

Magyar Tudomány

KÉMIA

Vendégszerkesztő: **GÖRÖG SÁNDOR**

2002•12

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA FOLYÓIRATA. ALAPÍTÁS ÉVE: 1840
CVIII. kötet – Új folyam, XLVII. kötet, 2002/12. szám

Főszerkesztő:

CSÁNYI VILMOS

Vezető szerkesztő:

ELEK LÁSZLÓ

Olvasószerkesztő:

MAJOROS KLÁRA

Szerkesztőbizottság:

ÁDÁM GYÖRGY, BENCZE GYULA, CZELNAI RUDOLF, CSÁSZÁR ÁKOS, ENYEDI GYÖRGY,
KOVÁCS FERENC, KOPECZI BÉLA, LUDASSY MÁRIA, NIEDERHAUSER EMIL,
SOLYMOSI FRIGYES, SPÁT ANDRÁS, SZENTES TAMÁS, VAMOS TIBOR

A lapot készítették:

CSAPO MÁRIA, CSATÓ ÉVA, GAZDAG KÁLMÁNNÉ, HALMOS TAMÁS, MATSKÁSI ISTVÁN,
PERECZ LÁSZLÓ, SPERLÁGH SÁNDOR, SZABADOS LÁSZLÓ, SZENTGYÖRGYI ZSUZSA, F. TÓTH TIBOR

Lapterv, tipográfia:

MAKOVECZ BENJAMIN

Szerkesztőség:

1051 Budapest, Nádor utca 7. • Telefon/fax: 3179-524

matud@helka.iif.hu • www.matud.iif.hu

Kiadja az Akaprint Kft. • 1115 Bp. Bátfai u. 65.

Tel: 2067-975 • akaprint@matavnet.hu

Előfizethető a FOK-TA Bt. címén (1134 Budapest, Gidófalvy L. u. 21.);

a Posta hírlapüzleteiben, az MP Rt. Hírlapelőfizetési és Elektronikus

Posta Igazgatóságánál (HELP) 1846 Budapest, Pf. 863,

valamint a folyóirat kiadójánál: Akaprint Kft. 1115 Bp. Bátfai u. 65.

Előfizetési díj egy évre: 5376 Ft

Terjeszti a Magyar Posta és alternatív terjesztők

Kapható az ország igényes könyvesboltjaiban

TARTALOM

Kémia – Vendégszerkesztő: **GÖRÖG SÁNDOR**

Görög Sándor: <i>Bevezető gondolatok</i> – kémiai mozaik	1544
Tétényi Pál – Lázár Károly – Paál Zoltán – Simándi László: Katalízis – tudomány és technológia	1548
Berkó András: A felülettudománytól a nanotechnológiáig – reakciók tanulmányozása atomi léptékben	1557
Oláh György – Ániszfeld Róbert: Új generációjú üzemanyagcellák	1564
Pukánszky Béla: Társított és erősített műanyagok	1570
Szépvolgyi János: Ipari ökológia – az ipar és a környezet kapcsolatának újragondolása	1578
Horváth István Tamás: Zöld kémia	1585
Kövesdi István – Dancsó András – Blaskó Gábor: Számítógéppel támogatott gyógyszertervezés	1589
Nyiredy Szabolcs: Gyógynövénykutatás – a gyógyszerkutatás természetes része ...	1600
Farkas József: Élelmiszerbiztonság: globális gondok – javítási törekvések	1608
Tóth Klára – Gyurcsányi E. Róbert: Szenzorok az analitikai kémiában	1614
Vankó György – Vértes Attila: Szinkrotronsugárzás a kémiai szerkezetkutatásban ...	1624
Beck Mihály: A kémia és társadalom.....	1636

Interjú

<i>A Védáktól az internetig</i> – Sipos Júlia interjúja Nyíri Kristóffal.....	1643
---	------

Akadémia

Prékopa András: Bolyai János emlékkonferencia az Akadémián.....	1649
---	------

Tudomány, politika

Imre József: Igények, remények, esélyek – A K+F és az innováció támogatási esélyei az EU strukturális alapjaiból	1656
Csermely Péter – Málnási-Csizmadia András – Kovács Mihály: Hogyan hozhatnánk haza a külföldön dolgozó, tehetséges fiatal magyar kutatókat?.....	1668

Megemlékezés

Hajdú Péter (<i>Honti László</i>)	1676
Mérei Gyula (<i>Font Márta</i>)	1678

Könyvszemle

Lee Congdon: <i>Seeing Red</i> (<i>Percz László</i>)	1680
Tilkovszky Loránt: Ausztria és Magyarország a vészterhes Európában (<i>Majoros István</i>)	1682
Agrártermelés – élelmiszerminőség – élelmiszerbiztonság (<i>Farkas József</i>)	1683
Adám György: Az emberi elme színe és fonákja (<i>Mészáros István</i>)	1684
Hraskó Péter: A könyvtár foglya (<i>Bencze Gyula</i>)	1689

Fanyar tudomány

Jéki László: Ig Nobel, a hóbortos kistestvér	1692
Vicsek Tamás: Media wave.....	1695

Hírek, információk

Az FMM és az MTA együttműködési megállapodása.....	1697
Az Európai Fizikai Társulat budapesti konferenciája (<i>Jéki László</i>).....	1699

Kémia

BEVEZETŐ GONDOLATOK

– kémiai mozaik –

Görög Sándor

az MTA rendes tagja, a VII. osztály elnöke, c. egyetemi tanár
Richter Gedeon RT., Budapest – s.gorog@richter.hu

I.

A *Magyar Tudomány* kémiai tárgyú különszáma 13 írást tartalmaz. Ezek témáit úgy állítottuk össze, hogy a lehető legsokoldalúbban mutassák be a kémia színes világát, szerepét a 21. század kezdetén mind a tudomány, mind pedig a mindennapi élet területén. Így tehát tulajdonképpen egy mozaikot, kémiai mozaikot nyújtunk át a lap olvasóinak. Bár a *mozaik* fogalmat itt természetesen metaforaként használom, érdemes egy rövid kitérő erejéig megállni a szó tulajdonképpen jelentésénél.

II.

A Magyar Nagylexikon definíciója szerint a mozaik " ... nedves vakolatba vagy cementbe vagy egyéb összetartó anyagba (például gipszbe) illesztett, különféle színű, apró méretű kő vagy üveglapocskákból, esetleg kavicsból készült díszítmény". A mozaik, mint a maga környezetét, kultikus helyeit széppé varázsolni igyekvő emberiség esztétikai örömeit nyújtására irányuló törekvéseinek egyik kifejezési eszköze, szinte egyidős magával az emberi kultúrával. Mi a mozaik mind fizikai, mind esztétikai szempontból is megnyilvánuló időállóságának kulcsa? Miért adhat betekintést ma is a Piazza Armerinába

látogatóknak a római élet és hitvilág színes világról a Villa Casale padlómozaikja, annak ellenére, hogy 1700 éves történetéből 800 évig földdel volt borítva? Mi a titka a ravennai Galla Placidia-mauzóleum kupolája csodálatos kék égboltjának és a rajta arany színben ragyogó csillagoknak, vagy a szomszédjában levő San Vitale-bazilika apszisában Justinianus császár és Theodora császárnő, valamint kíséretük színpompás öltözeke élethű színvisszaadásának? Miért csodálhatjuk több évszázados brutális lemeszelés után is a konstantinápolyi Hagia Sophia és a Chora-kolostor csodálatosan színgazdag krisztusábrázolásait? Honnan a 12. századi monrealei dóm szinte a teljes ó- és újszövetségi Bibliát bemutató mozaikkomplexuma háttérének arany ragyogása? Ezekre a kérdésekre az alkotók magasszintű művészetén túlmenően a kémia adhatja meg a választ.

Ez többféle megközelítést igényel. Vegyük ezek közül első helyre a mozaik készítéséhez felhasznált kövek és egyéb anyagok *mechanikai sajátosságait*. Természetesen itt feltétlenül fontos a szilárdság, keménység (főként padlómozaikok esetében), a kopásállóság (különösen a szabad téren elhelyezett mozaikok esetén), a csekély vízdékonyság. Hogyan biztosítható mindez? A

kulcsot a földkéreg kémiai összetételének rendkívüli változatossága adja meg. A világmindenség és ezen belül a földkéreg elemi összetételének kialakulását a *big bang* visszamenően Marx György kiváló tanulmánya (Marx, 2001) írja le. A földkéreg két leggyakoribb eleme az oxigén (45,6 %) és szilícium (25,7 %). Ennek a két elemnek leggyorsabb (és a mozaikkészítésnél is jelentős) vegyülete a kvarc (SiO_2). Ennek szerkezetében nem $\text{O}=\text{Si}=\text{O}$ molekulákkal kell számolni, hanem olyan nagy szimmetriájú 3 dimenziós térhálóval, ahol a szilícium mind a négy vegyértéke oxigénhez, az oxigén két vegyértéke pedig szilíciumhoz kötődik. A tiszta kvarcnál sokkal elterjedtebbek annak olyan származékai, ahol a szilíciumatomok egy részét alumínium helyettesíti, és ennek következtében (az alumínium csak három vegyértékű!) további fémek (nátrium, kálium, kalcium, bárium stb.) lépnek be a kristályrácsba. Ezeknek, a földkéreg 92 %-át kitevő kőzeteknek és ásványoknak közös tulajdonságait nagyban meghatározza a szilícium- és oxigénatomok közötti kovalens kötés nagy stabilitása és a kristályrács többékevésbé szimmetrikus szerkezete. A mozaikkészítés szempontjából fontos tulajdonságok közül ezekre vezethető vissza egyebek között a megfelelően nagy keménység. Ez a klasszikus Mohs féle 1-10-es keménységi skálán 6-7-es értékkel jellemezhető. Ez biztosítja a megfelelő kopásállóságot, de ugyanakkor még viszonylag könnyen kialakítható a mozaik készítéséhez szükséges darabok nagysága és alakja. (Nagyobb keménységű ásványok esetén ez utóbbi már problematikus lehetne.) Erre az atomos szerkezetre vezethető vissza a kedvezően csekély vízoldékonyság is. Ugyancsak a kvarcból vezethetők le, illetve állíthatók elő a mozaikok készítésére később tárgyalt okokból kiválóan alkalmas üvegek, amelyek nem kristályos szerkezetűek: túlhűtött folyadékoknak tekinthetők. Bár a szilikát alapú atomrácsos

kőzetekhez képest keménységük és vízzel, valamint kémiai behatásokkal szembeni ellenálló képességük kisebb, kiterjedten alkalmazhatók mozaikkészítésre a kalcium-karbonát alapú kőzeteket, főként a márványt is.

A mechanikai tulajdonságok mellett a mozaikkészítés szempontjából másik, meghatározóan fontos sajátosság a felhasznált anyag *színe*. A földkéreg eddig említett alkotórészei tiszta állapotukban színtelenek. A szilárd anyagok esetén a szín kialakulásának ugyanis egy olyan jelenség az alapja, amely esetén az anyagra eső fehér (kevert) fénysugár bizonyos hullámhosszú komponenseit az anyag elnyeli, és a visszavert fénysugár már nem a teljes fehér fényt, hanem csak az el nem nyelt részt (az elnyelt rész komplementerét) tartalmazza. A szín eredményező szelektív fényelnyelés feltétele, hogy legyen az elnyelő anyag atomjaiban, ionjaiban vagy molekuláiban olyan elektron, amelyet a fehér fény egy bizonyos hullámhossztartománnyal jellemezhető komponense állapotból egy magasabb energiatartalmú pályára emelni (gerjeszteni) képes. Az eddig említett elemek túlnyomó része (szilícium, oxigén, szén, alumínium, nátrium) a periódusos rendszer első három periódusában helyezkedik el. Ez azt jelenti, hogy elektronjaik az igen stabilis *s*, illetve *p* pályán foglalnak helyet: olyan egyszerű vegyületekben, mint az említett ásványok/kőzetek, látható fénnel nem gerjeszthetők. Ugyanez vonatkozik az elektrongerjesztés szempontjából jelentőséggel bíró külső pályán csupán *s* elektronokat tartalmazó káliumra, kalciumra és báriumra is. A szín megjelenésének feltétele a vegyületek, ezek körében a könnyen gerjeszthető *d* elektronok jelenléte bizonyos elemek (króm, mangán, vas, kobalt, nikkél, réz stb.) atomjaiban, illetve ionjaiban. Ezeknek a fémeknek ásványai és ipari előállításukra szolgáló ércei is színesek. A mozaikok szempontjából még jelentősebb, hogy az említett színtelen szilikát alapú kő-

zetek, üvegek és a márvány is tartalmazhatja kis mennyiségben, kémiaiilag kötött formában ezeket a fémeket. Ezek színét befolyásolja a fém mennyisége, vegyértékállapota és kémiai környezete. Innen származik az ásványvilág és az ilyen módon mesterségesen is színezhető üvegek színeinek a mozaikok készítésénél messzemenően kihasznált csodálatos világa, ahol a kék szín általában kobalt vagy réz, a vörös szín vas, esetleg króm, a rózsaszín mangán, a zöld szín vas, króm, réz, esetleg vanádium, a sárga főként nikkell, a fekete szín pedig vas vagy mangán jelenlétének következménye. Az a tény, hogy az ásványvilág színei fémekhez kapcsolhatók, magyarázat ezeknek a színeknek rendkívüli állandóságára is. (A növényvilág hasonlóképpen elragadó színvilága egész más alapokon nyugszik: itt a szín alapját képező, könnyen gerjeszthető, ún. p-elektronok a szerves (szén) vegyületek bonyolult kötési rendszereihez rendelhetők. Ezek már közel sem ilyen ellenállóak a környezeti behatásokkal szemben: gondoljunk a virágok színváltozásaira a hervadás során, a nyári erdőknek őszibe fordulását kísérő csodálatos színekre.)

A különösen a bizánci mozaikoknál oly nagy jelentőségű arany díszítőelemek külön említést érdemelnek. Legyen ez akár színarany, akár az ahhoz színre és csillogásra nézve is nagyon hasonló ún. mozaikarany (kb. 2:1 arányú réz-cink ötvözet) a jellegzetes szín, az átlátszatlanság és csillogás oka az a tény, hogy fémek esetében a külső pályán levő elektronok könnyen gerjeszthető közös elektronfelhőt alkotnak. Az elektronfelhő és a benne elhelyezkedő atomtörzsek sajátos mechanikai tulajdonságokat (például nyújthatóság, kalapálhatóság) is kölcsönöznek a fémeknek. Ez az alapja a mozaikok nagy felületeinek beborítását lehetővé tevő, rendkívül vékonyra megmunkált aranyfűst előállításának is.

III.

Azért tettem ezt a kitérőt a bevezető gondolatok alapját képező metafora kémiai hátterének felvillantására, hogy ezzel is illusztráljam azt, hogy milyen mértékben hatja át a kémia a mindennapi élet szinte minden vonatkozását: még egy ilyen képzőművészeti kategória, mint a *mozaik* mögött is kémiai meggondolások sorát lehetett felsorakoztatni. Ezek a meggondolások természetesen ugyanúgy a kémia klasszikus ismeretanyagához tartoznak, mint ahogyan a mozaik a képzőművészet klasszikus (ókori, kora középkori) korszakának volt a jellegzetes kifejezési formája. Ugyanez ugyanígy vonatkozik azonban a 21. század emberének mindennapi életét, életminőségét, egészségét döntő mértékben meghatározó anyagokra, tárgyakra és folyamatokra is: mindezek mögött mindig megtalálható a kémia.

A kémia legjellegzetesebb területe az anyagok (vegyületek) molekuláinak egymással való ütközése során végbemenő, új molekulákhoz vezető *kémiai reakciók* tanulmányozása. Ezek a reakciók végbemehetnek homogén fázisban, amikor mindkét reakciópartner azonos, általában gáz- vagy folyadékfázisban van jelen. A heterogén reakcióknál vagy a két reakciópartner van különböző fázisban (szilárd-gáz, szilárd-folyadék, folyadék-folyadék stb.), vagy gáz- illetve folyadékfázisban végbemenő reakciók lejátszódását vagy legalábbis gyorsítását lehetővé tevő katalizátorok vannak más (szilárd) fázisban. A *katalízissel* Tétényi Pál, Lázár Károly, Paál Zoltán és Simándi László dolgozata foglalkozik. Mivel ezek a katalitikus reakciók az esetek nagyobb részében szilárd anyagok felületén játszódnak le, az utóbbi időben rendkívüli mértékben felértékelődött a *felületkémia* szerepe, ami Berkó András dolgozatának tárgya. Ennek a két területnek az elméleti érdekességükön túlmenő ipari jelentőségét nehéz lenne túlértékelni. A számtalan alkalmazási terület közül

különös jelentőségű az energiahordozó és üzemanyagipar. Ez utóbbi már átvezet az energetika területére, ahol teljesen újszerű megközelítésnek tekinthetők Oláh György és iskolájának legújabb kísérletei, amelyekről Oláh György és Ániszfeld Róbert számolnak be. A kémiai reakciók speciális fajtáját jelentik az óriásmolekulákhoz vezető *polimerizációs reakciók*. Ezek az egészségügy, öltözködés, közlekedés, bútortipar, építőipar és számos további területen hatalmas lehetőségeket teremtő *műanyagkémia* alapjai. Ennek a területnek néhány speciális vonatkozásáról (társított és erősített műanyagok) Pukánszky Béla tájékoztat.

Már eddig is többször esett említés a kémiai reakciókról, mint a vegyipar alapjairól. Ez felvet ökológiai problémákat is; az *ipari ökológia* fontos területével foglalkozik Szépvölgyi János dolgozata. Az ipari környezet-szennyezés problémáinak újszerű megoldását kínálja a „*zöld kémia*”, amivel összeállításunkban Horváth István Tamás foglalkozik.

A kémia döntően befolyásolhatja, javítja életminőségünket, egészségünket. Ezt célozza a gyógyszerkutatás és a gyógyszeripar. A korszerű *gyógyszerkutatással*, illetve abban a számítógépes gyógyszertervezés szerepével Kövesdi István, Dancsó András és Blaskó Gábor, a gyógyszerkutatás egy speciális ágával, a *gyógynövénykutatással* pedig Nyiredy Szabolcs foglalkozik. Az életminőséget jelentősen befolyásolja az elfogyasztott élelmiszerek egészségkárosító szennyezéseinek megfelelő kontrollja. Az *élelmiszerbiztonság* kérdései képezik a tárgyát Farkas József dolgozatának. Ennek biztosítása nagyszámú analitikai mérést igényel.

Az analitikai kémia magyar sikerterülete, az *(elektrokémiai) szenzorok* kutatása is sok szállal kötődik az életminőség javításához. Amint az Tóth Klára és Gyurcsányi E. Róbert dolgozatából is kitűnik, fő alkalmazási területük az orvos diagnosztika és a környezetvédelmi analitika. Ugyancsak a szélesebb értelemben vett analitika területére esik a *ciklotronoknak* a legújabb időkben széleskörű lehetőségeket megnyitó alkalmazása, ami Vankó György és Vértes Attila dolgozatának tárgya.

IV.

Szerény, mozaikszerű összeállításunk csak néhány, szinte önkényesen kiválasztott területet ölel fel a kémia színes világából. Ezekből is látható azonban, hogy a kémia önmagában és számos más tudománnyal szoros együttműködésben, azokba beépülve milyen nagy hatással van az egyetemes tudomány fejlődésére, és így hatása az emberiség életére is rendkívüli. Bizton mondhatjuk, hogy a kémia „*központi tudomány*”. Beck Mihálynak az összeállításunkat záró dolgozata részletesen foglalkozik ezzel a kérdéssel, amelynek Oláh György is külön fejezetet szentelt a közelmúltban magyarul is megjelent könyvében (Oláh Gy. 2002). Mind a kémikusok, mind pedig a társadalom szempontjából fontos feladat tehát, hogy a kémiát gyakran érő igaztalan támadások korában számot adjunk a *kémia és a társadalom* viszonyáról. Ezért zárják összeállításunkat Beck Mihály gondolatai erről a kérdéskörrel.

Kulcsszavak: *kémia, mozaik, ásvány, közet, központi tudomány*

IRODALOM

Marx György (2001). *Nukleáris történelmünk*. Vértes Attila (szerkesztő): *Nukleáris tudomány és a 20. század c. könyvében*. MTA, Bp., 13-35. old.

Oláh György (2002). *Életem és a mágikus kémia*. Better Kiadó, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 25-44. old.

KATALÍZIS – TUDOMÁNY ÉS TECHNOLÓGIA

Tétényi Pál

az MTA r. tagja, kutatóprofesszor,
MTA Kémiai Kutatóközpont
Izotóp- és Felületkémiai Intézet
tetenyi@alpha0.iki.kfki.hu

Lázár Károly

a kémiai tudomány doktora, tud. tanácsadó,
MTA Kémiai Kutatóközpont
Izotóp- és Felületkémiai Intézet
lazar@iserv.kfki.hu

Paál Zoltán

a kémiai tudomány doktora, tud. tanácsadó,
MTA Kémiai Kutatóközpont
Izotóp- és Felületkémiai Intézet
paal@iserv.kfki.hu

Simándi László

a kémiai tudomány doktora, tud. tanácsadó,
MTA Kémiai Kutatóközpont
Kémiai Intézet
simandi@cric.chemres.hu

A jelenség

A katalízis már az ókorban ismert, de csak a XIX. század első felében, a kémia tudományának egy bizonyos fejlettségi fokán felismert, és a mai napig teljesen meg nem értett természeti jelenség. Körébe tartozik az emberi tevékenység útján megvalósított kémiai folyamatokon kívül számos fiziológiai és biológiai folyamat is, amelyekre itt nem térünk ki.

A jelenséget Berzelius határozta meg 1836-ban, annak nyomán, hogy egyes kémiai folyamatok megvalósítása céljából ekkor már tudatosan alkalmaztak olyan anyagokat, amelyek e folyamatokban látszólag nem vettek részt, de nélkülük azok nem játszódtak le. Berzelius az ilyen anyagok hatását „katalitikus erőnek” tulajdonította, a hatást kifejtő anyagot katalizátornak, a jelenséget katalízisnek nevezte el. A görög szó eredeti jelentése „törvényen kívüli állapot”; Berzelius szerint a kémiai szabályok itt látszólag érvényüket veszítették.

A katalízis fogalma azóta jórészt tisztázódott: a katalizátor kizárólag olyan kémiai

folyamatokat segít elő, amelyek lejátszódása energetikai (pontosabban *termodinamikai*) szempontból lehetséges, de katalizátor nélkül ehhez gyakran extrém, sőt gyakorlatilag nem megvalósítható körülmények szükségesek: igen magas hőmérséklet vagy nyomás, mert sebességük közönséges körülmények között minimális. A katalizátor megnöveli az ilyen folyamatok sebességét, így reális feltételek között is lejátszódnak. A hidrogén és az oxigén elegye („durrnogáz”) szobahőmérsékleten változatlan marad; meggyújtva (magas hőmérséklet) vízzé alakul, de platína jelenlétében e reakció szobahőmérsékleten is nagy sebességgel indul meg. A katalizátor megváltoztatja a reakció sebességét (*kinetikáját*), de nem módosítja termodinamikáját és a reakcióba lépő anyagok, illetve az átalakulás eredményeképpen képződő termékek egymáshoz viszonyított arányát, azaz a reakció *sztoichiometriáját*.

A katalizátor fontos tulajdonsága hatásának *szelektív* volta, azaz a katalizátor a sok lehetséges folyamat közül egy, illetve egyes termékek képződését eredményező folyamatokat gyorsít meg. Megfelelő katalizátor

alkalmazásával például a kőolaj feldolgozása során optimális mennyiségben állítható elő nagy oktánszámú benzin. Különösen nagy szelektivitásúak a biokémiai folyamatokat katalizáló enzimek, fehérjék, amelyek általában csak egy folyamatot, *egyetlen* vegyület *egyetlen* átalakulását segítik elő. Emil Fischer szellemes hasonlatával „úgy illeszkednek egy szubsztrátumhoz, mint kulcs a zárhoz”.

A katalitikus reakcióban a bruttó kémiai folyamat részlépéseit a katalizátor megváltoztatja; a nem katalitikus reakcióban molekulák ütközése révén lejátszódó folyamat résztvevői a folyamat katalitikus változatában a katalizátorral lépnek kapcsolatba, miáltal reaktívabb közti termék(ek) képződik(nek) amely(ek) nagyobb sebességgel alakul(nak) át végtermékké, mint katalizátor nélkül. Attól függően, hogy a katalizátor és a reakciópartnerek azonos vagy különböző fázisban vannak, beszélünk *homogén*, illetve *heterogén* katalízisről. A katalizátor nem szerepel a reakció végtermékei között, azonban aktív résztvevője a folyamatnak: a katalizátor és a reakciópartnerek közösen alakítják ki a *katalitikus rendszert*, amelyben a folyamat végbemegy (Tétényi, Gucci, Paál, 1974). A katalizátor és a reagáló anyagok közötti kémiai kötések a felületet is átrendezhetik: Somorjai Gábor, a Berkeley Egyetem professzora 1992-ben Budapesten, a Magyar Tudományos Akadémián tartott előadásában vezette elő a „flexible surface”, azaz a „mozgékony felület” elméletét.

A katalitikus iparok fejlődésének néhány mérföldköve: az ólomkamrás (1750), majd a kontakt (1831) kénsavgyártás, az ammóniaszintézis (1910), a katalitikus kőolajbontás (krakk, 1930–1960), a benzin katalitikus reformálása (1948), a polimerek gyártása (1950), a hidrokraakolás és hidroizomerizálás (1960), a hidrogénező kénmentesítés (1950–1980), majd a kipufogógázok katalitikus ártalmatlanítása (1970). A katalitikus kőolajfel-

dolgozás évi mértéke jelenleg meghaladja az 500 millió tonnát, a polipropilén és a polisztirol alapanyagának mennyisége 1990-ben megközelítette a 10-20 millió, a metanolé a 20 millió tonnát. Szakértői becslés szerint a katalitikus folyamatok termékei a fejlett országokban a bruttó hazai termék 20-30 %-ához járulnak hozzá. A katalitikus technológiák a környezetvédelemben és a fenntartható fejlődés biztosításában létfontosságú szerepet játszanak. Az elmúlt évtizedben előtérbe kerültek az értékesebb, a speciális szerves kémiai termékek előállítására irányuló fejlesztések is.

A katalízis elméleteiről

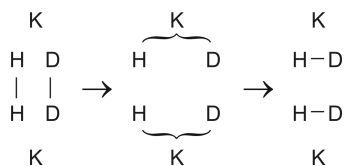
A katalitikus folyamatok tervezése az elmúlt 150 évben főleg empirikus alapokra épült. Gyakran említett példa, hogy az ammóniaszintézis (Haber-Bosch eljárás) legjobb katalizátorát mintegy kétezer katalizátor kipróbálása után találták meg.

A katalízis tudományos alapjainak feltárása nagy kihívás a kutatóknak. Ezt jól mutatja a katalízis tárgykörében készült tudományos publikációk számának rohamos növekedése, főleg a múlt század közepe óta. Az első két, katalízisre specializált folyóirat, a Kinetika i Katalíz és a Journal of Catalysis 1960-ban, illetve 1962-ben indult meg. Jelenleg már további mintegy tíz, katalízisre specializálódott folyóirat működik, további katalitikus tárgyú publikációkat jelentetnek meg a Journal of Physical Chemistry, a Surface Science, a Journal of the American Chemical Society és más kiemelkedő színvonalú folyóiratok is.

A katalízis elmélete elé állított kérdés leegyszerűsítve így fogalmazható meg: Milyen adatok révén választható ki egy folyamat optimális katalizátorává valamely kémiai elem vagy elemcsoport az elem(ek)nek a Mengyelejev-féle periodikus rendszerben betöltött helye alapján? Mi az oka például annak, hogy az etilén→etán átalakulás (azaz

egy hidrogénmolekula addíciója etilénhez) ródium jelenlétében tízezerszer, platinán kétszázszor gyorsabban játszódik le, mint volfrám felületén? Ilyen és hasonló kérdések sok elméleti kutatást generáltak, parciális válaszok születtek is rájuk, az alapkérdés azonban megválaszolatlan maradt, és ilyen általánosságban valószínűleg nem is válaszolható meg.

A heterogén katalízis elméleteinek közös kiindulópontja szerint a reakcióban részt vevő molekulák kapcsolatba lépnek a katalizátor felületével, azaz adszorbeálódnak, homogén katalízisnél pedig a katalizátor és a reagáló molekulák közös köztiterméket képeznek. Az $AB + CD = BC$ általános reakció példaként a katalitikus hidrogén-deutérium csere: $H_2 + D_2 = 2HD$ sémája írható fel, a katalizátor atomjait K-val jelölve:



1. ábra • A katalitikus hidrogén-deutérium cserereakció sémája

E folyamat katalizátor nélkül 600-750, ezüstfólián 400-460, rézfólián 310-350 °C hőmérsékleten játszódik le, platinán és palládiumon pedig szobahőmérséklet alatt is végbemegy. Mélyebb tanulmányozása közelebb vezethetne a heterogén katalízis alapkérdéseinek megértéséhez. Sajnos azonban – mint azt G. C. Bond, a katalíziskutatás ma élő egyik „nagy öregje” megjegyezte (Ponec, Bond, 1995) – erre a tisztán elméleti témára nagyon nehéz volt ipari támogatást szerezni, így e reakció vizsgálata lassan háttérbe szorult.

Több elméleti megközelítés indult ki a katalizátor geometriai szerkezete és a reagáló molekularészek közötti *geometriai összhang* elvéből (Balandin, 1969). Eszerint

minden katalitikus reakcióhoz tartozik egy optimális geometriájú katalizátor, amelynek szerkezete és a katalizátor-atomok közötti optimális távolság (K–K) nagysága a reagáló, illetve a reakcióban képződő molekulák szerkezetétől és a reakció során felhasadó, illetve képződő kötések nagyságától függ. Optimális K–K távolságnál a felületi komplex képződése a legkisebb energiát igényli, és – a termékek képződéséhez vezető – bomlása sem igényel nagy energiát. A geometriai megközelítés alapján meglepően sok bonyolult katalitikus reakció bizonyult értelmezhetőnek, sőt az elméletet kiterjesztették az enzimmkatalizált folyamatokra is.

Az elméletek másik klasszikus iránya a katalizátorok elektronszerkezetéből kiindulva értelmezte a katalitikus aktivitást (Ponec, Bond, 1995). Fém-, illetve ötvözetkatalizátoroknál – a komplexek fémmagva és a ligandumok közötti kötés elektronszerkezetének analógiájára – a d-elektronoknak a fémek kötésben megvalósuló arányát, illetve a fém d-sávjának relatív telítettségét tekintik meghatározónak a fémfelülethez kötődés erőssége és a katalitikus aktivitás szempontjából: a kötődés az atomi elektronpályák révén valósul meg, és minél nagyobb a d-elektronok hányada, annál kevesebb pálya áll rendelkezésre a reagáló molekula és a felület közötti kötés számára. Ez magyarázná az átmeneti fémek – nikkel, palládium, ródium és platina – kiemelkedő aktivitását olyan vegyületek reakcióiban, amelyek nem tartalmaznak feleslegben elektront (többszörös kémiai kötések). A fémkatalizátor elektronkoncentrációjának jelentőségét jól mutatták a különböző vezetőképességű oxidokra épített nikkellel végzett vizsgálatok eredményei (Szabó, Solymosi, 1960): a titán-dioxid elektronkoncentrációjának változtatásával sikerült először kimutatni, hogy a hordozó (hordozó alatt általában az adott reakciót önállóan nem katalizáló anyagot értünk, alkalmazása a felület és a

katalizátor élettartamának növelését célozza) elektronszerkezete, a hordozó és a fém között végbemenő elektronos kölcsönhatás a fém-katalizátor hatását befolyásolja.

A szilárd test elektronjainak „kollektív” tulajdonságaiból levezetett elektronelmélet napjainkra felváltotta az „atomos” megközelítést. Az elektronok energiaállapota kis atomcsoportokban különbözik a tömbi állapotoktól; ezek modellezésére ma már módot nyújt a korszerű kvantumkémiai számítási módszerek alkalmazása (Thomas, 1994).

A fémoxid katalizátorok aktivitását is értelmezték vezetőképességük alapján, néhez azonban ezeket egységes csoportnak tekinteni. Szelektív oxidáció, illetve redukció játszódhat le nem savas oxidokon. Sokkal fontosabbak azonban a savas, leginkább szilícium-alumínium-oxidok, amelyek elsősorban a szénhidrogének alkilezését, izomerizációját, krakkolását katalizálják, főleg savasságuk révén a proton és a szénhidrogén közötti kölcsönhatás eredményeképpen képződő karbónium-ion közti termékekkel (Oláh, Molnár, 1995).

A katalizátorkészítés módja gyakran sokkal nagyobb mértékben befolyásolja az aktivitást, mint az összetétel: hét – különbözőképpen készített – kobalt katalizátor összehasonlítása például azt mutatta, hogy a legaktívabb és a legkisebb aktivitású katalizátor között ugyanazon reakció felületegységre jutó sebességében 4000-szeres a különbség. Az ilyen és hasonló tapasztalatok azt mutatják, hogy a katalizátor fizikai állapota jelentős szerepet játszik a katalizátor viselkedésében. Mindez lényegében levette napirendről a katalitikus aktivitásnak a katalizátor periódusos rendszerben elfoglalt helyéből, az ebből következő geometriai, illetve elektronszerkezeti paramétereiből következő magyarázat lehetőségének kérdését, egy teljesen általános katalíziselmélet kidolgozásának igényét. A kiábrándulást jól szemlélteti a következő esemény: Charles Kamball, a katalízis-

tudomány kiemelkedő széniorja 1988-ban, a 9. Nemzetközi Katalízis Kongresszuson egy előadásához feltett – a platina és a ródiium katalitikus viselkedése közti különbség okát firtató – kérdésre a következőket válaszolta: „a különbség okáról nem akarok mást mondani, csak azt, hogy a platina – platina, a ródiium pedig ródiium.”

A készítési mód hatása érvényesül a katalizátor tulajdonságait meghatározó legkülönbözőbb paraméterek értékében, és főleg a felület szerkezetében. Langmuir már a múlt század 20-as éveiben kialakította a szilárd testek felületének heterogén voltára vonatkozó elméletét, amelynek értelmében a felületi helyek energiaállapota, következképpen a hozzájuk kötődő vegyületek és a felület közötti kölcsönhatás erőssége különböző. (Kézenfekvő példa a felület síkjában, valamint az éleken és a csúcsokon elhelyezkedő atomok energiaállapota közötti különbség.) Erre épült a katalitikusan aktív helyek, az ún. aktív centrumok koncepciója, amely szerint a katalitikus reakció a felület kis részét kitevő aktív helyeken játszódik le. Bizonyítja ezt a katalizátormérgezés jelensége: olyan kis mennyiségű katalizátormérget is megsemmisítheti a katalizátor aktivitását, amely a felület kisebb hányadának lefedésére – így annak elzárására a reagáló molekuláktól – sem elégséges. A reakció szempontjából általában optimális a közepes erősségű helyekhez kötődés: a kis erősségű helyek nem alkalmasak a reakció elősegítésére, a túl erős kötődés esetén viszont a felület nem szabadul meg a reakciótermékektől és elveszíti aktivitását. Ezért a reakció mintegy *kiválasztja* az aktív helyeket, amelyek száma a felület egészéhez képest kicsiny.

A kutatók figyelme a múlt század második felétől a katalizátorfelület és a felületi képződmények szerkezete felé fordult. Új vizsgálati eljárások (elektronkilépési munka meghatározása, elektronspektroszkópia, pásztázó alagút-mikroszkópia, szinkrotron-

sugárzásos szerkezetvizsgálat, kvantumkémiái számítások) alkalmazásával sikerült ismereteket szerezni többek között a szerves katalízisben alapvető szén-fém kölcsönhatás jellegéről, a képződő kötések számáról, a különböző kristálylapokon elhelyezkedő fématomok konfigurációja és a szénhidrogének szerkezete közötti összefüggésről, a különböző felületi ionok vegyértékállapotáról. A felületkémiái és katalíziskutatások közötti kapcsolatok jelentős mértékben bővültek (lásd erről Berkó András cikkét e számban).

A katalízis azonban nem azonosítható a felületkémiával; a felületi szerkezetre vonatkozó ismeretek alkalmazásához elengedhetetlen az egyes katalitikus reakciók mechanizmusának teljes körű tisztázása, az adszorpció és deszorpció, továbbá a felületi képződmények között lejátszódó elemi reakciólépések sorozatának feltérképezése. E kutatásokhoz jelentős segítséget adtak a különböző izotópos nyomjelzéses módszerek, valamint az izotópcseré-mérések (Ponec, Bond, 1995). Segítségükkel sikerült például megállapítani, hogy a telített szénhidrogének a hidrogén és a szénatom közötti kötés(ek) felhasadása útján kötődnek a felülethez a reakció során, továbbá, hogy ennek a részlépésnek a sebessége a legkisebb, ezért meghatározza az egész folyamat sebességét. Az aromás (azaz benzolgyűrűt tartalmazó) szénhidrogének képződése mind a gyűrűs szénhidrogénekből, mind a parafin szénhidrogénekből, azok gyűrűzáródása során, a hidrogénmolekulák fokozatos leszakadása útján játszódik le, ami cáfolja a hattagú szénhidrogényűrű és a fémszerkezet (felületi szex-tett) közötti különleges geometriai összhang létét. A szénhidrogének hidrogén-deutérium cseréje segítségével sikerült megkülönböztetni a gyenge (egyszeres) és az erős (többszörös) szénatom-fém kötődést és ennek szerepét a fémkatalizált szénhidrogén-reakciókban.

A katalíziskutatás súlypontjai napjainkban

A múlt század második felében növekedett az ipar szerepe a katalíziskutatásban. Ez érez-tette hatását a kutatási tematika terén is. Különösen a következő irányok kerültek elő-térbe az elmúlt évtizedekben (Heinemann, 1997):

Nagyfelületű hordozókra (alumínium- és szilícium-oxid, valamint ezek egyes oxidjai) változatos módszerekkel épített egy- és több-fémes katalizátorok, melyek főleg a szénhidrogén-átalakulások, szénatomszám-növelés, szén-monoxid → szénhidrogén-átalakulás, illetve a kipufogógázok ártalmatlanítási reakciói szempontjából nagy fontosságúak.

Fém-zeolit katalizátorrendszerek. A zeolitok vegyes, főleg szilícium- és alumínium-oxidból álló, sajátos szerkezetű ásványok. Egységes szerkezetű, meghatározott tulajdonságú zeolitok mesterségesen is előállíthatók. A katalízis szempontjából nagy jelentőségű a további társ-fém alkalmazásával befolyásolható savasságuk, a nagy elektrosztatikus mező, amely a reagáló molekulákat aktiválhatja, különösen pedig a szabályos kristályszerkezet és az egyenletes pórusméret, amelynek változtatásával a katalizátor szelektivitása tervezhető. A pórusok pontosan meghatározott helyein ionok, ionegyüttesek rögzíthetők, így alakítható ki az elektrosztatikus térnek a kívánt katalitikus hatáshoz szükséges specifikus geometriája. A zeolitok tipikus – <1 nm – átmérőjű csatornáin csak kisebb molekulák férnek át. Nagyobb (~5 nm) átmérőjű üregeket tartalmazó, ún. *mezopórusos* anyagokban már teljes funkciócsoportok rögzíthetők az üregek belső falain, ami lehetővé teszi nagyobb méretű molekulák szelektív katalitikus átalakítását. A zeolitok különleges tulajdonságai kitűnően érvényesültek a szénhidrogéniparban.

További – az utóbbi évtizedekben elő-térbe került – kutatási irány a hidrogénező

kéntelenítés katalizátorainak – hordozós fém-fémoxid rendszerek – tanulmányozása. E folyamat környezetvédelmi fontossága mellett a katalizátorrendszer elméleti szempontból is különösen érdekes: itt kiemelkedő szerepet játszik a fém-fémoxid kölcsönhatás, amelyet a fém elhelyezkedése és az oxidlemez (slab) mérete is befolyásol. E rendszerben sikerült pásztázó alagútmikroszkópiával azonosítani a katalizátor valószínű aktív helyeit is.

A szintetikus szerves kémia, a finomkémiai ipar, a műanyag- és a gyógyszeripar terén különösen széleskörű a *homogén katalízis* alkalmazása. Korszerű felfogás szerint a homogén katalízis a fémkomplexek és fémorganikus vegyületek katalitikus hatásával foglalkozik. Fontos ága a bioszervetlen kémiához kapcsolódó biomimetikus katalízis, amely a metalloenzimek hatásmechanizmusa alapján tervez hatékony és szelektív fémkomplex katalizátorokat (bioinspired catalysis).

Az életfolyamatokat átszövő kiralitás (azaz az egymás tükörképét képező molekulák „jobb-”, illetve „balkezes” szerkezete) következtében a biomolekulákkal kölcsönhatásba lépő gyógyszerek, rovarirtó és gyomirtó szerek, illatanyagok optikai izomerjei (enantiomerjei) eltérő hatékonyságúak. A kívánt hatás általában az egyik optikai izomerhez kötődik, míg a másik izomer hatástalan, vagy egyes esetekben akár súlyos mérgező is lehet (Contergan). Az optikailag tiszta izomerek alkalmazása ma már előírás, ezért az ezt lehetővé tévő királis szintézisek alapvető fontosságúak a modern gyógyszeriparban és a csatolt iparágakban. Az enantioszelektív homogén katalízis e célra alkalmas költséghatékony módszer, mivel kis mennyiségű királis katalizátor alkalmazásával a prokirális szubsztrátum (azaz a nem királis kiindulási anyag) nagy mennyiségének optikailag szelektív átalakítása végezhető el. A jövőben egyre több ipari eljárás kidolgozása várható a királis katalízis alapján.

A homogén katalízis leglátványosabb eredményei a királis katalízis kidolgozásához kötődnek. A 2001. évi kémiai Nobel-díj nyertesei ezen a területen végeztek úttörő munkát: iparilag is alkalmazható eljárásokat dolgoztak ki enantioszelektív hidrogénezési és oxidációs reakciók kivitelezésére királis ligandumokat tartalmazó ródium-, ruténium- és ozmium-komplexek jelenlétében. Az első sikeres enantioszelektív homogén katalitikus ipari eljárás a Parkinson-kór kezelésére használt L-dopa előállítására volt, amelyet több más alkalmazás követett. A királis katalízis jelensége a katalizátor-szubsztrátum komplex két enantiomerjének eltérő reaktivitásával értelmezhető.

Az enantioszelektív hidrogénezést nyomokban különböző optikai aktivitású kvarc katalizátoron is kimutatták, de főleg homogén katalitikus folyamatként valósították meg.

Az enzimekhez hasonló „alakszelektív” heterogén katalizátorok fontossága ugrásszerűen megnőtt az 1980-as évektől kezdve (Thomas, 1994). Egy óntartalmú zeolitikatalizátor segítségével először sikerült egy szerves molekula oxidációjában az enzimekhez hasonló, 100 %-os szelektivitást elérni (Corma, Németh, Renz, Valencia, 2001).

Katalitikus technológiák az elmúlt évtizedekben

Az előbbi példák egyértelműen bizonyítják, hogy a katalizatudomány fejlődését elsősorban a gyakorlat, a technológia fejlesztési igényei vezérlik. A katalitikus technológiák fejlesztésének fő irányai jelenleg (Thomas, 1994; Heinemann, 1996): Kőolajfeldolgozás és a szénhidrogén gázok (mindenekelőtt metán) átalakítása. Polimerizációs folyamatok. Finomkémiai szerves reakciók szelektív katalitikus eljárásainak kidolgozása. A levegőszennyezés leküzdését célzó katalitikus folyamatok.

Az elmúlt évtizedekben bevezetett nagyszámú új folyamat közül különösen há-

rom felfedezést kell kiemelni, amelyek meghatározó irányban vitték előre a katalitikus technológiát (Heinemann, 1996):

- A zeolitok katalitikus tulajdonságainak felismerése (Rabó Gyula az Egyesült Államokban), amelynek révén, mint ezt már részleteztük, a kőolajfeldolgozás hasznos termékeinek aránya, oktánszámuk növelése, és a feldolgozás során képződő koksz jelentős csökkenése volt biztosítható. Az alkalmazásuk révén elérhető megtakarítás a Föld ma ismert kőolajkészleteinek 8 %-ára tehető. Nagy perspektivikus jelentőségű a benzinelőállítás metilalkoholból és az aromások előállítása metánból.

- A polimerizációs technológiák fejlődése: egyrészt a heterogén, fémtartalmú katalizátorok alkalmazása kisnyomású polimerizációs folyamatokban, majd (a kilencvenes években) az ún. metallocénekkel (két párhuzamos öttagú szénhidrogéngyűrű a közötte elhelyezkedő cirkónium, titán vagy hafnium fémmel) katalizált polimerizáció programozott szerkezetű és tulajdonságú polimerek előállítására. A metallocének ugyan drágábbak, mint a hagyományos katalizátorok, de ezt ellensúlyozza kiemelkedő aktivitásuk (1 g fémelt tartalmazó katalizátorral másodpercenként 10 kg-ot meghaladó polimer állítható elő) és a polimer programozható szerkezete. A polimer-technológia új lehetőségeit nyitotta meg az oxigéntartalmú monomerek titánszilikát által katalizált előállítása hidrogénperoxiddal.

- A múlt század utolsó harmadában a kémia áttörést hajtott végre a katalízis alkalmazásával: a köztudat szerint környezetet szennyező tevékenységből az emberi környezet talán első számú védelmezőjévé lépett elő. A járművek kipufogógázából származó szén-monoxid-, szénhidrogén- és nitrogén-oxid-tartalom több mint 90 %-át nitrogénné, vízzé és szén-dioxidá alakítják át a kerámiára épített mintegy 4 illetve 2 tízezer súlyrész platinát és ródiomot tartalmazó

„háromutas” katalizátor segítségével. Együttal a katalizátor változtatható oxigén tartalmú fénoxidot is tartalmaz, amely biztosítja a reakció feltételét képező, szigorúan meghatározott levegő (azaz oxigén)-üzemanyag arány minimális ingadozásának kiküszöbölését is. A katalizátor ólomérzékenysége és a környezet védelme megkövetelte az ólomvegyületek kiiktatását, de katalitikus úton az üzemanyag megfelelő oktánszámát is sikerült biztosítani.

A katalizátorok környezetünket védő alkalmazásának másik iránya a villamosenergia-ipar. Nagy jelentőségű az üzemanyagok égéstermékei, különösen a gázturbinák működése során képződő nitrogén-oxidok ártalmatlanná tétele monolit szerkezetű (azaz párhuzamos csatornában elhelyezkedő aktív fázisú), magas hőmérsékleten is működő katalizátorok segítségével. Példaképpen említhető a Japánban a múlt század kilencvenes éveiben kifejlesztett mangán-alumínát katalizátorra épülő, 1300 °C-ig alkalmazható deNOx technológia.

A kutatások jelenlegi irányait jellemezheti a Catalysis Today folyóirat számainak három évre visszamenő elemzése. Ennek minden száma egy-egy témával foglalkozik. A vizsgált 42 szám közül 8 foglalkozott környezeti katalízissal, 5 ipari reaktorokkal. 10 kiadás egy-egy katalizátortípusra, 10 egy-egy reakciótípusra (ebből 5 oxidációra, 2 Fischer-Tropsch reakcióra), 4 pedig egy-egy módszerre koncentrált, a maradék 5 (pl. fotokatalízis, plazmakémia) nehezen sorolható az előbbi csoportokba. Az utóbbi időkből származó 550 cikk tematikus vizsgálata szerint (Schlögl, 2001) ezek 65 %-a heterogén, 35 %-a homogén katalízissal foglalkozott; a dolgozatok 60 %-ának fő témája a reakciómechanizmus volt, 20 %-uk az aktív szerkezetre koncentrált, míg a kinetikára csak 10 % jutott.

*A magyar katalíziskutatásról
(MTA Katalízis Munkabizottság, 2002)*

A hazai kémiai kutatásban a katalízis jelentős helyet foglal el. Kiemelkedő ipari eredmény volt a Varga-eljárás: mübenzin előállítás barnaköszén eredetű kátrány hidrogénezése útján volfrám-, illetve molibdén-szulfid katalizátorral. Csűrös és az általa alapított iskola a gyógyszeriparban alkalmazott szelektív hidrogénező katalizátorokat fejlesztett ki, Szabó Zoltán és iskolája pedig a szilárdfázisú reakciók katalízise, valamint a hordozó hatás új értelmezésében (Solymosi, 1977) értek el maradandó eredményeket. Az a körülmény, hogy a teljes nehézségi ipari technológiák érhető okokból általában import útján valósulnak meg, természetesen gátolja az ipari célú katalíziskutásokat, de az elmúlt években a kőolajfeldolgozásban alkalmaztak egy – a KKKI-val közösen kidolgozott – eljárást.

A magyar kutatók jelentős részt vállalnak a katalízistudomány nemzetközi fejlődésében. A magyar kutatók tollából külföldi folyóiratokban évente megjelenő közlemények száma meghaladja a 100-at, a katalízis tárgyú könyvfejezetek, könyvek szerzői között is rendszeresen találunk magyar kutatókat.

Az elmúlt évtizedekben kiemelkedő eredmények születtek többek között a felületi szerkezetek kimutatásában, a felület-szubsztrátum kölcsönhatás értelmezésében, a szénhidrogén-reakciók mechanizmusának tanulmányozásában, az elektrokatalízis, fém-komplexek homogén katalitikus tulajdonságainak, a finomkémiai célú hidrogénezés katalizátorainak vizsgálatában, továbbá a zeolitalapú katalizátorok előállításának, aktivitásának és szerkezetének kutatásában.

A hazai katalíziskutatás, sokoldalú nemzetközi kapcsolatrendszerének köszönhetően is, időben kapcsolódott a legutóbbi idők korszerű kutatási irányjaihoz, így például a zeolit hordozóra épített fémek szerkezetvizsgálata és katalitikus alkalmazása már

1985-ben megkezdődött, a fém-nanorészecskék, a klaszterek, a nanocsövek katalitikus alkalmazása, a királis katalízis immár a hazai katalíziskutatás tárgya is. A hazai katalíziskutatás jelenlegi fő irányjai is megfelelnek a nemzetközi irányzatoknak.

A magyar katalíziskutatás jelentős elismerésének tekinthető Budapest kijelölése az 1992-es 10. Nemzetközi Katalízis Kongresszus helyszínéül, Párizst, Amszterdamot, Moszkvát, Londont, Berlint követően a hatodik európai városként.

A katalíziskutatás jövőjéről

Láthattuk, hogy a katalízis a szervetlen, a szerves és a fizikai kémia, valamint a komplex és fémorganikus kémia, az anyagtudomány, a felületkutatás eredményeire, haladására épül és e tudományos diszciplínák fejlődéséhez járul hozzá, *de ezek egyikével sem azonosítható*, művelése komplex megközelítést igényel. Ezt a rendkívül összetett – az atomi léptékű elemi folyamatoktól az ipari reaktorokig terjedő – kérdéskört összefüggéseiben ezekben az években kezdték vizsgálni (Schlögl, 2001). A jelenség egyre több részlete tárul fel; a Stephen és Mackenzie által a múlt század harmincas éveiben még „titokzatos katalízisnek” nevezett jelenség már régen nem az. Mindemellett egy-egy folyamat optimális katalizátorát ma is empirikus úton építik fel, pontosabban az eddig felhalmozott hatalmas ismeretanyagra építve.

A katalitikus iparok fejlődési irányjai az utolsó évtizedekben kialakultnak tekinthetők, ezekről az előbbieken már ejtettünk szót. A XXI. században a katalízis előtt álló legnagyobb kihívás valószínűleg az egyszénatomos molekulák átalakítása nagyobb szerves molekulákká, ami már a múlt században elkezdődött. Sokat ígérő terület a metán átalakítása hatszénatomos szénhidrogénekké, de talán a legnagyobb fontosságú a szénhidrogének előállítása szén-dioxidból és vízből (Heinemann, 1996). Oláh György (1999)

szerint e folyamat nagyüzemi megvalósítása révén az ember majd művi úton másolja a természetes fotoszintézist. Az eddigi tapasztalatok arra utalnak, hogy a katalízisre, illetve elektrokatalízisre döntő szerep vár e folyamat megvalósításában. Nagy áttörést jelentene, ha megoldódna hidrogén előállítása fotokatalitikus úton (Thomas, 1994), illetve a hidrogén-peroxid közvetlen előállítása oxigénből és hidrogénből.

Az elméleti katalíziskutatás célja ma a reakciómechanizmusok atomi vagy molekuláris szintű megértése, ezen belül különösen a meghatározó szerepet játszó felületi képződmények szerkezetének tisztázása. Ebben segítséget nyújtanak a komplex kémiai analógiák, a ligandumok szerkezetére vonatkozó ismeretek alkalmazása a feltételezett felületi intermedierek keresésében. E szempontból nagy fontosságú továbbá a nanoméretű felületi szerkezetek felépítése, az atomi szintű modellrendszereken létrejövő képződmények vizsgálata. Segítséget nyújtanak mindebben az elméleti *ab initio* és *sűrűség-funkcionál* számítások. A megoldásban nyilván szerepet fog játszani a katalitikus anyagok elektronszerkezetének (Schlögl, 2001),

a reaktáns-felület kölcsönhatás, továbbá az elemi folyamatok számítógépes modellezése is. A felületi folyamatok kísérleti – *in situ* – vizsgálata sajnos még csak részleteiben lehetséges: zavart okozhatnak a reaktív köz-titerméknél jóval hosszabb élettartamú „spectator” („szemlélődő”) képződmények. Fontos tudni, hogy a műszeres vizsgálatokon kívül magát a reakciót is fel lehet és fel is kell használni a katalizátorok tulajdonságainak vizsgálatára, hiszen – mint gyakran hangoztatják – nincs olyan fizikai módszer, amely jobban ismerné a katalizátor aktív helyeit, mint maga a katalitikus folyamat. Ezért sajnálatos, hogy ma kevesebb figyelem fordul a katalitikus reakciók sebességi egyenleteiben szereplő konstansok meghatározására, holott ezek a *reakció során kialakuló felületi képződményt, a felület-szubsztrátum kölcsönhatás jellegét* jellemzik. Ebbe a családba sorolhatók a tranzienk kinetikai vizsgálatok is, izotópok alkalmazásával vagy más módszerekkel (Thomas, 1994).

Kulcsszavak: *katalízis, katalíziselméletek, szénhidrogén-katalízis, zeolítkatalízis, királitáskatalízis, környezetkatalízis*

IRODALOM

- Balandin, A. A. (1969). *Advances in Catalysis* **19**, 1
Corma, A., Németh, L. T., Renz, M., Valencia, S. (2001). *Nature* **412**, 423
- Heinemann, H. (1996): *Proc. 12th Internat. Congr. Catalysis*, Baltimore; Stud. Surf. Sci. Catal., **101A**, 96
- MTA Katalízis Munkabizottság helyzefelmérése (2002) (http://www.kfki.hu/chemonet/osztaly/bizot/elemzes_katalizis.html)
- Olah, G., Molnár, Á. (1995). *Hydrocarbon Chemistry*, John Wiley & Sons; Oláh, Gy.: *Magyar Tudomány* **106** (új folyam 44), 1409 (1999)
- Ponec, V., Bond, G. C. (1995). *Catalysis by Metals and Alloys*, Elsevier, Amsterdam
- Schlögl, R. (2001). *CATTECH* **5**, 146
- Solymosi, F. (1977). *Structure and Stability of Salts of Halogen Oxyacids in the Solid Phase*, John Wiley & Sons
- Szabó Z., Solymosi, F. (1960). *Actes de II. Congress International de Catalyse Paris*, p. 1627.
- Tétényi P., Gucci L., Paál Z. (1974). *Acta Chim. Hung.* **83**, 37
- Thomas, J. M. (1994). *Angew. Chemie, Internat. Ed.* **33**, 913

A FELÜLETTUDOMÁNYTÓL A NANOTECHNOLÓGIÁIG: REAKCIÓK TANULMÁNYOZÁSA ATOMI LÉPTÉKBEN

Berkó András

az MTA doktora, Szegedi Tudományegyetem MTA Reakciókinetikai Kutatócsoport, Szeged
aberko@chem.u-szeged.hu

1. Bevezetés

A felülettudomány a fizikai-kémiai tudományok fontos területe, amelynek kezdetei a múlt század közepére tehetőek. Az akkoriban már széles körben elterjedt nagyvákuumtechnika és az annak fejlesztését szükségessé tevő elektronikai ipar (világítóeszközök, elektroncsövek) serkentették a legnagyobb mértékben a felülettudomány kifejlődését. Mindehhez további erőteljes lökést adott a születőben lévő mikroelektronika fejlődésének (dióda, tranzisztor), és jelentős várakozások mutatkoztak a heterogén katalízis vonatkozásában is. Nyilvánvalóan már a XX. sz. első felében létrejöttek azok az elméleti eredmények, amelyek a kvantummechanika szilárdtestfizikai adaptációjával lehetőséget teremtettek a felületi jelenségek leírására. Napjainkban az ultravákuumtechnikai (UHV) eszközök és a felületanalitikai komplex berendezések gyártása már egy jól körülhatárolt iparágnak tekinthető (O'Connor, 2001).

Az anyagi jelenségek atomi léptékű megértése Démokritosz kora óta reményteli célja a természettudományok művelőinek, mégis, csupán a XX. század közepétől tekinthető reális lehetőségnek a szilárdtest-felületeken lejátszódó folyamatok atomi szintű tanulmányozása. Többek között éppen ebben jelölhető meg a felülettudomány legfontosabb feladata is. Számos összefoglaló mű készült már a területről, illusztrációként csak

néhány újabban megjelent kötetet említünk meg (Duke, 2002; Razumas, 2001; Desjonquères, 1998). A felülettudomány igazi jelentőségét azonban az elmúlt években kifejlődő ún. nanotechnológia fényében érthetjük meg leginkább. Ki gondolta volna még két évtizeddel ezelőtt, hogy akár egyetlen atom pozíciójának szándékolt megváltoztatása is lehetséges? Ki fogadott volna akkoriban arra, hogy egyszer *in situ* filmezhetjük le individualis atomok felületi diffúzióját? Napjainkban mindezt a felületkutatás már megvalósult eredményei között tartjuk számon.

A jelen összefoglalóban rövid áttekintést kívánunk adni az elmúlt fél évszázad jelentősebb felülettudományi eredményeiről, megemlítve a legfontosabb módszereket, néhány kiemelkedő elméleti és alapvetési eredményt, valamint olyan gyakorlati alkalmazásokat, amelyek nélkül civilizációnk életben maradási lehetőségei bizonyosan korlátozottabbak lennének.

2. A legfontosabb felületvizsgálati módszerek történeti áttekintése

Felülettudományi vizsgálatokról attól kezdve beszélhetünk, amióta sikerült megoldani a szilárdtest-felületek szerkezetének, kémiai összetételének atomi szintű kézbe tartását. Az alábbiakban ismertetjük azokat a legfőbb módszereket, amelyek ma a felületanalitika kísérleti bázisát jelentik (O'Connor, 2001).

Az 1960-as években dolgozták ki azokat a mintaelőkészítési és felülettisztítási módszereket, amelyek mind a mai napig használatosak, s egyben kiindulási pontját jelentik minden felületkutatási programnak. Ezek között meg kell említenünk a vizsgált minták ultravákuum ($<10^{-9}$ mbar) körülmények között végrehajtható hőkezelését – legalább az olvadáspont 60-70 %-áig –, amellyel a tömbi szennyeződések felületre történő szegregációját aktiválhatjuk. Amennyiben a felületre került szennyeződés az adott hőmérsékleten nem deszorbeálódik (s általában ez a jellemző), akkor további felületkezelési eljárásokat is be kell vetni. Erre vonatkozóan két alapvető módszer ismeretes: (i) kisenergiájú (0,5-2 keV) nemesgáz ionokkal (Ar, Ne) történő bombázás; (ii) a gáztérből adszorbeálódó gázokkal (például H_2 , O_2) történő reakció, melynek során deszorbeálódó termékek keletkeznek. Ma már a legtöbb fém és félvezető anyag esetében részletesen leírt tisztítási receptekkel rendelkezünk (Vickerman, 2001).

A felülettudományi kutatások korai szakaszából a kisenergiájú elektrondiffrakciót (Low Energy Electron Diffraction – LEED) és az Auger-elektron spektroszkópiát (Auger Electron Spectroscopy – AES) kell mindenképpen megemlítenünk. Ugyancsak a kezdetekig nyúlik vissza a téremissziós és térionizációs mikroszkópia (Field Emission Microscopy – FEM; Field Ionization Microscopy – FIM) alkalmazása is. Természetesen idővel újabb és újabb elektronerjesztéses elektron-spektroszkópiái módszerek jelentek meg, többek között a pásztázó Auger-elektron-spektroszkópia (Scanning Auger Electron Spectroscopy – SAES), az elektronenergia-vesztési spektroszkópia (Electron Energy Loss Spectroscopy – ELS), azonban látványosan új lehetőséget a fotoelektron-spektroszkópiák (X-ray Photoelectron Spectroscopy – XPS illetve Electron Spectroscopy for Chemical Analysis – ESCA, Ultraviolet Pho-

toelectron Spectroscopy – UPS, Angular Resolved UPS – ARUPS) kifejlesztése jelentette az 1970-es évek elején. Az ESCA napjainkban a felületek kémiai analizisében az egyik legszélesebb körben alkalmazott módszer.

Nagyon hatékonyak bizonyultak az ionok szóródásán alapuló módszerek is, mint például a szekunder-ion tömegspektrometria (Secunder Ion Mass Spectrometry – SIMS), illetve az alacsony energiájú ion visszaszórás spektroszkópia (Low Energy Ion Scattering – LEIS vagy Ion Scattering Spectroscopy – ISS). Itt említhetjük meg a felületanalitika kezdeteitől fontos szerepet játszó termikus deszorpciós tömegspektroszkópiát (Thermal Programmed Desorption – TPD) is, amellyel a felület hőmérsékletének függvényében tanulmányozhatjuk a deszorbeálódó termékek kémiai összetételét.

Az 1980-as évek közepétől a laterális felbontás területén forradalmi változást hoztak az atomszondás pásztázó módszerek (Scanning Probe Microscopy – SPM), mint például a pásztázó alagútmikroszkópia (Scanning Tunneling Microscopy – STM) és a pásztázó erőmikroszkópia (Atomic Force Microscopy – AFM). Ma már egyértelműen látható, hogy ezen eljárások nyitották meg az utat az ún. nanotechnológiai kutatások irányába, mivel nem csupán arra alkalmasak, hogy információt szolgáltatassanak a felületek szerkezetéről, hanem lehetővé teszik az atomi léptékű manipulációt is (individuais atomok, molekulák szándékolt mozgatása). Érdemes megjegyeznünk, hogy az SPM a különböző diffrakciós eljárásoknál (LEED, Reflection High Energy Electron Diffraction – RHEED) általában egyszerűbben értelmezhető kísérleti adatokat szolgáltat. Közben olyan kapcsolódó új módszereket is kifejlesztettek, mint az alacsonyenergiájú elektronmikroszkópia (Low Energy Electron Microscopy – LEEM), illetve a pásztázó alagútspektroszkópia (Scanning Tunneling Spectroscopy – STS). Megemlíthetjük továbbá, hogy a klasszikus

módszernek számító elektronmikroszkópia (High Resolution Electron Microscopy – HREM) is hatalmas fejlődésen ment keresztül az utóbbi két évtizedben.

Külön ki kell emelnünk a rezgési elektronátmenetek érzékelésére alkalmas technikákat, mint például a nagy felbontású elektronenergia-vesztési spektroszkópiát (High Resolution Electron Energy Loss – HREELS), valamint az 1990-es évek elejétől egyre intenzívebben alkalmazott reflektált abszorpciós infravörös spektroszkópiát (Reflection Absorption Infrared Spectroscopy – RAIRS). Ezek a módszerek még alkalmasabbnak látszanak a kémiai kötések azonosítására, mint a korábban már széles körben elterjedt ESCA és UPS fotoelektron spektroszkópiák. Napjainkban egy új technika, a lézeres összefrekvencia-spektroszkópia (Sum Frequency Generation – SFG) váltott ki igen nagy érdeklődést, amellyel *in situ* nagyobb nyomásokon is követhetőek a rezgési állapotok változásai.

A felületvizsgálati módszerek bemutatásakor nem hagyhatjuk említés nélkül a szinkrotronforrások mellett folyó kutatómunkát. A szinkrotron tárológyűrűk lényegében olyan folytonos szinképpel rendelkező fotonforrást jelentenek, amelyekkel a távoli infravöröstől a röntgentartományig monokromatizált gerjesztés révén a legváltozatosabb (nagy sebességű, illetve nagy laterális felbontású) fotoelektron-spektroszkópiái módszerekre van lehetőség (például: Extended X-ray Absorption Fine Structure – EXAFS, Near Edge X-ray Absorption Fine Structure – NEXAFS).

Fentieket összefoglalva megállapíthatjuk, hogy az elmúlt 20-30 évben a felületanalitikai módszerek igen széles köre jött létre. Természetesen egy adott felületanalitikai berendezést nem szerelhetünk fel az összes technikával, de törekedhetünk rá, hogy olyan, egymást kiegészítő módszerek kerüljenek beépítésre, amelyekkel a felület kémiai összetétele, a szerkezeti felépítése és a molekuláris kötések egyaránt meghatározhatók (1. ábra).



1. ábra • Felületanalitikai UHV nagyberendezés

3. A legegyszerűbb anyagi rendszerek vizsgálatától a komplex rendszerekig

A felületi reakciók tanulmányozásának közel fél évszázados története jól mutatja, hogy az anyagi jelenségek megismerése a legegyszerűbb rendszerektől fokozatosan a bonyolultabb, a valóságot egyre jobban megközelítő folyamatok tanulmányozása és megértése irányába halad. A felülettudományi alap kutatási eredmények gyakorlati hasznosíthatóságát megkérdőjelező szakemberek legfőbb érve hosszú ideig az volt, hogy az egyszerű kémiai rendszerekről kapott információk csupán nagyon közvetett ismereteket szolgáltatnak a reális anyagi rendszerek megértéséhez. A bonyolult rendszerek viszont nem vizsgálhatók felülettudományi módszerekkel, különösen nem nagyobb gáznyomásokon („pressure gap”). Ezt szokás mostanában bonyolultsági szakadékának („material gap”) is nevezni.

Az 1960-as években főként a tiszta fémegyikristály-felületeket, illetve az azokon történő adszorpciós folyamatokat vizsgálták. Csupán címszavakban a következő tématerületeket emelhetjük ki: (i) tiszta fémfelületek orientációfüggő relaxációja és rekonstrukciója; (ii) kis atomszámú molekulák adszorpciós és deszorpciós tulajdonságai átmenetifém-felületeken; (iii) adszorbeátumok közötti reakciók tanulmányozása; (iv) gázok adszorpciójának vizsgálata moleku-

lársugár technikával, illetve nagynyomású katalitikus cellában. A 1970-es években a fémek mellett egyre nagyobb hangsúlyt kapott a mikroelektronikában széles körben használt félvezető egykristály felületek vizsgálata. Kiemelkedő jelentőségű volt azon kutatási témák megjelenése, amelyek korábban a „hagyományos” vékonyfilmek témakörébe tartoztak, de a vizsgálat alapvetően az egy-két atomi rétegben felvitt epitaxiákra vonatkozott (ultravékonyréteg). A fém-fém, félvezető-fém, az oxid-fém határfelületek atomi szintű megértése egyre inkább közvetlen ipari igényként jelentkezett ebben az időszakban, amelyet joggal jelölhetünk a mikroelektronika fénykoraként. Természetesen más hangsúlyos anyagtudományi, illetve felülettudományi kutatási területek is megemlíthetők ebből a korszakból, így például az optikai, a nagy szilárdságú és az antikorróziós bevonatok kifejlesztése. Az 1980-as években a – főként katalitikus indítatású – felületanalitikai munkák egy jelentős része a felületi adalékok (pozitív és negatív elektronaffinitású preadszorbeátumok) szerepének tisztázására irányult (közvetlen/közvetlen hatás).

Az 1980-as évek vége radikális szemlélet- és témaváltást eredményezett. Míg korábban az atomi szerkezet tanulmányozása főként csak diffrakciós módszerekkel volt lehetséges, addig az SPM módszerek alkalmazása lehetővé tette a nem periodikus felületi szerkezetek nanométer léptékű tanulmányozását is. Ily módon megnyílt az út a hordozott nanoklaszterek, kristallitok, rekonstrukcióval kialakuló felületi nanoszerkezetek tanulmányozása előtt. Az ezen témákkal kapcsolatos alapkutatások az 1990-es évek közepétől egyre inkább meghatározóvá váltak, s még napjainkban is erőteljes bővülés tapasztalható. Itt említhetjük meg a heterogén katalízis vonatkozásában, hogy a korábban említett „material gap” áthidalását célozza a kétdimenziós modellkatalizátorok alkal-

mazása, amelyek előállításánál oxid-egy-kristály-felületekre fémkristallitokat juttatunk. Egy ilyen anyagi rendszer kitűnően alkalmas felületanalitikai vizsgálatokra, ugyanakkor összetettségében, komplexitásában már megközelíti a reális katalizátorokat.

Napjainkban a felülettudományi módszerek néhány egészen távolinak tűnő területen is alkalmazásra kerültek, mint például a biotechnológia vagy az űrkutatás, illetve a csillagászat. Az előbbi vonatkozásában az élőszövet-barát protézisfelületek kialakítása vagy a funkcionális nanoszerkezetek bioszenzorként történő felhasználása említhető meg. Az utóbbi esetében a foton-, elektron- és ionsugárzás hatására az égitestek (például a Hold) közeleiben bekövetkező változások tanulmányozása emelhető ki, ami a műholdas telekommunikációban lehet rendkívüli fontosságú.

4. Az utóbbi évtizedek kiemelkedő felülettudományi eredményei

A szilárdtest felületek viselkedésére vonatkozó jelentős felismerések sora igen hosszú, amelyet – a teljesség igénye nélkül – az alábbi néhány példával szeretnénk illusztrálni.

4. 1 Felületek atomi szerkezete

A szilárd felületek reakcióképességét döntően befolyásolja azok szerkezete, amelynek felderítése a felülettudományi vizsgálatok első és legfontosabb területe volt. A felületi szabadenergia minimalizálása következtében – a szorosan pakolt felületek kivételével – a tömbi szerkezetre jellemző atomi pozíciók jelentősen megváltozhatnak („relaxation, reconstruction, faceting, buckling”). Bár a legtöbb ilyen irányú vizsgálat fémeken történt, hasonló jelenségek lépnek fel félvezetők és oxidok esetében is. Három nevezetes példát szeretnénk megemlíteni: (i) a Pt(110)-(1x2) felületen minden második sor hiányzik a tömbi szerkezethez képest; (ii) a Si(111)-(7x7) felület elemi cellája, amely kö-

zel száz, megváltozott pozíciójú atomot tartalmaz; a $\text{TiO}_2(110)-(1 \times n)$ felület, amelyen egydimenziós redukált Ti_2O_3 oxidfázis alakul ki. A heterogén katalízis vonatkozásában számos esetben (például az ammóniaszintézis, szénhidrogén-átalakítás) sikerült összefüggést találni a felület szerkezete és aktivitása között (Dwyer, 1992). Ezen jelenségek önmagukban is izgalmasak, mindenesetre napjainkban az önszerveződő felületi folyamatok az érdeklődés homlokterébe kerültek bizonyos nanotechnológia eljárások kidolgozásában (nanohuzalozás, speciális foto-reflexió és elektronemisszió stb.) (Pearsall, 2000).

4.2 Adszorbeált molekulák és felületi csoportok reakciói

A gázfázisban instabil fragmentek a szilárdtestekhez kötődve stabil felületi formát képezhetnek, s szerepük bizonyos katalitikus reakciók köztitermékeként rendkívül jelentős lehet. Tanulmányozásuk érdekében létre kell hoznunk őket az adott felületen, s erre ma már több módszert is ismerünk: (i) gyökforrás segítségével előállított fragmentek adszorpciója alacsony hőmérsékleteken; (ii) az adott felületi csoportot tartalmazó adszorbeált molekulák „in situ” fragmentációja fény, elektronbesugárzás hatására, illetve termikus gerjesztéssel. Természetesen mindegyik eljárásnak vannak korlátai, de például a felületi C_xH_y csoportok kémiaiját sikerült eléggé részletesen megismerni ezekkel a módszerekkel (Zaera, 2001).

4.3 Felületi adalékanyagok hatásának megismerése

A szilárdtestek felületén jelen lévő idegen atomok jelentősen befolyásolhatják annak reakcióképességét. Ezen felületi adalékanyagok hatása számos esetben káros (ilyenkor szennyezőkről, illetve mérgező/inhibitor anyagokról beszélünk), de sokszor előnyös is lehet, például a felület passziválásának

megnövelésében (korróziógátló anyagok) vagy bizonyos katalitikus folyamatokban a szelektivitás növelésére (promotorok), esetleg a kilépési munka lecsökkentésében (katódbevonatok). A nyolcvanas években a világ számos laboratóriumában vizsgálták az alkáli atomok hatását különböző adszorbeált molekulák esetében átmenetifém felületeken (Somorjai, 1989). Az egyik alapvető megállapítás szerint az alkáli atom a szubsztrátfémen keresztül elektront donál a koadsorbeált molekulára, aminek következtében felületi negatív ionok jönnek létre (CO^- , CO_2^- stb.). Ebből a szempontból mind az elektropozitív, mind az elektronegatív koadsorbeált atomok hatásának szisztematikus vizsgálatára sor került, sőt nemcsak adszorpciós kísérletekben, hanem egykristály felületeken végrehajtott katalitikus folyamatokban is (Kiskinova, 1992).

4.4 Ultravékony filmek: fém-fém, oxid-fém és félvezető-fém határátmenetek

Számos alkalmazási területet érintenek azok a kutatások, amelyek az epitaxiális növekedés korai szakaszával, azaz az egy-két atomi réteg vastagságú filmek szerkezetével foglalkoznak (Freund, 2002). A mikroelektronikai vonatkozású fém-félvezető határátmenetek ilyen mélységű vizsgálatát a miniatürizálás tette szükségessé, sőt napjainkban az ún. nanoelektronika új igényei (kvantumpöttyök, egyelektron eszközök, atomi kapcsolóelemek) ezt a tématerületet a nemzetközi kutatás homlokterébe helyezték. A fém-fém homo-, illetve heteroepitaxiák atomi szintű tanulmányozása a nanoötvözetek világába vezet bennünket, amelyeknek a korrózióálló, magas keménységi fokú anyagok gyártásában, valamint a heterogén katalízisben van döntő szerepük. Az oxid-fém határátmenetek megismerése szintén nagy jelentőségű, különösen a heterogén katalízis, a gázszenzorika és a nanoelektronika területén (Ertl, 1999).

4.5 *A felülettudomány orvostudományi és biotechnológiai vonatkozásai*

Az utóbbi két évtizedben az orvosi rehabilitációban jelentősen megnőtt az igény a szövetbarát protézisek előállítására. A hagyományos felületkezeléseken kívül igen hatásosnak mutatkozott a vákuumban történő ionbesugárzás, amelynek a protézisfelületekre gyakorolt hatása vizsgálatában a felületanalitika jelentős segítséget jelenthet (Kasemo, 2002). A testbe épített anyagok esetében (például fog-implantátum) érvényes felülettudományi modellrendszer például a következő: titán-fémén képződő epitaxiális titán-oxid kölcsönhatása a testnedvekben előforduló molekulákkal és ionokkal. A legutóbbi időkben egy másik lényeges biotechnológiai területen – a funkcionizált, bioszektív felületek, bioszenzorok nanotechnológiai előállításában – is felmerült a felülettudomány alkalmazhatósága. További jelentős témák is ígértesek, mint például a DNS-szekvencia meghatározás SPM módszerrel; a mesterséges fotoszintézis, illetve az idegsejteknek integrált áramkörökkel történő összekapcsolása.

4.6 *Mágneses ultravékony rétegek előállítása*

A gyors és nagy kapacitású optikai, illetve mágneses adattárolók kétségkívül korunk információs társadalmának igen fontos keleti (floppy, CD, DVD, winchester). Az információsűrűség növelése vezetett ahhoz a felismeréshez, hogy a felületi mágneses jelenségek megértése alapvetően szükséges a továbblépéshez (Shen, 2002). E kihívás jegyében kezdtek tanulmányozni a 2D-s (kétdimenziós) mágneses filmeket, az 1D-s mágneses vezetékeket, valamint legújabban a 0D-s mágneses nanopöttyöket. A terület kapcsolódik a fentebb már említett fém-fém ultravékony filmek kérdésköréhez is (pl. a Cu-Co-Cu szendvicsszerkezetek). Ma a mesterséges mágneses nanoszerkezetek kialakí-

tása olyan újszerű lehetőségeket tárt fel, mint például (i) a spin-polarizációs alagútmikroszkópia kifejlesztése; (ii) a makroszkópikus méretekben instabil, de nm-tartományban stabil mágneses nanoötvözetek (Fe/Cu(100), Fe/Pt(111)) létrehozása.

4.7 *Felülettudományi kvantumkémia*

A fentiekben már említett – a kvantumkémia által kezelhető modellrendszerek és a technológiai felületek közötti bonyolultsági szakadék („material gap”) sokáig jelentősen korlátozta a számítógéppel végezhető felülettudományi kutatásokat. Az utóbbi tíz év számítástechnikai fejlődése azonban sokkal közelebb vitt ehhez a célhoz, és ugyanebbe az irányba mutatnak a felülettudomány azon törekvései is, hogy atomi léptékben ellenőrzött modellrendszerekkel végezzünk kísérleteket. A XXI. század elejére lehetségessé vált, hogy „ab initio”, illetve sűrűségfüggő számításokkal másodperces időintervallumban lehessen követni a 10^4 atomot tartalmazó rendszerek dinamikáját (molecular dynamics) (Stampfl, 2002). Így például sikerült modellezni valós felületi rendszerek fázisátalakulását, adszorpció és deszorpció dinamikáját (oszilláló felületi reakciók). Az utóbbi idők lényeges fejleménye, hogy míg a korábbi elméleti modellek csupán egyes molekulák dinamikáját voltak képesek leírni, manapság az adszorbeált molekulák kölcsönhatását is figyelembe lehet venni a szimulációban (például CO oxidációja Ru(0001) felületen) (Bottcher, 2000).

5. *A felülettudomány hazai helyzete és eredményei*

A fentiekből talán érzékelhető, hogy a felülettudomány műveléséhez meglehetősen egyedi, sokszor igen nagy értékű berendezésekre van szükség. A szűkös anyagi források ellenére a magyarországi felületkutatási programok és eredmények a közép-európai régióban kiemelkedőnek mondha-

tók, ugyanakkor Nyugat-Európához és a fejlett világhoz képest 5-10 éves hátrányban vagyunk. A tudományterület vezető folyóirataiban (Surf. Sci., Appl Surf. Sci., Rep. Surf. Sci., Prog. Surf. Sci., Phys. Rev. B, J. Phys. Chem., J. Chem. Phys.) az utóbbi 15-20 évben magyar szerzők tollából megjelent dolgozatok száma kb. 300, ami az ország nagyságához és a ráfordított pénzügyi forrásokhoz viszonyítva jó eredménynek tűnik. A felülettudomány területén nemzetközileg is elismert hazai laboratóriumok a következők: ATOMKI Elektron-spektroszkópiai Osztály (Varga Dezső, Kövér László), BME Atomfizikai Tanszék (Giber János, Deák Péter), MFA Felületfizikai Laboratórium (Gergely György, Menyhárd Miklós), KK-AKK Felületkémiai Csoport (Bertóti Imre), KK Izotóp- és Felületkémiai Intézet (Guczi László), KK-KI Felületkémiai és Korróziós Osztály (Kálmán Erika), KLTE Szilárdtest Fizika Tanszék (Beke Dezső), SZTE-MTA Reakciókinetikai Kutatócsoport (Solymosi Frigyes, Kiss János). Az elmúlt években nemzetközi visszhangot is kiváltó eredmények az alábbi tématerületeken születtek: (i) a szénhidrogének katalitikus átalakításában fontos szerepet játszó köztitermékek tanulmányozása; (ii) felületi adalékanyagok hatásmechanizmusának felderítése; (iii) vékonyréteg szendvicsszerkezetek mélységi összetételének

meghatározására szolgáló módszerek kidolgozása; (iv) 2D modellkatalizátorok előállítása, átmenetifém-nanoszemcsék gázok hatására bekövetkező morfológiai változásának kimutatása; (v) kompakt gyémánt vékonyrétegek és egyéb antikorróziós bevonatok létrehozása.

Összességében megállapítható, hogy jelenleg működőképes kutatási háttérrel rendelkezünk a felülettudomány és a kapcsolódó nanotechnológia területén, s ez jó alapot jelenthet a terület szükséges továbbfejlesztéséhez az elkövetkező néhány évben.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetemet fejezem ki Solymosi Frigyes akadémikusnak és Kiss János MTA-doktor-nak a kézirat gondos átolvasásáért és hasznos észrevételeikért. A felülettudomány terén végzett tevékenységem több mint két évtizedes támogatásáért és közös munkáinkban adott tanácsaiért külön is hálás köszönettel tartozom Solymosi Frigyes akadémikusnak.

Kulcsszavak: felülettudomány, nanotechnológia, redukált dimenziójú önszerveződés, felületanalitikai módszerek, elektron- és fotoelektron-spektroszkópia, atomszondás technika, kétdimenziós modellrendszerek.

IRODALOM

- Bottcher, A. Krenzer, B. Conrad, H. Niehus, H. (2000). Surf. Sci. **466**, L811
- Desjonquères, M.C. Spanjaard, D. (1998). *Concepts in Surface Physics*. Elsevier, Amsterdam
- Duke, C. B. Plummer, E.W. (Editors) (2002). Jubilee Volume Surf. Sci. **500**
- Dwyer, D. J. Hoffman, F.M. (1992). *Surf. Sci. and Catal. Symposium Series* 482, Washington D.C.
- Ertl, G. Freund, H.-J. (1999). Phys. Today. **1**, 32
- Freund H.-J. (2002). Surf. Sci. **500**, 271
- Kasemo, B. (2002). Surf. Sci. **500**, 656
- Kiskinova, M. P. (1992). *Studies in Surf. Sci. and Cat.* Vol. 70
- O'Connor, D. J. Sexton, B. A. (2001). *Surf. Anal. Methods in Mat. Sci.* Springer Series in Surf. Sci. Vol. 23
- Pearsall, T. P. (2000). *Quantum Semiconductor Devices and Technologies*, Kluwer Academic Publishers. London
- Razumas, V. Nylander, T. (2001). *Surf. and Coll. Sci.* Elsevier, Amsterdam
- Shen, J. Kirschner, J. (2002). Surf. Sci. **500**, 300
- Somorjai, G. A. Garfunkel, E. L. (1989). *Alkali Adsorption on Metals and Semiconductors*, Bonzel, H. P. Ertl, G. (eds). Elsevier, Amsterdam, 319
- Stampfl, C. Ganduglia Pirovano, M. V. Reuter, K. Scheffler, M. (2002). Surf. Sci. **500**, 368
- Vickerman, J. C. (2001). *Surface Analysis*, UMIST, Manchester, UK
- Zaera, F. (2001). Progr. in Surf. Sci. **69**, 1

ÚJ GENERÁCIÓJÚ ÜZEMANYAGCELLÁK

Oláh György

az MTA tiszteleti tagja,
egyetemi tanár, igazgató
Loker Hydrocarbon Research Institute,
University of Southern California
olah@usc.edu

Ánieszfeld Róbert

PhD, MBA, igazgatóhelyettes
Loker Hydrocarbon Research Institute,
University of Southern California
aniszfel@usc.edu

Mi az üzemanyagcella?

Az üzemanyagcella olyan elektrokémiai galvánelem, amely képes a benne lévő üzemanyag kémiai energiáját közvetlenül elektromos energiává átalakítani. A különbség az üzemanyagcellák és galvánelemek között az, hogy amíg a galvánelemek esetében az üzemanyag felhasználása után az elemet (vagy akkumulátort) ki kell cserélni (vagy fel kell tölteni), addig az üzemanyagcellákat új üzemanyaggal folyamatosan lehet ellátni. Ez mint elvi lehetőség már 160 éve ismert, Sir William Grove, walesi születésű brit kutató reagáltatott először hidrogén- és oxigéngázt platina elektródok fölött és ekkor elektromos áramot észlelt (Grove, 1839). Több kutatócsoport munkája ellenére az üzemanyagcellák széleskörű gyakorlati alkalmazása még nem valósult meg. Üzemanyagcellákat űrhajókon használnak elektromos áram fejlesztésére,

de ma már több más alkalmazási területen is megtalálhatók. Tömeges elterjedésüket energiaátalakítási hatásfokuk és magas költségük még korlátozza (Appleby, 1993).

Az üzemanyagcellák előnye a belsőégésű motorokhoz képest az, hogy az üzemanyagcellák eleméleti hatásfokát elvi termodinamikusan nem korlátozzák, a belsőégésű motorok hatásfokát viszont a Carnot-ciklus diktálta termodinamikusan határozza meg. Ha belsőégésű motort és dinamót használunk elektromos áram fejlesztésére, a sorba kapcsolt folyamatok eredő hatásfokát az egyes hatásfokok szorzata adja meg, azaz jelentős veszteségekkel jár ilyen módon elektromos energiát fejleszteni. E két különböző elektromos áram-fejlesztési folyamatot az 1. ábra illusztrálja.

Az üzemanyagcellák további előnye az akkumulátorokkal (vagy szekunder elemekkel) szemben az, hogy az „újratöltés” azonnal



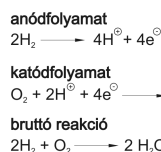
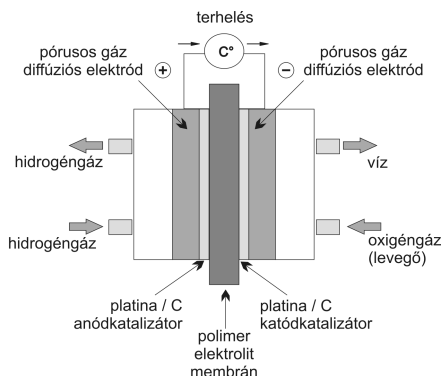
$$\eta_1 \times \eta_2 \times \eta_3 \ll \eta$$

1. ábra • Az elektromos áram-fejlesztés hatásfoka

megvalósul, amíg a legújabb gyorsöltésű akkumulátorok minimálisan is kb. egy órát és külső elektromos áramforrást igényelnek az újratöltéshez. Az üzemanyagcellák további nagy előnye, hogy lényegesen nagyobb teljesítménysűrűségekre képesek, és hogy az üzemanyagtartály térfogatát (és ezzel a két tankolás/töltés közötti időtartamot) kizárólag a pontos felhasználás követelményei diktálják.

Az üzemanyagcellák három fő sajátosságuk alapján rendszerezhetők: (1) a működési hőmérséklet korlátai szerint, (2) az üzemanyag típusa alapján és (3) az elektrolit fajtája alapján. Cikkünk központi tárgya az úgynevezett PEM, a polimer elektrolit membránt alkalmazó üzemanyagcellák, amelyek szobahőmérsékleten képesek működni. Továbbá összefoglaljuk két különböző üzemanyagcella tulajdonságait, előnyeit és hátrányait. Az egyik a Grove-féle hidrogén/oxigén cella, a másik az általunk és a Caltech – Jet Propulsion Laboratory által közösen kifejlesztett, a metanol vizes oldatának közvetlen (direkt) oxidációján alapuló üzemanyagcella.

A Grove-féle cellákban hidrogént és oxigént elektrokémiai úton reagáltatnak, közben elektromos áram, víz és hő képződik (2. ábra). A hidrogén/oxigén üzemanyagcellák tömeges elterjedését nehezíti, hogy nagyobb mennyiségű hidrogén tárolása veszélyes, a hidrogén előállítása energiaigényes. Nem utolsósorban gond az is, hogy nagy mennyiségű hidrogén szétosztására nem létezik még infrastruktúra, és egy ilyen hálózat kiépítése komoly befektetést igényelne. A hidrogéngáz reformátorokban is előállítható, ahol a különböző forrásokból származó szénhidrogéneket katalitikusan hidrogén és szén-monoxid keverékké alakítják át, amit ezután szétválasztanak. A teljes szétválasztást azonban nehéz megvalósítani. A nyom-szennyeződésként visszamaradó szén-monoxid felhalmozódása viszont megmérgezhetheti az üzemanyagcella platina katalizátorát.

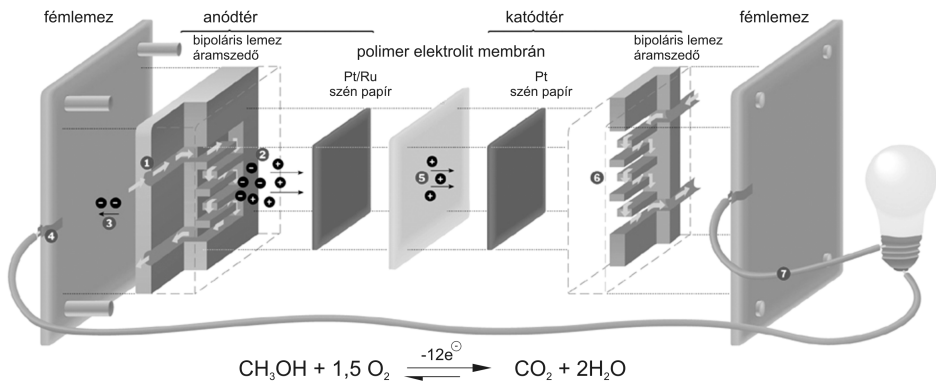


2. ábra • Hidrogén/oxigén üzemanyagcella

Direkt metanolos üzemanyagcella (Direct Methanol Fuel Cell – DMFC)

A NASA Jet Propulsion Laboratoryval közösen kifejlesztett direkt metanolos üzemanyagcellánk (Surampudi, Olah, Prakash *et al.*, 1994) a Grove-féle hidrogén/oxigén cella sok problémájával szemben nagyban leegyszerűsített és szobahőmérsékleten is biztonságos működést biztosít. (A továbbiakban az angol kezdőbetűkön alapuló DMFC = Direct Methanol Fuel Cell rövidítést fogjunk használni üzemanyagcellánk megnevezésére). A DMFC valamilyen folyékony szerves üzemanyag híg vizes oldatának (például: 3 %-os metil-alkohol) oxigénnel (vagy levegővel) történő közvetlen katalitikus oxidációján alapul. A DMFC (Oláh *et al.*, 1997) elektromos áramot, szén-dioxidot, vizet és hőt termel (3. ábra).

1. Metanol 3 %-os vizes oldatát az anódtérbe vezetik, és egyidejűleg oxigént (vagy levegőt) táplálnak a katódtérbe.



3. ábra • A metanol vizes oldatával működő közvetlen oxidációjú üzemanyagcella sémája (DMFC) (Forrás: Oláh György és Ániszfeld Róbert – Richard L. Sanchez / Los Angeles Times)

2. A platina/ruténium katalizátor felületén a metanol víz jelenlétében szén-dioxidá alakul.

3. Az így felszabadított elektronok az áramszedő lemez felé áramlanak. A polimer elektrolit membrán elektronszigetelő anyag, amely az elektronoknak a katódtérbe való áramlását akadályozza meg.

4. Elektron potenciál és áram épül fel, ami a féMLEmezen keresztül a külső áramkörbe folytatja útját.

5. Ezalatt a 2. pontban leírt folyamatban keletkezett protonok a polimer elektrolit membránon keresztül a katódtérbe vándorolnak.

6. A katódtérben a platina katalizátorral érintkezésben lévő protonok, az oxigén és az elektronok egyesülnek. A keletkező víz a feleslegben lévő gázzal együtt elhagyja a katódtérrel.

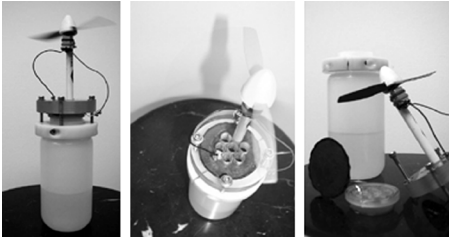
7. Az anódtérből áramló elektronok munkába lépnek az izzólámpán keresztül, ami után folytatják útjukat a katódtér felé.

DMFC -prototípusok

A Caltech-JPL-USC kooperáció eredményeire építve új generációjú prototípusokat

építettünk. Ezek a prototípusok képesek szobahőmérsékleten a metanol és a metanol származékainak híg vizes oldatával és levegővel több órán keresztül megszakítás nélkül működni (4. ábra). Ameddig az ábrán látható prototípust metanollal és levegővel tápláljuk, a prototípus megállás nélkül működik. A 4. ábrán egy egyrekeszű cella látható, amelynek legfontosabb eleme a jobb oldali képen látható, kb. 2 mm vastagságú korong alakú membránelektrod-szerelvény. Az 5. ábra egy 25 cm²-es aktív alapterületű membránelektrod-szerelvény szobahőmérsékletű elektromos teljesítményét és energiasűrűségét illusztrálja. A membrán és a membránelektrod-szerelvény adatait a közelmúltban megadott szabadalom részletezi (Oláh *et al.* 2001).

A mobiltelefonok és kézi adattárolású számológépek többféle működési képességeinek egyetlen mobilkészülékbe való sűrítésével az új generációjú telefonok energiaigénye messze túlhaladja a jelenlegi elemek kapacitását. Ennek következtében az akkumulátoros technológia korlátai a mobil eszközök fejlődési ütemének meghatározó tényezőivé váltak. Ezért az üzemanyagcellák álta



4. ábra • DMFC-prototípus

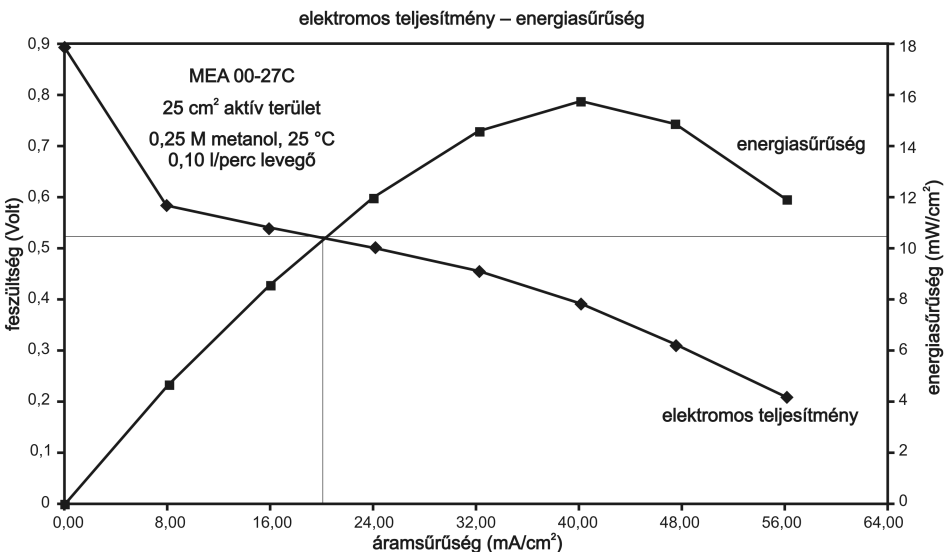
lános sikere fontos szerepet játszhat majd a mobil eszközök iparának jövőjében is.

Egy másik prototípusunk a 6. ábrán látható nyolccellás DMFC energiaforrás. A berendezés, csakúgy, mint a 4. ábrán látható egyrekeszű elődje, szobahőmérsékleten metanol híg vizes oldatával és levegővel működik. Ez az újabb prototípus abban különbözik elődjétől, hogy a négy-négy, egyenként kb. 5 cm² területű membrán-elektrodszerelvény anód oldalai a prototípus közepén helyezkedő 45 ml térfogatú üzemanyagtartály két szemben lévő oldalát képezik. Továbbá a metanol újratöltését önzáró, gyorskapcsolású szelepekkel oldottuk meg.

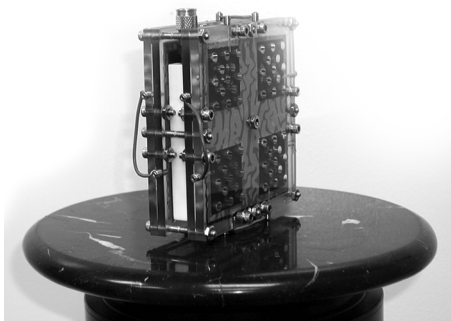
Regeneratív üzemanyagcellák. A szén-dioxid, mint a világ szén és szénalapú vegyületeinek végső forrása

Kutatásaink során (Oláh, Prakash, 1998) megfigyeltük, hogy a DMFC-ben lejátszódó kémiai folyamat fordított irányban is megvalósítható. Így a metil-alkohol vagy a belőle származtatható oxigéntartalmú vegyületek előállíthatóak szén-dioxidból vizes közegű elektrokatalitikus redukcióval, vagyis anélkül, hogy előbb a vízből hidrogént kellene készíteni. Ebben az úgynevezett regeneratív vagy fordított üzemanyagcellában a szén-dioxidot és a vizet elektrokatalitikus úton oxigéntartalmú üzemanyaggá, hangyasavvá és származékaivá alakítjuk. A cellafeszültségtől függően a metil-alkohol szintézise is lehetővé válik. (7. ábra)

A fordított üzemanyagcella a CO₂ elektrokatalitikus redukcióját olyan feszültségnél valósítja meg, amely kívül esik a víz elektrolyíziséhez szükséges feszültségtartományon. A fordított működési módban a feszültség alatt lévő üzemanyagcella a szén-dioxid vizes



5. ábra • Egycellás DMFC teljesítménye szobahőmérsékleten



6. ábra • Nyolccellás DMFC-prototípus

oldatából oxigéntartalmú metánszármazékokat: metil-alkoholt, dimetil-étert, dimetoximetánt, trimetoxi-metánt, trioxi-metilént, dimetil-karbonátot és metil-formiátot állít elő (8. ábra). Az üzemanyagcella, ennek megfelelően, az elektromos energia reverzibilis tárolójaként működik, és ezt sokkal hatékonyabban végzi, mint bármilyen ismert akkumulátor. A szén-dioxid újrafelhasználása tehát nemcsak a fűtőanyagok regenerálására ad lehetőséget, de egyúttal csökkentheti ennek az üvegházhatást okozó gáznak az atmoszférában történő felhalmozódását is (Oláh, 1999).

Összefoglalás

Elektromos energia hatásos tárolására ma még nincs bevált eljárás vagy hatásos berendezés. Például a hidroelektromos erőművek esetében a felesleges elektromos energiát (kapacitást) arra használják, hogy a vizet szivattyúkkal alacsonyabb szintről magasabb szintre emeljék, amivel helyzeti energiát nyernek, amelyet később újra elektromos energiává alakítanak. Nagy veszteségekkel

standard redukciós potenciálok E0 vs SHE



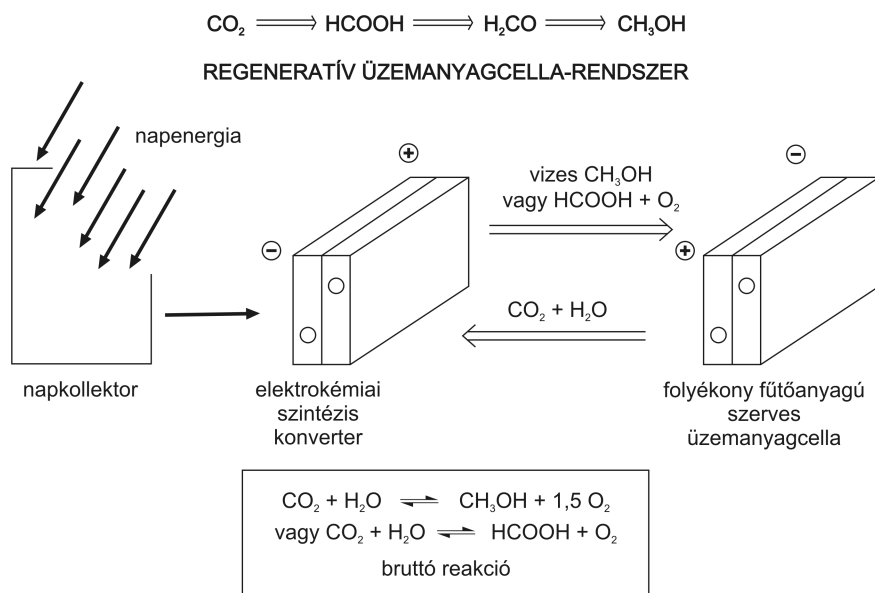
7. ábra • Standard redukciós potenciálok

ugyan, de ilyen módon elektromos energiát tudnak tárolni. Természetesen ez csak a hidroelektromos erőművek környékén valósítható meg, és csak ott érdemes használni, ahol vízhiány van. Ezzel szemben – a földrajzi helytől függetlenül – a felesleges elektromos energiát a regeneratív üzemanyagcellákon keresztül a fentiekben leírt módon fel lehet használni metil-alkohol vagy származékainak az előállítására is. Mások hasonló megfontolásokból, a nap-, a szél- és az atomenergiát akarják hidrogén fejlesztésére használni, és az így előállított hidrogénnel kívánnak energiát tárolni (Hoffman, 2001). Az elgondolás az, hogy a hidrogént majd a Grove-féle üzemanyagcellákban fogják hasznosítani. A hidrogéngáz alkalmazhatóságának hátrányai azonban messze túlszárnyalják előnyeit, mivel:

- hidrogént nehéz biztonságosan tárolni, szállítani és szétosztani;
- a hidrogén széleskörű szétosztására infrastruktúra jelenleg még nem létezik;
- továbbá hidrogén szénhidrogénekből reformátorok segítségével csak komplex módon lehet előállítani, és az így előállított gáz mindig tartalmaz szén-monoxidot is, amit költséges elválasztani.

Ezen okok miatt hidrogén helyett mi a metil-alkohol és származékainak energiahordozóként való előállítását és az üzemanyagcellákban való felhasználását kutatjuk. A biztonságos, folyékony halmazállapotú üzemanyag előnyei mellett alapvető előnyt képez az is, hogy metil-alkoholt (és származékait) szén-dioxidból is elő lehet állítani. A szén-dioxid okozta üvegházhatású melegedés világszerte hatalmas költségeket jelent. Többek között ez a tényező is a szén-dioxid alapanyagként való gazdaságos felhasználásának lehetőségét helyezi előtérbe.

Mint azt már korábban említettük, a direkt metanolos üzemanyagcellában lejátszódó katalitikus kémiai reakciók fő termékei az elekt-



8. ábra • Regeneratív üzemanyagcella

romos áram, a hő, a víz és a szén-dioxid. Szén-dioxidot az általunk kifejlesztett regeneratív üzemanyagcellában elektrokémiai úton is vissza lehet cirkulálni. Természetesen ehhez energia szükséges, amit a jövőben az alternatív energiaforrások mellett az atomenergia fog majd szolgáltatni. A metanol így mint reverzi-

bilis energiatároló – hordozó üzemanyagként fog egyre fontosabb szerepet játszani.

Kulcsszavak: Üzemanyagcella, polimer elektrolit membrán (PEM), üvegházhatás, regeneratív üzemanyagcella, elektromos-áram-fejlesztés, energiahordozó

IRODALOM

- Appleby, A. J. and Foulkes, F. R. (1993). *Fuel Cell Handbook*. Krieger Publishing Co., Malabar, Florida
- Grove, W. R. (1839). *Phil. Mag.*, **14**, 127
- Hoffman, P. (2001). *Tomorrow's Energy – Hydrogen, Fuel Cells, and the Prospects for a Cleaner Planet*. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts, London, England
- Oláh, G. A., Prakash, G. K. S. *et al.* (1997). *Aqueous Liquid Feed Organic Fuel Cell Using Solid Polymer Electrolyte Membrane*. US Patent 5,599,638
- Oláh, G. A. and Prakash, G. K. S. (1998). *Recycling of Carbon Dioxid into Methyl Alcohol and Related*

- Oxygenates for Hydrocarbons*. US Patent 5,928,806
- Oláh, G. A. (1999). Olaj és szénhidrogének a 21. században. *Magyar Kémiai Folyóirat*. **105**, 161-167
- Oláh, G. A., Prakash, G. K. S. *et al.* (2001). *Novel Polymer Electrolyte Membrane for Use in Fuel cells*. AU Patent 729900; WO 98/22989
- Surampudi, S., Narayanan, S. R., Vamos, E., Frank, H., Halpert, G., LaConti, A., Kosek, J., Prakash, G. K. S. and Oláh, G. A. (1994). *Advances in Direct Oxidation Methanol Fuel Cells*. *J. Power Sources* **47**, 377

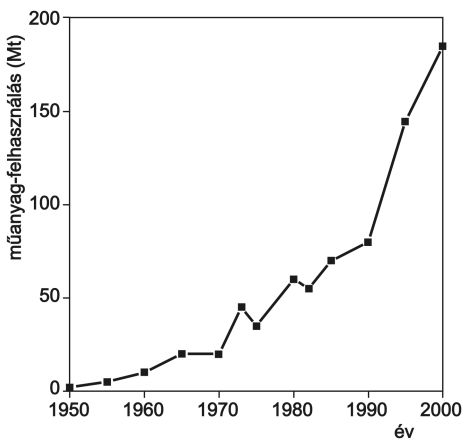
TÁRSÍTOTT ÉS ERŐSÍTETT MŰANYAGOK

Pukánszky Béla

a kémiai tudomány doktora, tanszékvezető, egyetemi tanár, BME, Műanyag- és Gumiipari Tanszék, Budapest, és MTA KK Kémiai Intézet, Budapest – pukanszky@muatex.mua.bme.hu

1. Bevezetés

A műanyagok ma már életünk szerves részét képezik, mindennap találkozunk velük, rendszeresen használjuk őket otthon és munkahelyünkön egyaránt. A műanyagok gyártása és felhasználása töretlenül növekszik szerte a világon, amit az 1. ábra szemléltet. A hagyományos szerkezeti anyagok felhasználása évről évre alig változik, a műanyagoké még mindig jelentős mértékben nő. Az 1. ábrán látható tendencia fokozatosan érvényes hazánkra (Farkas, 2002). Míg a fejlett országokban az egy főre eső műanyag-felhasználás eléri a 150 kg-ot, addig hazánkban ez csak 65 kg/fő. Talán éppen ezért a műanyagipar jelentősége nagy, az elmúlt években a vegyipari termelés értékének több mint 40 %-át adta.



1. ábra • A világ műanyag-felhasználásának változása

Számos területen használnak különleges tulajdonságokkal rendelkező polimereket és műanyagokat. Ilyenek például a piezoelektromos, a nemlineáris optikai jellemzőket mutató polimerek és folyadékkrisztályos polimerek vagy a vezető műanyagok. Ennek ellenére a felhasznált műanyagok közel 80 %-át a tömegműanyagok teszik ki, a poli-etilén (PE), a polipropilén (PP), a PVC és a polisztirol (PS). Új műanyagok kifejlesztése, üzemesítése és piaci bevezetése rendkívül hosszú és költséges. Jól példázza ezt, hogy az elmúlt években csupán néhány új műanyag jelent meg a piacon, mint például a Ticona ciklikus olefin kopolimere (Topas) vagy a Shell által kifejlesztett Carilon (alifás poliketón). Különösen érdekes és talán jellemző, hogy alig valamivel az üzem beindítása után a Shell megszüntette a Carilon gyártását. Új polimerizációs technológia kifejlesztése helyett leggyakrabban társítással állítanak elő új műanyagokat, a mátrix polimerhez töltőanyagot, egy másik polimert vagy erősítőanyagot, többnyire szálát adnak. Társítással rendkívül gyorsan, esetenként néhány hónap alatt hozható létre egy új műanyag. A társító komponensnek megfelelően három csoportot különböztetünk meg: a töltőanyagot tartalmazó polimereket, a polimer keverékeket és a szálerősítésű kompozitokat. Társított polimer például a kerti bútor, a személygépkocsi lökhárítója, a telefon vagy a számítógép monitorának háza, a Forma-1-es autó vagy a repülőgépek számos alkatrésze. A társítás célja jobb tulajdonságokkal rendelkező, esetenként olcsó anya-

gok előállítására, melyek maximálisan kielégítik az alkalmazási terület által támasztott követelményeket.

2. A társított műanyagok tulajdonságait meghatározó tényezők

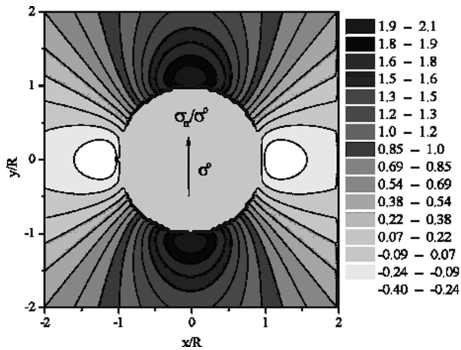
A társító anyagokat gyakran a mátrix polimerrel összemérhető mennyiségben adagolják. Az esetek többségében szerkezetük heterogén, általában többkomponensű, többfázisú anyagok. Jó példa erre az előző bekezdésben említett lökhárító. Ezt gyakran, de nem mindig, módosított polipropilénből készítik, a mátrix polimer töltőanyagot és elasztomert tartalmaz a merevség, valamint az ütésállóság egyidejű növelése érdekében. A társítás következtében tehát egy háromkomponensű (PP, töltőanyag, elasztomer) és négyfázisú (PP kristályos és amorf fázis, töltőanyag, elasztomer) anyag jön létre. A szerkezet változatosságát tovább növeli anizotrop társító, illetve erősítő anyag alkalmazása, melynek egységei (részecskék, szálak) a feldolgozási eljárástól függően rendeződnek, orientálódnak.

Bár a társított műanyagok három csoportja között számos különbség is felfedezhető, tulajdonságaikat egységesen négy tényező határozza meg: a komponensek jellemzői, az összetétel, a szerkezet és a határfüveti kölcsönhatások. A komponensek, illetve a társító anyag jellemzőinek szerepét jól mutatja, hogy ha a polipropilént töltőanyaggal társítjuk, kemény, merev műanyagot kapunk (kerti bútor, motorházban elhelyezett alkatrészek), míg nagymennyiségű elasztomer hozzáadásával gumyszerű termoplasztikus elasztomert nyerhetünk, melyből az autó ablakának tömitése vagy sícipő készül. A mátrix polimer tulajdonságainak változása nyilvánvalóan függ a társító anyag mennyiségétől, az összetételtől. A tulajdonságok összetétel-függését azonban nagymértékben befolyásolja a másik két tényező, a szerkezet és a komponensek kölcsönhatása is. A korábban említett lökhárító anyagban a kom-

ponensek kétféle módon rendeződhetnek el, a töltőanyag és az elasztomer egymástól függetlenül diszpergálódhat a polimer mátrixban vagy a töltőanyag beágyazódhat az elasztomerbe. A valóságban a két határeset közötti szerkezet alakul ki, a beágyazódás mértéke az összetételtől és a komponensek kölcsönhatásától függ (Molnár et al., 2000). Ugyancsak fontos, sőt döntő a szerkezet szerepe az anizotrop társító anyagot tartalmazó műanyagokban, ezek tulajdonságait gyakorlatilag a társító illetve erősítő anyag orientációja határozza meg. A szerkezet mellett a határfüveti kölcsönhatások meghatározzák a külső terhelés hatására bekövetkező deformációs folyamatokat, így a műanyag tulajdonságait is.

3. Mikromechanikai deformációs folyamatok

A társított és erősített műanyagok szerkezete gyakorlatilag mindig heterogén, egy mátrixban elméletileg egyenletesen diszpergált részecskékből állnak. A heterogenitás (töltőanyag-szemcse, diszpergált polimer) mérete a mikrométer-tartományba esik és ilyen az erősítő szálak átmérője is. A szálak hossza általában lényegesen nagyobb, néhány tízed millimétertől (rövidszál-erősítésű műszaki műanyagok) gyakorlatilag a végtelenig terjedhet, azaz összemérhető lehet a tárgy méreteivel (végtelenszál-erősítésű kompozit). Mivel a mátrix és a társító anyag rugalmas jellemzői általában különböznek egymástól, külső terhelés hatására inhomogén feszültségtér alakul ki a heterogenitás környezetében. A külső erő és a tárgy keresztmetszete által meghatározott átlagos feszültséghez viszonyítva lényegesen nagyobb feszültségmaximumok is kialakulhatnak. Egy polimer mátrixba ágyazott merev részecske körül kialakuló feszültség eloszlását mutatja a 2. ábra. Látható, hogy a részecske pólusán a feszültség az átlagos érték közel kétszerese (Vörös és Pukánszky, 2001).



2. ábra • Egy merev részecske körül külső feszültség hatására kialakuló feszültségeloszlás

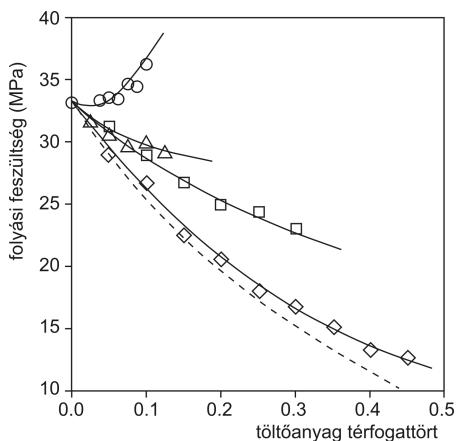
A feszültségkoncentráció, a helyi feszültségmaximumok hatására lokális mikromechanikai deformációs folyamatok indulnak meg a heterogenitás környezetében. A leggyakoribb ilyen folyamatok a nyírási folyás, a mikrorepedés, a határfelületek elválása és a kavitáció. Nyírási folyásnak nevezzük kristályos egységek vagy molekulakötegek elmozdulását, elcsúszását; a deformációt nem kíséri térfogatváltozás. A mikrorepedés során repedések alakulnak ki, melyek széleit több száz százalékban megnyúlt polimer szálak kötik össze. Ez a deformációs folyamat az ütésálló polisztirolra (monitorház) jellemző, és térfogat-növekedéssel jár. A határfelületek elválása a töltőanyagot tartalmazó polimerek jellemző deformációs mechanizmusa, a töltőanyag pólusain üregek alakulnak ki. Kavitáció elasztomerrel módosított polimerekben következik be, amennyiben a mátrix és az elasztomer között az adhézió megfelelő. Az elasztomerben nagy negatív hidrosztatikus feszültségek alakulnak ki a deformáció hatására, ami az elasztomer kohéziós szakadását eredményezi, üreg képződik az elasztomeren belül. Szálerősítésű rendszerekben az említett folyamatok mellett a szállal kapcsolatos deformációs, illetve tönkremeneteli folyamatok is bekövetkezhetnek, így például száلكihúzóds, törés, be-

hajlás vagy a szál elhasadása. Az egyes mikromechanikai deformációs folyamatok bekövetkezésének feltételei vannak, a domináló folyamat számos tényezőtől függ. A heterogenitás környezetében kialakuló lokális folyamatok határozzák meg az anyag makroszkopikus tulajdonságait, viselkedését (Michler, 1992).

4. Töltőanyagot tartalmazó polimerek

A társított műanyagok közül talán a legnépszerűbb ismert és alkalmazott anyagcsalád. A mindennapi ember számára is közsímet termékek a már említett kerti bútor, különböző autóalkatrészek (lökhárító, légbefúvó), a PVC csatornacső és padló vagy a bébipelenka borító fóliája. Bár a töltőanyag általában lényegesen olcsóbb, mint a polimer, adagolásának célja nem az ár csökkentése. A két komponenst külön lépésben homogenizálják, ami jelentősen növeli az anyag árát. A töltőanyag alkalmazásának, és általában a társításnak, műszaki okai vannak, új tulajdonságokkal rendelkező anyag előállításra a cél.

A töltőanyagot tartalmazó polimerek tulajdonságait meghatározó legfontosabb tényezők a töltőanyag szemcsemérete, fajlagos felülete és alakja. A szemcseméret meghatározza a kompozit feldolgozhatóságát és deformációs mechanizmusát. A nagy szemcsék könnyen, már nagyon kis terhelés hatására elválnak a mátrix polimertől, üreg képződik a részecske körül, és a nagy üregek gyorsan kritikus méretű repedéssé egyesülnek. A túlságosan kis szemcsék sem kedvezőek. Kis szemcseméret esetén a töltőanyag aggregálódik, a szemcséket összetartó erők nagyobbak, mint a feldolgozás során őket szétválasztani próbáló nyíróerők. Az aggregátumok eltömik az extruder szűrőjét, melynek tisztítása termelés kiesést okoz, a termelékenység csökken. Az aggregátumok a termék tulajdonságait is rontják. Rosszabb lesz a felületi minőség és csökken a szilárdság, különösen a dinamikus hatásokkal szembeni



3. ábra • A fajlagos felület (A_v) hatása a határfázisban megkötött polimer mennyiségére és a kompozit tulajdonságaira. PP/ CaCO_3 kompozitok. A_v : (◇) 0,5; (O) 3,3; (Δ) 16,5; (□) 200 m^2/g ; – elméleti minimum

ellenállás. Útés hatására az aggregátumok szétesnek, repedés keletkezik, a termék már viszonylag kis igénybevétel hatására is eltörik. Az aggregációt a töltőanyag szemcseméretének helyes megválasztásával és felületkezeléssel csökkentik. A töltőanyag nagy energiájú felületét felületaktív anyagokkal vonják be, a felületi feszültség és így minden fajta kölcsönhatás csökken.

A homogenizálás során a polimer megkötődik a töltőanyag felületén, egy határreteg alakul ki, melynek tulajdonságai különböznek a mátrixétól és a töltőanyagétól is. Ezt mutatja a 3. ábra, melyen különböző fajlagos felületű PP kompozitok jellemző feszültségét ábrázoltuk az összetétel függvényében. A folyási vagy nyakképződési feszültség az a terhelés, amelynél a műanyag maradandó deformációt szenved, azaz a gyakorlatban alkalmazható maximális külső feszültség. Látható, hogy a fajlagos felület növekedésével a határfázisban megkötött anyag mennyisége és a kompozit terhelhetősége nő (Pukánszky, Turcsányi és Tüdös, 1988). Sajnos ezzel egyidejűleg az útésálló-

ság általában lecsökken. A töltőanyag vagy közel gömb alakú, vagy anizotrop, többnyire lemezes szemcsékből áll. Az anizotrop anyagok a feldolgozás, a termék előállítás során orientálódnak, ami irányfüggő tulajdonságokat eredményez, a merevség és a szilárdság nagyobb lesz az orientáció irányában, mint arra merőlegesen.

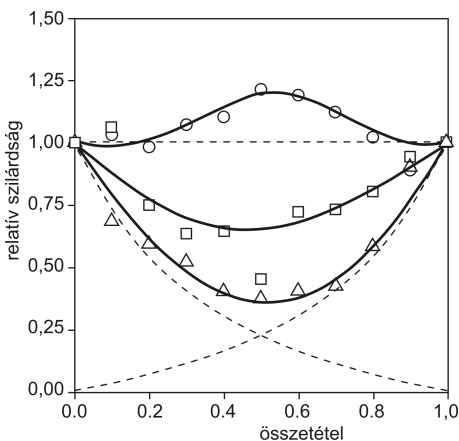
A töltőanyagok olcsó, egyszerű anyagok, és általában tömegműanyagokhoz adják őket. Ezekből is lehet azonban igényes, magas műszaki tartalommal rendelkező terméket készíteni. Ilyen az egészségügyi termékekben, például a bébipelenkában is alkalmazott lélegző fólia, ami polietilénből és nagy mennyiségű, 40-50 m/m % CaCO_3 töltőanyagból áll. A kompozitból fóliát készítenek, melyet megnyújtva a határfelületek elválnak, kis üregek képződnek, melyek a gőzt átteresztik, a folyadékot viszont nem. A megfelelő gőzátteresztéssel rendelkező termék termelékeny előállítása azonban csak a töltőanyag mérete, a polimer tulajdonságai és a technológia helyes megválasztásával lehetséges (Moreiras, 2001).

5. Polimer keverékek

A műszaki műanyagok keverékeit nagy mennyiségben használja az ipar, elsősorban a műszeripar és az elektronika. Az ilyen keverékek készítésének célja megfelelő tulajdonságok kialakítása, a feldolgozhatóság javítása vagy az ár csökkentése (Paul és Bucknall, 2000). Jó példát szolgáltatnak erre a poli(fenilén-oxid) (PPO)/polisztirol keverékek, ahol az olcsó polisztirol adagolása a feldolgozhatóság javulásához és az ár csökkentéséhez vezet, de említhetnénk a széles körben használt polikarbonát (PC)/poli(akrilnitril-butadién-sztirol) (ABS) keverékeket is. Meglepő módon nagyon sok tömegműanyagot, elsősorban a poliolefineket, szintén keverék formájában használnak.

A polimer keverékek készítésének és alkalmazásának kulcskérdése a komponen-

sek elegyíthetősége. A legtöbb, kereskedelemben kapható polimer nem elegyíthető egymással, összekeverésük heterogén, két-fázisú keveréket eredményez. Ez önmagában még nem baj, a legtöbb, gyakorlatban használt keverék heterogén, sőt a gyakran alkalmazott ütésálló műanyagok gyakorlatilag mindig azok. Néhány mikromechanikai deformációs folyamat, különösen a mikrorepedezés és a nyírási folyás sok energiát nyel el, az ütésállóság nő. Ahhoz azonban, hogy katasztrofális törés ne következzen be, és a fenti folyamatok valóban az ütésállóság növekedését eredményezzék, a komponensek megfelelő kölcsönhatása szükséges. Ilyen esetben a fázisok valamilyen mértékben egymásba diffundálnak, ami biztosítja a feszültség átadását közöttük. A kölcsönhatás szerepét szemlélteti a 4. ábra, ahol három polimer pár szilárdságát ábrázoltuk az összetétel függvényében (Pukánszky és Tüdös, 1990). Mivel az összes vizsgált polimer tulajdonságai különböznek, az összehasonlíthatóság érdekében relatív skálát alkalmaztunk, a mért szilárdságot elosztottuk az additivitás feltételezésével számolt mennyiségekkel.



4. ábra • Polimer keverékek szilárdságának függése a komponensek kölcsönhatásától. (□) PPO/PS, (○) PS/PVC; (Δ) PP/PVC; – additivitás és elméleti minimum

Látható, hogy a gyakorlatban is alkalmazott PPO/PS keverék tulajdonságai rendkívül jók, az összefüggés az additivitást jelző vonal fölött halad. A PS/PVC keverék tulajdonságai közepesek, míg a PVC/PP keveréké rendkívül rosszak, a mért pontok az elméleti minimum környezetében helyezkednek el. Ez a viselkedés a kölcsönhatás teljes hiányára utal, ami érthető, hiszen az apoláris PP legfeljebb gyenge diszperziós kölcsönhatásra képes más anyagokkal. A kölcsönhatás hiánya a keverékek szerkezetében is jelentkezik, a PP/PVC keverékekben a diszpergált fázis mérete rendkívül nagy, közel 10 mm, míg a PPO/PS keverékek gyakorlatilag homogének. A komponensek kölcsönhatása tehát meghatározza a keverékek szerkezetét és tulajdonságait.

6. Szálerősítésű kompozitok

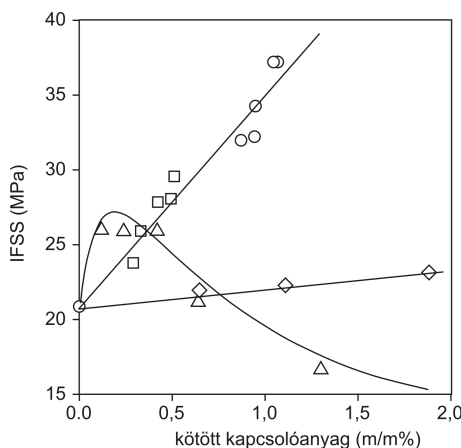
A kölcsönhatások szerepe különösen jelentős a szálerősítésű kompozitok esetében. A szálerősítésű polimerek működésének elve az, hogy a merev, szilárd szál viseli a terhelést, míg a mátrix közvetíti azt a szálak között. Ez az elv természetesen csak akkor működik, ha a szálak a terhelés irányába állnak, a mátrix és a szál közötti kölcsönhatás pedig megfelelő. Ennek hiányában külső terhelés hatására a szál elválik a mátrixtól, kihúródik belőle. A megfelelő adhéziót általában reaktív felületkezeléssel, kovalens kötések kialakításával, a komponensek összekapcsolásával hozzák létre. Ez bizonyos esetekben viszonylag könnyen megoldható, más esetekben azonban komoly problémát okoz. A magas hőmérsékletű (1000-3000 °C) hevítéssel előállított poli(akril-nitril) (PAN) alapú szénszálak felülete például semleges, funkciós csoportokat alig tartalmaz. A kovalens kötés kialakítására képes csoportokat a szál felületén oxidációval, nedves vagy száraz eljárással hozzák létre. A leggyakoribb eljárás az elektrokémiai kezelés. Az elektrolittól és az alkalmazott potenciáltól függően külön-

böző oxigéntartalmú csoportok keletkeznek a szál felületén. A reaktív csoportokat ezután kapcsolóanyagokkal reagáltatják a megfelelő adhézió létrehozása érdekében. A kémiai kötések megakadályozzák a határfelületek elválását, megnövelik a határfelületi adhéziót, amit a határfelületi nyírószilárdsággal (IFSS) jellemzünk és egyedi szálat tartalmazó mikrokompozitok vizsgálatával határozzunk meg. Az egyetlen szálat tartalmazó mikrokompozitot a szállal párhuzamosan terheljük. A kialakuló nyírófeszültség hatására a szál tördelődik, és a fragmentumok hosszából meghatározható a nyírószilárdság. Erősebb adhézió rövidebb átlagos szálhosszat eredményez.

Sajnos az ismertetett elvek alkalmazása nem minden esetben egyszerű. A kapcsolóanyag és a szál felületén létrehozott csoportok között gyakran bonyolult reakciók sora játszódik le, és előfordul, hogy a kapcsolóanyag polimerizál a szál felületén. A kialakult határfázis szerkezete és tulajdonságai jelentősen befolyásolják, olykor meghatározzák a kompozit tulajdonságait. Ezt szemlélteti az 5. ábra (Gulyás et al., 2000). PAN alapú szénszálát különböző kapcsolóanyagokkal kezeltünk, és meghatároztuk a határfelületi nyírószilárdságot epoxi gyanta mikrokompozitokban. Bizonyos vegyületek növelik az IFSS értékét, míg másokkal a kívánt hatás nem érhető el. Az egyik esetben (AMS) a kialakult felület reaktivitása nem volt megfelelő, míg az izocianát gyenge határfelületi réteget eredményezett, melynek kis szilárdsága az IFSS csökkenését eredményezte. Ilyen és hasonló problémák az elmúlt években jelentősen hátráltatták a szálerősítésű kompozitok előretörését a polgári repülésben és más területeken is. A jövőben azonban további fejlődés várható, és az új Airbus lényeges teherhordó funkciókban is számos szénszál-erősítésű kompozit alkatrészt tartalmaz majd.

7. A fejlődés iránya

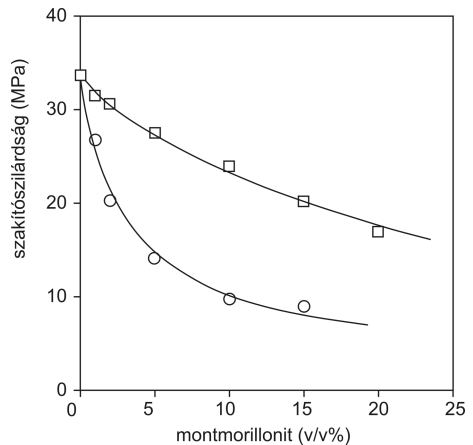
Hasonlóan az élet más területeihez, a társított és erősített műanyagok fejlesztése is új kérdéseket vet fel, új anyagok megjelenéséhez vezet. Ezek közül kettőt említünk. A nanoméretű anyagok iránt az érdeklődés világszerte megnőtt, az egyik új kutatási irány a nanokompozitok előállítására és vizsgálatára. Több típusuk létezik, a gyakorlat szempontjából legígéretesebbek a rétegszilikát nanokompozitok (Alexandre és Dubois, 2000). Ezek előállíthatók in-situ polimerizációval, a rétegek delaminációjával vagy polimer ömledék interkalációjával. A kompozitok előállítására többnyire montmorillonitot (MMT) használnak. Ennek az ásványnak a rétegei között szolvatált kationok találhatók, melyek szerves kationokra, többnyire kvaterner ammóniumsókra cserélhetők. Az így organofilizált ásvány lemezei között csupán gyenge másodlagos kötések hatnak, melyek nem tudnak ellenállni a feldolgozás során



5. ábra • Kapcsolóanyagok hatása a határfelületi kölcsönhatásra epoxi/szénszál mikrokompozitokban. (◇) aminoszilán (AMS); (O) toluilén-diizocianát (TDI); (Δ) 4,4'-metilén-bisz(fenil-izocianát) (MDI); (□) epoxiszilán (EPS)

fellépő nagy nyíróerők hatásának, végbe megy a delamináció. A lemezek vastagsága kb. 1 nm, míg kiterjedése kb. 500 nm. Hasonlóan a szálerősítésű kompozitokhoz, az anizotrop részecskéktől nagy erősítő hatás várható. Ez a PA nanokompozitok esetében meg is valósul, mivel itt a polimer láncok a lemezek felületéhez ionos kötással kapcsolódnak. A többi polimernél azonban ilyen kötés nem alakul ki, így a szilárdság csökken. Összecsapási vonalakat tartalmazó fröccsöntött PP tárgyakban a nanorészecskék jelenléte kifejezetten káros, az összecsapási vonal szilárdsága jelentősen csökken a szilikáttartalom növekedésével az inert töltőanyagként viselkedő kezeletlen montmorillonit-hoz viszonyítva (6. ábra). A szilárdságcsökkenés oka, hogy a szilikát nanoméretű felületkezelt lemezei az összecsapási vonallal párhuzamosan helyezkednek el, és megakadályozzák az ömledékfrontok összehegedését. A nanokompozitok kutatásában, gyártásában és alkalmazásában a várt áttörést még nem sikerült elérni, a megoldást a mátrix és a szilikátlemezek közötti megfelelő adhézió kialakítása jelenti.

A fejlesztés másik kiemelt területe a természetes eredetű szálak alkalmazása. A természetes szálak számos előnnyel rendelkeznek a korábban használt, ma már hagyományosnak tekinthető üveg, szén vagy aramid (aromás poliamid, Kevlar) szálakhoz viszonyítva. Természetes, megújuló nyersanyagforrásból származnak, hozzáférhetőségük korlátlan, áruk alacsony. Sajnos számos hátrányos tulajdonságuk is van, ami korlátozza alkalmazásukat. A szálak átmérője változik és függ a származási helytől, valamint az időjárástól, a szálak keresztirányú szilárdsága kicsi, és nedvességérzékenyek. A nedvesség felvétele a termék vetemedését okozhatja, és a tulajdonságok lényeges romlásához vezet. Hasonlóan a nanokompozitokhoz, a természetes szálak sikeres alkalmazásához is számos problémát kell még megoldani.



6. ábra • Összecsapási vonalat tartalmazó PP/montmorillonit kompozitok szilárdsága; a felületkezelés hatása. (o) kezeletlen MMT, (j) felületkezelt MMT (nanokompozit)

8. Következtetések

A műanyagok jelentős szerepet játszanak a világ és hazánk gazdasági életében, gyakorlatilag az élet minden területén alkalmazzák őket. Új polimerek szintézise helyett társítással állítanak elő kívánt tulajdonságú új műanyagokat; ezek gyártása gyorsabban növekszik, mint a tömegműanyagoké vagy a hagyományos szerkezeti anyagoké. A társított műanyagok az esetek többségében többkomponensű többfázisú anyagok. A szerkezet mellett a tulajdonságokat befolyásolják a komponensek jellemzői, az összetétel és a határfelületi kölcsönhatások. A társított műanyagok mindhárom csoportjában intenzív kutatás és fejlesztés folyik, melynek eredményeképpen egyszerű anyagokból magas műszaki értékű termékek állíthatók elő. A hagyományos társító anyagok mellett érdekes új töltő és erősítő anyagok jelennek meg. Bár a nanokompozitok és a természetes szálakkal erősített műanyagok fejlesztése még nem hozta meg a kívánt eredményeket, az áttörés a közeljövőben várható.

Kulcsszavak: *töltőanyag, polimer keverék, szálerősítésű kompozit, szerkezet, határ-*

felületi kölcsönhatás, műanyagok alkalmazása, nanokompozitok, természetes szálak

IRODALOM

- Alexandre, M. and Dubois, P. (2000). Polymer-layered silicate nanocomposites: preparation, properties and uses of a new class of materials. *Mater. Sci. Eng. Reports* **28**, 1-63.
- Farkas, F. (2002). A műanyagok térhódítása. *Vegyipar* (1), 54-59.
- Gulyás, J., Rosenberger, S., Földes, E. and Pukánszky, B. (2000). Chemical Modification and adhesion in Carbon Fiber/Epoxy Micro-Composites: Coupling and Surface Coverage. *Polym. Compos.* **21**,387-95
- Michler, G. H. (1992) *Kunststoff-Mikromechanik. Morphologie, Deformations- und Bruchmechanismen*, Carl Hanser, München
- Molnár, Sz., Pukánszky, B., Hammer, C. O. and Maurer, F. H. J. (2000). Impact fracture study of multicomponent polyethylene composites. *Polymer* **41**, 1529-1539.
- Moreiras, G. (2001). Baby boom market for fillers. GCC in microporous films. *Ind. Minerals* (6) 29-33
- Paul, D. R. and Bucknall, C. B. (2000). *Polymer blends*, Wiley, New York
- Pukánszky, B., Turcsányi, B. and Tüdös, F. (1988) Effect of Interfacial Interaction on the Tensile Yield Stress of Polymer Composites. Ishida, H. (ed.) *Interfaces in Polymer, Ceramic, and Metal Matrix Composites*. 467-477. Elsevier, New York
- Pukánszky, B. and Tüdös, F. (1990). Miscibility and Mechanical Properties of Polymer Blends. *Makromol. Chem., Macromol. Symp.* **38**, 221-231.
- Vörös, G. and Pukánszky, B. (2001). Effect of a soft interlayer with changing properties on the stress distribution around inclusions and yielding of composites. *Composites* 32A, 343-352.



IPARI ÖKOLÓGIA: AZ IPAR ÉS A KÖRNYEZET KAPCSOLATÁNAK ÚJRAGONDOLÁSA

Szépvolgyi János

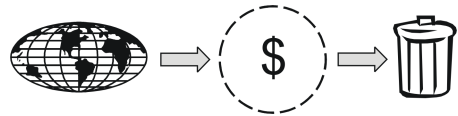
az MTA doktora, igazgató, MTA Kémiai Kutatóközpont,
Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium – szepvol@chemres.hu

Bevezetés

A legújabb demográfiai előrejelzések szerint 2030-ban a Földön mintegy 8 milliárd ember fog élni. Tételezzük fel, hogy ekkorra a Föld valamennyi lakosának életszínvonala megközelíti a fejlett ipari országok lakosainak mostani életszínvonalát. Milyen következményekkel járna mindez? Egyfelől bizonyos kritikus nyersanyagok, például a réz, a kobalt, a molibdén vagy a kőolaj és a földgáz felhasználása annyira megnőne, hogy – a jelenleg ismert készletek kimerülése miatt – ezt az állapotot legfeljebb egy évtizedig lehetne fenntartani. (Hacsak időközben nem fedezünk fel újabb nyersanyaglelőhelyeket, vagy az említett nyersanyag- és energiaforrásokat nem tudjuk másokkal helyettesíteni.) Másrészt, az adott esetben évenként mintegy 320 milliárd tonna szilárd hulladék keletkezne a Földön. Ennyi hulladékot egy Budapesttel azonos alapterületű, több mint 100 méter mély hulladéktárolóban lehet elhelyezni.

Ilyen és hasonló számítások, továbbá az a tény, hogy az elmúlt másfél évszázad kétségkívül imponáló gazdasági fejlődését a természeti környezet állapotának folyamatos romlása kísérte, vezettek annak felismeréséhez: az ipari tevékenység korábbi lineáris modellje (1. ábra) hosszabb távon nem működőképes. A szokásos gyakorlat szerint

ugyanis a természetből származó nyersanyagokat és energiát az ipari termelés során úgy alakítjuk át a társadalom által igényelt termékekkel (értékekkel), majd ezeket a termékeket úgy használjuk fel, hogy közben folyamatosan, nagy mennyiségben képződnek a természeti környezetbe visszajuttatott, azt terhelő hulladékok.



1. ábra • Az ipari termelés lineáris modellje

Egyre nyilvánvalóbb: a fenntartható fejlődés, azaz annak érdekében, hogy a társadalom mai igényeit az utánunk következő nemzedékek életfeltételeinek ellehetetlenülése nélkül elégítsük ki, a lineáris modellt egy, a természeti környezetbe jobban integrálódó modellel, az ún. *ipari ökörendszerrel* kell felváltani. Ez utóbbi modell ugyanis a természeti környezetet és az ipari termelést egyazon rendszer részeinek tekinti, az egész rendszerben az anyag- és energiafelhasználás optimalizálására és a hulladékképződés lehető legteljesebb visszaszorítására, továbbá arra törekszik, hogy az egyik részfolyamat kilépő árama, mint egy másik részfolyamat belépő árama, a rendszeren belül hasznosuljon.

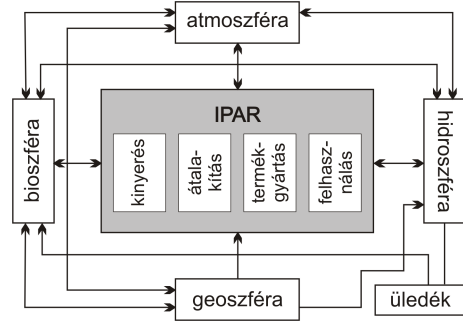
A következőkben az ipari ökorendszerek megvalósítását elősegítő, az utóbbi időben látványosan fejlődő, interdiszciplináris tudományterület, az *ipari ökológia* néhány általános vonását szeretnénk felvázolni.

Az ipar és a természeti környezet kapcsolatáról

A társadalom által igényelt javak előállításakor az *ipar* a geoszférából, a hidroszférából, az atmoszférából, továbbá a növény- és állatvilágból származó anyagokat és energiát használ fel, és oda anyagokat és energiát juttat vissza, egy lényegét tekintve lineáris, de az 1. ábrán látható, egyszerűsített sémánál jóval bonyolultabb kapcsolatrendszer keretében (2. ábra). Még néhány évtizeddel ezelőtt is ez a kapcsolatrendszer többnyire lokalizáltan működött: az ipari tevékenység környezeti hatásai, akár a bemenő, akár a kimenő oldalon, egy-egy földrajzilag jól körülhatárolható térségben jelentkeztek. A helyi környezeti hatásokat viszonylag könnyen fel lehetett ismerni, okaikat egyszerűen fel lehetett tájni. Így az adott hatásokat kiváltó cégek és az illetékes hatóságok a környezeti problémákat megfelelő szinten tudták kezelni, például közös erőfeszítéssel csökkentették egyes toxikus szennyezők kibocsátását.

Az utóbbi 30-40 évben az ipari termelés volumene világszerte oly mértékben emelkedett, hogy a környezeti hatások a korábinál jóval nagyobb területekre terjednek ki, és már nemcsak az egyébként is veszélyes, hanem a nem mérgező emissziók, például az energiatermelésből (és a közlekedésből) származó szén-dioxid is, mind nagyobb veszélyt jelentenek a bennünket körülvevő természetre.

Ezzel párhuzamosan folyamatosan nő az ipari rendszerek viszonylagos súlya a természeti környezethez képest. Már az 1980-as évek végén a világ ipara évente közel azonos tömegű nitrogént és foszfort mozgatott meg,



2. ábra • Az ipar és a természeti környezet kapcsolata

mint amennyi – ugyanezen idő alatt – a természetben mozgott. Egyes fémek, így a kadmium, a cink, az arzén, a higany, a nikkel és a vanádium ipari tömegáramai közel kétszer nagyobbak voltak a természetes áramoknál. Az ólom esetében még kirívóbb a helyzet: 1988-ban az ipar világszerte 3,4 millió tonna ólmot mozgatott meg, ez több mint 18-szorosa (!) volt a természetben áramló ólom mennyiségének (Clarks 1989).

Jóllehet a *természeti környezet mint rendszer* igen elmésen működik, és nagy az alkalmazkodóképessége, nem kétséges, hogy még a benne ritkán előforduló kémiai anyagokból is csak véges mennyiséget tud befogadni, nem beszélve a nagy tömegben megtalálhatókról. Sajnos, hajlamosak vagyunk erről megfeledkezni. Azt sem mindig tartjuk szem előtt, hogy ipari technológiáink – jelenlegi szerkezetükben – csak egészséges ökorendszer mellett működtethetők megfelelően. Az egészséges természeti környezet nemcsak tiszta levegőt és vizet, megfelelő mennyiségű csapadékot és termékeny talajt biztosít automatikusan az emberiség számára, hanem olyan, eddig nem kellő súlyl értékelt feladatokat is ellát, mint az időjárás szélsőségeinek tompítása vagy éppen a természetes és ipari hulladékok lebontása.

A mai ipari technológiák többsége nem tekinthető környezetbarát jellegűnek. Az

ezzel kapcsolatos problémák érzékeltetésére röviden tekintsük át két jól ismert technológiai rendszer működését. A választott két példa a vas- és acélgyártás, illetve a műanyagok előállítás és felhasználása.

A *vas- és acélgyártás* mint technológiai ciklus a vastartalmú ércek bányászatával indul, ezt az ércek dúsítása követi. Az előkészített ércből nagykohóban, koks és mészkő adagolása mellett, nyersvasat gyártanak. A nyersvasból viszonylag kevés adalékanyag felhasználásával acélt állítanak elő, amelyet öntéssel, hengerléssel vagy kovácsolással félkész termékek, majd késztermékek alakítanak át.

Az elhasználdott vas- és acéltermékek – ferromágneses sajátságai miatt – könnyen elválaszthatók más hulladékoktól. Begyűjtésük jól szervezett, újrahasznosításuk gazdaságilag is kifizetődő.

Az acélgyártás által igényelt hulladék tömege elsősorban az alkalmazott technológiától függ. Az utóbbi időben kezdenek elterjedni azok a technológiai megoldások (az ún. mini acélművek), amelyek kizárólag ócskavasból és acélhulladékból kiindulva gyártanak kereskedelmi acélt. 2000-ben a világ acéltermelése mintegy 800 millió tonna volt, ennek a mennyiségnek közel felét hulladékból állították elő (Sziklavári, 2002). A vasciklus tehát a viszonylag egyszerű újrahasznosíthatóság ellenére sem zárt körfolyamat. Az elhasznált fogyasztási cikkekből származó vashulladék csak részben kerül vissza a fémelőállításba és feldolgozásba. Nagyobb része a természetben szétszóródva, hosszabb-rövidebb idő alatt oxidálódik (elrozdásodik), ami egyrészt anyag- és energiavesztést jelent, másrészt környezetterhelést okoz.

A *műanyagok* kémiai összetételüket tekintve széles skálát átfogó anyagrendszer alkotnak. Az összetétel sokféleségének (polietilén, polipropilén, poli(vinil-klorid), polisztirol, hogy csak a leggyakoribb műanyagok

kat említsük) egyik fontos következménye a tulajdonságok sokszínűsége. Nem véletlen, hogy ezeket az anyagokat az élet minden területén egyre szélesebb körben használjuk fel. Ennek egyik folyamánya pedig az, hogy évről-évre nő a műanyag hulladék tömege.

A műanyagok újrahasznosítását számos tényező gátolja. A különféle műanyag hulladékok nehezen különböztethetők meg és választhatók el egymástól. Igen gyakran még a „tisztá” műanyag hulladékok sem bonthatók le eredeti kémiai alkotóelemeikre, ráadásul a lebontás során a környezetre fokozottan veszélyes termékek (dioxinok, klórozott szénhidrogének stb.) képződhetnek. A műszaki és környezeti problémákon kívül további kérdés, hogy az újrafeldolgozás gazdaságosan megoldható-e?

Mindezen okok miatt a műanyagok újrahasznosítása ma még alacsony szintű. A fogyasztói szektorban nagy tömegben képződő, környezetvédelmi szempontból igen kritikus PVC-hulladékból például az USA-ban is csak alig 1 %-ot hasznosítanak. Valamivel kedvezőbb a helyzet egy másik műanyagból, a polietilén-tereftaláttól (PET) készült üdítőitalos palackok esetében, amelyeknél az újrahasznosítás aránya akár 25 %-ot is elérhet. A PET-hulladékból, megfelelő kezelést követően, autóalkatrészeket, elektronikai eszközöket vagy társított anyagokban felhasználható szálakat állítanak elő.

A fentiek is megerősítik, hogy ipari technológiáink döntően nyitott rendszerként, a természeti erőforrások (nyersanyagok és energia) intenzív igénybevétele és a környezet számottevő terhelése mellett működnek.

Mit tanulhat az ipar a természettől?

Természeti környezetünk – szemben az ipari technológiákkal – nem lineáris rendszerként, hanem körfolyamatként funkcionál. Működésének számos olyan sajátága van, amelyeket az ipari termelésben is érdemes volna alkalmazni. Ezek közül néhány:

- a természetben hulladék, mint olyan, nem létezik; nem képződik ugyanis olyan anyag a természetben, amelyet a rendszer valamely más eleme célirányosan ne hasznosítana (példa: az állatok által kilélegzett szén-dioxidot a növények a fotoszintézis alapanyagaként használják fel);

- az egyes élőlények létezéséhez szükséges táplálékot más élőlények elpusztulása és lebomlása szolgáltatja (példa: a talajban levő baktériumok és gombák lebontják az állati és növényi eredetű hulladékokat, ezáltal tápanyagot szolgáltatnak a növényeknek);

- az anyag és az energia állandóan és folyamatosan áramlik a természetben, és „környezetbarát” módon alakul át egyik állapotból a másikba; a rendszer működéséhez szükséges energiát a napsugárzás biztosítja, és a természet hosszabb távra is megoldotta a napenergia tárolását a fosszilis tüzelőanyagok képződése révén (példa: a nitrogén körforgalma a légkörből a fehérjékbe és vissza a légkörbe a bakteriális, növényi és állati tápanyagláncon keresztül valósul meg);

- a természet dinamikus, folyamatos információáramlás mellett működik; a rendszer szereplőinek identitását a folyamatokban betöltött szerepük határozza meg (példa: az egyes egyedek ösztönös tevékenységének kódját génjeik tartalmazzák);

- a természetben minden egyed önálló identitásként, ugyanakkor más egyedekkel összhangban létezik; a fajok együttműködése és versengése egymással összekapcsolódik és egyensúlyban van (példa: a fajok viselkedését interaktív módon befolyásolja a táplálék hozzáférhetősége, az időjárási körülmények alakulása, az új fajok megjelenése).

Az *ipari ökológia* célja, hogy a természeti rendszerek működési elveit részletesen megismerjük, és azokat célszerűen adaptáljuk az ember által létrehozott, mesterséges rendszerekre, adott esetben az ipari techno-

lógiákra. Így a biológiai rendszerekkel analóg módon, azokkal összehangoltan működő, zárt ciklusú, műszakilag és gazdaságilag hatékony, a természeti környezet tűrőképességét figyelembe vevő, ezáltal hosszabb távon is fenntartható ipari termelést lehet megvalósítani.

Az ipari ökológia jellemzői és eszköztára

Az ipari ökológia lényegében a folyamat- és terméktervezés, valamint a fenntartható műszaki fejlesztés egy újfajta megközelítése. Mint minden új tudományterületet, ezt is többféleképpen definiálják. Általánosan elfogadott definíciója még nem alakult ki. A különféle meghatározások többnyire azonos elemeket tartalmaznak, de ezeknek az elemeknek eltérő hangsúlyokat tulajdonítanak. Az ipari ökológia fontosabb attribútumai, amelyek egyúttal az adott tudományterület alapvető feladataira és lehetőségeire is utalnak, a következők:

- az ipari és környezeti rendszerek kölcsönhatásainak rendszerszemléletű vizsgálata;

- az anyag- és energiaáramok, és ezek átalakulásainak együttes figyelembevétele;

- a technológiai és környezeti problémák multidiszciplináris megközelítése;

- a lineáris (nyitott) rendszerek átalakítása ciklikus (zárt) rendszerekké, úgy, hogy az egyik technológiában képződő hulladék egy másik technológiában alapanyagként hasznosuljon;

- törekvés az ipari folyamatok környezeti hatásainak csökkentésére;

- az ipari rendszerek és a környezet működésének összehangolása;

- az ipari és természeti rendszerek hierarchiaszintjeinek meghatározása és azok összehasonlítása a további vizsgálódások és teendők körvonalazása érdekében.

Az ipari és ökológiai rendszerek egy lehetséges hierarchiáját az *1. táblázat* mutatja (Garner 1995). Nyilvánvaló, hogy a különbö-

Ipari rendszerek	Ökológiai rendszerek
Emberi tevékenységből származó, globális anyag- és energiaáramlás	Ökoszféra Bioszféra
Gazdasági szektorok (vegyipar, gépipar stb.)	Biogeográfiai régiók
Ipari szervezetek, cégek	Biológiai közösségek
Termelési rendszerek	Ökorendszerek
Technológiai folyamatok	Élő szervezetek
A termék életciklusának fázisai	

1. táblázat • Ipari és ökológiai hierarchiaszintek

zö hierarchiaszinteken más és más problémák jelentkeznek, és azokra más és más megoldások adhatók. Minél feljebb haladunk a hierarchiában, annál bonyolultabbak a feladatok és a megoldások is.

Illusztrációként tekintsünk egy vegyipar-ból vett példát. A vegyipari termelés környezeti hatásai nagymértékben csökkenthetők a technológiákban képződő veszélyes hulladékok ártalmatlanításával. A legcélszerűbb hulladékkezelési módszereket minden esetben alapos kémiai, műszaki, környezetvédelmi és gazdasági megfontolások alapján lehet és kell kiválasztani. Manapság már egyre több módszer segíti a kiválasztást. Ezek egyike az ún. korlátozott életciklus-elemzés (Limited Life-Cycle Analysis – LLCA), amellyel egyes környezetvédelmi intézkedések hatásait mennyiségileg is becsülni lehet. A becslésre alapozva azután ki lehet választani a környezeti hatások csökkentésének legmegfelelőbb módszerét (Schaltegger 1994, Vignes 2001).

A korlátozott életciklus elemzés során minden lehetséges szennyezőre egy ún. szennyezési tényezőt határoznak meg, külön-külön mindazon környezeti elemre (levegőre, vízre, talajra), ahol az adott komponens előfordulhat. A szennyező komponensek várható környezeti hatásait a szennyezési tényezőkből származtatott dimenziómentes számokkal, a környezeti hatás-

hatásegységekkel (Environmental Impact Units – EIU) fejezik ki. Utóbbiak összegezhethetők és valamennyi környezeti elemre összehasonlíthatók. Ily módon minden egyes környezetvédelmi megoldás egy EIU-val jellemezhető, ami tükrözi az adott intézkedés közvetlen (helyi) és közvetett (távoli) környezeti hatásait.

Az LLCA módszer az egyes környezetvédelmi intézkedések költségeit ugyan nem veszi figyelembe, de az eddigi tapasztalatok arra utalnak, hogy legtöbbször a legkisebb környezeti hatással járó változatok a legolcsóbbak.

Németországban egy vegyipari üzemet a hatóságok arra köteleztek, hogy az általa alkalmazott technológiában képződő, kevés rovarirtót tartalmazó szennyvizet, a nulla kibocsátás érdekében, égetőműbe kell szállítania, és ott el kell égetnie (Vignes 2001). Mielőtt erre sor került volna, LLCA módszerrel a következő három „kezelési” változatot hasonlították össze: (1) a szennyvizet közvetlenül a közeli folyóba engedik, minden kezelés nélkül, (2) a szennyvizet az előírt módon, égetőműben elégetik, és (3) biológiai, majd aktív szenes kezelésnek vetik alá. Amint a hatáselemzés eredményeit összefoglaló 2. táblázatból kitűnik, a legkisebb környezeti terhelés (legkisebb összesített EIU érték) a kombinált biológiai-aktív szenes kezeléskor várható: ez csak mintegy 10 %-a a szennyvíz

	kibocsátás kezelés nélkül	a szennyvíz elégetése	biológiai + aktív szenes kezelés
Közvetlen emisszió			
Peszticidok	15200	0	15
Teljes szerves szén (TOC)	300	0	8
Kloridok	8	8	12
A kezelés emissziója			
Olajfogyasztás	0	23500	975
Villamos energia	0	7280	430
Szállítás	0	2470	50
Összesített EIU	15500	33250	1490

2. táblázat • Rovarirtó szert tartalmazó szennyvíz kezelési módszereinek összevetése, LLCA módszerrel számolt környezeti hatéységység (EIU) értékek alapján

közvetlen kibocsátásokor várható környezeti hatásnak. A jogszabályban előírt égetéses változat ugyanakkor közel kétszer akkora környezeti terhelést okoz, mint a kezeletlen szennyvíz kibocsátása. A számítások alapján az illetékes környezetvédelmi hatóság, a jogi előírásokat felülbírálván, az égetés helyett a kombinált biológiai-aktív szenes kezelést írta elő az üzem számára.

Az ipari ökológia eszköztára igen széles. Ez részben az általa tanulmányozott rendszerek jellegéből, részben a kérdésekre adható válaszok sokféleségéből adódik. Az eszköztár fontosabb elemei közül néhány:

- *ipari ökorendszerek kialakítása*: a különböző iparágak közötti együttműködés elősegítése, amikor is az egyik termelési folyamat hulladékát egy másik folyamatban kiindulási anyagként hasznosítják;

- *összhang teremtése az ipar környezeti hatásai és a természeti környezet befogadóképessége között*: azon lehetőségek felderítése, melyek révén az ipar biztonságosan illeszkedik a természeti környezet adottságaihoz;

- *az ipari termelés anyag- és energiafelhasználásának csökkentése*: az ipari termékek minőségének javítása, az elhasz-

nálódott termékek megjavítása és újrahasznosítása; integrált anyag- és energiahálózatok megvalósítása;

- *az ipari folyamatok hatékonyságának növelése*: az erőforrásokkal takarékosan bándó termelési folyamatok bevezetése;

- *megújuló energiaforrások felhasználása az ipari termelésben*: olyan globális energiarendszer kialakítása, amely az ipari ökorendszerek integráns részeként működik;

- *új gazdaságfejlesztési elvek bevezetése, nemzeti és nemzetközi szinten egyaránt*: a gazdasági és környezeti tényezők együttes figyelembevétele a politikai döntések meghozatalánál, zöld adók bevezetése, a környezetvédelmi törvénykezés korszerű elveinek megfogalmazása és gyakorlatának kialakítása.

Hogyan tovább?

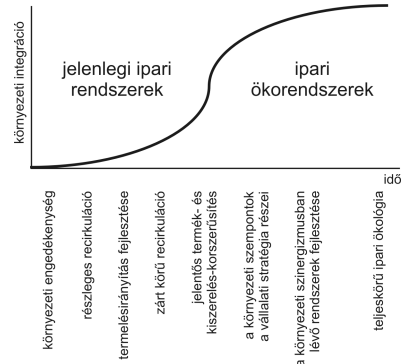
Az ipari ökológia koncepciója első közelítésben talán túl idealisztikusnak, a mindennapi gyakorlatban nehezen vagy egyáltalán nem megvalósíthatónak tűnik. Ugyanakkor csaknem bizonyos, hogy a jövőben az ipar-környezet kapcsolatrendszernek ez lesz a legvalószínűbb modellje.

A jövőben várhatóan nemcsak egyféle ipari ökorendszer fog létezni, hanem több, a lehetséges megoldások széles spektrumát átfogó rendszer működik egymás mellett. A megoldások az egyszerű zárt ipari technológiától (például az alumíniumból készített üdítőitalos dobozok újrahasznosítása), a különféle bonyolult ipari ökorendszerekig át a hibrid, bio-ipari ökorendszerekig terjednek.

Az ipari ökológia szemléletmódjának elterjedéséhez természetesen még kedvező esetben is évtizedekre van szükség (Tibbs, 1993). A folyamat eredményeként a jelenlegi nyitott termelési rendszerektől eljutunk a teljeskörű öko-ipari infrastruktúrához (3. ábra). A régi, lineáris anyagáramláson alapuló ipari rendszerek el fognak tűnni, és a technológiák új generációja válik uralkodóvá. Nem szükséges, hogy ez a generáció teljesen újszerű műszaki elveken alapuljon, de kapcsolódnia kell az ipari ökorendszer többi eleméhez.

Záráskeppen

Terjedelmi korlátok miatt ez az írás csak az ipari ökológia néhány általános sajátosságának



3. ábra • Az ipari ökorendszerek fejlődésének várható útja

bemutatására vállalkozhatott. Célszerűnek tűnik ugyanakkor, hogy egy későbbi tanulmányban külön áttekintsük az ipari ökológia hazai helyzetét és lehetőségeit, különös tekintettel az EU-csatlakozás kapcsán a közeljövőben, illetve hosszabb távon jelentkező ipari környezetvédelmi feladatokra.

Kulcsszavak: *ipar, természeti környezet, környezeti hatások, ipari ökológia*

IRODALOM

- Clarks, W. C. (1989 September). Managing Planet Earth. *Scientific American*, 51-56.
- Garner, A. and Keoleian, G. A. (1995). *Industrial Ecology: An Introduction*. National Pollution Prevention Center for Higher Education, University of Michigan, Ann Arbor. pp. 1-27.
- Schaltegger, S. and Sturm, A. (1994). *Ökologieorientierte Entscheidungen in Unternehmen*. 2nd Ed. University of Basel, Switzerland

- Sziklavári, J. (2002). Vaskohászat és környezetgazdálkodás. *Magyar Tudomány*. CVIII. 903-917.
- Tibbs, H (1993). *Industrial Ecology. An Environmental Agenda for Industry*. GBN, Emeryville. pp. 1-28.
- Vignes, R. P. (2001). Use of Limited Life-Cycle Analysis for Environmental Decision-Making. *Chemical Engineering Progress*. 40-54.

ZÖLD KÉMIA

Horváth István Tamás

a kémiai tudomány doktora, egyetemi tanár, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Kémiai Technológiai és Környezetkémiai Tanszék, Budapest – istvan.t.horvath@hit-team.net

A nagyszámú kémiai felfedezés, valamint az ezekből származó új technológiák és termékek világszerte történt sikeres bevezetésének következtében a vegyipar meghatározó szerepe a társadalom legkülönbözőbb igényeinek kielégítésében az elmúlt évtizedekben folyamatosan növekedett. Ennek ellenére az európai és amerikai polgárok legalább kétharmada negatívan értékelt a vegyipart az ezredfordulón (Clark, 1999). A negatív megítéléshez vezető események közös vonása az, hogy ehhez elég volt néhány szintetikus termékről kimutatni, hogy a környezetre és/vagy az egészségre káros hatású (Clark, Acquarrie, 2002). Az emberek bizalmatlanokká váltak a vegyiparral szemben, és általában azt hiszik, hogy a vegyi anyagok „rosszak” és a természetes anyagok „jobbak”, bár sokan azt sem tudják, hogy mi is egy vegyi anyag. Az a vélemény, hogy a „természetes” jobb, mint a „kémiai”, megalapozatlan. A természetben bőven található olyan vegyület, amely káros biológiai hatással rendelkezik. Noha ez igaz, ennek ismételt hangoztatásával nem lehet a romló megítélést megváltoztatni.

A vegyészek és vegyész mérnökök közül még mindig nem csekély azoknak a száma, akik nem akarják vagy nem tudják elfogadni a közvélemény egyértelmű üzenetét. Azzal, hogy valaki úgy érvel, hogy „én tudom, hogy hogyan kell veszélyes anyagokkal dolgozni”, még nem küszöbölte ki a potenciális baleseteket, csak elodázta azokat, mivel nincs 100 százalékos balesetmentesség! A veszélyes anyagokkal kapcsolatos baleseteket egyfé-

leképpen lehet biztosan elkerülni: *a veszélyes anyagok helyett veszélytelen anyagokat kell alkalmazni!* Nem elég a környezeti problémák eredetét megérteni és azokat utólag, rohamlépésben megoldani, hanem törekedni kell olyan új vegyipari folyamatok és termékek kifejlesztésére, amelyek mai tudásunk szerint nem lesznek az egészségre és a környezetre károsak. A zöld „szemüveg” feltétele ahhoz vezet, hogy számos rutinszerűen használt vegyület, módszer és technológiai megoldás azonnal láthatatlanná válik, és a célok elérése gyakran számottevően nehezebbé válik. A *zöld kémia* erre a kihívásra próbál válaszolni úgy, hogy útmutatót ad a környezeti szempontból jobb megoldások kialakításához.

Az 1990-ben elfogadott amerikai szennyvesztésmegelőzési törvény (Pollution Prevention Act, 1990) a hagyományos „parancsolj és szabályozz” irányítási módszer helyett a környezeti szennyezők forrásának csökkentésére helyezte a hangsúlyt. A *megelőzési stratégia* alapja az az egyszerű felismerés, mely szerint *ha egy szennyező anyag nem keletkezik, akkor az nem okozhat környezeti problémát*. Az első zöld kémiai programot „Alternatív szintetikus utak” címmel 1991-ben írta ki az Amerikai Környezeti Minisztérium (EPA), amelyet egy évvel később követett az Amerikai Tudományos Alap (NSF) hasonló célú „Környezetbarát szintézisek és eljárások” nevű programjának meghirdetése. 1993-ban az Amerikai Környezeti Minisztérium hivatalos programjává vált a zöld kémia (U.S. Green Chemistry Pro-

gram). Az Európai Közösségben először az 1993-ban Velencében 30 egyetem közreműködésével megalakult konzorcium indított zöld kémiai programot, amelyből fontos kiemelni az évente megrendezésre kerülő velencei zöld kémiai nyári iskolát. Nem sokkal később az Egyesült Királyságban a „Green Chemistry Network”, majd Japánban a „Green and Sustainable Chemistry Network” kezdte meg működését. 2002-ben indult el az európai COST program zöld kémiai akciója (COST Action D29 on *Sustainable/Green Chemistry and Chemical Technology*).

A zöld kémia céljait összefoglaló 12 alapelvet Anastas és Warner foglalták össze *Zöld kémia: elmélet és gyakorlat* című könyvükben (Anastas, Warner, 1998). Ezek:

1. Jobb megelőzni a hulladék keletkezését, mint keletkezése után kezelni.

2. Szintézisek tervezésénél törekedni kell a kiindulási anyagok maximális felhasználására (nagyobb atomhatékonyságra).

3. Lehetőség szerint már a szintézisek tervezésénél olyan reakciókat célszerű választani, amelyekben az alkalmazott és a keletkező anyagok nem mérgező hatásúak és a természetes környezetet nem ártalmasak.

4. A kémiai termékek tervezésénél törekedni kell arra, hogy a termékekkel szembeni elvárások teljesítése mellett mérgező hatásuk minél kisebb mértékű legyen.

5. A segédanyagok használatát minimalizálni kell, s amennyiben szükséges, ezek „zöldek” legyenek.

6. Az energiafelhasználás csökkentésére kell törekedni.

7. Megújuló nyersanyagokból válasszunk vegyipari alapanyagokat.

8. A felesleges származékkészítést kerülni kell.

9. Reagens helyett szelektív katalizátorok alkalmazását kell előtérbe helyezni.

10. A kémiai termékeket úgy kell megtervezni, hogy használatuk végeztével ne maradjanak a környezetben, és bomlásuk

környezetre ártalmatlan termékek képződéséhez vezessen.

11. Új és érzékeny analitikai módszereket kell használni a vegyipari folyamatok in situ ellenőrzésére, hogy a veszélyes anyagok keletkezését idejében észleljük.

12. A vegyipari folyamatokban olyan anyagokat kell használni, amelyek csökkentik a vegyipari balesetek valószínűségét.

Anastas és Warner a zöld kémiát mint a kémiai termékek tervezését, termelését és felhasználását irányító 12 elv egységes alkalmazását definiálta, melyek eredményeként csökken vagy megszűnik a környezetre veszélyes anyagok előállítása és felhasználása. Noha a 12 alapelv közül számos triviálisnak tűnik, a 12 alapelv együttes alkalmazása egy adott probléma megoldására gyakran megkívánja, hogy az alapoktól induljon egy új termék vagy folyamat tervezése. Ennek következtében a zöld kémia az alap kutatások fontosságára irányítja a figyelmet. Fontos megjegyezni, hogy a zöld kémiának az elmúlt tíz évben világszerte tapasztalható rohamos terjedése annak a felismerésnek is köszönhető, mely szerint a környezetbarát és egészségre ártalmatlan termékek és technológiák hosszú távon a leggazdaságosabbak. Mivel a zöld kémia 12 alapelvéről és alkalmazásáról már megjelent egy magyar nyelvű összefoglaló (Barta, Csékei, Csihony, Mehdi, Horváth, Pusztai, Vlád, 2000), itt csak két példa illusztrálja a zöld kémia lényegét.

Szinte minden reakcióban használunk olyan segédanyagokat, amelyek elősegítik a kémiai reakció lejárásodását vagy a termékek elválasztását, de nem lesznek részei a termékeknek. Ez különösen igaz az oldószerekre, amelyeknek lehetnek emberre és környezetre ártalmas tulajdonságaik. Gyakran használt oldószerek a klórozott szénhidrogének (diklór-metán, kloroform, tetraklór-etilén, szén-tetraklorid), amelyek általában rákkeltő hatásúak. Az aromás szénvegyüle-

tek, mint például a benzol, más mechanizmus szerint fejtik ki rákkeltő hatásukat, de a végeredmény ugyanaz. Egy másik gyakori probléma, hogy egy új, látszólag egészségre és környezetre nem káros segédanyag esetleges negatív tulajdonsága lehet, hogy csak évek, évtizedek múlva jelentkeznek. Így történt ez a tisztítószerként, hűtőfolyadéként és aeroszolok hajtógázaként nagy mennyiségben használt freonok esetében is, amelyek toxicitása általában kicsi, nem gyúlékonyak és nem robbanékonyak. Jóval a széleskörű elterjedés után derült ki viszont, hogy mekkora pusztítást végeztek az ózonpajzsban. Azóta a freonokat betiltották, és hatalmas költségek árán sikerült kifejleszteni egy hasonló tulajdonságú, de az ózonpajzsra nem káros anyagot. Az oldószerekkel kapcsolatos egy másik probléma: a reakció végén el kell választani a terméktől. Ez történhet desztillációval vagy kristályosítással, melyek energiaigényes műveletek. Amennyiben az elválasztás után az oldószert szennyezett marad, vagy meg kell semmisíteni, vagy ha túl drága, tovább kell tisztítani, hogy újrafelhasználható legyen. Ezért a legjobb megoldás, ha nem használunk oldószert, vagy ha használata elkerülhetetlen, olyan oldószert alkalmazunk, amely könnyen elválasztható a terméktől (DeSimone, 2002). Ezek lehetnek szuperkritikus oldószerek (Jessop, Leitner, 1999), víz (Cornils, Herrmann, 1998), fluoros oldószerek (Horváth, Rábai, 1994; Horváth, 1998) és ionos folyadékok (Welton, 1999). Az ionos folyadékok olyan ionpárokból álló vegyületek, melyek szobahőmérsékleten lehetőleg folyékonyak. Alacsony tenziójuk és magas forráspontjuk lehetővé teszi az alacsony forráspontú, velük elegyedő kiindulási anyagok és termékek desztillációval történő elválasztását.

A zöld kémiai megoldásokkal kapcsolatos nehézségekre jó példa a polikarbonátok előállítására kifejlesztett „zöld” eljárás. A hagyományos eljárásban a foszgén és biszfenol-A nátrium-hidroxid, víz és diklórmétán jelen-

létében vezetett reakciójában képződik a polikarbonát. A foszgén mérgező anyag, a benzol és a diklórmétán rákkeltő. A folyamatban nagy mennyiségű vizet és klórozott oldószert kell a terméktől elválasztani, és mind a szennyvízben, mind a termékben található klórtartalmú szennyezés. A „zöld” eljárásban a foszgént és a nátrium-hidroxidot difenilkarbonát helyettesíti, és így úgy tűnhet, hogy a termék nem tartalmaz klórtartalmú szennyezést. Az eljárásban fenol képződik, amelyet át kell alakítani difenilkarbonáttá. Mivel a fenol oxidatív karbonilezésére alkalmazható katalizátorok nem gazdaságosak, a difenilkarbonátot a fenol és dimetilkarbonát reakciójával állítják elő. Így zöld kémiai szempontból meg kell vizsgálni a dimetilkarbonátot termelő eljárást is, amely a metanol közepes nyomású katalitikus oxidatív karbonilezésén alapul (Romano, Tesei, Mauri, Rebora, 1980). Az ipariilag alkalmazott katalizátor réz-klorid számos probléma okozója. A reakcióban melléktermékként keletkező víz és a katalizátor regenerálására használt sósav annyira korrózív, hogy a reaktorokat, szelepeket, csöveket vagy korrózióálló anyagból kell készíteni, vagy a felületüket üveggel kell bevonni. Az utóbbi megoldás került gyakorlati alkalmazásra, amelynek nagy hátránya, hogy az üveg repedése esetén a vizes sósav az üvegen kívül található nem saválló felületeken korróziót és előbb vagy utóbb balesetet okoz. A másik környezeti probléma az, hogy klórtartalmú szennyezés kerül a dimetilkarbonátba, amely szennyezi a difenilkarbonátot és így a végtermék polikarbonátot. A difenilkarbonátot alkalmazó polikarbonát eljárást tehát csak akkor nevezhetjük környezetbarátnak vagy zöldnek, ha sikerül gazdaságos, klórmentes katalizátort kidolgozni a dimetilkarbonát előállítására. A legfontosabb tanulság ebből a példából az, hogy környezeti szempontból a „bölcstől a temetőig” kell a kapcsolt folyamatokat elemezni, és csak akkor hívható egy termék

zöldnek, ha sikerül az előállítására alkalmazott kapcsolódó folyamatok mindegyikét környezetbaráttá tenni.

Az emberiség legfontosabb célja az, hogy a civilizáció folyamatos fejlődése mellett az emberek egyéni és kollektív tevékenysége folytatható legyen a végtelen jövőben, legalább azonos, de ha lehet, jobb életkörülmények között. A tudósok és a mérnökök kulcsszerepet töltenek be a fenntartható civilizáció kialakításában, lévén felfedezéseik eredményei gyakran csak évtizedekkel később kerülnek alkalmazásra és hatnak előnyösen vagy hátrányosan a civilizáció fejlődésére. Ebből következően a társadalom számára fontos problémák megoldásakor nem mindig használható az adott tudományág teljes tudáskészlete, hanem már a kutatómunka tervezésekor ki kell kerülni a jövő generációra biztosan vagy várhatóan negatívan ható módszereket és megoldásokat. A fenntartható civilizáció fontosabb technológiai kihívásai közül fontos szerepet játszik a környezetszennyezés lokális és globális csökkentése és a kimerülő szénalapú alapanyagok (kőolaj, földgáz, kőszén) kiváltása az energia-termelésben és a vegyiparban. A zöld kémia ezen célok eléréséhez ad irányelveket, és segít a hosszútávon alkalmazható (azaz fenntartható) molekulák és eljárások tervezésében. A zöld kémia néhány, napjainkban fontos kihívása (Anastas, Kirchoff, 2002):

- A víz hatékony bontása látható fénnel.

- Olyan oldószerrendszerek tervezése, amelyek a hő- és az anyagátadás mellett katalizátorként is működnek, és lehetővé teszik a termékek könnyű elválasztását.

- Molekuláris építőkocka-rendszer tervezése atomhatékony és környezetbarát szintézisekhez.

- Olyan adalékmentes műanyagok kifejlesztése, amelyek használat utáni természetes bomlása környezetre ártalmatlan anyagok képződéséhez vezet.

- Újrafelhasználható anyagok tervezése.

- Nem éghető és nem anyagintenzív energiaforrások alkalmazása.

- Szén-dioxid alapú kémiai termékek kifejlesztése.

- Olyan új felületek és anyagok kifejlesztése, amelyek sokáig használhatók, és nem kívánnak felületi védőanyagokat és/vagy felületi tisztítást.

Hogy a fenntartható civilizáció és ezen belül a fenntartható kémia kihívásaira molekuláris szinten válaszolhassunk, a zöld kémia fejlődését tudatosan gyorsítani kell a következő években. A zöld kémia akkor lesz sikeres, ha a *zöld* jelzőt elhagyhatjuk, és az emberek bizalommal várják a kémikusok és vegyészmérnökök által kifejlesztett termékek és eljárások bevezetését.

Kulcsszavak: *zöld kémia, veszélyes anyagok, kémiai technológia, fenntartható civilizáció, oldószer, freonok, katalizátorok*

IRODALOM

- Anastas, P. T., Kirchoff, M. M. (2002). *Acc. Chem. Res.* **35**, 687
- Anastas, P. T., Warner, J. C. (1998). *Green Chemistry: Theory and Practice*. Oxford University Press Oxford
- Barta, K., Csékei, M., Csihony, S., Mehdi, H., Horváth, I. T., Pusztai, Z., Vlád, G. (2000). *Magy. Kém. Lapja* **55**, 173
- Clark, J. (1999). *Green Chemistry* **1**, 1
- Clark, J., Acquarrie, M. (2002). *Handbook of Green Chemistry & Technology*, Blackwell Science Ltd., Oxford

- Cornils, B., Herrmann, W. A. (1998). *Aqueous-Phase Organometallic Catalysis*, Wiley – VCH, Weinheim
- DeSimone, J. M. (2002). *Science* **297**, 799
- Horváth, I. T., Rábai, J. (1994). *Science* **266**, 72.
- Horváth, I. T. (1998). *Acc. Chem. Res.* **31**, 641
- Jessop, P. G., Leitner, W. (1999). *Chemical Synthesis Using Supercritical Fluids*, Wiley – VCH, Weinheim
- Pollution Prevention Act of 1990. 42 U.S.C., Sections 13101-13109, 1990
- Romano, U., Tesei, R., Mauri, M. M., Rebora, P. (1980). *Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev.* **19**, 396
- Welton, T. (1999). *Chem. Rev.* **99**, 2071

SZÁMÍTÓGÉPPEL TÁMOGATOTT GYÓGYSZERTERVEZÉS

EREDMÉNYEK, REMÉNYEK, PERSPEKTÍVÁK

Kövesdi István

tudományos főmunkatárs,
EGIS Gyógyszergyár Rt., Budapest

Dancsó András

tudományos főmunkatárs,
EGIS Gyógyszergyár Rt., Budapest

Blaskó Gábor

az MTA lev. tagja, c. egyetemi tanár, kutatási igazgató, EGIS Gyógyszergyár Rt., Budapest
director.rd@egis.hu

A számítógéppel támogatott gyógyszertervezés (*Computer Aided Drug Design – CADD*) 40 év látványos sikerei után is még csak lehetőségeinek töredékét aknázza ki. A kvantitatív szerkezet-hatás összefüggéseken alapuló, racionális gyógyszertervezést már a számítógépek megjelenése előtt is alkalmazták, de csak a megfelelő teljesítményű eszközök megjelenésével tudott a CADD elterjedni a gyógyszeriparban. A módszert igazoló első jelentős pénzügyi sikert a TAGAMET® márkanéven forgalmazott gyomorfekély-gyógyszer, a H-2 receptor antagonistá cimetidin hozta. Ennek a receptre felírt gyógyszerek forgalmában néhány évig világelső gyógyszermolekulának a megtalálásához elsősorban számítógépes eljárásokat használtak. Ezzel a CADD módszer „Proof of Concept”-je a gyógyszeriparban bizonyítást nyert. A TAGAMET® után került piacra az enzim aktív helyének ismeretére alapozott, számítógépes tervezéssel kifejlesztett vérnyomáscsökkentő hatású ACE inhibitor captopril, amely hosszú ideig az első tíz hely valamelyikét foglalta el az 1980-as és 1990-es évek eladási listáin. Ezen évek pénzügyi sikert hozó, számítógéppel tervezett gyógyszerei között említésre méltó a NOROXIN®

antibiotikum vagy pedig a magas vérnyomás kezelésére szolgáló TEVETEN®. A 2001-es év gyógyszerreladási 200-as toplistáján szereplő, alapjaiban számítógéppel tervezett gyógyszermolekulák adatait az *1. táblázatban* foglaltuk össze.

Új eszközök; statisztika, dokkolás-elemzés

A számítógépes gyógyszertervezési módszerek száma már közelít a tízezres számhoz, összefoglaló ismertetésük is köteteket tölt meg (Kubinyi, 1993, 1998, 1999). Ezek részletes tárgyalására jelen cikk keretei között nyilván nem vállalkozhatunk, csupán nagy vonalakban kísérlünk meg áttekintést adni a módszerek teljesítőképességéről.

Előjáróban érdemes megjegyezni, hogy manapság a kémiai tudásunk egy része is számítógépes formában jelenik meg. Gondoljunk például a molekulák ábrázolására vagy térszerkezetük gyors meghatározására és szemléltetésére. A számítógépes molekulatervezés kicsit hasonló hatással van a kémiára, mint az űrtechnika az ipari technikára. A CADD-ban bevált eszközök és modellezési módszerek lassan, de biztosan megjelennek a kémia oktatásában és a szintetikus laboratóriumokban elhelyezett számítógé-

Márkanév	Éves forgalom 2001-ben millió \$-ban	Terápiás terület	Helyezés a 200-as árbevételi toplistán	Irodalom
COZAAR®	1 905	Magas vérnyomás	19.	Duncia, 1992
VIRACEPT®	632	AIDS	86.	Kaldor, 1997
ARICEPT®	585	Alzheimer-kór	101.	Kawakai, 1996
TRUSOPT®	425	Glaukóma	140.	Greer, 1994
CRIXIVAN®	410	AIDS	146.	Dorsay, 1994
ZOMIG®	277	Migrén	192.	Glen, 1995

1. táblázat • Számítógéppel tervezett gyógyszerek adatai (2001)

peken is, mint ahogy az űrtechnika számos hajdanvolt újdonsága ma már a háztartásokban is megtalálható. Az is figyelemre méltó, hogy keresve sem találhatnánk nagyobb mértékben interdiszciplináris területet, mint a számítógépes gyógyszertervezés. Az adott feladatra vonatkozó speciális ismereteken felül általában szükség van a kémia, a molekuláris biológia, a matematika és a statisztika, valamint nem utolsósorban a számítástechnika tudományának használatára is a tervezési feladat megoldásánál.

A víz/oktanol megoszlási hányadosból Hansch által származtatott p paraméter bevezetése kvantitatív szerkezet-hatás összefüggések (*Quantitative Structure Activity Relationship – QSAR*) megállapítását tette lehetővé a biológiában. A molekula részeitől additív módon származtatható p paramétert a moláris refrakcióval, valamint az ugyancsak additív elektronos és szterikus paraméterekkel kombinálva számos *in vitro* biológiai aktivitás kvantitatív modelljét lehetett felállítani. Bár ezek a klasszikus QSAR modellek kísérleti alapokon meghatározott paramétereket használtak, és elsősorban az adott kémiai-biológiai folyamat leírására, analizálására és nem pedig predikcióra szolgáltak, elindították a tervezésre is használható szerkezet-hatás összefüggések kidolgozását. Randiè, Kier és Hall munkásságát követően pedig megjelentek a molekulászerkezetből mérés nélkül számolható paraméterek, amelyek

alkalmasnak bizonyultak a számítógépes statisztikai elemzés és tervezés céljaira. A CADD statisztikai módszerei nem a fizikai vagy biokémiai alapelvekből próbálják értelmezni a gyógyszer és az élő szervezet kölcsönhatását, ehelyett a gyógyszermolekulához a kémiai szerkezetből kalkulált számszerű adatokat rendelnek. Ezek a deskriptorok, melyekhez hozzáveszik a mért biológiai adatokat, és különféle matematikai eljárásokkal verifikálható statisztikai összefüggéseket állítanak fel a deskriptorok és a biológiai adatok között. A módszer fő nehézsége az, hogy a mért biológiai adatok általában csak közelítő értékűek, vagy a biológiai effektus természetéből eredően, nagy szóródást mutatnak. Az adatok hibájánál vagy a természetes szóródásánál pontosabban becsülő modellt természetesen nem lehet felállítani. Ha viszont a modell becséléseinek pontossága megközelíti a kiindulási adatok szórását, akkor megvalósítható nagyszámú tervezett molekula statisztikailag helytálló számítógépes szűrése. A véletlenszerűen vizsgált molekulák esetéhez képest még egy viszonylagos statisztikai előrejelzés is megtöbbszörözheti az aktív vagy kívánt tulajdonságú molekulák arányát a biológiai tesztelés során, ha a tesztelésre elsősorban a statisztika által aktívnak, jónak javasolt molekulákat használjuk fel. A statisztikai alapokon nyugvó QSAR módszereknek a többi CADD módszertől eltérően reális esélyük van arra, hogy az elkövetkező 5-10 év-

ben is lépést tartanak a gyógyszeripari kutatási adatok számának robbanásszerű növekedésével.

A gyógyszermolekuláknak a fehérjemolekulákhoz való specifikus kötődését leíró kulcs-zár elméletből kiindulva több megközelítés is született a hasonló hatású vegyületek térszerkezetének statisztikai elemzésre, amelynek célja az ismeretlen receptor vagy aktív hely térbeli modelljének a felállítása volt. A nehézség itt abban rejlik, hogy több különböző receptor, illetve egy receptoron több különböző kötőhely, illetve egy kötőhelyen többféle illeszkedés is eredményezhet hasonló hatást. Ráadásul a vizsgált molekulák konformációs változatossága is igen nagy lehet, és ez a változatosság hatványozottan jelentkezik a molekula-átfedések számítógépes elemzésénél. Mindezek nagyon lelassítják a becslésre, illeszkedésre is használható 3-dimenziós (3D) receptor modellek elkészítését.

A molekulák axiómákra alapozott modellezésére jól kidolgozott elméletek állnak rendelkezésre, ilyen például a kvantumkémia vagy pedig a fenomenológiai elvekre épülő molekulamechanika. A kvantumkémia alapját képező Schrödinger-egyenletet csak közelítőleg tudjuk megoldani a héliumatomnál bonyolultabb rendszerekre, de a kb. egyezrelékes elvi pontosság numerikus eljárásokkal megközelíthető. A számítási igény azonban rohamosan növekszik az atomok számával, illetve az elérni kívánt pontossággal. A magyar gyógyszeripar számára jelenleg hozzáférhető számítógépes kapacitással jól modellezhető például egyetlen, a végtelen üres térben izolált gyógyszermolekula, de attól még messze vagyunk, hogy megbízhatóan leírjunk egy fehérjét, amint az élő sejtben komplexet képez ezzel a molekulával.

A molekulamodellek megjelenítését végzi a molekulagrafika, ami igen alaposan kidolgozott terület, mivel a CADD-szoftvereknek ez a leginkább látványos része,

mondhatni, ez adja el a programot. A molekulagrafikai programok új generációjával általában lehetséges a fehérjemolekulák és a ligandum molekulák kölcsönhatásának a felhasználó által irányított interaktív vizsgálata. A molekulák kölcsönhatását a programok általában molekulamechanikával számolják, és gyakran lehetőség van a ligandum molekula számítógéppel irányított automatikus dokkolására, a molekula receptorhoz való kötődésének szimulálására is a kötőhelyen. Minden molekulakölcsönhatásokat számoló módszer eredményei csak annyira megbízhatóak, mint a kölcsönhatás matematikai közelítésének pontossága. A dokkolás gyakran a merev peptidszerkezethez közeledő, jobb esetben flexibilis molekula rendkívül elnagyolt közelítéssel számolt mozgásán, kölcsönhatásán alapszik. Éppen ezért a legtöbb dokkoló program eredményeinek hibája nem kisebb, mint a megalapozott statisztikai módszerek becsléseiei. A dokkolási módszer csúcsteljesítménye az, amikor az aktív hely környezetének atomjait mind figyelembe vevő, a kölcsönhatást viszonylag pontos kvantumkémiai eljárással számoló molekuladinamikai számítást végznek. A rendkívül időigényes eljárás során meghatározzák a ligandum molekula pillanatnyi helyzetének, mozgásának térbeli eloszlását az aktív hely környezetében. A módszer figyelembe veszi az atomok hőmozgását is, és a kapott térbeli eloszlásfüggvényből az aktív hely - ligandum kölcsönhatás alapvető termodinamikai paraméterei kiszámolhatók. Az ilyen számítások szuperszámítógépeken vagy manapság UNIX clustereken is több hónapig tartanak, és még ezeknek a hatalmas számítógéprendszereknek a kapacitása is messze van attól, hogy a teljes peptidszerkezet dinamikáját is figyelembe lehessen venni. A kvantumkémiai kombinált molekuladinamikai számításokból kapott termodinamikai paraméterek azonban tartalmazzák az aktív hely - ligandum kölcsönhatás igen fon-

tos, gyakran meghatározó entrópiájárulékát is. Ez a többi dokkoló vagy 3D receptor modellező CADD eljárásról nem mondható el.

A racionális gyógyszertervezés jelenleg használt legfejlettebb módszere a következő. Először kikristályosítják a megcélzott fehérjét, majd röntgenspektroszkópiával meghatározzák a térszerkezetét. Ezután kikristályosítják egy már ismert gyógyszermolekulával alkotott komplexét is, ennek is meghatározzák a térszerkezetét, ebből megtudják a fehérje kötőhelyének helyzetét. Végül következhet a számítógépes tervezés: különféle molekulákat próbálnak illeszteni, dokkolni a kötőhelyhez. A dokkolást sokszor, a már említett módon, molekulamechanikára alapozott automatikus módszerek is segítik. Itt is vannak azonban gondok. Nem minden fehérjét tudunk kikristályosítani a természetes állapotában, a receptormolekulák nagy része, például a G-protein csatolt receptorok ugyanis a sejtthártyában úsznak. Ráadásul egy fehérjének általában több, jellemzően négy-öt különböző kötőhelye is van, amelyekhez egészen más típusú molekulák kapcsolódhatnak. A röntgenkristallográfiával meghatározott szerkezet az egyensúlyi hőmozgástól eltekintve sztatikus, a természetes élő környezetében a sejtben viszont a fehérje dinamikusan mozog. A ligandum közeledésekor az aktív kötőhely nagymértékben átalakulhat, és erre egyre több és több példát találunk. Mégis ez az utóbbi módszer számos aktív HIV-proteáz inhibitor számítógépes tervezését tette lehetővé az utóbbi években. Ezen ígéretes gyógyszerjelöltek közül 18 már a klinikai vizsgálatok fázisában van, és néhány éven belül a piacra kerülhet.

Nem csak a számítógép kicsi

Az 1. táblázatban a helyezési sorszámkokat újra áttekintve látható, hogy ezek a már piacra került, számítógéppel tervezett gyógyszerek valójában nem értek el kimagasló piaci

eredményt. Árbevételük az összes gyógyszerforgalom alig 2 %-át teszi ki. Felmerül a kérdés, hogy a többi, sikeres gyógyszert milyen úton találták meg. Megállapítható, hogy gyakorlatilag véletlenül. A véletlen elsősorban persze a racionálisan gondolkodó gyógyszerkémikusokat segítette, de ebben a racionális megközelítésben a számítógépes modellezésnek nem sok szerep jutott. A CADD teljesítményének mérsékelt volta mindenképpen elmarad az elsősorban akadémiai körök által szított rendkívül optimista várakozásoktól, és az elmaradás alapvető okai nem csupán a számítógépeink jelenleg talán még csekély teljesítményében, hanem az elsősorban leíró, utólag magyarázó jellegű kémiai és biológiai tudásunk nem kielégítő mélységében rejlik.

A járműipar, illetve a nukleáris ipar már rendkívül precíz és megbízható matematikai modellezési eljárásokkal rendelkezik. Ezek a modellezések a számítógépek áramkörében létrejövő virtuális térben és időben lehetővé teszik komplett járművek, repülő szerkezetek és hajtóműkonstrukciók ezerféle változatának kipróbálását, vagy például nukleáris fegyverek szerkezetének optimalizálását, anélkül hogy drága és veszélyes kísérletek százait kellene elvégezni. Ezek a matematikai modellek a fizika és a kémia alaptörvényein nyugszanak, és az atomi kölcsönhatásoktól kezdve a makroszkópikus jellemzőkön át viszonylag hűen figyelembe veszik az anyagok kémiai, fizikai tulajdonságait, a szerkezetek mechanikai viselkedését, a gázok és folyadékok áramlásának dinamikáját. A számítógéppel támogatott gyógyszertervezés még messze nem bír az előbb említettekhez hasonló pontos matematikai modellekkel, és nem sok jel mutat arra, hogy ilyen eszközök az elkövetkező 5 évben megvalósításra kerülnek. Ehhez pontosabb biológiai ismeretek és alapvetőbb törvények felismerése kellene majd. A tudomány például majdnem egy nagyságrendet tévedett csu-

pán csak az emberi gének számának megbecslésénél. Ezek számát ugyanis 100 000 és 250 000 közé feltételezték, ugyanakkor a humán genom program csupán kb. 35 000 gént talált. A közelítő fizikai alapelveken nyugvó *ab initio* kvantumkémiai módszer vagy akár a molekulamechanikát használó számítások pedig a jelenlegiekénél ezerszer vagy akár milliószor nagyobb teljesítményű számítógépeket igényelnének, akár csak egy kis sejtmembrán részletnek vagy egy receptorfehérje és ligandum molekula-komplexnek a gyógyszerkutatásban használhatóan pontos dinamikai modellezéséhez.

Ha a hardver terén megvizsgáljuk a távlatokat, akkor például az USA kormányának ASCI (*Accelerate Strategic Computing Initiative*) programja csak 2006-ra tervezi 100 Teraflopos számítógépek létrehozását. Ez a számítási teljesítmény a jelenlegi csúcscserekszer teljesítőképességének majd tízszeresét jelenti. Ez a jövőbeli fejlődési ráta megfelel Moor, az utóbbi ötven évben fényesen beigazolódott törvényének. A Moor-törvény ekvivalens megfogalmazása szerint a számítógépek teljesítménye 10 évente kb. a 100-szorosára növekszik. Tehát ha bízunk a számítógépeink teljesítményének töretlen fejlődésében, akkor is 10-20 évet kell várunk a biológiailag releváns makromolekulák vagy molekularendszerek fizikai alapelveken nyugvó reális modellezésének a megjelenésére. S ekkor valószínűleg még távol leszünk a sejteink és szerveink prediktív erejű matematikai modellezésétől. Ehhez valószínűleg új tudományoknak is meg kell jelenni, például a statisztikus fizika analógiájára, nagyszámú kölcsönható makromolekula térben elrendezett specifikus együttesének viselkedését leíró „statisztikus molekuláris biológiának”.

Gazdasági kényszer

A gyógyszergyártó vállalatoknak alapvető célja az, hogy növekvő és az ipar átlagánál nagyobb arányú osztalékot tudjanak fizetni

a részvényeseknek, illetve extraprofitot termeljenek a tulajdonosoknak. Ez az egyébként triviális kijelentés akkor is igaz, ha figyelembe vesszük e vállalatok néha speciális, az állam által részben felülről regulált helyzetét. Az a vezető, aki nem a profit tartós növekedésének érdekében alokálja és mozgósítja a vállalati erőforrásokat, beleértve a kutatást és a fejlesztést is, nem marad sokáig az állásában. E törekvések eredményeként a gyógyszeriparnak az elmúlt öt évben a bevételek 10 % fölötti növekedését sikerült megvalósítania, és messze magasabb profitrátát ért el, mint például a mezőgazdaság vagy az elektronikai ipar. Amikor a gyógyszeripari ágazat válságáról beszélnek, akkor ennek a dinamikus növekedésnek az egyre nehezebben és nehezebben való fenntartásáról van elsősorban szó. A kezdetben fetiszizált *hitech dot.com* most már *dot.gone*, mivel az interneten szervezett gyógyszerkutatás nem vált be, és a cégegyesülések sem bizonyultak eléggé hatékony eszköznek a profit növelésére. Az összeolvadási folyamat lelassult, bár a nagyvállalatok fogyatkozó száma és növekvő agresszivitása is részben ez irányban hatott. A nagyvállalatok ezért célul tűzték ki a milliárdos forgalmú „blockbuster” gyógyszerek piacra hozatalának politikáját. Ez jól követhető a milliárd dollárnál nagyobb forgalmú gyógyszerek számának az utóbbi 7 évben való növekedésén végigtekintve. Az adatok szerint az ilyen gyógyszerek száma ez idő alatt majdnem megháromszorozódott a következő módon: 1995 – **17**; 1996 – **25**; 1997 – **27**; 1998 – **30**; 1999 – **35**; 2000 – **44**; 2001 – **48**.

2001-ben a 2 milliárd dollárnál nagyobb forgalmú gyógyszerek száma már 17 volt, átlagosan 3 milliárd dollár bevétellel. 2005-ben a LIPITOR® márkajelű, jelenleg 7 milliárd dolláros és gyorsan bővülő forgalmú koleszterinszint-csökkentő gyógyszer bevétele minden bizonnyal meghaladja majd, a gyógyszeripar történetében először, az évi

10 milliárd dollárt. Ugyanebben az időszakban az évente piacra bevezetett kb. 50-60 új hatóanyag száma alig növekedett, vagyis a kiemelkedő pénzügyi eredményekben a marketingtevékenység is döntő szerepet játszott.

A növekvő profit irányába erőlködő gyógyszeripari tevékenységet azonban a marketingzlogenek mellett újabb és újabb nagyhatású hatóanyagokkal kell ellátni, és ehhez az alapot egyértelműen az originális gyógyszerkutatás adja. 2001-ben a világ gyógyszeripara 50 milliárd dollárt költött kutatásra és fejlesztésre. Ha a gyógyszeripar összes kutatási-fejlesztési költségét a piacra került új gyógyszerek kifejlesztéséhez szükséges ráfordításnak tekintjük, akkor ezek az egy hatóanyagra vetített költségek megháromszorozódtak az elmúlt évtizedben, és ma már a gyógyszeripar átlagában elérik a 880 millió dollárt. A hatalmas költségek 75 %-át a fejlesztés különböző fázisaiban elbukott többi molekulára fordított kiadás teszi ki. Nemcsak a molekulák, hanem a terápiás célok helyes megválasztása is komoly költségcsökkentő tényező lehet. Tíz közül egy tudományosan megalapozatlan, vagy ami még rosszabb, piacképtelen terápiás cél kiiktatása a kutatásból 100 millió dolláros nagyságrenddel csökkentheti egy-egy gyógyszer kifejlesztésének átlagos költségét az adott cégen belül. A hatóanyagmolekula szintetizálásától a termék törzskönyvezéséig átlagosan 15, de legalább 12 év telik el. Egy évi milliárdos forgalmú gyógyszer piacra hozatalában minden nap késlekedés 2-3 millió dollár bevételkiesést jelent a gyógyszergyárnak. Ezért érthető, hogy nincs az a számítástechnikai hardver és szoftver, amit azonnal meg ne vásárolnának, ha azzal akár néhány héttel is, de csökkenteni lehetne a gyógyszer piacra hozatalához szükséges időt. A szükséges számítástechnikai hardvert viszonylag olcsón meg lehet venni. Az igazi gond az, hogy jelenleg nincs olyan szoftver, amely

tudná a humán biológia vagy akár csupán a biokémia vezérlő törvényeit, és ezeket az alaptörvényeket használó modellezést valószínűsítana meg. Éppen ezért a cégek nem is költenek túl sokat a CADD-szoftvereszközökre. Ez jól látszik a számok tükrében. A molekula-modellezési és szimulációs szoftverek évi piaca jelenleg 323 millió dollár. Ennek a költségnek az aránya az összes kutatási költségen belül kb. 0,7 %. Ez az arány talán nem véletlenül emlékeztet a CADD-al tervezett hatóanyagok összeforgalomhoz viszonyított alacsony arányára. Az is igaz viszont, hogy a CADD-szoftverek forgalmának volumene évi 30 %-kal növekszik, vagyis gyorsabban, mint a kutatási költségek egyébként is gyors növekedése. A legnagyobb 40 gyógyszeripari vállalatnak már a fele vásárolt egy vagy több molekulamodellező és szimulációs szoftvercsomagot. A 20 legnagyobb felfedezésorientált cégnél pedig ez az arány már 85 %. A CADD tehát az originális gyógyszeripari kutatás igen elterjedt, de nem csodatevő, és jelenleg még nem túl produktív eszközévé vált.

A voluntarizmus zsákutcája

Ha a molekulamodellezésbe, valószínűleg okkal, nem fektetnek sokat a gyógyszergyárak, akkor mi az a metodika, amelyre az új és hatékony gyógyszerek kifejlesztését alapozni kívánják? Jelenleg a nagy átbocsátóképességű tesztelés (*High Throughput Screening – HTS*) tűnik megoldásnak, ami a kutatási költségek lényegesen nagyobb szeptét használja fel, mint a CADD-módszerek alkalmazása. A jelenleg már elsősorban robotizált párhuzamos szintéziseket használó kombinatorikus kémia (*Combinatorial Chemistry – CC*) által előállított vegyületek százezreinek, millióinak gyors, robotizált biológiai vizsgálata az első találatokig diverz, majd a további vizsgálatokra kiválasztott, az ún. „lead” molekula optimalizálás során kisebb méretű, de az adott terápiás területre fókuszált vegyületkönyvtá-

rak segítségével az utóbbi évtized rutineljárásává vált a felfedezésorientált gyógyszeriparban. Tíz év elteltével már meg lehet vonni a CC és HTS módszer kezdeti eredményességének a mérlegét. Az eredmény lesújtó. Az egyre nagyobb és nagyobb vegyületszámokkal való hazard pókerjáték úgy tűnik, kezdetben kudarcot eredményezett (Lahana, 2000). Mint az élet sok területén, itt is bebizonyosodott, hogy egy bizonyos határon túl a több már nem biztos, hogy jobb, különösen akkor, ha hiányzik belőle az igazi innováció, a konstruktív emberi elme. A szisztematikus HTS-szűrően fennakadt találatokból kifejlesztve jelenleg 62 gyógyszerjelölt van klinikai vizsgálat alatt, de még egy sincs forgalomban, ehhez ugyanis még nem telt el elég idő. Mindenesetre 62 új molekula a klinikai vizsgálatokon önmagában nézve impozáns eredménynek tűnhet, de ha figyelembe vesszük azt, hogy jelenleg a világon kb. 1 800 hatóanyag klinikai vizsgálatai folynak több mint 600 hatásterületen, akkor a szisztematikus HTS módszerrel való gyógyszerfejlesztés hatékonysága nem tűnik lényegesen jobbnak, mint a CADD módszereké. A nagy gyógyszeripari vállalatok néhány HTS-labort már bezártak, néhányat összevontak, de az egyértelmű, hogy a kutatási stratégiájukban a HTS módszernek továbbra is alapvető szerepet szánnak. Mi lehet ennek az oka? Valószínűleg az, hogy a robotizált HTS technikának jelenleg még nincs olyan alternatívája, amely megbirkózhatna a gyógyszerterápiás területek számának várhatóan robbanásszerű növekedésével. A jelenleg piacon lévő gyógyszerek csupán kb. 500 terápiás területtel, céllal kapcsolatosak. Ez a szám a genomika fejlődésével néhány éven belül elérheti a 10 000-et is miután egyre több és több emberi gén funkcióját tisztázzák. Ezidáig a humán genom program a 35 000 emberi génből 10 000 funkcióját ismerte fel vagy azonosította. Ezek között 560 G-protein csatolt receptort, 80-90 kation-

csatornát, 130 ioncsatornát, 60 hormon receptort, 3000 transzkripciósfaktort, 580 protein kinázt, 120 foszfatázt és több mint 200 proteáz enzimet azonosított. Ezek mindegyike egy-egy lehetséges célpont a gyógyszeriparnak. Ilyen hatalmas mennyiségű biológiai célponthoz rendre megtalálni a pontos validált célmolekulákat jelenlegi, ehhez még felületes biológiai tudásunk alapján, a HTS módszerek nélkül alig elképzelhető.

A genomika, a proteomika és az újabb és újabb -omikák, valamint az egyre bőségesebben áradó HTS eredmények az információtechnológia (IT) egyre kiterjedtebb alkalmazását követelik meg a gyógyszeripartól. Az IT-szoftverekre költött pénz már jelenleg is majd két és félszerese a CADD eszközökre fordított javaknak, és dinamikusabban növekszik, mint az utóbbi. Tágabb értelemben az információtechnológia is a gyógyszertervezés számítógépes támogatását jelenti. Az utóbbi időben a két szakterület konvergenciája is megfigyelhető. Az intelligens adatértelmezés és adatkeresés segít abban, hogy a rohamosan növekvő adathalmok ne váljanak túl hamar információs meddőhányókká. Ma már kaphatók olyan szoftverek, amelyek a szerkezet-hatás összefüggések automatikus felismerését és megjelenítését teszik lehetővé igen nagy kémiai szerkezet és biológiai hatás adathalmazokban keresgélve.

Jobb előre gondolkozni!

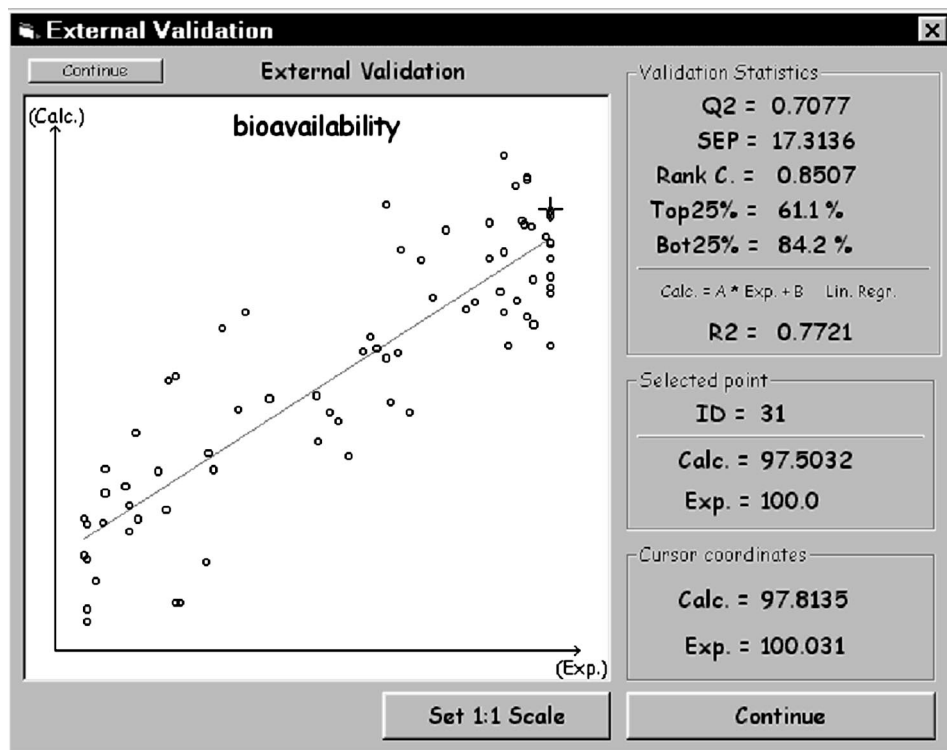
Az 1800, jelenleg emberekben vizsgált hatóanyag több mint kétharmada valószínűleg meg fog bukni a klinikai vizsgálatokon, a csillagos egekben tartva ezzel a gyógyszeripar kutatási költségeit. Túl sok a nem megfelelő hatóanyag-kandidátus. Nemcsak a gyógyszerjelöltek tökéletlenek. A farmakológusok előtt közismert, hogy a forgalomban lévő gyógyszerek nagy átlagban csak az emberek 60 %-ánál mutatnak észrevehetően kedvező hatást. A többi 40 %-nál jobb esetben nem tapasztalható hatás, de nem ritka

súlyos mellékhatások jelentkezése sem, még akkor is, ha nincs kedvező effektus. Ez a rossz statisztika az egyik fontos oka annak, hogy a világon mindenütt rendkívüli módon megszigorodott az új gyógyszerek engedélyezésének eljárása. A nem kielégítő hatás vagy egy káros és súlyos mellékhatás fellépte a klinikai vizsgálatok során azonban csak 20-30 %-ban oka a gyógyszerjelölt elbukásának. A bukás oka legtöbbször a vegyületek nem megfelelő ADMET-profiljában rejlik (*Absorption, Dispersion, Metabolism, Excretion and Toxicity, ADMET* a gyógyszer (jelölt)eknek a szervezetben való felszívódását, eloszlását, metabolizmusát, kiürülését és toxicitását jellemző adatok összessége). A gyógyszerjelölt vagy nem szívódik fel a szervezetben a kívánt mértékben, vagy ha felszívódik, akkor a szervezet gyorsan metabolizálja azt védekező, méregtelenítő enzimreakciói segítségével, vagy ha mindezeket sikeresen túléli a molekula, akkor esetleg nem tud eljutni a kívánt szervbe, vagy nem tud ott feldúsulni a kellő mértékben. Tegyük fel, hogy mindezen nehézségek után a gyógyszermolekulák a kellő koncentrációban jelen vannak a terápiásan megcélzott helyen, és ott ki tudják fejteni kedvező hatásukat. Ezek után nem túl gyorsan, de nyomtalanul ki is kell ürülniük a szervezetből, és nem dúsulhatnak fel tartósan egyetlen szervben sem. Ráadásul, az előbb leírt folyamat egyik fázisában sem mutathatnak toxikus hatást. Az kész pénzügyi csapás, ha a gyógyszerjelölt molekuláról a klinikai vizsgálatok során derül ki a nem megfelelő ADMET-tulajdonság. Ekkorra ugyanis már dollármilliók tucatjait fektették be a molekula kifejlesztésébe, amely befektetés egy pillanat alatt füstté vált. A gyógyszergyártó csak egy drágán megszerzett tapasztalattal lesz gazdagabb, miszerint nem szabadna rossz ADMET profilú molekulát még csak szintetizálni sem, nemhogy klinikai vizsgálatra engedni. Mindezen keserű tapasztalatok vezettek a „fail early fail cheap”

elv megfogalmazásához és a korai in-silico vagy in vitro ADMET-szűrés fontosságának felismeréséhez. Ez az a pont, ahol a gyógyszeripari kutatás két szépreményű, de gyengén szereplő játékos, a CADD és a HTS kombinációjából megszülethet a gyógyszerkutatás új, ígéretes lehetősége: az ADMET-fókuszált HTS. A nem megfelelő ADMET tulajdonságú molekulákat a lehető legkorábban fel kell ismerni, és nem érdemes semmiféle biológiai tesztelésnek alávetni. Ha az ADMET-előszűrésnek köszönhetően csupán feleannyi gyógyszermolekula bukik el a klinikai tesztelés fázisában rossz ADMET-paraméterei miatt, akkor is 20-30%-kal, vagyis dollár százmilliókkal csökkenhetnek az új gyógyszerek kifejlesztésének a költségei.

Egy konkrét példa

Az alábbiakban egy ADMET-jellemző, a biológiai hasznosíthatóság példáján mutatjuk be egy statisztikus QSAR módszer tulajdonságait és az ADMET-előszűrésben való alkalmazhatóságát. A biológiai hasznosíthatóság a szájon át szedett gyógyszerek hatóanyagának fontos adata. Azt mutatja meg, hogy a szájon át beszedett gyógyszer vérszint-idő integrálja hány százaléka annak a vérszint-idő integrálnak, amelyet azonos mennyiségű hatóanyag intravénás befecskendezése után mérnek. Ha a biológiai hasznosíthatóság 20 % alatt van, az már egyértelműen gyenge érték, és arra utal, hogy a gyógyszer nehezen szívódik fel a belekből és/vagy gyorsan metabolizálódik a májban. A várhatóan alacsony biológiai hasznosíthatóságú vegyületek számításokkal történő előrejelzése fontos döntéstámogató eszköz lehet a molekulák közti válogatásnál. A számításokhoz 274 gyógyszermolekula embereken mért biológiai hasznosíthatósági adatait használtuk (Goodman & Gilman, 1996). Az adatok átlagos bizonytalansága kb. 15 % volt. A legtöbb mért értéket ugyanis jellemzően úgy adták meg, hogy például 40-60 %. A biológiai hasz-



1. ábra • A biológiai hasznosíthatóság QSAR modelljének ellenőrzése

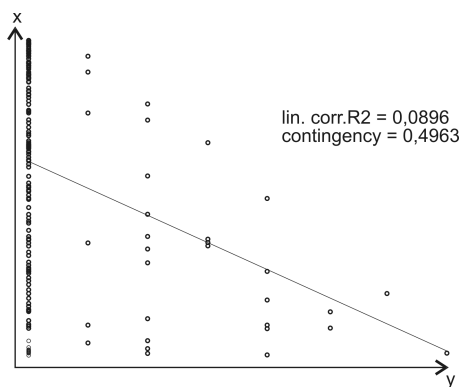
nosíthatóságnak az értéktartományok közepét vettük. Az olyan adatoknál, mint például a >90 % vagy a <5 %, a 100 %-ot vagy a 0 %-ot vettük az értéktartomány másik szélének. Minden molekulára több mint 1700 deszkriptort számítottunk ki. A molekulák 3D szerkezetét molekulamechanikával határoztuk meg. Ezek után véletlenszerűen kiválasztottunk egy 200 molekulából álló munkahalmazt, és a maradék 74 molekulán pedig a számított QSAR modellt ellenőriztük. A munkahalmazt tovább feleztük modellkészítésre és becslésre használt molekulákra. Ezt a felosztást több különböző véletlen módon, ez esetben 16-szor megismételtük. Ezt követően genetikussal kiválogattuk az 1700 deszkriptorból azt a néhányat – végül is 18-at –, amelyeknél egy mesterséges ideghálómodell a legjobb átlagos

becslést adta a munkahalmaz felosztásaira. Majd az ellenőrzésre félretett 74 molekula adataival verifikáltuk ezt a modellt. A számításokat természetesen teljesen automatikusan, egy program segítségével végeztük el. Az ellenőrzés eredményét az 1. ábrán mutatjuk be, ahol az x tengelyen a kísérleti értékeket, az y tengelyen pedig az adott molekulákra számolt értékeket ábrázolta a program. Jól látható, hogy habár a becslések pontossága nem jobb, mint a modell készítésére használt adatok bizonytalansága, mégis a modell határozottan érzékeli és követi a mért biológiai hasznosíthatóság értékeit. Például a 25 %-nál kisebb biológiai hasznosíthatóságú molekulák 84 %-át jól ismerte fel a program. Érdekes lehet azt is megvizsgálni, hogy például a modell legfontosabb deszkriptora milyen összefüggésben van a kísérleti ada-

tokkal. Ez a deskriptor azon szénatomoknak a száma, amelyhez közvetlenül egy oxigénatom kapcsolódik, és a szomszédos szénatomhoz pedig legalább két heteroatom, azaz nem szén, és nem hidrogénatomok. A 2. ábrán látható, hogy az ilyen, heteroatom kapcsolatokkal telezsúfolt szénatom párok számának növekedése a molekulákban a várható biológiai hasznosíthatóság maximumának egyértelmű csökkenését jelenti. Ilyen és ehhez hasonló összefüggések felismerése alapján számolja ki a mesterséges ideghálózat a biológiai hasznosíthatóságot az új molekulák esetében.

Perspektívák

A nehézségek ellenére a számítógépes molekulatervezés a csak reprodukálható eredményekre vevő és haszonorientált ipari környezetben is sikerre van ítélve. A gyógyszerkémikusok és biológusok számára a számítógépes elemzés nélkül ma már a mérési adatok pusztá áttekintése is lehetetlen. Mindenképpen elemi igény lesz az emberi genom programból származó adatok szerint kb. 200 000-féle humán fehérje térszerkezetének megbízható számítására, hiszen a kísérleti módszereink jelenlegi teljesítképességének sokszorosára és mondjuk újabb 100 évre lenne szükség a tisztán mérések alapján történő szerkezetmeghatározásokra. A nem hatékony vagy olcsón helyettesíthető elméleti vagy kísérleti módszereknek távozniuk kell az iparból. A nagy gyógyszergyárak például kivétel nélkül bezárták, vagy pedig kis molekulák vizsgálatára állították át peptidszerkezet-meghatározásokkal foglalkozó NMR laboratóriumait, hiszen meg ipari környezetben nem engedhető, hogy akár fél tucat kutató egyetlen fehérje szerkezetének meghatározásával hónapokig foglalkozzon. Viszont a CADD alap gondolatát, miszerint ha egy receptor különbséget tud tenni a molekulák között, akkor azt egy matematikai eljárás is meg tudja



2. ábra • A biológiai hasznosíthatóság QSAR modellje; egyik deskriptora (x) és a mért adatok (y) összefüggése

tenni, a hivatalos szervek is kezdik felismereni. A gyógyszeriparban mértékadó amerikai szövetségi Élelmiszer- és Gyógyszerügyi Hivatal (*Food and Drug Administration – FDA*) 5 éven belül a CADD módszerek és a matematikai modellezések standardizálását és a standard eljárások eredményeinek figyelembevételét tervezi a gyógyszer-enge-délyezés folyamatában.

Ha a profit növelésének érdekében a jelenlegieknél jóval pontosabban becsülő CADD számításokat vagy ADMET modelleket szeretnénk létrehozni, akkor sokkal pontosabb biológiai mérési adatokra lesz szükségünk, mint a mostaniak. A számítógépes molekulatervezés céljára inkább kevesebb, de pontosabb farmakológiai mérést kell majd végezni, releváns és jól reprodukálható kísérleti körülmények között. A HTS biológiai adatok most még messze nem felelnek meg ezeknek a követelményeknek. A gyógyszeripar azonban, éppen a humánbiológiai alapfolyamatok matematikai modellezhetőségének hiánya miatt, alaposan elkötelezte magát a HTS metodológiával, és egyre nagyobb és nagyobb szakmákzslakban keresik a tüt. A HTS biológiai tesztek száma évente már milliárdokra rúg. Azonban ilyen nagyszámú vizsgálat esetén

még a viszonylag bizonytalan eredményű QSAR statisztikai módszerek is segíthetnek a vegyületehalmazok praktikus méretűre szabásában, valamint abban, hogy a sok-sok vegyületcsalád közül elsősorban azokat válasszuk ki, amelyekben nagy valószínűséggel egy igazán hatékony és eredménye-

sen fejleszthető gyógyszermolekula található.

Kulcsszavak: *biológiai hasznosíthatóság, gyógyszeripar, dokkolás, gyógyszertervezés, modellezés, számítógép, szerkezet-hatás összefüggés*

IRODALOM

- Dorsay B. D. et al. (1994). *J. Med. Chem.* **37**, 3443-51
- Duncia J. V. et al. (1992). *Med. Res. Rev.* **12**, 149-91
- Glen R. C. et al. (1995). *J. Med. Chem.* **38**, 3566-80
- Greer J. et al. (1994). *J. Med. Chem.* **37**, 1035-54
- Goodman & Gilman's *The Pharmacological Basis of Therapeutics*, 9th ed., (1996) McGraw Hill, N.Y.
- Kaldor S. V. et al. (1997). *J. Med. Chem.* **40**, 3979-85
- Kubinyi H. ed. (1993) *3D QSAR in Drug Design - Vol. 1*. ESCOM. Leiden, p. 760
- Kubinyi H., Folkers G., Martin Y. C. eds. (1998) *3D QSAR in Drug Design - Vol. 2*. Kluwer/ESCOM. Dordrecht, p. 416
- Kubinyi H., Folkers G., Martin Y. C. eds. (1999) *3D QSAR in Drug Design - Vol. 3*. Kluwer/ESCOM. Dordrecht, p. 352
- Kawakai Y. et al. (1996). *Bioorg. Med. Chem.* **4**, 1429-1446
- Lahana R. (2000) *Drug Discovery Today* **4**, 447-448
- Az üzleti, ipari és technológiai adatok forrásai*
Am. Chem. Soc. publ. MODERN DRUG DISCOVERY, 2000 october - 2002 march. <http://pubs.acs.org/mdd>
- Brimblecome R. ed. DRUG DISCOVERY WORLD, 2001 spring - 2002 summer. www.ddw-online.com
- Karl Endel ed. PHARMABUSINESS, 2001 jan/feb - 2002 may., www.pharmabusiness.com
- Wilkie T. ed. SCIENTIFIC COMPUTING WORLD, 2000 october/november - 2002 march/april. www.scientific-computing.com



GYÓGYNÖVÉNYKUTATÁS: A GYÓGYSZERKUTATÁS TERMÉSZETES RÉSZE

Nyiredy Szabolcs

a kémiai tudomány doktora, c. egyetemi tanár, elnök-igazgató
Gyógynövény Kutató Intézet Rt., Budakalász – rimp@axelero.hu

Az érdeklődő emberek többsége, amikor a gyógynövénykutatásról beszélnek, általában nosztalgiaiával teli érdeklődéssel reagál, mint ha valami régmúlt, „okkult” tudományról lenne szó, a mítoszokkal körülvett „füben-fában orvosság” témáról és nem a nagy társadalmi elismertségű gyógyszerkutatásról. Mi is a valóság? Mi képezi a gyógynövénykutatás, a farmakognózia tárgyát, és milyen kapcsolata van a gyógynövénykutatásnak a szintetikus gyógyszerkutatással? Ezekre a kérdésekre kíván röviden választ adni ez a tanulmány.

1. Bevezetés

A gyógynövénykutatás célkitűzései

Ha visszatekintünk a gyógyítás történetének csak az időszámításunk utáni 2000 évére, ezen időszak több mint 90 %-ában nem volt más gyógyszere az emberiségnek, mint a gyógynövény, illetve ennek szárított része, a drog. Jelenleg több mint 12 000 gyógynövény ismert a világon, pedig a Föld növénytakarójának még csak mintegy 6 %-át vizsgálták meg kémiaileg (Petri és mtsai, 1989). Ezekből mégis számtalan, a gyógyászat számára nélkülözhetetlen vegyületet izoláltak, mint például, az alkaloidokat (a kínafa-kéregből a lázcsillapító kinint, a máktokból előállított simaizom görcsoldó papaverint és a kábító fájdalomcsillapító morfint), különböző, a szívelégtelenségi tünetegyüttesben széles-

körűen alkalmazott, a gyűszűvirágból előállított szívglikozidokat, a növényi szteroidokat, amelyek a mai korszerű fogamzásgátló készítmények alapjait képezték, növényi vitaminokat, flavonoidokat vagy például a széles körben alkalmazott antibiotikumokat. Kevesen tudják, hogy a lázcsillapító hatású, világhírű aszpirin hatóanyaga is növényi eredetű, más kérdés, hogy évtizedek óta már ezt a vegyületet is szintetikusán állítják elő. A laikusok véleménye szerint is az itt felsorolt példák gyógyszerek, de vajon mi a helyzet a kamillával vagy például az orbáncfűvel. Ezeket az emberek nagy része nem tekinti „igazi” gyógyszereknek, bár előnyös élettani hatásukat elismerik. Az érvényben lévő Magyar Gyógyszerkönyv (Ph.Hg.VII.) definíciója szerint „Gyógyszernek tekintünk minden olyan anyagot, amelyet az élő szervezet befolyásolására gyógyászati céllal alkalmazunk, vagy a betegség megállapítása céljából az élő szervezetbe juttatunk. Gyógyászati célnak tekintjük a betegség megelőzését is”. Ezek alapján tehát nem csak az izolált, erős farmakológiai hatással rendelkező molekulák (például morfin), hanem a betegség-megelőző céllal a szervezetbe juttatott gyógynövény-drogból készült teák (például kamilla) is gyógyszerek.

Elgondolkodtatóak a WHO 1994-es adatai, miszerint a világ népességének 90 %-a gyógynövényt alkalmaz gyógyítás cél-

jára és 81 %-a még soha nem jutott szintetikus gyógyszerhez! Ez egyrészt elszomorító, hiszen életmentő gyógyszerek sem állnak a világ lakossága nagyobb részének rendelkezésére Afrikában, Ázsiában vagy Dél-Amerikában. Más oldalról ezek az adatok azt is jelzik, hogy az iparilag fejletlen országokban a gyógynövény-drogok komoly gyógyászati jelentőséggel bírnak, melyet a fejlett országok még mindig nem ismernek eléggé. A gyógynövénykutatás és így a természetes eredetű molekulák kutatásának fontosságát ismeri el a túlnyomórészt szintetikus gyógyszeréről ismert, világhírű Bayer gyógyszer-gyár is azzal, hogy az 1999-es adatok szerint 90 000 természetes molekula teszi ki az új gyógyszerek 40 %-át, míg a több milliárd szintetikus molekula a gyógyszerkincsnek csupán 60 %-át adja.

Ezzel tulajdonképpen eljutottunk a gyógynövénykutatás célkitűzéséhez, miszerint a természetes eredetű gyógyszerek kutatásának célja az alábbiakban foglalható össze:

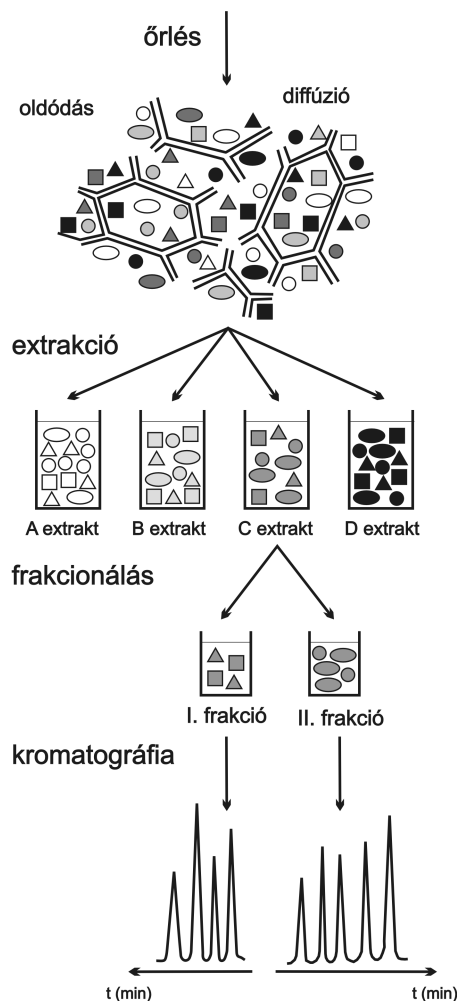
- a gyógynövények komponenseinek minőségi és mennyiségi elemzése
- a növényi eredetű frakciók és molekulák izolálása
- a gyógynövények tartalmi anyagainak optimalizálása.

2. A gyógynövények komponenseinek minőségi és mennyiségi elemzése

Jelenleg mintegy 2-300 gyógynövény esetében rendelkezünk kidolgozott, analitikai minőségi és mennyiségi elemzési módszerekkel (Hänsel és mtsai, 1999). Korábban csak a vegyülettípusok összhatóanyag-tartalmának (például össz-flavonoidtartalom) meghatározása volt lehetséges, de a korszerű elválasztástechnikai módszerek, mindennek előtt a nagyhatékonyságú gáz-, és folyadék-kromatográfiás eljárások kifejlesztésével lehetőség van a komponensek elválasztására és kvantitatív meghatározására (Bisset és

Wichtl, 2001). Ehhez a gyógynövények analízálhatóvá tételére, megfelelő minta-előkészítésre van szükség.

A minta-előkészítés a megszáritott gyógynövény, a drog aprításával, majd őrlésével kezdődik (1. ábra). Minél kisebb részecskeméretet érünk el az őrlés során, annál gyorsabb és hatékonyabb lesz a kivonás művelete, az extrakció. A megfelelő polaritású



1. ábra • Gyógynövény-drog minta előkészítése a mennyiségi és minőségi elemzéshez

kivonó oldószer ugyanis a sérült sejtekből kioldja az extrahálható komponenseket, míg a sértetlen sejtekből a koncentráció-gradiens hatására a komponensek kidiffundálnak a sejtekből, mindaddig, míg a koncentrációkülönbség fennáll. Az oldódás gyors, a diffúzió lassú művelet. A koncentráció kiegyenlítődését eredményező extrakciónál általában friss oldószerrel többször ismételni kell a műveletet, hogy megfelelő hatékonyságot érjünk el. A kivonást egymás után több, emelkedő polaritásértékű oldószerrel szokták végezni, hogy bizonyos szintű frakcionálást már ezzel is elérjünk (az 1. ábrán a szürke különböző árnyalataival jelölt komponensek). Egy-egy szilárd/folyadék extrakció során (Nyiredy, 2000) általában több ezer komponens kivonása történik meg a növényi részekből, melyek számát különböző tisztítási műveletekkel csökkentjük, hogy lehetőleg szelektív legyen azon vegyülettípusokra amelyeket elemeznünk kívánunk.

Az egyik leggyakrabban alkalmazott tisztítási művelet a szárazra bepárolt nyers extraktum oldása különböző polaritású oldószerekben, illetve a folyadék/folyadék extrakció alkalmazása. Ez utóbbi művelet során a nyers kivonat komponensei az egymással nem elegyedő oldószerelemek között oszlanak meg, azon az elven, hogy az azonos vegyülettípusba tartozó komponensek más-más mértékben oldódnak az alsó, illetve felső fázisban. Megfelelően megválasztott tisztítási eljárásokkal a több ezer komponens tartalmzó nyers kivonatból néhány száz komponensből álló frakciókat kaphatunk, ahogy azt az 1. ábrán a frakcionálás eredményeként a különböző formájú komponensek jelzik.

A tisztított frakciók alkalmasak arra, hogy a helyesen megválasztott kromatográfias módszerekkel minőségileg és mennyiségileg elemezhetővé váljanak. A nagyhatékonyságú kromatográfias műveletek során a minta aliquot részét injektáljuk az elemző

rendszerbe, ahol az egyes komponensek valamilyen kényszeráramlás hatására más-más mértékben oszlanak meg az álló és mozgó fázis között. A megoszlás következtében az egyes komponensek eltérő ideig tartózkodnak az állófázison, így a komponensek elválaszthatók. Az elválasztás eredménye on-line detektálható. A kromatogramokon – melyek az 1. ábrán láthatók – az egyes csúcsok helye a komponensek minőségét, a csúcs alatti területek pedig a komponensek mennyiségét jellemzik.

3. Növényi eredetű frakciók és molekulák izolálása

A gyógynövénykutatás egyik kiemelt feladata új, biológiailag aktív frakciók és molekulák izolálása új fitofarmakonok előállítására céljából. A növényforrás biztosítása különböző stratégiák alapján kerül kiválasztásra (Wagner, 1999). Az egyik elterjedt módszer az etno-botanikai adatok alapján történő begyűjtés. A hazai, Kárpát-medencei, illetve egzotikus tájak (például Afrika) növényeinek begyűjtését minden alkalommal kísérőként, a helyi botanikusok bevonásával végzik. Másik ismert stratégia egy-egy megadott földrajzi terület (például a Kárpát-medence) növényflórájának szisztematikus szkrínelése, vagyis mindazon növények (például gyógynövények is) begyűjtése, melyek az irodalmi adatok alapján ez ideig még nem kerültek kémiai és/vagy farmakológiai vizsgálatra. A megfelelő mennyiségben begyűjtött, botanikailag azonosított és kiméletesen szárított növényeket az 1. ábrán feltüntetett elvek alapján dolgozzák fel, háromféle stratégia alapján.

3.1 A főkomponensek izolálása

A kémiai stratégia alapján a kutatók egyrészt bizonyos vegyülettípusokat (például ekdiszteroidok, flavonoidok) keresnek, illetve a vegyülettípustól függetlenül a főkomponenseket kívánják kinyerni (Nyiredy, 1995). Az

izoláláshoz különböző preparatív léptékű kényszeráramlásos folyadékkromatográfias módszereket, valamint álló- és mozgófázisok kombinációit alkalmazzák. A legalább 95 % tisztaságú komponensek szerkezetének megállapítását korszerű, spektroszkópiás módszerekkel végzik. Az ismert szerkezetű vegyületeket ezután különböző, nagy átteresztőképességű biológiai szkrínvizsgálatok (HTS – high throughput screening) alapján tesztelik. A stratégia előnye, hogy a komponensek aránylag gyorsan, a biológiai szkrínvizsgálatok eredményeire való várakozás nélkül is izolálhatók, és az egyes növényekben nagyobb mennyiségben jelen lévő vegyületek szerkezetét megismerhetjük. A módszer hátránya, hogy gyakran a már ismert vegyületek is izolálásra és szerkezetvizsgálatra kerülnek, illetve, hogy a biológiai inaktív vegyületek izolálása nem szolgálja az új fitofarmakonok előállítását.

3.2 A biológiai aktív frakciók és komponensek izolálása

A biológiai stratégia alapján minden egyes frakciót biológiai szkrínvizsgálatnak vetnek alá, és a további izolációt csak azokkal a frakciókkal folytatják, melyek megfelelő biológiai aktivitást mutatnak. Az izolálás és szerkezetvizsgálat módszerei megegyeznek az előbbieken ismertekkel. A stratégia előnye, hogy valóban csak az aktív komponensek kerülnek kinyerésre, hátránya, hogy az ismert szerkezetű komponensek is izolálásra kerülnek, és a módszer lassú, hiszen a biológiai szkrínvizsgálatok gyakran időigényesek.

3.3 Új kémiai struktúrájú komponensek izolálása

Ennél az új stratégiánál a legkorszerűbb kromatográfias és szerkezetvizsgáló módszerek együttesen, on-line kerülnek alkalmazásra. A módszer lényege, hogy a nagy felbontóképességű kromatográfias elválasztás detektálására több spektroszkópiás módszert

együttesen alkalmaznak. Ily módon a vegyületek izolálása nélkül is meghatározható a komponensek szerkezete. Csak abban az esetben izolálják a vegyületeket, ha azok szerkezete még nem ismert. A stratégia előnye, hogy az új kémiai struktúrájú komponensek jelentős biológiai aktivitással rendelkezhetnek. A műszeregyüttes tetemes ára a magyarázata, hogy a világon ma még csak két farmakognózi kutatócsoport rendelkezik ezzel a technikával.

4. Gyógynövények tartalmi anyagainak optimalizálása

A vadon termő gyógynövények nemesítése során a tartalmi anyagok optimalizálásához egyrészt a hatóanyagszint emelése, a ható komponensek egymáshoz viszonyított arányának stabilizálása, illetve a nem kívánt, toxikus komponensek eliminálása tartozik.

A gyógynövény-nemesítésnél több olyan szempontot kell figyelembe venni, amely az élelmiszer-, takarmány- vagy ipari felhasználású növényfajok esetében marginálisnak tekinthető, de felmerülnek a gyógynövényeket jellemző speciális kritériumok is. A terméshozam mellett a beltartalmi mutatók ugyan sok ipari növény értékelése során is lényegesek lehetnek, de ezek többnyire csak egy-egy paraméterre vonatkoznak, mint például a cukortartalom a cukorrépánál. Ugyanakkor a gyógynövények mint gyógyszerek értékelésekor elsődlegesen meghatározó szempont a faj beltartalmi karaktere, szorosabb értelemben a hatóanyag-tartalma, illetve a hatóanyagok egymáshoz való viszonya. Ezt a feltételrendszert a vadon gyűjtött gyógynövény-alapanyagok felhasználásával gyakorlatilag lehetetlen megoldani még akkor is, ha a megfelelő minőségi mutatókkal rendelkező gyógynövény-populáció feltárását követően minden alkalommal ugyanannak a lelőhelynek a növényállománya szolgál a gyógyszergyártás alapanyagául.

A botanikai feltáró munkát követően a megfelelő minőségi mutatókat hordozó genetikai alpanyaggal, illetve alpanyagokkal indul a nemesítési munka, majd a faj természetbe vonása és agrotechnikájának kialakítása következik.

4.1 Gyógynövények biodiverzitása

Hazánkban ma mintegy 2400 magasabbrendű növényfajt tartanak nyilván. Ezek közül a Gyógynövény Kutató Intézet 406 fajt tart felmérései szerint gyógynövénynek, melyek vagy hivatalosak az egyes gyógyszerkönyvekben, vagy megfelelő farmakológiai, illetve klinikai vizsgálatok igazolták hatásosságukat, illetve etnobotanikai adatok alapján a népgyógyászatban alkalmazták, illetve alkalmazzák őket. A botanikai feltárások és az állományok rendszeres monitorozása során egyrészt a védett (627 faj), illetve a fokozottan védett (63 faj) növények aktuális helyzetét és a fajok társulásait kísérik figyelemmel. A védett gyógynövényfajokat szakmailag szigorú feltételek mellett botanikus kertekben és/vagy laboratóriumi körülmények között *in vitro* szövettenyészetekben felpaporítják, illetve génbankokban deponálják.

Az élővilág változatossága, a biodiverzitás tanulmányozása során a botanikusok a morfológiailag és/vagy fenológiailag eltérő tulajdonságokat tanulmányozzák. Így fedezték fel a kutatók például a máriatövis [*Silybum marianum* (L.) Gärtn.] új, fehérvirágú genotípusát. A botanikailag azonos családba tartozó növényfajok analitikai kémiai elemzése értékes adatokat szolgáltatnak a hatóanyagok bioszintézisének eredményeként keletkező szekunder anyagcseretermékek rokonságára, a kemotaxonómiai összefüggésekre.

4.2 Gyógynövények nemesítése

A gyógynövények természetes, vagyis vadon fellelhető biodiverzitása olyan széles, hogy sok esetben szelekcióval is elérhető,

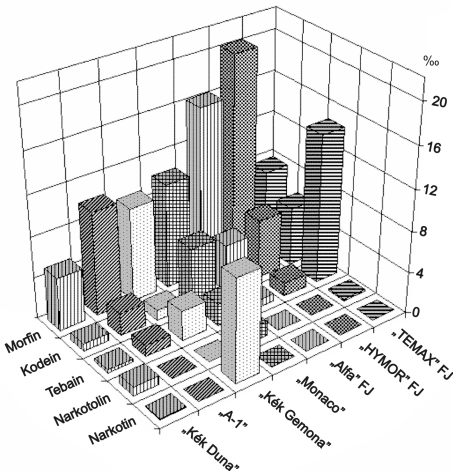
hogy az ember teremtette agroökológiai környezetbe helyezve se veszítsék el értékes tulajdonságaikat. A gyógynövényfajok döntő része egyedszelekcióval folytatott nemesítés eredménye. Ezzel a gyakorlattal néhány év alatt célt érhetünk, amennyiben egyetlen tulajdonságra végezzük a válogatást.

Más a helyzet akkor, ha egyszerre több tulajdonságra folytatjuk a szelekciót. Ilyenkor azoknak a genotípusoknak a kiválogatása, amelyek minden releváns nemesítési szempontnak megfelelnek, sokkal hosszabb időt vehet igénybe. Nehezíti a helyzetet, ha a munka során nemkívánatos tulajdonságok is rögzülnek, amelyeket a nemesítési szempontok között nem jelöltünk meg a kutatás elején. Ez a helyzet állt elő például az orbáncfű (*Hypericum perforatum* L.) szelekciója során, amikor a kellő hatóanyagtartalomra, hozamra és morfológiai bélyegekre kiválasztott populációról utóbb kiderült, hogy rendkívül fogékony egy olyan betegségre, amely a természetes populációkban csak elvétve jelentkezik. Ezután a szelekciót a rezisztens vagy toleráns törzsek kiválogatására kellett koncentrálni, természetesen a már meglévő kedvező tulajdonságok megőrzésével.

Az orvosi zsálya (*Salvia officinalis* L.) szelekciós nemesítése során a mérgező thujon, mindenekelőtt az a-thujon komponensnek a genomból történő eltávolítása volt az elsődleges feladat. A szelekció előrehaladtával azonban az állomány drog- és illóolajhozama is jelentősen csökkent, ugyanakkor az elvégzett statisztikai összefüggés-vizsgálatok arra is rámutattak, hogy egyebek mellett ezek a tulajdonságok is rendkívül szoros, ellentétes irányú összefüggésben vannak a nemesítési populációban. Többéves – gázkromatográfiás analízisekkel támogatott – nemesítői munka során sikerült kiválasztani azokat a korrelációtörő törzseket, amelyekben a magas illóolaj- és droghozam egyidejű jelenlétével a thujon komponensek gyakorlatilag eltűntek a genomból.

Kedvező esetben egy markáns morfológiai jegy a beltartalmi paraméterek kedvező kombinációjával jár együtt. Ez történt a máriatővis fehér virágú genotípusának kiválogatása során, ahol a fehér virágzat megjelenésével párhuzamosan a termésben olyan új flavonolignán komponensek jelentek meg, amelyek az általánosan elterjedt – és a gyógyászatban alkalmazott – lila virágú típusokban egyáltalán nem halmozódnak fel. Ez a nemesítési példa arra is utal, hogy bár mindkét genotípus összhatóanyag-tartalma (spektrofotometriásan mérve) azonos, nagyhatékonyságú folyadékromatográfiai módszerekkel az eltérő hatókomponensek kimutathatóak.

Sok tekintetben hasonló feladatot jelent a gyógyszeripari célú máknemesítés során a magas morfin-, illetve tebaintartalomra történő szelekció. Itt a nemesítési munka bázisát nem a biodiverzitás-feltérési kutatások jelentik, hanem a köztermesztésű fajták és az egzotikus populációk keresztezéses utódnemzedékei. A több mint 10 éves divergens szelekció eredményeként kapott populá-



2. ábra • A gyógyszeripari célra termesztett mákfajták és fajtajelöltek összehasonlító alkaloidtartalma

ciók már szinte kizárólag a nemesítési célként megjelölt alkaloidkomponenst halmozzák fel nagy mennyiségben, miközben a többi alkaloid mennyisége jelentősen visszaszorult, sőt eltűnt a fajtajelöltekből. A Gyógynövény Kutató Intézet új, világviszonylatban is kiemelkedő fajtajelöltségeinek (Alfa, Hymor, Temax) alkaloidprodukcóját összehasonlítva a köztermesztésben lévő fajtákkal (Kék Duna, A-1, Kék Gemona, Monaco) a 2. ábra szemlélteti.

Bármennyire is prioritásnak tekintjük azonban a gyógynövények hatóanyag-tartalomra történő nemesítését, agrotechnikai szempontból a termesztésbe kerülő fajta morfológiai és fenológiai tulajdonságai sem hanyagolhatók el. A gyógynövények hozama, betegségekkel szembeni ellenállóképessége, vagy a különböző termesztéstechnológiai elemekre történő reakciói ugyan csak fontosak a gazdaságos és eredményes termesztéshez. Nem beszélve arról, hogy bármilyen gyógynövényfaj – államilag elismert fajtaként történő – köztermesztésbe vonása együtt kell hogy járjon a megkülönböztethetőség, az egyöntetűség és a stabilitás kritériumrendszerének kielégítésével. Ezzel a kritériumrendszerrel ma hazánkban 74 államilag elismert gyógynövényfajta rendelkezik, melyből 49 fajta a Gyógynövény Kutató Intézet kutatás-fejlesztési eredménye.

4.3 Gyógynövények termesztésbe vonása

A homogén, jó minőségű gyógynövény-drog alapanyag előállítása érdekében szükséges a megfelelő paraméterekkel rendelkező, vadon termő populációk felhasználásával folytatott nemesítés eredményeként kapott gyógynövények nagy területeken történő termesztése. A termesztésbe vonás során az agroökológiai paraméterek kerülnek kidolgozásra: a faj igényeinek megfelelő szaporítási mód és időpont, a tenyészterület, a növényápolás, a tápanyag-visszapótlás, a

növényvédelem és a betakarítás optimalizálása. A termesztésbe vonás több évet vesz igénybe, és több termőhelyen elvégzett, üzemi méretű (5-10 hektár) kísérleteket feltételez.

5. A gyógynövény alapú gyógyszerek gyártása és minőségbiztosítása

A fitofarmakon fogalomnak két megközelítése ismeretes. Mindkettő közös feltétele a növényi eredet (Nyiredy és Glowniak, 2000). Szűkebb értelemben fitofarmakonnak tekintjük azokat a gyógyászati céllal alkalmazott készítményeket, amelyek hatóanyagai növényi részek (gyógynövény-drog), illetve azok kivonatai (nyers vagy tisztított kivonat), így az általuk kiváltott farmakológiai hatás természetes anyagkeverékeknek köszönhető.

Tágabb értelemben a fitofarmakonokhoz sorolhatók a gyógynövényekből kinyert, erős farmakológiai hatással rendelkező komponensek, például a kábító, fájdalomcsillapító hatással rendelkező morfin. A négy fitofarmakon kategóriát a 3. ábra tünteti fel.

A gyógynövények gyógyászati célú felhasználása esetén a feldolgozás, gyártás az általános gyógyszergyártási előírásoknak megfelelően történik, mivel a fitofarmakonokkal szemben ugyanolyan minőségi elvárások érvényesek, mint a szintetikus gyógyszerek esetében. A laboratóriumi minőségellenőrző vizsgálatokra (Kiniczyk és Nyiredy, 1996) a gyógynövények begyűjtése után, a megfelelően előkészített drogok előállítását követően kerül sor. Ezek az előírások nem csupán a gyógynövény-drog makroszkópos, mikroszkópos és kémiai azonosítására, fizikai-kémiai jellemzőinek meghatározására, egyes hatóanyagcsoportjainak vagy komponenseinek kimutatására, különböző tisztasági vizsgálatokra, a nehézfém-szennyezettség meghatározására, a növényvédőszer-maradványok kimutatására és a mikrobiológiai tisztaság vizsgálatára, hanem



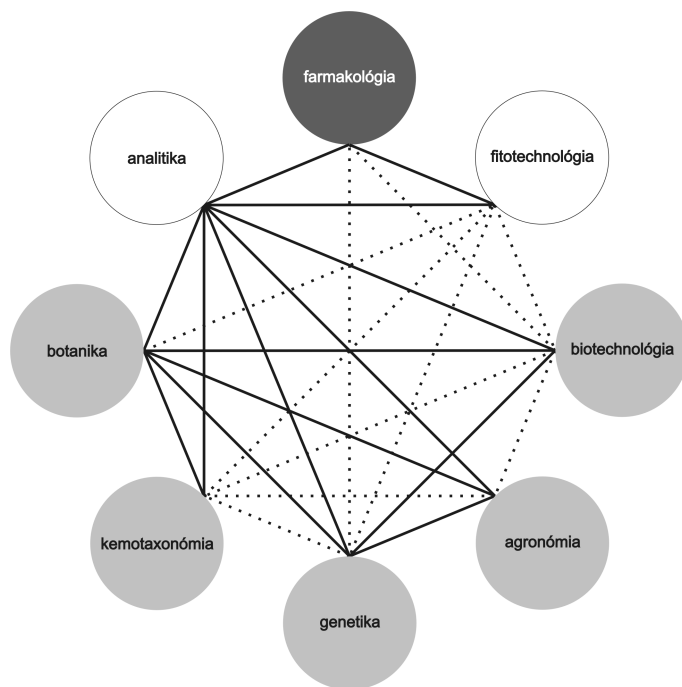
3. ábra • A gyógynövény-tartalmú gyógyszerek, a fitofarmakonok fajtái

a felhasználásra kerülő gyógynövény-alapanyag beltartalmi mutatóira is vonatkoznak. A gyógynövény alapú gyógyszergyártási folyamat teljes körű minőségbiztosítási rendszere a GMPP (Good Medicinal Plant Practice – helyes gyógynövény gyakorlat), melynek alapjait a Gyógynövény Kutató Intézet kutatói dolgozták ki.

6. A gyógynövénykutatás diszciplínáinak kapcsolatrendszere

A gyógynövény-kutatás a biológiai (botanika, genetika, biotechnológia, agronómia, kemotaxonómia), a kémiai (analitika, technológia) és az orvosi (farmakológia) tudományok interdiszciplináris kapcsolatán alapszik. Az egyes diszciplínák közötti meghatározó kapcsolatokat a 4. ábrán folyamatos, a lazább kapcsolatokat szaggatott vonallal jelöltük.

A hatékony gyógynövénykutatás egy olyan csapatmunka eredménye, melyben különböző alapképzettségű kutatók (gyógyszerész, botanikus, agrármérnök, kertészmérnök, vegyész, vegyészmérnök, mikrobiológus, orvos) egy közös cél – az új és hatékony fitofarmakonok előállítása érdekében működnek együtt.



4. ábra • A farmakognózia diszciplínáinak kapcsolatrendszere

A gyógynövénykutatás tehát a gyógyszerkutatás azon részével foglalkozik, melyben a gyógyító molekulákat a természet a gyógynövényekben lokalizálta. Pavlov szavaival: „Ezek ez anyagok az ember számára készen vannak, csak értük kell nyúlni.” Hinnünk kell abban, hogy a szívinfarktus megelőzésének, a rákbetegségek és a HIV-vírus legyőzésének vegyületei is

készen vannak a természetben, a gyógynövényekben, és együttes munkával, megfelelő felkészültséggel, szakértelemmel, elhivatottsággal és kutatói hittel „csak értük kell nyúlni”.

Kulcsszavak: *gyógynövény, farmakognózia, izolálás, kromatográfia, biodiverzitás, nemesítés, minőségbiztosítás*

IRODALOM

- Bisset N. G., Wichtl M. (2001). *Herbal Drugs and Phytopharmaceuticals*. Medpharm, Stuttgart
- Hänsel R., Sticher O., Steinegger E. (1999). *Pharmakognosie – Phytopharmazie*, Springer, Berlin
- Kiniczky M., Nyiredy Sz. (1996). *Pharmorient*, **41**, 1
- Nyiredy Sz., Glowniak K. (2001). *in: Nyiredy Sz. Ed.: Planar Chromatography. A Retrospective View for the Third Millennium*, Springer, Budapest, pp. 550-568.
- Nyiredy Sz. (1995). *in: Flavonoids and Bioflavonoids* (Eds.: Antus S., Gábor M., Vetschera K.), Akadémiai Kiadó, Budapest, pp. 157-166.
- Nyiredy Sz. (2000). *Chromatographia*, **51**, 288.
- Petri G., Nyiredy-Mikita K., Nyiredy Sz. (1989). *Gyógynövények korszerű terápiás alkalmazása*, Medicina, Budapest
- Wagner H. (1999). *Arzneidrogen und ihre Inhaltsstoffe*, Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft GmbH, Stuttgart

ÉLELMISZERBIZTONSÁG: GLOBÁLIS GONDOK – JAVÍTÁSI TÖREKVÉSEK

Farkas József

az MTA rendes tagja, egyetemi tanár,
Szent István Egyetem, Hűtő- és Állattermék-technológiai Tanszék
jfarkas@alarmix.net

1. Élelmiszerekkel közvetíthető veszélyforrások

Az élelmiszerek egészségügyi biztonságossága, az, hogy az élelmiszer elfogyasztása egészségártalmat ne okozzon, az egészséges környezet mellett az életminőség alapvető tényezője. Az élelmiszerbiztonság hiányának ugyanakkor roppant fontos gazdasági és politikai kihatásai is vannak.

Az élelmiszerbiztonsági veszélyekre nagyon érzékenyek a csecsemők, a terhes nők, a betegségek miatt csökkent immunitású egyének és az idős emberek. Az immunitás előrehaladott korban csökken, a fiziológiai funkciók romlása miatt kevésbé hatékonyá válik az antibiotikumos kezelés, és az öregek körében az alultápláltság is gyakoribb. Az élelmiszerekkel közvetíthető negatív élettani hatások, az élelmiszerbiztonságot rontó tényezők feltérképezése és folyamatos felügyelete a népesség általánosan rossz egészségi állapota miatt hazánkban különösen indokolt.

Az élelmiszerek fogyasztásával összefüggő egészségveszélyeztetés a következő okokra vezethető vissza:

- *Mikrobiológiai eredetű veszélyek* (élelmiszerek kórokozó mikrobákkal való szennyezettsége és egyes mikroorganizmusok toxikus anyagcseretermékeinek jelenléte);
- *Vegyiszennyezők* az élelmiszerekben. Ilyenek lehetnek

– a környezetből származó fém-szennyezések (például ólom, higany, kadmium)

– a mezőgazdasági tevékenységgel összefüggő vegyszermaradványok (növényvédő- és rovarirtószer-maradványok, műtrágyázással kapcsolatos nitrit/nitrát tartalom)

– állattenyésztési és állatgyógyászati szermaradványok

– ipari szerves szennyezők (extrakciós oldószermaradványok)

– csomagolóanyagokból az élelmiszerbe kerülő vegyületek

– egyes élelmiszer-nyersanyagok természetes toxikus komponensei (például alkaloidok, szaponinok, fitoösztrogének)

– radioaktív elemekkel való szennyezetttség

– szándékolt élelmiszeripari adalékanyagok (tartósítószer, mesterséges színezékek, mesterséges édesítőszer, állományjavítók stb.).

Korunk sokat vitatott, komplex kérdésköre az új biotechnológiai módszerekkel előállított, transzgenikus élelmi anyagok és az élelmiszeripari használatra genetikailag módosított hasznos mikroorganizmusok esetleges kockázata.

A felsorolt, egészségveszélyeztető tényezők súlyossága és fontossága tekintetében a szakértői megítélés és a fogyasztói/nem szakmai vélekedés gyakran igen eltérő. Míg a szakértői (tudományosan megalapozott, illetve egészségügyi statisztikákon

nyugvó) veszélyeztetési sorrend, legalábbis a fejlett országokat illetően, többé-kevésbé az előbbi felsorolás szerinti, a fogyasztói vélekedés és a fogyasztókat nem mindig megfélelően tájékoztató média általában nagyobb súlyt helyez a „nem természetes” adalékanyagokra. Mindezt annak ellenére, hogy a szándékolt élelmiszer-adalékok használatának hatósági engedélyezését – néhány „klasszikus”, a régóta elterjedt használat által szentesített anyag kivételével – igen alapos toxikológiai kivizsgálás előzi meg.

2. Globális élelmiszerbiztonsági problémák

Az mindenesetre tény, hogy élelmiszerek megbetegedéseket okozhatnak, és ez a probléma globális jellegű. Mindannyian élelmiszer-fogyasztók vagyunk: az élelmiszer-fogyasztás okozta egészségkárosodás valószínűségének (kockázatának) valamilyen mértékben mindannyian ki vagyunk téve. Az élelmiszerek okozta megbetegedések, az élelmiszerbiztonsági hiányosságok növekvő problémát jelentenek, ha más súlypontokkal is, mind a fejlett, mind a fejlődő országokban. A probléma globálissá válásának számos oka van: az élelmiszer-kereskedelem globalizálódása, az urbanizációval járó népességsűrűség, életmódváltozások, fokozódó környezetszennyeződés, a nemzetközi személyforgalom növekedése stb. Az élelmiszertermelés is tömegessé és bonyolultabbá vált, az élelmiszertermelés és -fogyasztás közötti láncolat hosszabb lett, több lehetőséget adva a szennyeződésre és a kórokozók szaporodására. Mint az ENSZ Élelmezési és Mezőgazdasági Szervezete (FAO) és Egészségügyi Világszervezete (WHO) egy közös szakértő bizottsága már egy 1984-es jelentésében megállapította: „a szennyezett élelmiszer talán a legelterjedtebb egészségügyi problémája mostani világunknak, és egyik jelentős oka a csökkent gazdasági teljesítőképességnek” (FAO/WHO, 1984). A helyzet azóta sem javult.

Az élelmiszerfogyasztás okozta megbetegedések globális mértékét nehéz megbecsülni, de a WHO szerint csupán 2000-ben 2,1 millió ember halálát okozták „hasmenéses megbetegedések”. Ezek nagy részét bizonyos kórokozók szennyezett élelmiszer vagy ivóvíz okozhatta. A fejlődő országokban a csecsemők és kisgyermekek diaréja az egyik fő oka az elégtelen táplálékellátottságuknak (malnutrition). Ezekben az országokban az élelmiszerek okozta megbetegedések sokféleségében az élelmiszerekkel közvetített állati paraziták is fontos oki tényezőt jelentenek.

A becslések szerint az iparosodott fejlett országokban az élelmiszerekkel közvetített megbetegedések évente a lakosságnak akár 30 %-át is érintik. Az Amerikai Egyesült Államokban az ottani statisztika szerint évente mintegy 76 millió élelmiszer-eredetű megbetegedés fordul elő, amiből 325 000 kórházi kezelést igényel és 5000 haláleset okozója (WHO, 1999). Például 1994-ben egy, jégkrémmel közvetített, szalmonellák okozta fertőzés-sorozat mintegy 224 000 embert érintett. A legtöbb élelmiszer-eredetű megbetegedés azonban sporadikus jellegű, és gyakran nem is kerül nyilvánosságra.

A veszélyek mértéke és fontossági sorrendje az egyes országok szerint eltérő, azok társadalmi-gazdasági viszonyaitól, a szabályozás és ellenőrzés színvonalától függő, s időben is változó lehet. Hazánkban például amiatt, hogy az utóbbi évtizedben – részben a tulajdonviszonyok átrendeződésével összefüggésben – a mezőgazdaságban is lazult a vegyszerek alkalmazásának fegyelme, ugyanakkor romlott az ellenőrzés lehetősége is, így a növényvédőszer-maradványok vagy a toxikus nehézfém-tartalom kockázata is megnövekedhetett. Bár a táplálkozástudományi kutatások eredményei szerinti ismeretek egészséges táplálkozásként a sok zöldség, gyümölcs és gabonatermék fogyasztásával jellemezhető vegyes táplálko-

zást indokolnak, a növényi nyersanyagok ellenőrizetlen „tisztasága” esetén ez az ajánlás kétes értékűvé válik.

3. Ételfertőzések, mikrobás ételmérgezőések

Az élelmiszerekkel közvetíthető *mikrobás eredetű megbetegedések*, különösen a „fertőzéses enteritiszek” tekintetében a helyzet az utóbbi évtizedekben világszerte semmit sem javult. A *baktériumok* okozta ételfertőzések terén „új” vagy újonnan felismert kórokozók „jelentkeztek”, mint például a hemolitikus-urémiás szindrómákat okozó *Escherichia coli* szerotípusok vagy a *Listeria monocytogenes*, de drámaian megnövekedett az olyan régóta ismert kórokozó szerepe is a megbetegedési statisztikákban, mint a *Salmonella enteritidis*-é.

A szalmonellózisok jelentik a fő problémát a legtöbb országban, de a kampilobakteriózis (a *Campylobacter* baktérium-nemzettség egyes fajai által okozott fertőzés) is széles körre terjedő, élelmiszer közvetítette megbetegedés, amelynek esetszáma már vetekszik a szalmonellózisokéval. A kampilobakteriózis is esetek 2-10 %-ában különféle krónikus egészségügyi problémákhoz is vezethet.

Bár az enterohemoragiás *E. coli* és a patogén *Listeria* viszonylag ritkán okoznak megbetegedést, ezek következményei az esetek jelentős számában súlyosak, néha halálosak, különösen a csecsemők, a gyermekek és az idősek között. Emiatt ezek az „új”, az utóbbi évtizedekben felmerült élelmiszer-fertőzések ma már a legsúlyosabbak közé számítanak.

A *Vibrio cholerae* baktérium által előidézett *kolera* nemcsak a kórokozóval szennyezett vízzel, hanem élelmiszerekkel is terjedő megbetegedés, amely a fejlődő országokban okoz nagy közegészségügyi problémákat és óriási gazdasági veszteségeket. A például a Peruban 1991-ben fellépett kolerajárvány abban az évben az országot csupán

az inkriminált halászati termékei exportjának a kiesése révén 700 millió USA dolláros veszteséggel sújtotta (WHO, 1999).

A később említendő mesterséges kémiai anyagok, mint lehetséges környezeti szennyezők mellett nagy figyelmet érdemel az, hogy egyes mezőgazdasági terményeket szennyező *penészgombák* között egyre növekvő számban válnak ismeretessé azok, amelyek mérgező anyagokat: *mikotoxint* képezhetnek. A legnagyobb humánegészségügyi jelentősége az *aflatoxinoknak* és az *ochratoxinoknak* van. Hazai éghajlati és növénytermesztési körülményeink között azonban a *fuzárium toxinok* kimagasló állategészségügyi jelentőségük mellett élelmiszerbiztonsági szempontból is figyelemre méltók (Kovács, 2001). Bár a sokféle mikotoxin legtöbbszörre kis koncentrációban fordul elő az élelmiszerekben, a mikotoxinok fajlagos toxicitása a mezőgazdasági szermaradványokénál sokkal nagyobb, s általában igen ellenállóak az élelmiszer-feldolgozás során felmerülő behatásokkal szemben. Ez a stabilitás, valamint a kumulálódás lehetősége, és a táplálékban esetleg együttesen jelenlévő többféle toxin potenciálisan egymás hatását erősítő volta miatt a probléma súlyosabb lehet annál, mint amennyi figyelmet a mikotoxin-kérdéskör kap.

A *vírusok* ételfertőzésekben játszott szerepét alárendeltebbnek tekintik, mint a baktériumokét, bár egyes vírusok (calicivirus, Norwalk vírus, Hepatitis E) által előidézett, kevésbé közismert kórfarmák a szakemberek körében már növekvő figyelmet keltenek élelmezés-egészségügyi területen is.

Speciális, európai viszonylatban különösen nagy jelentőségű, korszak-jellemző fertőzési probléma a *prion okozta betegség*. A „kergemarhakórt” (bovine spongiform encephalopathy, BSE) okozó fertőző agensek (prionok) problémaköre azon felismerés miatt vág a tárgy körünkbe, mert a Creutzfeldt-Jacob-féle, a prionokra visszavezetett

humán megbetegedés változataként (vCJB) jelentkező halálos kórt kapcsolatba hozták a BSE-problémával: a szarvasmarha agy- és izomszöveti prionfertőzöttségét élelmiszer-egészségügyi fertőzési lehetőségnek tekintik. A haszonállat-takarmányozás élelmiszerbiztonságra is kiható következményeinek az utóbbi évtizedben legpregnansabb kifejeződése éppen a nyugat-európai BSE-krízis volt, amelyet a szarvasmarha takarmánykiegészítőjeként használt kérődző csont- és húsliszt etetésével lehetett összefüggésbe hozni.

4. Az élelmiszerbiztonságot veszélyeztető kémiai tényezők

Az élelmiszerek biztonságát veszélyeztető környezeti vegyi szennyezők közül különösen a *perzisztens szerves pollutánsoknak* (POPK) minősülő vegyületeket kell kiemelni, amelyeknek az elmúlt időszakban iskola-példáivá váltak a *dioxinok* és a *poliklórozott bifenilek* (PCBK). A dioxinok egyes ipari folyamatok és a hulladékégetés nem kívánt melléktermékei, amelyek számos egészség-ártalom forrásai lehetnek.

A *nehézfém-szennyeződések* problémakörében az *ólom* és a *higany* által a csecsemőknel és gyermekeknel okozott idegkárosodást kell kiemelni; a *kadmiumos* szennyeződés az időseknel okozhat vesekárosodást is. Ezek a fémek a POPK-kal együtt a levegőt, a vizeket és a talajt szennyezve okozhatják élelmiszereink szennyeződését.

A *növénytermesztésben használt szerek* (peszticidek, műtrágyák) maradékai miatt a hazai ellenőrző hatóságok által kifogásolt minták aránya néhány %-ot tesz ki. Leggyakrabban a primőr zöldségek kifogásoltak.

Hasonló nagyságrendű az *állatgyógyszer-maradékok* miatt kifogásolt élelmiszertételek aránya. Ez azért lényeges kérdés, mert az élelmiszerekben lévő állatgyógyszer-maradékok szerepet játszanak az antibiotikum-rezisztencia terjedésében.

A *természetes eredetű toxinok* közül a „tenger gyümölcseit” fogyasztókat veszélyeztető, egyes halászati termékekben lévő biotoxinok nem tartoznak a magyarországi problémák közé. Hazánkban viszont a *mérgező kalapos gombák* okozta megbetegedések és halálesetek tekintélyes száma okoz gondot (ÉBTT, 2000).

5. Géntechnológiák és az élelmiszerbiztonság

A *transzgenikus termékek* illetve marker géneik kérdésköre nem tartozik a klasszikus élelmiszerbiztonsági problémák közé. Azonban a genetikailag módosított szervezetek mezőgazdasági alkalmazásának és az ilyen jellegű élelmiszerek fogyasztásának ártalmatlanságáról sok fogyasztó nehezen győzhető meg. A transzgenikus termékek – különösen Nyugat Európában – napjaink legemocionálisabban fogadott, a hagyományos élelmiszerbiztonsági problémáknál jóval komplexebb egészségügyi és környezeti hatásokra vonatkozó feltételezések elemzését, a kockázatok és előnyök gondos mérlegelését igénylő, s új etikai szempontokat is felvető kérdéskörét jelentik. Az EU *Novel Food Regulation* című komplex jogszabályozása szigorúbb eljárást ír elő az élelmiszer-gazdasági innovációkkal szemben szkeptikusabb európai fogyasztókra tekintettel, mint a modern biotechnológiában vezető szerepet játszó Észak-Amerikáé.

6. Kockázatelemzési rendszer a veszélyek megelőzésére

A fogyasztóvédelmet, a megelőzést szolgáló, racionális és korszerű jogi szabályozás megalkotásához nélkülözhetetlen a korszerű *kockázatelemzés* (risk analysis). Ennek fő részei a *kockázatbecslés* (risk assessment), a *kockázatkezelés* (risk management) és a *kockázatközlés* (risk communication).

A kockázatot elsősorban tudományos munkával lehet felbecsülni, és a kockázat-

elemzéshez csak a tudományos ismeretek folyamatos bővítése és naprakész alkalmazása, valamint a megfelelő adatbázisok létesítése szolgáltathat megfelelő alapokat. Ezért eredményes táplálkozás- és élelmiszerbiztonság-politika kellően támogatott kutatási háttér nélkül elképzelhetetlen.

A kockázatbecslés egyaránt magában foglalja a komplex toxikológiai elemzést, az epidemiológiai felmérést és az „expozíció”, a környezeti terhelés hatásának értékelését. Szükség van tehát a humán egészségügyi kockázat és az ökológiai kockázat párhuzamos és integrált értékelésére. Tekintetbe kell venni azt is, hogy több kockázati tényező egyidejűleg van jelen, és értékelni kell a veszélyeztetett populációra specifikus paramétereket. A kockázatkezelés már nem a tudósok, hanem a döntéshozók, a „politika” feladata. A kockázatelemzés lényeges eleme a *kommunikáció*. Ennek először szűkségszerűen a kockázatbecslést végzők és a kockázatot kezelők között kell operatívnak lennie. Eredményeiket azonban széles körben meg kell ismertetni. Az élelmiszerbiztonság ugyanis az összes érintett: a termelők, a tudósok, a törvényhozók, az élelmiszerfelügyelet és a fogyasztók együttes erőfeszítésének, „együttműködésének” az eredménye. Az élelmiszer-egységügyi szabályozás csak akkor lehet népegészségügyi és gazdasági szempontból egyaránt eredményes, ha az tudományos felismerésekre és ismeretekre épül, rendszeres felülvizsgálatnak van kitéve, és következetesen megvalósul a „határértékek” betartása, a technológiai fegyelem ellenőrzése, valamint a döntéshozók és a lakosság folyamatos tájékoztatása. Az élelmiszerbiztonsági veszélyek megelőzéséhez a termelő szektorban az élelmiszerbiztonsági szempontok szerinti és rendszerszemléletű minőségsszabályozás (például a veszélyelemzés és kritikus szabályozási pontok – *HACCP*rendszer) kialakítására, a kutatás és az ipar fokozott kapcsolat-

tartására és a témára irányuló, minden szintű oktatás, továbbképzés és ismeretterjesztés támogatására van szükség.

7. Nemzetközi és hazai törekvések az élelmiszerbiztonság javítására

Az Egészségügyi Világszervezet az egyre bővülő élelmiszerbiztonsági programjaival arra törekszik, hogy segítse a jó gyártási gyakorlatot, és hogy az élelmiszerek helyes kezelésére oktassa a kiskereskedőket és a fogyasztókat. A fogyasztók oktatását és az élelmiszerekkel foglalkozóknak a biztonságos élelmiszer-kezelésre kiképzését lehet ugyanis a legfontosabb célnak tartani az élelmiszerekkel közvetíthető megbetegedések megelőzésében.

Fontos kezdeményezés volt a közelmúltban a WHO/FAO által az élelmiszerek mikrobiológiai kockázatának szakértői becslésére létrehozott tanácsadó testület, és a FAO/WHO *Codex Alimentarius* Bizottságában pedig az élelmiszerbiztonsági követelményekkel kapcsolatos munka erősítése.

A FAO és a WHO 2002 februárjában Budapesten rendezte meg az első pán-európai konferenciáját az élelmiszerbiztonság és -minőség témakörében, amelyen több mint 40 ország szakértői vettek részt, együtt az élelmiszer-előállítók és a fogyasztói érdekvédelmi szervezetek képviselőivel. A konferencia célja az volt, hogy megvitassák az élelmiszerbiztonság javításának tennivalóit, és segítsék a fogyasztókat abban, hogy azok visszanyerjék az európai élelmiszerellátás biztonságosságába vetett bizalmukat az elmúlt évek nagy aggodalmat kiváltó eseményei (BSE-krisis, dioxinbotrány) után.

Magyarországon is fontos lépés volt az Egészségügyi Minisztérium és a Földművelésügyi és Vidékfejlesztési Minisztérium közös kezdeményezésével az *Élelmiszerbiztonsági Tanácsadó Testület* (ÉBTT) létrehozása. Az ÉBTT elkészített egy részletes tanulmányt Magyarország élelmiszerbizton-

sági helyzetéről (ÉBTT, 2000), és jelenleg egy nemzeti élelmiszerbiztonsági program tervezetének kidolgozásával foglalkozik. A Magyar Tudományos Akadémián a *Magyarország az Ezredfordulón* címmel összefogott stratégiai kutatások keretében készült tanulmányok között a közelmúltban jelent meg a Földművelésügyi és Vidékfejlesztési Minisztériummal való együttműködés részeként egy élelmiszerbiztonsági tanulmánykötet (Kovács és Bíró, 2002). A 2001 augusztusában az Egészségügyi Minisztérium által 10 éves időszakra rendeletileg meghirdetett *Népegészségügyi Célprogram* egyik akcióprogramja az élelmiszerbiztonság javítása, amelynek fő célja „az élelmiszerek által közvetített megbetegedések visszaszorítása – felkészülés az új kihívásokra” (EÜM, 2001).

Az *Európai Unió*, amely a világ legnagyobb élelmiszer- és italelőállítója, az *Európai Közösségek Bizottsága* által 2000. január 12-én tette közzé azt a *Fehér Könyvet*, amely az élelmiszerbiztonság európai szabályozásának alapos elemzését, az abból levont követ-

keztetéseket és a szükséges intézkedéseket tartalmazza. (CEC, 2000). Az utóbbiak között a legnagyobb jelentőségűek közé tartozik az *Európai Élelmiszerbiztonsági Hivatal* (European Food Safety Authority) létrehozása 2002-ben, amely elsősorban a kockázatbecslésért és az élelmiszerbiztonsági kérdésekkel kapcsolatos kommunikációért felelős (Molnár, 2002). Hazánk, EU-csatlakozásra felkészülésének egyik fontos elemeként, ugyancsak megalakítja a *Magyar Élelmiszerbiztonsági Hivatalt*, amely az Európai Élelmiszerbiztonsági Hivatal feladatköréhez hasonlóan, s azzal szoros együttműködésben tevékenykedik majd, összegezni fogja az élelmiszerbiztonságra vonatkozó vizsgálatok és ellenőrzések megállapításait, azok elemzése és értékelése után döntési javaslatokat tesz, valamint megteremti e témakörben a gyors reaklási rendszer koordinációját.

Kulcsszavak: *élelmiszerbiztonság, veszélyforrások, ételfertőzés, ételmérgezés, szermaradványok, kockázatelemzés*

IRODALOM

- CEC (2000). *White Paper on food safety*. Commission of the European Communities, Brussels
- EÜM (2001). Egészséges nemzetért népegészségügyi program, 2001-2010. Célprogram a népegészségügyi problémák megelőzésére Magyarországon. *Egészségügyi Közlöny*, **51**, 2237-2324
- ÉBTT (2000). *Magyarország élelmiszerbiztonsági helyzete az ezredfordulón*. Az Élelmiszerbiztonsági Tanácsadó Testület tanulmánya a Nemzeti Élelmiszerbiztonsági Program megalkotásához. Budapest
- FAO/WHO (1984). *The role of food safety in health and development*. Report of a Joint FAO/WHO Expert Committee on Food Safety. Technical Report Series No. 705. World Health Organization, Geneva
- FAO/WHO (2002). *FAO/WHO Pan-European Conference on Food Safety and Quality, Budapest, 25-28 February 2002*. Final Report, PEC/REP 1. FAO, Rome, April 2002
- Kovács F. (szerk.) (2001). *Penészgombák – mikotoxinok a táplálékláncban*. MTA Agrártudományok Osztálya, Budapest
- Kovács F. és Bíró G. (szerk.) (2002). *Élelmiszerbiztonság az EU-szabályozás függvényében*. MTA Agrártudományok Osztálya, Budapest
- Molnár P. (2002). Az élelmiszerbiztonság aktuális kérdései az európai szabályozás tükrében. *Élelmiszervizsgáló Közlemények*, **48**, 8-40.
- WHO (1999). *Food safety*. Report by the Director-General. EB105/10. World Health Organization, Geneva, December

SZENZOROK AZ ANALITIKAI KÉMIÁBAN

Tóth Klára

az MTA r. tagja, egyetemi tanár, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Általános és Analitikai Kémia Tanszék – ktoth@mail.bme.hu

Gyurcsányi Ervin Róbert

PhD, posztdoktor, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem,
Általános és Analitikai Kémia Tanszék – robertgy@mail.bme.hu

Bevezető gondolatok

A kémiai információ, egy adott minta komponenseinek azonosítása és mennyiségi jellemzése, rendkívül fontos helyet foglal el információs társadalmunkban. A kémiai és biológiai folyamatok megértése, modellezése és kontrollja lehetetlen kémiai információ hiányában. Az analitikai kémia fejlődése hihetetlen mértékben kibővítette a környezetünkben nyerhető kémiai információ mennyiségét és minőségét. Bizonyos becslések szerint a naponta elvégzett kémiai analízisek száma milliárdos nagyságrendű, és ez a szám az alkalmazási területek bővülésével, de leginkább a szigorú minőségellenőrző nemzetközi megállapodások hatására nagymértékben növekedni fog a jövőben. Az analitikai kémiai tudomány a társadalmi elvárásokra válaszolva napjainkban is folyamatosan fejlődik, és a fejlesztés új irányait három általános trenddel lehet jellemezni: automatizálás, miniatürizálás és egyszerűsítés. Kiemelt fontosságúvá válnak a gyors, megbízható és valós idejű kémiai információt szolgáltató analitikai eszközök és mérés technikák.

A szenzorok (érzékelők) fejlesztése az analitikai kémia egyik legdinamikusabban fejlődő, legvirágzóbb és legváltozatosabb interdiszciplináris tudományterülete. Fejlesztését többek között a környezeti és egészségügyi előírások biztosítása és az élet-

folyamatok molekuláris szintű feltárására való törekvés motíválja. Számos érzékelő az anyagok, tárgyak, folyamatok fizikai sajátságainak, így hőmérséklet, nyomás, helyzet, gyorsulás stb. jelzésére szolgál. Több különböző típusú *fizikai érzékelőt* évtizedek óta használnak mechanizált elemzőkben. Környezetünk kémiai összetételéről információt adó *kémiai szenzorok* (érzékelők), mint minden analitikai mérőrendszer, a kémiai tulajdonságok (koncentráció, szerkezet) fizikai-kémiai jellel való átalakítását végzik. A szenzor által szolgáltatott analitikai jel feldolgozásával egyes alkotók (atomok, molekulák és ionok) koncentrációja vagy szerkezetének megváltozása határozható meg. A kémiai szenzor két részegységből áll: egy *molekuláris felismerést* biztosító anyagot (például receptort) tartalmazó felismerő részből (felismerő zónából) és egy fizikai-kémiai jelátvivő egységből. A felismerő egység funkciója kettős: szelektív kölcsönhatás révén a szenzor szelektivitásának biztosítása és a kémiai paraméter (általában koncentráció) analitikailag mérhető, hasznos jellel való átalakítása, amelyre a jelátvivő egység reagál. Jellemző tulajdonságuk, hogy a kémiai felismerést biztosító alkotóelem és a fizikai-kémiai jelátalakító egység egy analitikai eszközben van integrálva. Ennek az integrációnak több fontos vonzata is van, amiért, annak ellenére, hogy a detektálási elvek (elektrokémiai, optikai,

mikro-tömegmérésre visszavezetett, stb.) nem térnek el a többi analitikai eszköztől, a szenzorok külön fejezetét képezik az analitikai kémiának. A szenzorfejlesztés legnagyobb kihívása a szelektív felismerő zóna (egység) tervezése és a jelátvivő egységhez való rögzítése.

A bioszenzorok (*biológiai szenzorok*) a kémiai szenzorok alcsoportját alkotják, amelyeknél a felismerő anyag biológiai eredetű, és a szelektív felismerési lépés biológiai folyamatra épül, így lehet enzim-szubsztrát, antigén-antitest, receptor-agonista kölcsönhatás vagy nukleinsav hibridizáció. A különböző biológiai anyagok közül legáltalánosabban az enzimeket használják. A jelátvitel lehet elektrokémiai (amperometriás, potenciometriás), optikai vagy reakcióhő mérésén alapuló. Újabban készítenek felületi plazmon-rezonancia detektáláson vagy a tömegváltozás mérésén alapuló (kvarckristály mikromérleg alapú) és felületi akusztikus hullám detektáláson alapuló kémiai és bioszenzorokat is.

A szenzorokkal szemben támasztott követelmények nagyon szigorúak. Közös előnyös tulajdonságuk a nagy szelektivitás, a nagy érzékenység (alacsony mérési alshatár), a gyors működőképesség (rövid válaszidő) és a hosszú élettartam. Fontos megemlíteni, hogy a szenzorok működését megszabó folyamatok általában reverzibilisek, ami biztosítja a szenzorok ismételt felhasználhatóságát, folyamatos üzemmódi alkalmazását. Az egyes paraméterek teljesülése azonban esetenként ellentmondáshoz vezethet. Példaként vegyük a nagy szelektivitást és a reverzibilitást. Egyrészt kívánalom a nagy szelektivitás, másrészt a reverzibilis funkció. Ez a két követelmény valamilyen ellentmond egymásnak, hiszen a szelektivitás javul, amennyiben a molekuláris felismerő réteg és a meghatározandó komponens között erősebb kölcsönhatás lép fel. Ugyanakkor az erősebb kölcsönhatás a

reverzibilitás csökkenését jelentheti. Az irreverzibilis, egyben igen specifikus antigén-antitest kölcsönhatáson alapuló immunanalitikai rendszerek (eszközök) ismételt felhasználhatósága korlátozott. Ezért a gyógyszerek, hormonok, baktériumok és vírusok mint antigének meghatározására használt immunanalitikai rendszerek, továbbá minden olyan eszköz, amely nem alkalmas a komponens-koncentráció folyamatos monitorálására, az IUPAC (Union of Pure and Applied Chemistry) ajánlása szerint „bioprobe^{1/2}-nak vagy egyszerhasználatos szenzornak nevezhető (Thevenot et al., 1999).

A bioszenzorokat alkalmazó, mintakezelő egységet is tartalmazó analitikai rendszerek, illetve azok miniatürizált változatai sem tekinthetők szenzoroknak. A mikro-, illetve nanoszenzorokat és mintakezelési (elválasztási) egységet is tartalmazó komplett mikroanalitikai rendszereket az angol irodalomban *mTAS*-nak, *Lab on the chip*-nek nevezik. Előnyös alkalmazásuk az orvosi biológiában, *in vitro*, nagysebességű szűrések és a molekuláris biológiai kutatások terén várható.

A kémiai szenzorok jelentősége

A modern társadalomban számos olyan analitikai kémiai feladat van, amelyet nem lehet konvencionális laboratóriumi, analitikai kémiai műszerezettséggel megoldani. Ennek okai között szerepel az analitikai mérőrendszer nem megfelelő mérete, a túl hosszú analízisidő vagy az analízis túl magas költsége. A kémiai érzékelők hagyományos előnyei között említhető a minimális vagy minta-előkészítés nélküli gyors helyszíni mérések lehetősége és az eszköz-előállítás alacsony költsége. Nagyon fontos kihangsúlyozni a kémiai érzékelők alkalmazhatóságát kémiai és biológiai folyamatok monitorálására élő szervezetben (*in vivo*) és a természetben (*in field*), terepviszonyok között, ami magában hordozza az azonnali információszerzés

és ezáltal a gyors beavatkozás lehetőségét. A legfontosabb-alkalmazási területek közt említhető a környezetvédelem, a minőség-ellenőrzés, az élelmiszeranalitika, az orvosi biológiai analízis, különös tekintettel az orvosi diagnosztikára, a hadiipar és a folyamat-ellenőrzés és -szabályozás (1. ábra).

Az orvostudományok területén a kémiai érzékelők jelentőségét a glükózszenzor példája jól érzékelteti. A cukorbetegségnek akut és krónikus szövödményei a vércukorszint kóros ingadozásával vannak összefüggésben. A krónikus, életminőséget jelentősen rontó szövödmények (retina, vese, keringési rendszer, stb. károsodása) hosszabb idejű hiperglikémia fennállása mellett jelentkeznek. A 20-70 életév között jelentkező vakság fő oka az USA-ban a diabéteses retinopathia, évente mintegy 12-24 ezer új eset (Heller, 1999). A vércukorszint normál tartományban tartása legalább 60 %-kal csökkenti a krónikus szövödmények jelentkezését (The Diabetes Control and Complications Trial Research Group, 1993). A betegek által egyszerűen használható, egycseppnyi vérmintát igénylő glükózérzékelő jelentősége nyilvánvaló, ha arra gondolunk, hogy alternatívája a naponta többször végzendő kórházi laboratóriumi meghatározás lenne. Egyes betegségekre jellemző molekulák szenzorokkal történő meghatározása a jövőben nagymértékben javíthatja az életminőséget azáltal, hogy lehetővé válik az adott marker (kreatinin, glükóz, koleszterin stb.) koncentrációjának nyomon követése kórházi beutalás nélkül is. A betegágy melletti szenzorok alkalmazása a megfigyelés minőségét nagymértékben javítja. Erre példa az intenzív terápia során használatos *oxigénmérő érzékelők* illetve a neonatológiában az emberi szervezet elektrolit-háztartását jellemző ionok meghatározására alkalmas *ionszelektív elektródok*.

A környezetvédelemben kiemelt jelentőséggel bír a szennyvizek, talaj- illetve fel-



1. ábra • A kémiai szenzorok fő alkalmazási területei

színi vizek minőségének ellenőrzése, a toxikus anyagok (pesticidek, nehézfémek, klórozott szénhidrogének stb.) szintjének meghatározása környezeti mintákban. Az érzékelők segítségével a kritikus paraméterek helyszíni jelzésére nyílik lehetőség, és elkerülhető a költséges mintaszállítás, illetve konzerválás, ami a laboratóriumi vizsgálatok követelménye. A szennyvizekből származó cianid által okozott természeti katasztrófák tükrében a folyamatos, in-field monitorálás jelentőségét nem kell indokolni. A különböző hazai és nemzetközi pályázatok, például a Biotechnológia 2001 pályázat is, egyértelmű felhívást tartalmaz az ökoszterek, szennyezések gyors kimutatására szolgáló módszerek kidolgozására. A pályázat szövegéből idézve: szükséges: „Olyan eljárások és bioszenzorok kidolgozása, amelyekkel gyorsan és hatékonyan lehet figyelmeztetni a környezeti szennyezésre, és a szennyezési szinteket gyorsan és pontosan meg lehet adni.”, valamint „DNS, fehérje vagy mikroorganizmus specifikus detektálására szolgáló tesztek alkalmazása a biomonitoring területén” (Biotechnológia 2001, 4. 3). Érzékelőhálózatok kialakításával az említett paraméterek térbeli eloszlása is meghatározható, és lehetőség nyílik a szennyezés forrásának azonosítására is.

A kémiai folyamatszabályozás területén a szenzorok a visszacsatolós rendszerek szerves részeit képezik. A mért pillanatnyi értékeknek megfelelően a rendszer több paraméterének (például reagens adagolás, pH-beállítás, stb.) automatikus szabályozására is lehetőség nyílik. Gyakran az egész folyamat minőségét döntően meghatározhatja a szenzor teljesítménye és megbízhatósága.

A 2001. szeptember 11-e utáni bioterrorizmus eredményeképpen eddig összesen 18 anthrax esetet diagnosztizáltak az Egyesült Államokban. Az események hatására rendkívüli mértékben megnőtt az érdeklődés a veszélyes biológiai és kémiai ágensek detektálására alkalmas analitikai eszközök iránt. Várhatóan a jövőben a hadiipar a kémiai és biológiai érzékelők jelentős felhasználási területét fogja képezni (Niiler 2002).

Honnan indult el a szenzorkutatás, és merre halad?

A szenzorkutatást az elmúlt 50 évben az érzékelők szelektivitásának növelésére irányuló törekvések uralták. A hidrogénszelektív üvegelektrod a pH-mérés általánosan elfogadott eszközévé vált. A hazai üvegelektrod-kutatásokat Lengyel, Boksay és Csákvári végezte, nemzetközileg elismert eredményeket érve el (Lengyel et al., 1966). Az 1950 és 1980 közötti időszakot a nem üvegmembrán alapú *ionszelektív elektródok* virágkorának lehet tekinteni. Pungor Ernő és kutatócsoportja e területen végzett úttörő munkája eredményeként több anionmérő elektród került kifejlesztésre, és elsőként hazánkban indult el az ionszelektív elektródok gyártása (Pungor, 1967). A lantan-fluorid egykristály alapú fluoridelektrod vagy a valinomycin (ionofór, biológiai membránokban szelektív iontranszportot biztosító makrociklusos vegyület) alapú káliumion-szelektív elektród a legkiemelkedőbb példái az adott periódusban folyó nemzetközi kutatás sikerének. A természetes és szintetikus iono-

fórok szelektív felismerőanyagként (receptor molekulaként) való alkalmazása W. Simon és munkatársainak úttörő munkája nyomán indult el, s ma már több mint 60 féle ion és molekula határozható meg ionofór alapú membránelektroddal (Stefanac, Simon, 1966). Az ionszelektív elektródok legfontosabb rutinszerű alkalmazásai között említhetők a biológiai minták (vér, vizelet) elektrolit-koncentrációjának meghatározása.

Az utóbbi évek legszenzációsabb kutatási eredménye az a felfedezés volt, amely rámutatott arra, hogy az *ionofór alapú ionszelektív elektródok* mérési alsó határa kiterjeszhető a tudományos közvélemény által elfogadott mikromólos tartományról a pikomólos tartományra (Sokalski, et al., 1997). Bebizonyosodott, hogy a korábban tapasztalt viszonylag magas kimutatási határokat az ionszelektív membránból kiáramló, az elektródnak megfelelő, ún. elsődleges ionok okozzák. A membrántranszport kémiai vagy elektrokémiai modulálása lehetőséget adott a mérési alsó határ kedvező irányú befolyásolására, az eddig elérhetőnek tartott érték hat nagyságrendet meghaladó mértékben való csökkentésére. Az alacsony kimutatási határokat különösen vonzóvá teszik az új típusú elektródokat környezeti szennyezők, például nehézfémek nyomanalízisében.

A rendkívül alacsony kimutatási határral rendelkező ólom-ionszelektív szenzorokat sikerrel használták természetes vizek ólomtartalmának meghatározására (Ceresa, et al). A mért és az induktív csatolású plazma-tömegspektrométer műszeregyüttessel (ICP-MS) meghatározott értékek gyakorlatilag azonosak. Az ólomszelektív elektród ugyanakkor a minta előkészítésétől függően különbséget tudott tenni a szabad és össz-ólmion koncentráció között. Az eredmények a környezetvédelmi szempontból fontos nehézfémek speciációjának feltárása szempontjából is ígéretesek. A jövőben várható a nehézfémion szenzorok ilyen irányú alkalmazása.

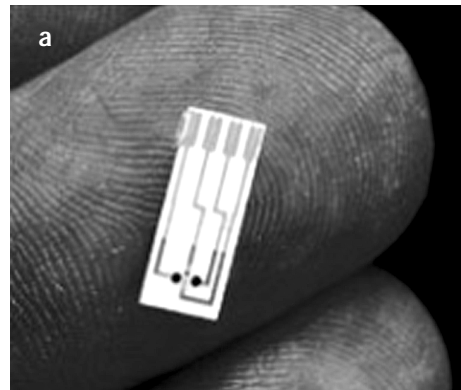
A biológiai eredetű szelektivitás bevezetése a szenzor kutatásba egy egészen új szenzortípus, a *bioszenzorok* kifejlesztéséhez vezetett, amelyet a vércukor szelektív mérésének igénye initiált. A cukorbetegség prevalenciája az iparilag fejlett országokban közel 4%. A Clark és Lyons úttörő munkája alapján elindult glükóz-szenzor 40 éves története sikertörténet, és ma már többféle, kis térfogatú, esetenként 100 mL vérmintát igénylő miniatürizált glükózmérő szenzor és rendszer található a kereskedelmi forgalomban (Wang, 2001). A klinikai tesztek forgalmazó cégek szinte mindegyike forgalmaz bioszenzor alapú glükózmérő terméket.

Mindegyik glükózmérő érzékelő (tesztcsík) enzim alapú, és a biokatalitikus réteg a jelátvivő elektrokémiai vagy optikai egységre van rögzítve. A glükózkoncentráció meghatározása gyakran a glükóz és az oxigén között lejátszódó reakción alapszik. A biokatalitikus reakcióban állandó konverzió mellett keletkező lokális hidrogén-peroxid koncentrációjának mérése alapján történik a glükózkoncentráció meghatározása. A kereskedelmi glükózszenzorok többségénél a hidrogénperoxid-koncentráció mérése általában elektrokémiai úton (amperometrián) történik. A kutatások a természetes oxigén más reakciópartnerrel, mediátorral (reverzibilis redoxi-rendszerek) való helyettesítésére irányultak, kiküszöbölve ezzel az oxigénkoncentráció analitikai jelre gyakorolt hatását. Az egyes glükózmérő szenzorok a szenzor méretében, a biokatalitikus réteg kialakításának módjában, a zavaró hatások kiküszöbölésére kialakított megoldásokban térnek el egymástól.

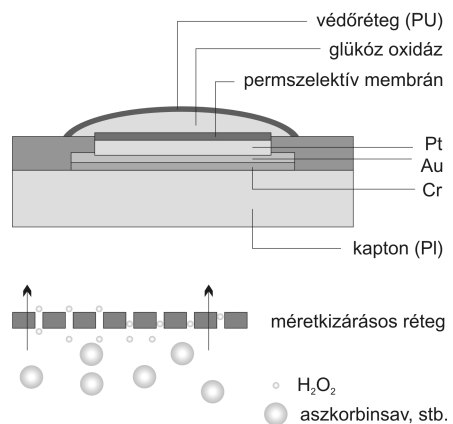
A kereskedelmi forgalomban lévő, személyes vércukormérők általában miniatürizált, planáris felépítésű enzimelektrodot tartalmaznak mint mérőérzékelőt, amelyek mikroelektronikai rétegtechnológiával készülnek (2. ábra). A biokatalitikus réteg (enzim, mediátor, stabilizátor és rögzítő rea-

gens) és az amperometriás elektród között található a biológiai minta egyéb oxidálható anyagainak zavaró hatásait kizáró permszelektív membrán. Az esetleges fehérjeadszorpciót ugyancsak védő membránréteg akadályozza meg.

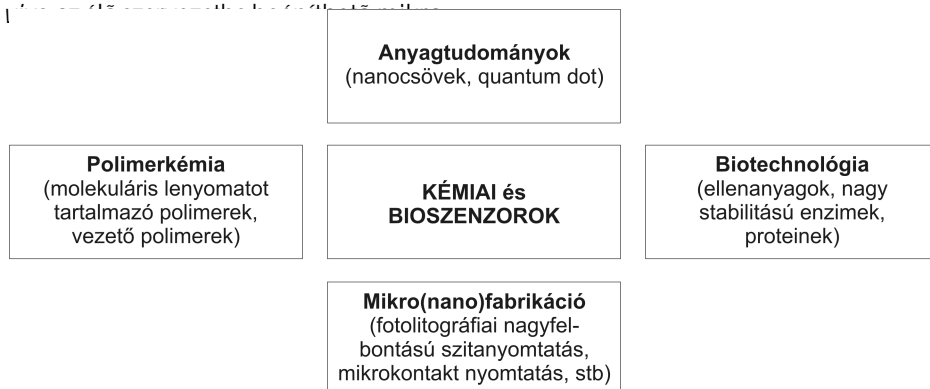
A kapcsolódó mérőműszer könnyű, zsebben hordozható, telepes polarizáló egység, amely közvetlenül kijelzi a vércukorszintet. A kutatások rendkívül biztatóak in



b



2. ábra • Planáris elektrokémiai glükóz szenzor; a) vázlatos kép; b) planáris szenzor szerkezet a rétegek feltüntetésével



3. ábra • Fejlesztési irányok

glükózszenzor, illetve glükózmonitor-rendszer kialakítása vonatkozásában is.

Kidolgoztak a különböző növényvédőszer-maradványok (szerves foszforsavészter származék típusú vegyületek) meghatározására is enzimaktivitás gátlásán alapuló szenzorokat. Ezek a szenzorok általában vegyületcsoport-specifikusak, és elsősorban a környezeti szennyező anyagok terepviszonyok közötti (*in field*) tesztelésére alkalmasak. Válaszuk igen/nem jellegű, és előnyösen használhatók a kritikus küszöbérték jelzésére. Semmiképpen nem helyettesítik a nagy szelektivitású, laboratóriumi elválasztási módszereket.

A bioszenzorok esetében számolni kell a biológiai eredetű felismerő anyagok korlátozott stabilitásával. Komoly erőfeszítések folynak új, hőstabil enzimek és géntechnológiával előállított fehérjék kialakítására és alkalmazására. Újabban a molekulalenyomatot tartalmazó polimerek, mint szenzor felismerő anyagok fejlesztése is a kutatások élvonalában van. Másfelől a miniatürizált analitikai kémiai rendszerek mikrokialakítása (mTAS) a biológiai szelektivitást felhasználó analízisek esetén vitathatatlanul előnyös az egyszerű szenzorkonstrukcióval szemben. Az utóbbi előnye a mikroméretű folyadék-

csatornák által biztosított mintakezelési (például elválasztási) lépés bevezetésében, valamint a szenzor - mintakomponens irreverzibilis kölcsönhatása esetén a szenzorfunkció kémiai vagy elektrokémiai úton történő regenerálási lehetőségében van. Példaként a DNS chipek említhetők. A DNS-kölcsönhatások nem adaptálhatók szenzor felismerési funkcióként, mivel szobahőmérsékleten a kölcsönhatás irreverzibilis. Ugyanakkor a DNS mikroanalitikai elemző rendszerek (mTAS) egyre inkább terjednek, és általában gyors analitikai információ-szolgáltatásra alkalmasak. Így azt lehet mondani, hogy szenzorok és analitikai rendszerek más és más előnyökkel és korlátokkal rendelkeznek, és sok esetben kiegészítik egymást. A biológiai patogének meghatározásának kiváló módja az automatikus bioanalízis (Scheller, et al., 2001).

Az enzimelektrodok fejlesztésében új fejezetet nyithat meg az ún. bio-galvánelemek fejlesztése. A bioelemek működésükhöz nem igényelnek külső elektromos energiát, hanem a biológiai közegben jelenlévő anyagokat használják fel üzemanyagként. Ilyen például a glükóz-elem, amelynek anódja glükóz oxidáz enzimmel módosított fémelektrod, míg katódjá ugyancsak fémelektrodhoz elektronikusan kapcsolt citokrómm c/

citokróm-oxidáz rendszer. Az energiát a glükóz biokatalizált oxidációja szolgáltatja. A glükóz-elem cellafeszültsége érzékeny a glükóz(üzemanyag)-koncentrációra 1-80 mM koncentráció-tartományban, így a mennyiségi mérés alapjául szolgálhat. Folyamatos üzemi működés mellett az első prototípus élettartama 5 óra volt (Katz, et al., 2001).

A kémiai és bioszenzorok fejlesztése sok irányban folyik (3. ábra). A fejlesztést kedvezően befolyásolja a fizikai tudományok területén érvényesülő, méretcsökkentésre irányuló trend. Egyre inkább előtérbe kerülnek a mikro- és nanoelektrod-kutatások, a mikrotechnológiai eljárások bevezetése a szenzorok készítésbe, elsősorban a biológiai vizsgálatok követelményeit szem előtt tartva. A szenzorok integrálása mikroanalitikai rendszerekbe logikus lépés, amely a szenzor-alapú analitikai technikák automatizálása irányában hat. Fontos irányzat új típusú felismerő anyagok (receptor molekulák) bevezetése a szupramolekuláris kémia, polimer-kémia és a biológiai kutatások eredményei alapján. Különös jelentőséget kap a molekulalenyomatot (a meghatározandó komponens lenyomatát, templáját) tartalmazó polimerek fejlesztése és vizsgálata. A fejlesztési irányzatok jól demonstrálják a különböző tudományterületek összefonódását a szenzorfejlesztésben, a szenzorkutatás interdiszciplináris jellegét.

Az érzékelők miniatürizálása, érzékelősorok előállítása (a mikroelektronikai technológiák hatása a szenzorkutatásra)

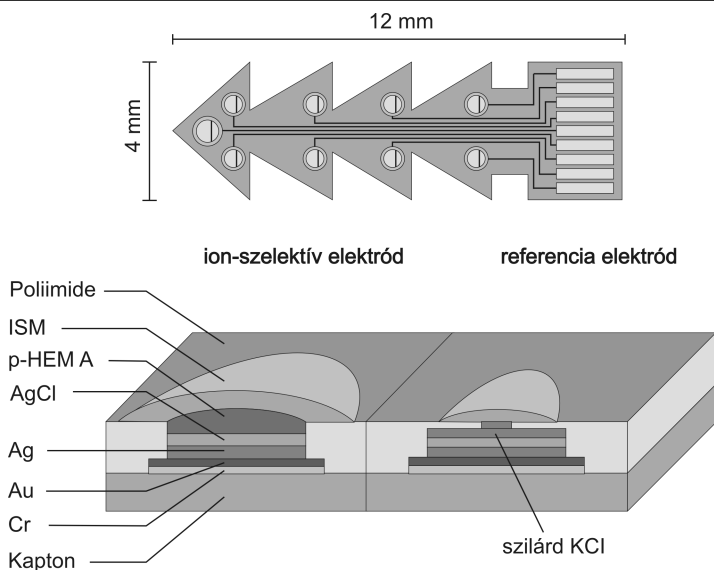
Az elmúlt 20 évben a kémiai szenzorsorok előállítása a jobb szelektivitás irányában folyó kutatások egyik alternatív megoldása volt, amely miniatürizált számítástechnikai egységgel kiegészítve érte el a kívánt célt. A kemometria módszereinek (alakfelismerés és neurális hálózatok) és a kémiai szenzorok

összekapcsolása elsősorban a különböző típusú gázérzékelők vonatkozásában hozott eredményeket. Sikerral fejlesztettek többek között oldószergőzők felismerésére és meghatározására alkalmas érzékelősorokat.

A mikroelektronikai technológia (a mikrofabrikáció) bevezetése a szenzorkutatásba a méretcsökkentés (miniatürizálás) irányába vitte el a szenzorfejlesztést, lehetőségeket teremtve a biológiai kutatások kiszélesítésére. Az első miniatürizált érzékelők szilikon-technológiai alapon készültek, és a 70-es években jelentek meg a kémiaiilag módosított térvezérlésű, tranzistor alapú szenzorok (CHEMFET-ek). Abban az időben a konvencionális elektronikai eszközök és a kémiai érzékelő tranzistorok mérete azonos volt.

Napjainkban a mikroszenzorok és szenzorsorok kialakítására leginkább a mikroelektronikai iparban használatos rétegtechnológiák (vékony- és vastagréteg technológia) terjedtek el. A vékonyrétegeket fotolitográfiával, míg a vastagrétegeket szitanyomással állítják elő. A vékonyréteg technológiával jól reprodukálható mintázatok készíthetők, de viszonylag költséges, ezért e technikát inkább a szenzorsorok előállítására, míg a vastagrétegeket egyszerű használatos érzékelők reprodukálható készítésére használják. Természetesen egyéb mikro-technológiai eljárások is népszerűségegre tesznek szert, mint a fotomaszkot nem igénylő kémiai pecsételési módszer (microcontact printing).

A félvezető iparban használatos mikro-technológiák bevezetése a szenzorfejlesztésbe megoldotta a mikro- és nanoszenzorok, szenzorsorok megbízható, költséghatékony előállítását. Az érzékelők méretének csökkenésével egyrészt új alkalmazási területek tárultak, illetve tárulnak fel, elsősorban a sejtbiológia és az orvostudomány területén. A sürgősségi betegellátásban használatos diagnosztikai eszközök, amelyek a vérgázok, elektrolitok és metabolitok (elsősorban



4. ábra • Nyolc ionszelektív és egy referenciaelektród kialakítására alkalmas felület (fent) és a planáris elektrodok szerkezete a rétegek feltüntetésével (lent)

glükóz) meghatározására szolgálnak, mikrofabrikációval készült planáris érzékelőkre épülnek. A mikrofabrikációval készült ionszelektív elektrodok a konvencionális *ionszelektív elektrodok* planáris változatai, melyeket nemcsak klinikai analizátorokban, hanem *in vivo* analitikai célokra is sikeresen használtak. Egy ilyen *in vivo* vizsgálatban sikeresen használt elektrodkonstrukció felépítését szemlélteti a 4. ábra.

A karácsonyfa alakú elektród egy referencia- és nyolc mérőelektród kialakítására alkalmas. Megoldható, hogy mindegyik mérőhelyen azonos ionféséség mérésére alkalmas érzékelőt alakítsunk ki, így az elektród sor alkalmas az ionféséség térbeli eloszlásának monitorálására. A másik lehetőség, hogy az egyes mérőhelyek más és más ionféséség mérésére szolgálnak. Az elektród-konstrukciót az Észak-Karolinai Egyetem kutatói kardiovaszkuláris vizsgálatok céljára fejlesztették ki. Sikeres keringési kísérleteket végeztek nyúl szív papillaris izmán, egyidejűleg mérték a pH és a káliumszint változását

normális és ischaemiának megfelelő körülmények között (Lindner and Buck, 2000).

A miniatürizálás jelentősen megnövelheti a meghatározás érzékenységét, amennyiben a mikroszenzor válasza a meghatározandó molekulák számától függ. Ez az eset áll fenn, amikor egy kis, állandó térfogatú minta (például egy elősejt tartalma) áll rendelkezésünkre, amelyben a meghatározandó komponens teljes mennyisége kölcsönhatásba lép a mikroszenzorral (például amperometriás szenzor). Tekintettel arra, hogy a mikroszenzor válasza az egységnyi felületen kölcsönhatásba lépő komponensek számával hozható összefüggésbe, egyértelmű, hogy a méretcsökkenés az érzékenység növekedésével jár együtt. Ezzel ellentétben a mikroszenzor használata nem jelent előnyt az érzékenység szempontjából, amikor az érzékenység a koncentrációtól függ. Jellemző példa, amikor egy gyakorlatilag végtelen térfogatban (felszíni víz) kis koncentrációban jelenlevő komponenset kell meghatározni (Hughes, et al., 1991). Nem véletlen,

hogy a mikroszenzorok első alkalmazásai között a biológiai minták analízise szerepelt.

A telekommunikációs célokra kifejlesztett optikai szálakat az 1970-es évek során alakították ki. A nagy törésmutatójú, átlátszó filmek nagyon jó optikai hullámvezetőknek bizonyultak. Szelektív kémiai vagy biológiai réteggel történő módosításukkal különböző optikai elven működő *optikai mikroszenzorokat* alakítottak ki. Sikerrel alkalmaztak a nitrogén-monoxid (NO) sejten belüli mérésére is optikai szál érzékenyítésével kialakított érzékelőt. A fluoreszcens festékekkel jelölt citokróm c-t kolloidális aranygömböcskék segítségével rögzítették az optikai szálra. A nitrogén-monoxid fehérjéhez való kötődése következtében regisztrált fluoreszcencia intenzitás-változást ugyancsak mikrogömböcskékre rögzített fluoreszcens referenciaanyag intenzitásához hasonlították, és a mért intenzitásarány szolgált a koncentráció-meghatározás alapjául. A szenzor alsó mérési határa 8 mM nitrogénoxid (Barker, et al., 1999).

A nanotechnológia hatása a szenzorkutatásra

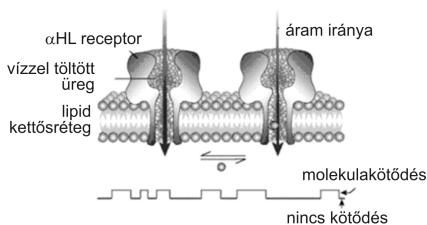
Az Egyesült Államok (National Nanotechnology Initiative) és az Európai Unió (6. Európai Keretprogram) nagyon fontos lépéseket tett a nanotechnológiai kutatási program kialakításában. Az említett kutatási területek finanszírozása az USA-ban elérte a 604 millió dollárt, amely 43 %-os növekedést jelent az előző évi költségvetéshez képest. Az Európai Unió 1,2 milliárd eurót szánt egy négyéves kutatási program kialakításához. Az alapkutatási és technológiai fejlesztések mellett jelentős szerepet kapott a nano-bioszenzorok és a *lab-on-chip* rendszerek kialakítása, különös tekintettel a DNS-analízisre. A bioszenzorokat és mikroanalitikai rendszerek fejlesztését gyakorlatilag minden ügynökség támogatja (NASA, NIH, NSF stb.) (AAAS Report XXVI, Washington, D.C., July 2001, pp. 225-233; updated on February 5, 2000.)

A nanotechnológiai eredmények alapján elindult szenzorkutatásnak köszönhető a *sztochasztikus érzékelők* megjelenése. A sztochasztikus érzékelők az egyedi receptormolekulák és a meghatározandó komponensek közötti kölcsönhatás detektálásán alapulnak. Annak ellenére, hogy ezeket az érzékelőket még nem alkalmazták összetett biológiai minták analízisére, rendkívül jellemző példák az ígéretes biotechnológia-bioszenzor területek közötti kapcsolatra (5. ábra). Ezek az érzékelők géntechnológiai módszerrel előállított α -haemolysin proteint tartalmaznak, amely a lipid kettősréteg membránban önrendeződéssel egy pórust képez. A meghatározandó komponenssel való kölcsönhatás során a pórus átmérője lecsökken, ami együtt jár a membránon keresztül átfolyt áramerősség csökkenésével. A csatorna blokkolása egy olyan sztochasztikus esemény, amelynek előfordulási frekvenciája a meghatározandó molekulák koncentrációjától függ (Bayley és Cremer, 2001).

A nanohuzal (nanodrót) térvezérlésű tranzisztorok (FET-ek) hasonlóan rendkívül érzékeny szenzorok, mivel méretük olyan kicsi, hogy egyetlen molekulával való kölcsönhatást is érzékenyen jeleznek. A Harvard Egyetem munkatársai szilícium alapú FET-eket használtak, és az oxidréteg konvencionális módosításával alakítottak ki nanoméretű kémiai és bioszenzorokat, többek között kalcium- és hidrogénionok mérésére. A mérőfelület avidinnel való módosításával a streptavidin mérését valósították meg 10 pM szinten (Cui, et al., 2001). Sikeres kísérletek folynak a nanocsövek szenzorkutatásban való alkalmazására is.

Kitekintés

A kémiai szenzorokkal kapcsolatban megjelent közlemények száma több mint 20 000, és az éves publikációs sebesség kb. 10 %-kal nő. Ez mindenképpen ígéretes jövőt jósol.



5. ábra • Sztochasztikus érzékelés géntechnológiával előállított porusokkal

Kísérletek folynak a különböző jelátviteli módszerekkel működő szenzorosok irányában történő fejlesztésre. A különböző detektálási módot alkalmazó szenzoros – a kapcsolt technikákhoz hasonló módon – megnöveli az analitikai információ tartalmát. Az ilyen típusú szenzorok bevezetése hasonló eredményekre vezethet, mint a kapcsolt technikák alkalmazása. Várható, hogy a különböző detektálási módokra alkalmas felismerőanyagot tartalmazó kémiai szenzor-együttesek nemsokára rendelkezésre fognak állni.

Új optikai jelátvitelők (optikai szál és hullámvezetők), új nem-lineáris optikai elemek, integrált optikai elemek alkalmazása az optikai szenzorok fejlesztésének új irányait nyitják meg. Fejlődés várható az új típusú kémiai és biokémiai anyagok bevezetésétől, valamint az optika és elektronika terén bekövetkező fejlődési eredményektől és az adatfeldolgozási módszerek komplexebb alkalmazásától.

A speciális alkalmazások, mint a „nanoanyagok” vizsgálata, a mikrofabrikációval előállított mikroanalitikai rendszerek detektálási problémái, sürgetik a nanoszenzorok és nanoszenzor-együttesek irányában folyó fejlesztéseket. A jövőben várható, hogy az ilyen típusú szenzorok lehetővé teszik a génexpresszió, a fehérjeszintézis és a sejten belüli metabolitok nyomon követését.

Kulcsszavak: kémiai szenzorok, bioszenzorok, ionszelektív elektródok, glükóz-szenzor, sztochasztikus érzékelők, nanoszenzorok, mikrofabrikáció, orvosi diagnosztika, környezetanalitika

IRODALOM

- Barker, S. L. R., Clark, H. A., Swallen, S. F., Kopelman, R., Tsang, A. W., Swanson, J.A. (1999). *Anal. Chem.* 71, 1767-1772.
- Bayley, H., Cremer, P. S. (2001). *Nature* 413, 226-230.
- Ceresa, A., Bakker, E., Hattendorf, B., Günther, D., Pretsch, E. (2001). *Anal. Chem.* 73, 342-351.
- Cui, Y., Wei, Q. Q., Park, H. K., Lieber, C. M. (2001). *Science* 293, 1289-1292.
- Heller, A. (1999). *Ann. Rev. Biomed. Eng.* 1, 153-75
- Hughes, R. C., Ricco, A. J., Butler, M. A., Martin, S. J. (1991). *Science* 254, 74-80.
- Katz, E., Bückmann, A. F., Willner I., (2001). *J. Am. Chem. Soc.* 123, 10752-10753.
- Lengyel B., Boksy Z., Csákvári B. (1966). *A szilikátüvegek elektromos tulajdonságai*, Akadémiai Kiadó, Budapest
- Lindner, E., Buck R. P. (2000). *Anal. Chem.* 72, 336A-345A
- Niiler, E. (2002). *Nature Biotechnology* 20, 21-25
- Pungor, E. (1967). *Anal. Chem.* 39, 28A-45A
- Scheller, F. W., Wollengber, U., Warsinke, A., Lisdat, F. (2001). *Current Opinion in Biotechnology* 12, 35-40.
- Sokalski, T., Ceresa, A., Zwickel, T., Pretsch, E. (1997). *J. Am. Chem. Soc.* 119, 11347-11348.
- Stefanac, Z., Simon, W. (1966). *Chimia* 20, 436.
- T. D. C. a. C. T. R. Group (1993). *N. Engl. J. Med.* 329, 977-986.
- Thevenot, D. R., Tóth, Durst, R. A., Wilson G. S. (1999). *Electrochemical Biosensors: Recommended Definition and Classification*, *Pure and Applied Chemistry* 71, 2333-2348.
- Wang, J. (2001). *Electroanalysis* 12, 983-988.

SZINKROTRONSUGÁRZÁS A KÉMIAI SZERKEZETKUTATÁSBAN

Vankó György

PhD, European Synchrotron Radiation Facility,
Grenoble, France – vanko@para.chem.elte.hu

Vértés Attila

az MTA rendes tagja, egyetemi tanár, ELTE,
Magkémiai Tanszék – vertesa@ludens.elte.hu

A szinkrotronsugár-források megjelenése nagymértékben kitolta a spektroszkópiai és diffrakciós kísérleti technikák korlátait. Magyarország néhány éve az egyik legkorszerűbb és legnívósabb szinkrotron, az ESRF (European Synchrotron Radiation Facility – Európai Szinkrotron Kutatóközpont) társult tagja, ezért a magyar kutatók számára is nyitott a lehetőség a röntgensugárzás élvonalbeli kísérleteknél való felhasználásához. Írásunk, mely a röntgensugárzás szerkezetkutatásban való hagyományos és újabb alkalmazásait veszi számba, ehhez kíván kedvcsinálónként szolgálni.

A röntgensugárzás és alkalmazásai

Röntgen 1895-ös felfedezését követően alig néhány hónap leforgása alatt számosan felismerték, hogy az újfajta sugárzással – nagy áthatolóképessége folytán – miként lehet láthatóvá tenni az emberi csontokat, illetve általában az eltérő (rendszerű) környezet által takart objektumokat. A XX. század első néhány évtizede a röntgensugárzással kapcsolatos további felfedezéseket hozott. A röntgensugárzás hullámhossza összemérhető a kémiai kötésben lévő atomok közötti távolsággal, ebből kiindulva Bragg és fia, valamint von Laue megmutatták, hogy kristályokon, azaz periodikus atomrácsokon a röntgensugárzás interferenciát mutat, így csak a rácsszerkezet által megszabott irányokban tapasztalható jelentős áthaladt, illetve

viSSZAVERT intenzitás. A röntgendiffrakciót megalapozó felfedezések mellett a röntgenspektroszkópiák irányába is megtörténtek az első lépések. Az idősebb de Broglie fivér, Maurice, 1913-ban kimérte az első röntgen-abszorpciós vonalat, 1920-ban pedig H. Fricke megfigyelte az abszorpciós él finomszerkezetét. Sagnac már 1898-ban felismerte és Moseley a Bohr-atommodell megjelenése után 1913-ban értelmezte, hogy az ionizációs hatásokat követően kibocsátott röntgensugárzás energiája jellemző az azt kibocsátó elemre (azaz „karakterisztikus”). A fotóeffektus megértése és az atompályák energiaviszonyainak megismerése után az is világossá vált, hogy a röntgensugárzás hatására bekövetkező ionizáció során kilépő elektronok kinetikus energiája az atomtörzs pályae energiáiról árulkozik.

A múlt században a röntgensugárzás használata széles körben elterjedt, fő alkalmazási területei a radiológia, a tomográfia, a diffrakció és a kisszögű röntgenszórás, a röntgenabszorpció és -emisszió, valamint a fotoelektron-spektroszkópia. Hogyan s miről szolgálnak ezek információval? Ez az eddig irtakból már jórészt kitetszik, ám néhány szóban igyekszünk jobban megvilágítani. A röntgensugárzás orvosi alkalmazása mindenki számára ismert, emellett az iparban és a kutatásban egyaránt használják képalkotásra, *tomográfiára*, különféle médiumok mikroszkopikus szerkezetének megállapításához. A

röntgen diffrakciókristályos anyagokban az elektronsűrűség periodikus változásait kezelni le, tehát képes az atomok relatív elrendeződésének, kapcsolódásának közvetlen meghatározására, így a szerkezetkutatás egyik legfontosabb módszere. A nem kristályos anyagok szerkezetéről is szerezhettünk információt *kisszögű röntgenszórás*sal. Utóbbi módszer a nanométertől csaknem a mikrométerig terjedő skálán érzékeny, így igen hasznos a polimer- és kolloidkémiai, anyagtudományi és biológiai kutatásokban.

Mivel az ionizáció után kibocsátott karakterisztikus röntgensugárzás (a röntgenfluoreszcencia) energiája jellemző a kibocsátó elemre, intenzitása pedig annak mennyiségére, a *röntgenfluoreszcencia* az elemanalízis gyakran használt módszerévé vált. Segítette elterjedését a kísérlet könnyű kivitelezhetősége: az ionizációt ugyanis könnyű megvalósítani (tetszőleges, az abszorpciós élnél nagyobb energiájú sugárzással), az egyes elemek vonalainak elkülönítése pedig a nukleáris technikáknál használt viszonylag egyszerű detektorokkal is lehetséges.

A *röntgenabszorpció* során az abszorpciós él közelében törzselektronokat gerjesztünk üres pályákra, e módszer neve XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure), és egyelektronos közelítésben azt mondhatjuk, hogy a be nem töltött elektronállapotok felderítésére alkalmas. Mivel utóbbiak függenek a koordinációs szféra viszonyaitól, így a XANES a komplexkémia közvetett módszereként is megállja helyét. Az abszorpciós él fölött, az ionizáció tartományában is tapasztalható intenzitás-oszcilláció. Ennek oka abban keresendő, hogy az abszorpció hatáskeletkezése függ a végállapot hullámfüggvényétől, amire viszont hatással van a távozó és a környező atomokról visszaverődő elektron(hullám) interferenciája. Ennek megértéséhez gondoljunk a pocsolyában lévő kövek közé hajított kavics által keltett

hullámok képére! A vízbe csobbanás helyétől kifelé haladó hullámok a kövekről visszaverődnek, sajátosságos, a kövek számára és távolságára jellemző mintázatokat hozva létre. Az elektronhullám hasonlóan verődik vissza az ionizált atom szomszédairól. Az energia változtatásával az interferenciakép is változik, ez tükröződik a spektrum energiáfüggésében. Ez az EXAFS-nak (Extended X-ray Absorption Fine Structure) nevezett módszer alkalmas tehát egy atom szomszédai számának és távolságának meghatározására nemkristályos anyagokban is, így kiváló eszköze a koordinációs kémiának és minden más, lokális környezetet tanulmányozó vizsgálatnak. Az abszorpciós spektrum (XANES, EXAFS) kiméréséhez azonban energiapásztázásra van szükség, ennek megfelelő intenzív forrást, mint rövidesen látni fogjuk, nem könnyű készíteni, így e módszereket viszonylag ritkán használták a kémiai szerkezetkutatásban.

A *röntgensugárzás forrása* az esetek túlnyomó többségében egy elektród, melyen a sugárzás becsapódó elektronok lefékezése során keletkezik. A sugárzás intenzitásának korlátot szab az elektronsugárzás anódot roncsoló hatása. Az igénybevételt jelentősen csökkenti az intenzív hűtés és az elektronok becsapódási helyének folyamatos változtatása (az anód forgatása), ami valamivel nagyobb elektronáram használatát teszi lehetővé, ám nagyságrendekkel nagyobb intenzitásnövekedés így sem érhető el. A kibocsátott sugárzás távolról sem optimális olyan alkalmazásokhoz, melyek a sugárzás energiájának változtatását, illetőleg pásztázását kívánják meg – ilyen például a teljes abszorpciós él kimérése, mely kb. 1000 eV energiatartományt fog át. A felhasználás szempontjából az is hátrányos, hogy a sugárzás a tér minden irányába terjed, így jelentős része – mivel nem a mintánk felé tart – nem hasznosítható. A kibocsátott sugárzás nem koherens, nem polarizált, intenzitása

időben állandónak tekinthető. A nyaláb átmérőjét optikai résekkel szabályozzák, számottevő fluxus azonban csak úgy érhető el, ha a rések viszonylag nagyra nyitottak.

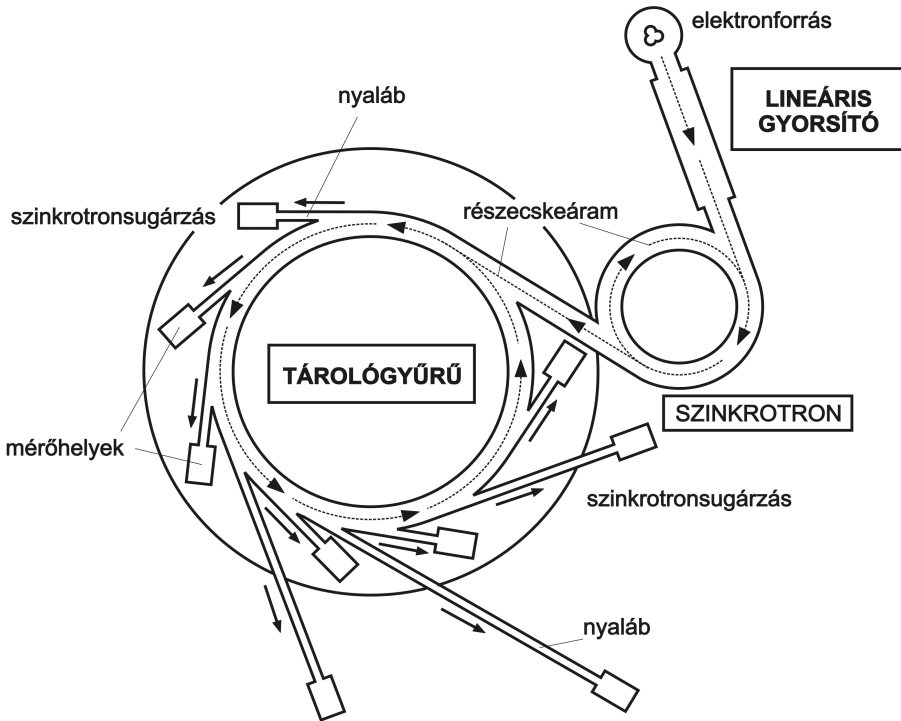
A fentiek alapján kijelenthető, hogy a röntgensöveken alapuló laboratóriumi készülékek, bár hasznuk és jövőbeli felhasználásuk igénye megkérdőjelezhetetlen, számos kihívásnak nem tudnak megfelelni, ezért messze nem teszik lehetővé a röntgensugárzással történő szerkezetkutatásban rejlő lehetőségek optimális kihasználását. A továbblépéshez elsősorban széles tartományban hangolható energiájú, nagyobb intenzitású kollimált nyaláb szükséges, emellett a pulzált időszerkezet, a koherencia, a polarizáció és a kis nyalábkeresztmetszet tovább bővítené a lehetséges alkalmazásokat. Mint rövidesen látni fogjuk, a szinkrotronsugárzás mindezen tulajdonságokkal rendelkezhet, így mindenképpen méltó a szerkezetkutatás iránt érdeklődők figyelmére.

Mi a szinkrotronsugárzás?

A szinkrotronoknak nevezett részecskegyorsítókban és a részecskék tárológyűrűiben a töltött részecskék körpályán tartása (tehát centripetális gyorsítása) melléktermékeként keletkező elektromágneses sugárzás spektruma a legtöbb spektroszkópiai és diffrakációs technika műveléséhez szükséges frekvenciát tartalmazza. A sugárzás tehát annyira „fehér”, hogy az infravöröstől a kemény röntgenig (MeV) minden hullámhossz megtalálható benne, jóllehet igen eltérő intenzitással. A berendezéseket üzemeltető részecskefizikusok számára a szinkrotronsugárzás nem kívánt energiavesztésgként jelentkezett, azonban számosan felismerték, milyen lehetőségek rejlenek az így kapott röntgensugárzásban. A szinkrotronsugárzást alkalmazni vágyók azonban számtalan technikai kihívással szembesültek (újszerű detektorok, monokromátorok tervezése és

építése), ráadásul a részecskefizikusok sem a „hulladéksugárzás” optimalizálásában voltak érdekeltek. Ennek következtében olyan berendezések épültek 1975 után, amelyeket már kizárólag szinkrotronsugárzás előállítására terveztek. Az elmúlt évtizedben pedig megépült több, ún. harmadik generációs szinkrotron, melyeknél a sugárzás különleges, speciálisan elrendezett mágnesekből álló mágneses egységeken (wiggler, undulátor) keletkezik. Az ezekről származó szinkrotronsugárzásnak számos, a korszerű szerkezetkutatási alkalmazásoknak kedvező tulajdonsága van, ilyenek a nagy (a röntgensöveket 13 nagyságrenddel meghaladó) intenzitás, a fókuszált sugárnyaláb kis átmérője (tipikusan néhány tized milliméterszer néhány milliméter) és teljesen polarizált volta, továbbá pulzált időszerkezete. Jelenleg három ilyen, kemény röntgensugárzásra optimalizált létesítmény üzemel a világon: a Grenoble-i ESRF, a japán SPring-8 és az amerikai APS.

Az 1. ábrán, mely egy tipikus harmadik generációs szinkrotron felépítését mutatja, végigkövethetjük a szinkrotronsugárzás keletkezéséhez vezető utat. Először is gyorsítandó részecskékre van szükségünk, ezért egy elektronágyúból, mely hasonló a televízióknak hátuljában zümmögő katódsugárcsőhöz, elektronokat juttatunk egy lineáris gyorsítóba. A lineáris gyorsító néhány százmillió elektronvolt mozgási energiára gyorsítja ezeket, sebességük ekkor a fénysebesség 99,99994 %-a. Ezután az elektronok a szinkrotronba kerülnek, ahol néhány tizedmásodperc alatt néhány százezerszer körbejárnak a több száz méter kerületű csőgyűrűben, miközben az alkalmazott rádiófrekvenciás tér kb. 7 milliárd elektronvoltra gyorsítja őket. Ekkor az elektron tömege már 14 000-szerese nyugalmi tömegének, tehát egy Li-atoménak felel meg, sebessége pedig a fénysebesség 99,999999997 %-a. Ezeket az elektronokat kis csomagokban juttatják a

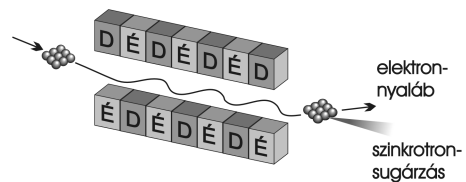


1. ábra • Egy tipikus harmadik generációs szinkrotron felépítése

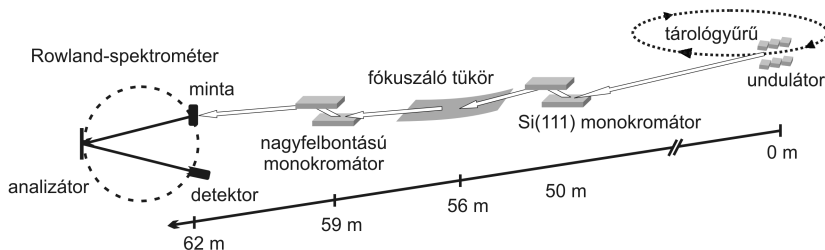
több száz méter átmérőjű tárológyűrűbe. A tárológyűrűben terelőmágnesek tartják körpályán az elektronokat, és energiavesztésüket rádiófrekvenciás térrel folyamatosan pótolják. Az ultranagy vákuum ellenére az elektronok fogynak, ezért a tárológyűrűt az előbbi módon naponta kb. kétszer újratöltik.

A tárológyűrűben számos speciális mágneses eszköz található szinkrotronsugárzás előállítására. Ezek azt használják ki, hogy a gyorsuló töltött részecskék elektromágneses sugárzás formájában energiát veszítenek. A gyorsítás esetünkben a mágneses téren áthaladáskor fellépő Lorentz-erő következtében jön létre. A mágnesek megfelelő elrendezésével befolyásolható a szinkrotronsugárzás energiaeloszlása, intenzitása és polarizációja. A 2. ábra egy ilyen kifinomultabb mágneses egység, az ún. undulátor felhasználásával illusztrálja a szinkrotronsugárzás keletkezését.

A relativisztikus elektronok óriási sebessége miatt a keletkező dipólussugárzás tangenciális irányú, igen kevésbé széttartó (azaz kis divergenciájú) nyalábként jelenik meg. E sugárnyalábot elvezetik, s megfelelő optikai elemekkel, tükrökkel, monokromátorokkal, résekkel alakítják energiáját és méreteit,



2. ábra • A szinkrotronsugárzás keletkezése. Nagy energiájú töltött részecskék fékezésakor (pl. mágneses téren való áthaladás során) energiát veszítenek, ami elektromágneses sugárzás formájában bocsájtódik ki



3. ábra • A szinkrotronsugárzás útjának sémája az ESRF ID16-os *beamline*-ja (mérőhelye) elektrongerjesztések tanulmányozására összeállított formájában

majd a kísérletek színhelyére, a mérőhelyekre vezetik. A 3. ábrán láthatjuk az ESRF ID16-os, inelasztikus röntgenszórásnak szentelt mérőhelye sematikus rajzát, elektrongerjesztések tanulmányozására összeszerelt módban.

Mi teszi az energiapásztázást könnyűvé? A „fehér” szinkrotronsugárzásból monokromátorral nyerhető ki a kísérlethez szükséges energiájú sugárzás. A monokromátor két közel tökéletes szilíciumkristályból áll, melyek felülete általában az (111) kristálysíkokkal párhuzamos. A kristályokat héliummal vagy cseppfolyós nitrogénnel intenzíven hűtik, mivel a sugárzás több száz wattnyi teljesítménye komoly hőterhelésként jelentkezik az első kristályon. A kiválasztott energiájú (avagy hullámhosszú) sugárzás a Bragg-törvény felhasználásával kapható: az ismert rácsállandójú kristályokra a sugárzás olyan szögben kell eszen, hogy a kívánt hullámhosszra teljesüljön az (111)-diffrakció feltétele. Adott energiatartomány végigpásztázása a kristályok szögének megfelelő határok között való változtatásával történik.

A szinkrotronsugárzást felhasználó szerkezetvizsgáló módszerek

A szinkrotronsugárzás használata – a nagyobb intenzitás, a kisebb fókusz és az energia hangolhatósága folytán – a laboratóriumban is hozzáférhető módszereket lényegesen hatékonyabbá teszi, s kitolja e módszerek alkalmazhatóságát a korábbinál kisebb és a

sugárzással gyengébben kölcsönható minták vizsgálata felé. Az említett tulajdonságokból adódó nyilvánvaló előnyök ismertetésétől eltekintünk, s elsősorban a szinkrotronoknál létrejött fotonok szórásán, illetve elnyelésén és kibocsátásán alapuló új technikákra összpontosítunk a következőkben. Terjedelmi okok arra készítetnek, hogy mindezt a teljesség igénye nélkül tegyük.

A *diffrakció* és a képkalkotás területét illetően számos említésvonalunk akad. A nagy intenzitás következtében lerövidült mérési idő stabil fázisok vizsgálata mellett lehetővé teszi az átalakulások követését, így például röntgendiffrakcióval monitorozták többek között az $S_4N_4 \rightarrow (SN)_x$ polimerizációs reakciót és a cement vízfelvételeit. A pulzált időszerkezetnek köszönhetően „lefényképezhetjük” kémiai átalakulások lépéseit. Mint azt a 4. ábrán láthatjuk, a hemoglobinnal szén-monoxiddal (CO) alkotott komplexének lézerimpulzust követően bekövetkezett diszociációjánál a szinkrotronsugárzás egy-egy „felvillanásával” sikerült képeket készíteni a CO távozásának fázisairól, megalapozván ezzel a molekuláris biológiai mozi műfajára aspiráló reményeket.

Szintén a nagy intenzitásnak és a kollimált nyalábnak köszönhető egy felületvizsgálati technika, a *súroló beeséses diffrakció*. A felülettel csaknem párhuzamosan (súroló beesésben) haladó röntgensugárzás csak egészen kis mélységig (nanométer) hatol be az anyagba. A beesés szögét változtatva a beha-



4. ábra • Első lépések a molekuláris biológiai mozi felé – a szénmonoxid (CO) mioglobinnal alkotott komplexének bomlása. Ultrarövid lézerpulzus hatására a komplex elbomlik, és a CO molekula leválik a mioglobinnal. E folyamat lépéseit követhetjük a szinkrotronsugárzás egy-egy „felvillanásával” készült kristallográfiai felvételeken. Egy felvétel időtartama 150 ps (1 ps = 1/1 000 000 000 000 s), ez kb. tizedrésze a reakcióidőnek

tolási mélység is változik. Ha ilyen beeső nyalábbal végzünk röntgendiffrakciós kísérletet, a különböző rögzített beesési szögek-nél felvett diffraktogramok összehasonlításával mélységszelektív szerkezeti elemzést kaphatunk.

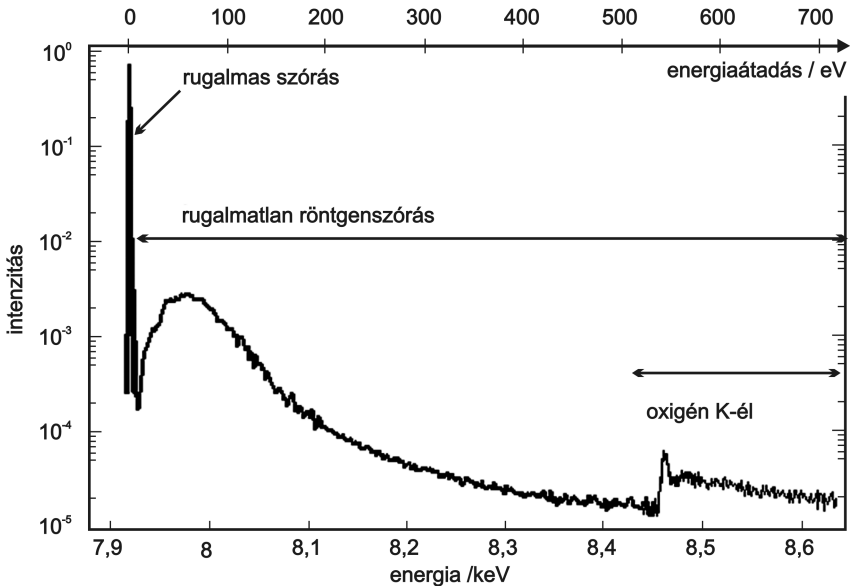
Említést érdemel egy, a diffrakciót kiegészítő technika, jelesül a magyar kutatók (Tegze Miklós és Faigel Gyula, az MTA SZFKI munkatársai) által kifejlesztett atomi felbontású *röntgenholográfia*, mely szintén közvetlenül deríti fel az atomok relatív elhelyezkedését, azonban ehhez – a diffrakcióval szemben – a sugárzás fázisát is felhasználja.

A képalkotás lehetőségei tovább gyarapodtak a *mikronyaláb-analízis*ekkel: a minta különféle összetevőinek eloszlását ugyanis feltérképezhetjük, ha a mintán valamely spektroszkópiái vagy szórásos technikát alkalmazunk, s a mintát pontról pontra vizsgáljuk a kb. mikrométer átmérőjű nyalábbal. Mágneses anyagok doménszerkezetét felderíthetjük a *mágneses cirkuláris dikroizmus* (XMCD – X-ray Magnetic Circular Dichroism) segítségével. Ehhez cirkulárisan

polarizált röntgensugárzásra van szükség. A „jobb- és balkezes” fotonok abszorpciója ugyanis függ a mágneses tér irányától, a dikroizmust a két abszorpciós együttható különbségékként definiálják.

A sugárzás koherenciájában rejlő lehetőségeket aknázza ki a *fáziskontraszt-tomográfia*, mely a hagyományos abszorpciós tomográfiánál sokkal jobb kontrasztot biztosít kevésbé abszorbeáló anyagok (például könnyű elemek vegyületei), illetve hasonló abszorpciós együtthatójú, de különböző törésmutatójú fázisok határainak kirajzolásánál. A módszer, mely a fentiek alapján kifejezetten alkalmas szövetek vizsgálatára, azon alapszik, hogy a törésmutató mintabéli változása a hullámfrontot torzíttja. A törésmutató-változás helyén szórt hullám és az eredeti hullám interferenciájából a fázishatárok képe áll össze a pozícióérzékeny detektoron.

Az elektronszerkezet alap- és gerjesztett állapotának vizsgálata az egyik legizgalmasabb területe a kémiának és a fizikának. A bevezetésben láttuk, hogy a röntgenspektroszkópiák ehhez a betöltött (röntgenfluoreszcencia) és betöltetlen elektronállapotok (XANES) felderítésével járulnak hozzá. A könnyű energiapástázás nyomán a röntgenabszorpciós spektroszkópiák, tehát a XANES és a lokális szerkezet tanulmányozására alkalmas EXAFS rutinmódszerré váltak, továbbá az abszorpció és az emisszió kombinálásával új módszerek jöttek létre, emellett a *rugalmatlan röntgenszórás* (IXS – Inelastic X-ray Scattering) is reneszánszát éli. Utóbbi módszerrel a szórás során a röntgensugárzás a mintában különböző gerjesztéseket kelthet, melyek segítségével az elektronszerkezet átmenetei mellett a rácsrezgések spektrumát is vizsgálhatjuk. A kísérlet során az adott szögben szórt röntgenfotonok energiáját alkalmas szilíciumkristállyal analizáljuk, így kézben tartjuk mind az energiaátadást, mind a szórásos szög által meghatározott impulzusátadást. A módszer alkalmas kollektív



5. ábra • A víz rugalmatlan röntgenszórási spektruma. Az energiaátadás-skála a mért és a rugalmas szórás energiájának különbsége. 8,45 keV-os fotonenergia (kb. 535 eV energiaátadás) fölött rajzolódik ki az oxigén K (1s) abszorpciós éle. Utóbbi jellemző a víz szerkezetére, hidrogénkötéseinek viszonyaira.

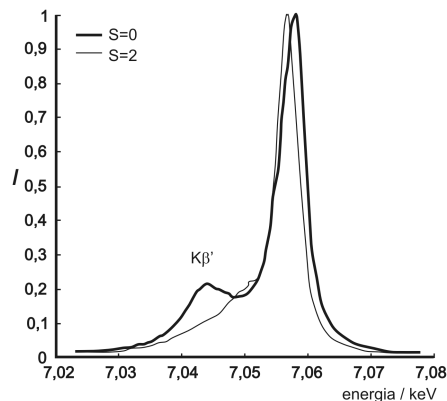
gerjesztések, így rácsrezgések és plazmaoszcillációk, továbbá excitonok, Compton-szórás, illetve könnyű elemek törzselektrongerjesztéseinek Raman-szórással történő kimérésére. Az 5. ábrán látható a víz rugalmatlan röntgenszórási spektruma. A kísérlet során az analizált energiát rögzítettük kb. 8 keV-on, míg a beeső sugárzás energiáját növelve mértük ki az energiaátadás hatáskezsztmetszetét. A rugalmas szórás spektrumvonalát a Compton-szórás széles sávja követi, majd ezután következik az oxigén K-abszorpciós éle, mely tulajdonképpen az O 1s elektronjának gerjesztési és ionizációs spektruma. Ennek közvetlen, röntgenabszorpcióval történő méréséhez 540 eV energiájú lágyröntgensugárzásra lenne szükség, melynek áthatolóképesége kicsi, továbbá a felület hatására igen érzékeny. Ilyen röntgensugárzás alkalmazásához a mintának és környezetének vákuum-kompatibilisnek

kell lennie, ami kizárja extrém körülmények (nyomás, hőmérséklet) alkalmazását. Mind-ezen kötöttségektől mentesülünk azonban rugalmatlan röntgenszórás alkalmazásával: a megfelelő energiáttranszfer tartományban az abszorpciós spektrum kemény röntgensugárzással is kimérhető. Az ilyen sugárzás könnyen áthatol a diffrakciós célokra készített nagy nyomású cellák vagy kriosztátok, illetve kemencék ablakain, és nem a minta felületéről, hanem belsejéről szolgál információval.

A fluoreszcencia-spektrumnak van ugyan finomszerkezete, ennek tanulmányozásához azonban nagyfelbontású (≈ 1 eV) spektrométerre lenne szükség. A rugalmatlan röntgenszóráshoz használt spektrométer éppen megfelel a célra, így használhatjuk nagyfelbontású röntgenemissziós spektroszkópiai vizsgálatokhoz. E módszer, melynek egyik legfontosabb alkalmazása az atomi mágneses momentum vizsgálata, kiegészít

szítője a hosszú távú mágneses rendeződést feltárni képes technikáknak. A $K\beta$ spektrum az $1s$ ionizáció utáni $3p \rightarrow 1s$ átmenet nyomán keletkezik. A $3p$ pályán lévő lyuk (illetve párosítatlan elektron) mágneses momentumának a $3d$ pályán levő párosítatlan elektronok mágneses momentumához (mely az átmenetifémek első sorában megegyezik az alapállapotú atom mágneses momentumával) való relatív beállása különböző lehet. A $3p$ és a $3d$ pályák átfedése jelentős, ezért a kicserélődési kölcsönhatás nagymértékben befolyásolja a spektrum finomszerkezetét. A fő spektrumvonalnál mintegy $15\text{--}20\text{ eV}$ kisebb energiánál megjelenő, gyakran $K\beta'$ szatellitnek nevezett vonal intenzitása arányos az atomi mágneses momentum mértékével. A 6. ábra ennek egy alkalmazását mutatja be egy közepes ligandumtérférségű vaskomplex, a $[\text{Fe}(\text{o-fenantrolin})_2(\text{NCS})_2]$ példáján, ami a hőmérséklet emelésével átbillenthető kis spinszámú ($S=0$) nagy spinszámúba ($S=2$).

Az abszorpciós és emissziós spektroszkópia kombinálásával a rezonáns rugalmatlan röntgenszórást, avagy a *rezonáns röntgenemissziós spektroszkópiát* kapjuk. E módszerrel lehetőségünk van mind a köztes, mind a végállapot tanulmányozására, mely alkalmassá teszi például vegyérték-, spin- és töltéstranszfer-állapotoknak és változásainak vizsgálatára. További igen fontos következmény, hogy a rezonancia következtében az abszorpciós spektrumokat nagyobb felbontással is megkaphatjuk. A *nagyfelbontású röntgenabszorpciós spektroszkópiánál* az analízátorral kiválasztjuk az emissziós spektrum egy vonalát, és az abszorpciós él felvételénél csak az ebből az emissziós (fluoreszcencia) csatornából érkező fotonokat használjuk. A módszer másik neve, a részleges fluoreszcencia-hozam (PFY – Partial Fluorescence Yield) detektált röntgenabszorpció, mely egy gyakran használt (és sokkal egyszerűbben kivitelezhető) másik mérési



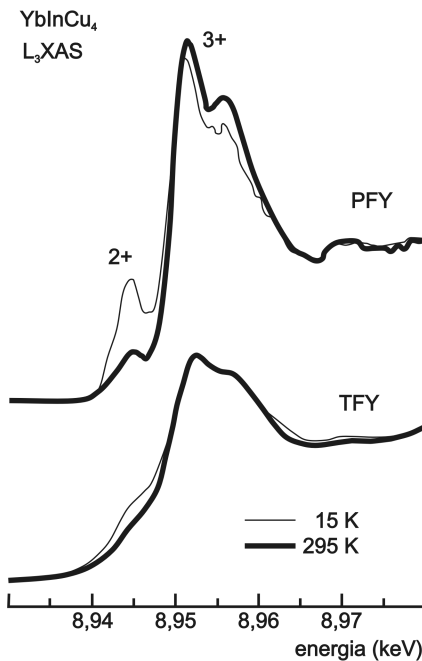
6. ábra • A $T=176\text{ K}$ hőmérsékleten spinátmenetet mutató $[\text{Fe}(\text{o-fenantrolin})_2(\text{NCS})_2]$ komplex kis spinszámú ($S=0$) és nagy spinszámú ($S=2$) állapotában felvett röntgenemissziós spektrumok jól érzékeltetik az emissziós spektrumvonalak helyi mágneses momentumra való érzékenységet. A kapcsolódó további eredmények reményeink szerint új módszerrel gazdagítják a molekuláris mágnességet tanulmányozók eszköztárát.

móddal, a teljes fluoreszcencia-hozamot használó detektálással (TFY – Total Fluorescence Yield) való szembeállításból származik. A 7. ábra PFY és TFY XANES spektrumok összevetésével mutatja meg előbbi előnyeit. A nagyfelbontású abszorpciós és emissziós spektroszkópiákról de Groot ad alapos áttekintést (de Groot, 2001).

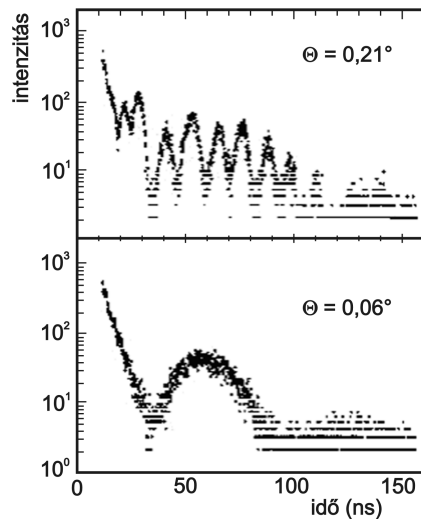
A röntgennyaláb hangolható energiája és nagy intenzitása folytán lehetővé vált korábban csak radioaktív források γ -sugárzásával gerjeszhető magrezonanciák tanulmányozása is (Gerdau és de Waard, 1999). A *magrezonanciaszórás*-kísérletek során a mintában lévő rezonáns atommagokat szinkrotronsugárzással gerjesztjük, és ezek időbeli bomlását figyeljük meg. Az atommag környezetének hatását a spektrumokban időbeli oszcillációkként észleljük. A spektrumok a Mössbauer-spektroszkópia időbeli Fourier-

transzformáltjainak tekinthetők, ezért – a hiperfinom kölcsönhatás következtében – ezek is tükrözik az atommag körüli elektronsűrűség szimmetriáját, közvetve a vegyértékállapotot, valamint az anyagban lévő mágneses teret. Várható, hogy a közeljövőben elérhetővé válik olyan magok vizsgálata is, melyek vizsgálatára a hagyományos Mössbauer-spektroszkópia alkalmas sugárforrás híján nem ad módot. Az ebből kifejlődött egyik jelentős technika a szinkrotron-Mössbauer-reflektometria, melynek alkalmazásá-

ban élen járnak az MTA Részecske- és Magfizikai Kutatóintézetének munkatársai. A módszernél, mely kitűnő felületek és mágneses (multi)rétegek vizsgálatára, a súroló beesési diffrakciónál ismertettekhez hasonlóan a beesés szögével változtatják a behatolási mélységet. A 8. ábrán látható egy 20 nm-es vastag eloxidált vasfólia spektruma két különböző beesési szögnél, melyen a felületről és a minta belsejéről származó spektrumok igen látványosan tükrözik a kémiai minőségkülönbséget.



7. ábra • Az YbInCu_4 vegyület részleges (PFY) és teljes (TFY) fluoreszcencia-detektálással az L_3 ($2p_{3/2}$) abszorpciós élén felvett XANES-spektrumainak összehasonlítása. Megfigyelhető, hogy a spektrum jellegzetességei az első esetben jobban elkülönülnek egymástól. A nagyobb felbontás következtében a hőmérsékletváltozásra bekövetkező vegyértékváltozás is jobban követhető.



8. ábra • Üvegfelületre felvitt 20 nm vastag oxidált vasréteg vizsgálata szinkrotron-Mössbauer-reflektometriával (SMR). A sugárzás $0,06^\circ$ -os beesési szögnél kb. 2 nm mélyen hatol be az anyagba, így csak a minta tetején lévő 30 atomnyi rétegről hoz információt. Az ábra alján látható az ilyen körülmények között felvett spektrum, mely paramágneses fázis – valószínűleg FeO(OH) – jelenlétét tükrözi. A $0,21^\circ$ -os beesési szögnél a behatolási mélység kb. 20 nm, az ennek megfelelő (felső) spektrum az anyag belsejében lévő mágneses fázisra jellemző, melynek kémiai összetétele valószínűleg magnetit (Fe_3O_4).

Szemben a Mössbauer-spektroszkópiával, a rezonáns fotonok rugalmatlan szóródásának részkérdéseit is vizsgálhatjuk a szinkrotronsugárzás energiája hangolhatóságának és nagy intenzitásának következtében. A rugalmatlanság azt jelenti, hogy a mag gerjesztésével párhuzamosan valamely más kölcsönhatás is fellép, ami általában a rácsrezgések gerjesztése. A *rugalmatlan magrezonanciaszórás* (NIS – Nuclear Inelastic Scattering) tehát a mag rezonáns gerjesztése során kelthető rezgések állapotsűrűségét tanulmányozza, és (némi jóindulattal) a rugalmatlan röntgenszórás olyan igen speciális esetének tekinthető, ahol az analízátor szerepét a keskeny energiaszélességű magátmenet tölti be, az impulzusátadásról pedig elveszítjük az információt. A módszer jól kiegészíti a hagyományos rezgési spektroszkópiákat és a rugalmatlan röntgenszórást, ugyanis csak olyan rezgési módokra érzékeny, melyekben a rezonáns (ti. Mössbauer-aktív) atom rész vesz. Alkalmazásába a hazai kutatók közül eddig az ELTE Magkémiai Tanszéke és az MTA RMKI munkatársai kapcsolódtak be. A *9. ábrán* egy vízben oldott vaskomplex NIS spektrumát látjuk, melyen elsőként figyeltük meg e módszerrel oldott molekulák rezgéseit.

További, kémikusok számára érdekes módszerek is fejlődnek, illetve születnek a szinkrotronoknál: gondoljunk csak a fotoelektron-spektroszkópiára. Ezek áttekintésére azonban e helyen már nincs módunk. Ehelyett inkább arra térünk ki, hogyan is lehet a fenti módszerek valamelyikét alkalmazó kísérleti lehetőséghez hozzáférni.

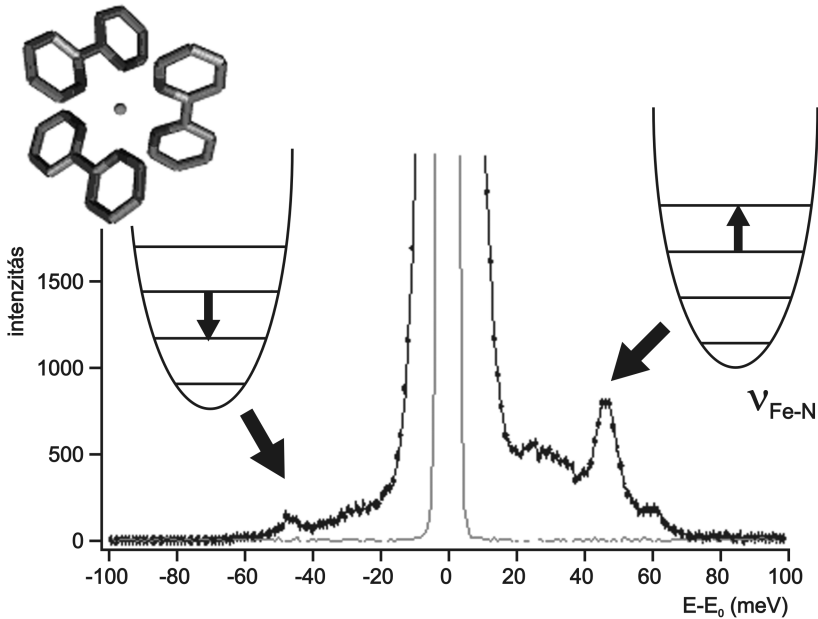
Munka a szinkrotronoknál

A mérőhelyek egy-egy tudományterületre vagy módszerre specializálódtak. Mindazonáltal a kísérleti elrendezések általában igen flexibilisek, gyakran hétről hétre számos lényeges elemet teljesen át kell szerelni a felhasználók igényei szerint. A kísérletek folya-

matosak a nap 24 órájában, a heti egy karbantartónapot és az évenkénti néhány hosszabb leállást kivéve. Az egyes mérőhelyek személyzete az ESRF-nél tipikusan két kutatóból, két posztdoktorális kutatóból, egy technikusból és esetleg néhány doktoranduszból áll. Közvetlen munkájukat segíti még néhány, más csoporttal is megosztott személy, így a kísérletekhez használt programokat karbantartó és fejlesztő számítástechnikus, a berendezések üzemelését biztosító mérnök, valamint egy tervezőmérnök. Utóbbira azért is szükség van, mert a mérőhelyek fejlesztése folyamatos, évről évre jelentős átalakítások lehetnek a versenyképesség megőrzése érdekében. A közhiedelemmel ellentétben a mérőhelyeket az idő java részében nem a személyzet használja, ők csak asszisztálnak a használatához. Az évi 65 millió Euro működési költség fejében ugyanis az ESRF-et fenntartó tagállamok elvárják, hogy elsősorban kutatóik használhassák ki a létesítmény előnyeit. A kísérletekre alkalmas időt így szinte teljes egészében felosztják az évente kétszer meghirdetett pályázatok nyertesei között, s a személyzetnek is hasonlóképpen meg kell mértenni ötleteit a megvalósításhoz. A nyertes pályázatoknál 3 tagországbéli kutató utazási, szállás- és étkezési költségét fedezik. Ezek a feltételek vonatkoznak a hazai kutatókra is, lévén Magyarország társult tag. Nem csak tagországokból lehet pályázni, ám sikeres pályázat esetén ilyenkor a pályázóknak maguknak kell előteremteniük az említett költségek fedezetét.

Kitekintés

Bár a harmadik generációs szinkrotronok technikailag már meglehetősen érettnek tekinthetők, a fejlesztés szüntelenül folyik, melynek legfőbb célja a kedvező tulajdonságaik kihasználásának további optimalizálása. Így a tárológyűrű fejlesztésénél várható az elektronok számának (az áramnak) növelése és gyakori utántöltése az intenzitás



9. ábra • A $[Fe(2,2'\text{-dipiridil})_3]Cl_2$ komplex vizes oldatának NIS spektruma. A spektrum fő jellegzetessége a ± 50 meV relatív energiánál látható, molekularezgéstől származó két csúcs. Ezek a molekula Fe–N nyújtási rezgése kvantumállapotának gerjesztését (+50 meV), illetve legerjesztését (–50 meV) tükrözik.

növelése és időbeli csökkenésének szinte észrevétlenné tétele céljából. A mágneses egységek szupravezető mágnesekre történő cseréje és vákuumba helyezése szintén növelné az elérhető intenzitást. Becslések szerint intenzitásban még mintegy két nagyságrend nyerhető. Az optikai elemek is továbbfejleszthetők, így nagyfelbontású monokromátorok és mikrométer alatti fókuszszolgáltató egységek megjelenése prognosztizálható. E források a laboratóriumi berendezésekhez hasonlóan szinte biztosan használatban maradnak a negyedik generációs szinkrotronsugár-források megjelenése után is, mivel számos vizsgálathoz továbbra is ezek lesznek a legmegfelelőbbek.

A negyedik generációs, szabadelektron-lézereket alkalmazó berendezések tervezése már folyik, s talán egy évtizeden belül

üzembe is állhatnak. Ezek lineáris gyorsítón és undulátorokon alapulnak, sugárzásuk hangolható és teljesen koherens, intenzitásuk sok nagyságrenddel haladja meg a most elérhetőket, időfelbontásuk pedig pikoszekundum alatti, így a kémiai átalakulások követésére igen alkalmasnak tűnnek.

A szinkrotronsugárzás alkalmazásairól további információk találhatóak a létesítmények weblapjain, ezek listája elérhető például az ESRF (<http://www.esrf.fr>) oldalain. Nemrégiben számos folyóiratnak szinkrotrons külső száma készült (Burkel 2001, Coppens és Penner-Hahn, 2001; Vértes és Vankó, 2003), amiket érdemes az érdeklődőknek fellapozni. A Magyar Tudományos Akadémia Magyar Szinkrotron Bizottságától a pályázatokkal kapcsolatos információkat remélhet az olvasó.

Kulcsszavak: szinkrotronsugárzás, röntgen-
abszorpció, diffrakció, röntgenholográfia,

fáziskontraszt-tomográfia, rugalmatlan
röntgenszórás, magrezonanciaszórás

IRODALOM

Burkel, E. (ed.) (2001). Special issue on synchrotron studies of new materials: Euroschool 2000. *Journal of Physics: Condensed Matter* **13**, No. 34 (27 August 2001), pp. 7473- 7922.

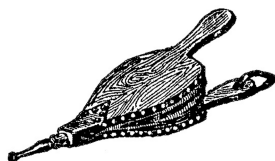
Coppens, P., Penner-Hahn, J. (eds.) (2001). *X-rays in chemistry*. Chemical Reviews **101**, No. 6

de Groot, F. M. F. (2001). *High Resolution X-Ray*

Emission and Absorption Spectroscopy. Chemical Reviews **101**, 1779–1808.

Gerdau, E., de Waard, H. (eds.) (1999). *Nuclear resonant scattering of synchrotron radiation. Hyperfine Interactions* **123–124**.

Vértes A., Vankó Gy. (eds.) (2003). *Synchrotron radiation in structural chemistry*. Structural Chemistry **14**, No. 1



A KÉMIA ÉS A TÁRSADALOM

Beck Mihály

az MTA r. tagja, egyetemi tanár, Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszék,
MTA Kémiai Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Kutatólaboratórium – beckmt@chemres.hu

Bevezetés

Hosszú ideig csaknem teljesen általános és egyértelmű volt a természettudományok hasznosságának társadalmi megítélése. A természettudományok mintegy másfél évszázada kezdődött fellendülésének nyomában jelentkeztek a mindennapi életre gyakorolt hatásai. A technikai fejlődés csak ritkán váltott ki elítélő, vagy félelmet kifejező érzelmeket. Érdemes emlékeznünk a 19. század eleji géprombolók, a ludditák mozgalmára, akik a technikai fejlődés miatt a munkalehetőségek lényeges csökkenésétől tartottak. Noha a természettudományok és ezzel együtt a gyakorlatban is felhasználható eredmények kifejlesztése az utóbbi évtizedekben rendkívüli mértékben felgyorsult, és e fejlődés eredményei a modern, sőt a fejlődő társadalmakban is a mindennapi élet meghatározó elemeivé váltak, egyre inkább találkozzunk tudományellenes vélekedésekkel, sőt mozgalmakkal. A tudományellenes nézetek immár politikai erővé váltak. A tudományellenes támadások, melyek sajnos csaknem általános, de mindenképpen széleskörű társadalmi jelenséggé váltak, az alapvető természettudományok mindegyikére, a biológiára, a kémiára és a fizikára is kiterjednek, de különösen élesen fogalmazódnak meg a kémiát illetően. Az utóbbi években a kémiai anyag megjelölés szitokszóvá vált, ami persze csak használóik tájékozatlanságát mutatja. Már két évtizeddel ezelőtt javasolták (MacKinnon, 1981) a *kemofóbia* megnevezést azokra a szinte patológiás jellegű véleke-

désekre, melyek a kémia eredményeinek gyakorlati alkalmazásaival kapcsolatosak. A teljességre való törekvés nélkül sorolunk fel jellegzetes kemofóbiás megállapításokat:

- A kémia a felelős a rák és más betegségek elterjedéséért. A kémiai anyagok többségükben betegségeket okoznak, a legveszélyesebbek a karcinogén, a rákkeltő anyagok.

- A kémia a felelős a kábítószeres elterjedéséért. Egy, az USA-ban 1983-ban a drog- és alkoholelles mozgalom által kiadott könyv címe *The Chemical People Book* (Kaiser, 1983).

- A műtrágyázás és a növényvédő szerek alkalmazása következtében a táplálékkal sok veszélyes, betegségeket okozó anyag kerül a szervezetbe.

- A kémiai anyagok légszennyezés útján az ózonréteg elvékonyodásához, és ennek folytán különböző károsodások, mint például a bőrrák, elterjedéséhez vezet.

Úgy véljük, a tudományellenes nézeteknek, a tudománytól való félelmeknek általában, s a kémiát illetően különösen, a tájékozatlanság, a felületes általánosítás az alapjuk. A következőkben ezt az állítást kívánjuk bizonyítani, és javaslatot tenni e szerencsétlen helyzet megváltoztatására; utóbbira természetesen annak tudatában, hogy ez csak hosszabb idő után következhet be.

A kémia központi tudomány

A természettudományokban általában hierarchikus kapcsolatokat szokás elképzelni,

melyek természetesen nem a tudományterületek fontosságára, hanem egzaktságuk szintjére vonatkoznak: fizika, kémia, biológia. (Ez a megállapítás sem teljesen igaz, hiszen a kémiának, sőt a biológiának is vannak olyan ágazatai, melyek egzaktságukban vetekednek a fizikáéval, sőt, felül is múlják a fizika egyes ágainak egzaktságát.) A kémia azonban nem csupán közbülső, hanem központi helyet foglal el a természettudományok között (Kaufmann, Szmant, 1984, Pimentel, Coonrod, 1987, Breslow, 1987). Minden anyag, amellyel a kémia, biológia és a fizika foglalkozik, atomokból és molekulákból álló kémiai anyag. (E megállapítás alól csak a nagyenergiájú gyorsítóknak vizsgált különleges részecskék jelentenek kivételt.) Sajnos az utóbbi években a *kémiai anyag* megjelölés szitokszóvá vált, ami persze csak használoik tájékozatlanságát mutatja. A kémia az atomok és molekulák egymással való kapcsolódásának, reakcióinak mennyiségi törvényeit, a reakciók időbeli lefolyásának mechanizmusát és matematikailag egyenletekkel való leírását, a reakciók során előálló egyensúlyi állapotok törvényszerűségeit vizsgálja. Fontos feladata az ismert vegyületek szerkezetének meghatározása és új vegyületek előállítására. Az új, laboratóriumban előállított vegyületek száma az idővel exponenciálisan növekszik. Néhány évtizeddel ezelőtt még az egymilliót sem érte el az ismert vegyületek száma, ma több mint tízmillió vegyületet ismerünk, és az ún. kombinatorikus szintézis segítségével ezerszámra és gyorsan állíthatók elő új vegyületek. A fizika és a kémia is kémiai anyagokkal, illetve több kémiai anyag bonyolult rendszerével foglalkozik. Az atomok és molekulák szerkezetének tanulmányozásával kapcsolatban nincs is értelme a fizika és a kémia megkülönböztetésének. Az élő anyag is kémiai anyag, illetve különböző molekulák bonyolult rendszere, melynek szerveződésében meghatározó szerepet játszanak a jellegzetes kémiai visszacsatolások.

A természettudományok fejlődésének két alapvető jellemzője a differenciálódás és az integrálódás. Kezdetben volt az egységes természettudomány, azonban ez még inkább csak természetfilozófiának tekinthető: ebből sarjadt ki a fizika, a kémia és a biológia. A differenciálódás az ismeretek növekedésével a kémia területén először a fizikai, a szervetlen és a szerves kémia kialakulására vezetett, melyek ma is élő tantárgyak a kémia oktatásában. A további differenciálódást jelzik például a következő megnevezések: biokémia, biofizikai kémia, bioszervetlen kémia, orvosi kémia, gyógyszerkémia, kémiai kinetika, kémiai termodinamika, koordinációs kémia, szupramolekuláris kémia. Ezek egyike-másika már jelzi az integrálódási folyamatot is. Más jellegű, de ugyancsak a kémia meghatározó szerepét mutató új tudományágak a molekuláris biológia, az anyagtudomány és a környezettudomány. A genetikai anyag kémiai szerkezetének meghatározása vezetett a molekuláris biológia kialakulására, melyben ötvöződik a biológia, a kémia és a fizika. Az anyagtudományban a kémia nyilvánvalóan kulcsszerepet játszik, hiszen a kémiai megfontolások segítségével lehet meghatározott tulajdonságú új vegyületeket illetve társított anyagokat, ún. kompozitokat előállítani. A környezettudomány pedig azzal foglalkozik, hogy melyek azok a vegyületek, amelyek káros hatással vannak a természeti környezetre életére, hogyan lehet ezeket az anyagokat eltávolítani, illetve környezetbarát anyagokkal helyettesíteni.

A kémia haszna és kára

Már a kémia tudományának bő két évszázad előtti kialakulása előtt is rengeteg gyakorlati fontosságú felfedezés született, melyek mélyrehatóan befolyásolták az emberek életét. Előállítottak különböző fémeket és ötvözeteket, az üveget, a porcelánt, a puskaport stb. Megtalálták az élelmiszerek tartósi-

tásának néhány módját. Az élelmiszerek elkészítésében ősidők óta alkalmazott módszerek kémiai alapjainak feltárása azonban csak a kémia tudományának kialakulásával kezdődhetett meg. Ősidők óta ismeretesek a különböző festési eljárások, a szappan előállításának módszere, és sok más eljárás mód is. Ezekben a felfedezésekben természetesen nem jutott szerep a tudományos megfontolásoknak, jobbra véletlenszerű megfigyeléseken alapultak. A technológia és a természettudományok összefonódása a modern természettudomány kialakulásával vette kezdetét. Érdekes, hogy évezredekkel ezelőtt egyes távol-keleti társadalmakban a technológiai ismeretek lényegesen meghaladták az akkori európai szintet. (Például a kínaiak ismerték a porcelánt, a puskaport, a könyvnyomtatást stb.) Azonban ott nem alakult ki a természettudomány, ezért a technológiai fejlődés is megrekedt. Az elmúlt két-száz évben viszont a technológiai haladás elképzelhetetlen a tudományos ismeretek fejlődése nélkül. Közvetlenül vagy közvetve minden tudományos felismerésnek gyakorlati következményei is vannak. A következőkben a kémiai kutatásoknak csak néhány, a legfontosabbnak vélt gyakorlati eredményét soroljuk fel. A kémia tudományának központi jellegéből következően ezek az eredmények a mindennapi élet minden vonatkozásában meghatározó jelentőségűek. Természetesen rámutatunk azokra a veszélyekre is, melyek jelentkeznek vagy jelentkezhetnek ezeknek az eredményeknek a nem eléggé körültekintő alkalmazáskor, továbbá a valós veszélyek elhárításának lehetőségeire is.

A kémia és az élelmezés

Az élelmiszerek termelésének és feldolgozásának minden fázisában kémiai folyamatok játszódnak le, melyek megértése lehetőséget nyújt befolyásolásukra és optimalizálásukra. A növénytermeléshez elengedhetetlenül szükségesek a műtrágyák és a kártevők

elleni szerek. A növények nitrogénszükségletét különböző nitrogénvegyületekkel lehet kielégíteni. A természetes nitrátkészletek nem elegendők, ezért volt rendkívüli jelentőségű Haber felfedezése az ammónia szintézisére, melyért megkapta az 1918. évi kémiai Nobel-díjat. Az ammóniából ugyanis a műtrágyázásra használható ammónium-nitrátot, illetve karbamidot lehet előállítani.

Rendkívüli a jelentősége a különböző növényvédőszer alkalmazásának. Ezek nem ártalmatlan szerek, de helyes mértékű használatuk nem jár veszéllyel. Természetesen az élelmiszerek elkészítésében, konzerválásában is tömegével használunk különböző kemikáliákat.

A kémia és a ruházatkodás

Az állati és a növényi eredetű textíliák felhasználása ma csak töredékét teszik a különböző műszálakénak, melyek számos tulajdonságukban sokkal jobbak, mint a természetes eredetűek. A *Carothers* felfedezte nylon valóságos forradalmat jelentett a textiliparban. A műszörmék még az egyébként tudományellenes állatbarátok elismerését is kivívták. A színezékek korábban kizárólag természetes eredetűek voltak. *Perkin* még húsz éves sem volt, amikor szinte véletlenül felfedezte az első anilinfestéket. Ez a felfedezés vetette meg a szintetikus szerves vegyipar alapjait.

A kémia és az orvoslás

Ma a kémia döntő szerepet játszik mind az orvosi diagnózisban, mind pedig a gyógyításban. *Ehrlich* 1907-es felfedezése korszakalkotónak bizonyult – ez volt a szifilisz gyógyítására a 606. próbálkozásra megtalált szerves arzénvegyület: a szalvarzán. *Ehrlich*hez hasonlóan *Domagk* is a baktériumokat szelektíven festő anyagokban kereste a sztreptokokkuszt okozta betegség gyógyszerét. A szulfonamidok bakteriosztatikus hatásának felismerése korszakalkotó jelentőségű volt. (*Ehrlich* 1907-ben, *Domagk* 1939-ben kapta meg az orvosi és élettani Nobel-díjat.) A

penicillin és a többi antibiotikum bevezetése új korszakot jelentett a fertőző betegségek elleni küzdelemben. (A penicillin és széleskörű gyógyhatásának felfedezéséért és *Fleming*, *Chain* és *Florey* 1945-ben kapták az orvosi és élettani Nobel-díjat.)

Tanulságos a DDT felfedezése és alkalmazása a malária leküzdésére. A betegséget terjesztő szúnyogok kiirtása sok millió ember életét mentette meg. Joggal részesült a felfedező, *Paul Müller* az 1948. évi kémiai Nobel-díjban. Hosszú évek múltán derült ki, hogy a DDT nem bomlik le a természetben, és egyes állatfajtákra igen veszélyes. Ezért használatát 1972-ben betiltották. A kutatások hasonló hatású, de a zavaró mellékhatásoktól mentes szerek kidolgozására vezettek.

Felsorolni sem lehet a legkülönbözőbb betegségek hatásos gyógyítására bevezetett gyógyszereket. Ma egyetlen új gyógyszer felfedezéséhez és bevezetéséhez több ezer új vegyület előállítására, laboratóriumi és klinikai vizsgálatára van szükség, melynek összköltsége többszázmillió dollár. A gyógyszerjelölt új vegyületek előzetes vizsgálatát akkor szigorították meg rendkívüli mértékben, amikor az 1956-ban altató- és nyugtatószerként bevezetett *Contergan*-ról kiderült, hogy hatására terhes anyák torzszülötteket hoztak a világra. A szert 1961-ben betiltották. Azóta megállapították, hogy a drámai mellékhatásért a vegyületnek csak az egyik optikai izomerje a felelős, és maga a vegyület alkalmas lehet több szörnyű betegség, mint például a lepra leküzdésére.

Mi sem mutatja jobban a fejlődést a gyógyításban, mint az, hogy a fejlett országokban az átlagos életkor az elmúlt száz év alatt harminc évvel növekedett.

A kémia és az energiatermelés

Az energiát a vízierőművek és a szélerőművek mellett vagy kémiai folyamatok, vagy magreakciók szolgáltatják. A szén és a szénhidrogének (földgáz, benzin, stb.) égése több káros hatással jár: a szén-dioxid okozza az

ún. üvegházhatást, a belsőégésű motorok kipufogógázaiiban több káros anyag is található. Ez utóbbiak mennyiségét, illetve koncentrációját jelentősen lehetett csökkenteni különböző katalizátorok alkalmazásával. (Még néhány évvel ezelőtt is megengedett volt a benzin hatásfokának javítására tetraetil-olmot használni adalékanyagként, de ezt a környezetbe kerülő ólomvegyületek mérgező hatása miatt betiltották. Sikerült viszont környezeti mellékhatásoktól mentes kopogásgátló szereket kifejleszteni.) A szén- és szénhidrogén-készletek természetesen végesek, és nagy tékozlás a fontos vegyipari nyersanyagként szolgáló kőolaj és a földgáz elégetése. Az atomreaktorok alkalmazásával kapcsolatban sok az indokolt és az indokolatlan félelem. A jelenleg is fejlesztés alatt álló kémiai eljárások nagy segítséget jelenthetnek az atomreaktorok kiégett fűtőelemeinek feldolgozásában –, a tulajdonképpeni problémát okozó izotópoknak a sokkal nagyobb mennyiségben jelen lévő, de nem zavaró egyéb anyagoktól való elválasztásával. Így a kiégett fűtőelemek veszélytelen tárolását sokkal egyszerűbben lehetne megoldani.

Már eddig is jelentős eredményeket értek el a különböző tüzelőanyagcellák alkalmazásával a gépjárművekben. Valószínű, hogy az áttörés ezen a területen a még hatékonyabb katalizátorok alkalmazásával rövidesen bekövetkezik. A napelemek hatásfokának növelése, ami természetesen megfelelőbb fényérzékeny félvezető anyagok felfedezését követeli meg, minőségileg változtathatja meg azok alkalmazási lehetőségeit.

A kémia és az elektronikus ipar

A számítógépek, a mobiltelefonok és a televíziókészülékek manapság a fejlett országok szinte minden háztartásában megtalálhatók. Mindezek működésében a tranzisztorok játsszák a döntő szerepet. Ezek kialakításában a kémiai eljárások a meghatározóak, ugyanis ezek segítségével vált lehetségessé

a rendkívüli mértékű miniaturizálás. Ezen a területen olyan gyors a fejlődés, hogy a kémiai és fizikai kutatások eredményeit nem lehet megjósolni. Az azonban kétségtelen, hogy a *nanokémia* meghatározó szerepet játszik ezen a területen. Az új félvezető és szupravezető anyagok felfedezése tovább növelheti a műszerek adatfeldolgozó sebességét, és csökkentheti azok energiaigényét.

A kémia és a környezetvédelem

A kémiával szemben a leggyakrabban hangoztatott vád, hogy a veszélyes kémiai anyagok károsítják, kevésbé mérsékelt megfogalmazás szerint tönkreteszik a környezetet. Potenciálisan minden emberi tevékenység, a mezőgazdasági és az ipari termelés, valamint a termelt javak felhasználása is a természet szennyezésével jár. Az emberiség lélekszámának növekedése, mely részben az orvostudomány, és ezen belül természetesen a kémia diadala, részben pedig civilizációs elmaradottság és ideológiai megfontolások következménye, szükségképpen megköveteli a mezőgazdasági és az ipari termelés növelését. A műtrágyázás és a növényvédőszer alkalmazása nélkül a gazdaságilag fejlett államok lakói is éhínség fenyegetné. Minél fejlettebb egy társadalom, annál nagyobb az egy lakosra jutó energiafogyasztás. Részben a valós fejlődés, részben a mértéktelen pazarlás miatt az Egyesült Államokban az egy főre jutó energiafogyasztás mintegy ötszöröse a magyarországinak, a miénk pedig kb. tízszerese az indiainak, az pedig sokszorosa az elmaradott afrikai országok lakóinak.

A legjobb környezetvédelem a környezeti szennyezések megelőzése. A kémiának ebben elsődleges szerep jut. Egyrészt olyan eljárások kidolgozásával, melyek hulladékai nem veszélyes anyagok, másrészt pedig a hulladékok illetve az elhasznált anyagok feldolgozása útján. Ezzel kapcsolatban rendkívül élénk kutatások folynak; ma már elterjedt a *zöld kémia* elnevezés. A legnagyobb

mennyiségű hulladék az elhasznált műanyagok felhalmozódásából keletkezik. Ezek feldolgozása részben regenerálásuk, részben a különböző hőkezelési eljárások révén már lényegében megoldottnak tekinthető, de a további fejlesztés feltétlenül szükséges (Szépvölgyi, 2001). Természetesen arra lenne szükség, hogy eleve szelektíven gyűjtsék a különböző hulladékokat.

A kémia tanítása

A társadalom vélekedését a kémiáról az határozza meg, hogy tagjai milyen ismeretekre tesznek szert az alap- és a középfokú oktatás során, illetve, hogy milyen információkkal találkozhatnak a napi- és hetilapokban, a rádióban és a televízióban. Sok tankönyv átlapozása azt mutatja, hogy gyakran nem érvényesül az az alapvető pedagógiai elv, hogy csak az oktatható, ami az adott életkori szinten és a korábbi ismeretek birtokában felfogható. Elsősorban a makroszkopikusan észlelhető és tapasztalható tulajdonságokkal kell foglalkozni, és – amennyire lehetséges – megmutatni azok atomi és molekuláris szintű értelmezését.

Nem kicsiny pedagógiai feladat annak bemutatása, hogy egyrészt az utolsó néhány évtizedben rendkívüli volt a fejlődés a természettudományokban általában, és így a kémiában is, ugyanakkor az új ismeretek nem szükségképpen érvénytelenítik a korábbiakat. Például a több mint száz éve felfedezett termodinamikai törvények ma is érvényesek és nélkülözhetetlenek tapasztalataink megértése és azok további elmélyítése szempontjából. Természettudományi ismereteink időbeli gazdagodásának és elmélyülésének bemutatásán keresztül nem csupán azt kell bizonyítani, hogy milyen sok nyitott kérdés van, melyekre természetesen csak a további kutatások adhatnak választ, hanem azt is, hogy vannak olyan törvényszerűségek melyeket a további kutatások aligha kérdőjelezhetnek meg. Az újabb kutatások gyak-

ran nem a korábbi törvények megdöntésére, hanem finomítására, korlátaik felismerésére vezetnek. A legjobb példa a newtoni törvények korlátainak einsteini felismerése. A kémiában meghatározó jelentőségű volt az állandó és sokszoros súlyviszonyok törvényének felfedezése, a további kutatások pedig feltárták e törvények korlátait, de nem kérdőjelezték meg alapvető érvényességüket.

Szerencsére a legújabb felfedezések között is akadhatnak olyanok, melyeket jelleghűknél fogva már a középiskolai oktatásban megemlíthetünk, sőt esetleg meg is kell említenünk. Erre talán a legjobb példa a fullerének alig több mint tíz évvel ezelőtti felfedezése. Ezeknek az anyagoknak a szerkezetét is be lehet mutatni, hiszen legfontosabb képviselőjük, a hatvan szénatomból álló buckminsterfullerén szerkezete pontosan megfelel a 20 hatszögből és 12 ötszögből álló futball-labda szerkezetének. Ma már a középiskolában sem szabad azt mondani, hogy a szénnek két kristályos módosulata van, a grafit és a gyémánt, valamint az amorf szén, hanem meg kell említeni, esetleg be is lehet mutatni a fulleréneket is.

Természetesen meg kell mutatni a vegyületek sokféleségét, kihangsúlyozva azokat, melyekkel a mindennapi életben is találkozunk. Nem szégyen a főzés kémiájáról beszélni. Rá kell mutatni a természetes és mesterséges anyagok közötti hasonlóságokra és különbözőségekre, ezzel is meg lehet nehezíteni a természetes anyag mítoszának kialakulását. A természetes nem szükségképpen jó és hasznos, a mesterséges pedig nem eredendően káros. A légyölő galócából nem célszerű paprikást főzni, a nagyhatású gyógyszernek túlnyomó többsége mesterségesen előállított vegyület, a televíziós készülék pedig mesterséges anyagok tucatjaiból áll. Sok természetes anyagot is alkalmaznak gyógyszerként, például a vitaminokat és a hormonokat. Nagyon fontos azt a tévhiedelmet eloszlatni, hogy a természetben előforduló

gyógyhatású anyagok, például a különböző vitaminok, hatásosabbak, mint azok a hasonló kémiai összetételű és szerkezetű anyagok, melyeket mesterségesen állítanak elő. Sok alkalom kínálkozik annak bemutatására, hogy az adott, gyakorlati alkalmazásokkal is járó felfedezés társadalmilag csak akkor káros, ha nem a társadalom érdekében használják.

Az egyik legfontosabb kémiai állandó az *Avogadro*-szám. Ennek ismeretében lehet és kell a hatás és a hatásos anyagmennyiség problémájáról beszélni. Gyakran olvashatni az újságokban, hogy milyen veszélyes „kémiai” anyagok kerülnek a természetbe vagy éppenséggel élelmiszereinkbe. Meg kell mutatni, hogy a *veszélyes* minősítésnek nincs értelme a *veszélyes mennyiség* megjelölése nélkül. Érzékeltetni kell a 6.023×10^{23} nagyságát. Például el lehet mondani, hogy az ivóvízzel naponta milliárdszámra isszuk az aranyatomokat, és a legtermészetesebb „biotáplálkozás” esetén is sokszorta nagyobb számban kerülnek szervezetünkbe rákkeltő anyagok molekulái.

A középiskolai oktatásban is nagyon fontos a kísérletek szerepe. Persze minden kísérlet veszélyes, de azt is be kell mutatni, hogyan kerülhetők el a veszélyek. A kísérletek élményit jelentenek, a szükséges mértékű óvatosságra nevelnek, és megbarátkoztatnak a kémiával.

Than Károly egyik dolgozatában (Than, 1893) részletesen írt a középiskolai kémiaoktatás fontosságáról. Szomorú, hogy szavai ma még inkább érvényesek, mint valaha: „Bizonyára ennek a végzetes előítéletnek (ti. hogy a chemia nem igen alkalmas pedagógiai szempontból az értelem fejlesztésére) köszönjük azt, hogy Magyarországon a chemiát a középiskolai oktatás teréről a humanisták, a magyar kormánynak iskolai reformja közben, úgyszólván teljesen kiszorították. Helyes belátással pedig csak azt kellett volna cselekedni, hogy a chemiának rossz tanítása helyett jó tanítását létesítsék.”

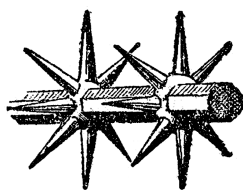
Sajnos a kiváló hazai ismeretterjesztő folyóiratokat – mint a *Természet Világa* és az *Élet és Tudomány* – nem olvassák elegendően, a napilapokból és az elektronikus sajtóból pedig jobbára nem kielégítő vagy éppenséggel téves tájékoztatásban részesülnek az olvasók, a nézők és a hallgatók. Szükség lenne ismét színvonalas és egyidejűleg szórakoztató

természettudományi ismeretterjesztő műsorokra, valamint arra, hogy a napilapoknak legyen rendszeres, érdekes és hiteles információkat kínáló tudományos rovatuk.

Kulcsszavak: *kémia, központi tudomány, vegyipar, környezetvédelem, energiatermelés, élelmezés, orvostudomány*

IRODALOM

- Breslow, R. (1997). *Chemistry Today and Tomorrow*, American Chemical Society, Washington, D. C.
- Kaiser, L. (szerk.) (1983). *The Chemical People Book*, QED Enterprises, Pittsburgh
- Kauffmann G. B., Szmant, H. H. (szerk.) (1984). *The Central Science*, Texas Univ. Press, Fort Worth
- MacKinnon, D. (1981). *Chem. Eng. News* **59**, (29) 5
- Pimentel, G. C., Coonrod, J. A. (1987). *Opportunities in Chemistry*, National Academy Press, Washington, D.C.
- Szépvölgyi J. (2001). *Környezeti kémia – feladatok és lehetőségek*, MTA Közgyűlési előadások (megjelenés alatt)
- Than Károly (1893). *Budapesti Szemle* **84**, 161



Interjú

A VÉDÁKTÓL AZ INTERNETIG¹

Sipos Júlia beszélgetése Nyíri Kristóf filozófussal

Nyíri Kristóf akadémikus, az MTA Filozófiai Kutatóintézetének igazgatója; legújabb kutatásai az információs társadalom által fölvetett társadalomtudományi kérdésekhez kapcsolódnak.

S. J.: Aki az Ön nevével mostanában találkozott – és ez elég gyakran mesélik manapság –, azt gondolhatja, hogy munkássága elsősorban ahhoz az új filozófiai kihíváshoz kapcsolódik, amit a világháló megjelenése jelent.

Ny. K.: Bár így lenne! Sajnos én jóval korábban kezdtem, az első filozófiai publikációm 1966-ban született – az angolszász nyelvfilozófiát mutattam be a magyar olvasóknak. Ez akkoriban új dolognak számított. Ebből szervesen következett számomra a logikai pozitivizmus témája, a Bécsi Kör, majd Rudolf Carnap, aki elvezetett Wilfrid Sellars-hoz. Ő ír Wittgensteinről, aki a következő állomás volt számomra, és az ő nyomán kezdtem foglalkozni osztrák-magyar eszmetörténettel. Végül is, nagyobb bukdácsolások nélküli szerves és gyors folyamat vitt a Monarchia eszmetörténetének kutatásához, nagyjából a hetvenes évek elején. Lendvai Feri kollégámmal letettünk az asztalra egy összefoglaló rövid filozófiatörténet kötetet, ez volt a

Védáktól Wittgensteinig, amely azóta már a negyedik kiadást is megérte. Ez 1995-ben jelent meg. Azért említem külön büszkeséggel, mert ebben tettenérhető volt egy új módszertan. Markánsan kitapintható volt az a megközelítés, hogy a filozófiát nem önmagából kell megérteni, a filozófia történetét nem a filozófiai problémák felől kell megérteni, hanem a filozófián kívüli problémák felől. Ez a szociologizáló megközelítés azt jelenti, hogy a társadalomnak és a kultúrának megvannak a maguk problémái, és a filozófia ezeket a problémákat igyekszik a maga eszközeivel földolgozni. A filozófia problémái nem azonosak minden korban és minden geográfiai tájon. Nem igaz, hogy az egyszeri ember valahol a Polinéz-szigeteken fölnez a csillagos égre, és filozófia tölti el az ő lelkét. A filozófia összefügg a görögség óta tartó fejlődéssel, az alfabetikus írásbeliséggel, mindazzal, ami ebből következett, és ennek jelenlegi utójátékaival is. Tehát ha a filozófia szót az ember komolyan használja, akkor ez az euro-amerikai kultúrtörténethez kötődő sajátos jelenség, amely nem önmagából érthető meg, hanem ebből a kultúrtörténetből általában. Ez a metodológia jellemezte az említett könyvet.

A magyar gondolkodásmódot mindig is a szociologizáló szemléletmód jellemezte Palágyi Menyhértől Lukács Györgyig, Husserl Arnoldig, ugyanakkor ez a szociologizáló

¹ Az interjú a Magyar Rádió *Aranyemberek* című sorozatában 2002. április 18-án elhangzott beszélgetés írott változata.

filozófiatörténet a filozófiai főáramok felől nézve outsider pozíció. Az én itthoni pozícióm is mindig outsider pozíció volt, amit természetesen büszkén és boldogan viseltem és viselek. Az utóbbi másfél évtizedben a gondolkodásmódom kibővült, és e mellett a szociologizáló megközelítés mellett a filozófiát befolyásoló elsődleges tényezőnek a kommunikáció technológiáját tartom. Tehát, ha úgy tetszik, most is kívülről próbálok megérteni a filozófia működését, kérdéseit és válaszait. Ez azonban egy intímabb megközelítés, mert nem a társadalom tágabban értelmezett kulturális élete felől közelítek, hanem magának a gondolkodásnak és a kommunikációnak saját instrumentumai felől, amelyek: a szóbeli beszéd, a kézzel írott és nyomtatott szöveg vagy az internet. Azt mondhatnám tehát, hogy az internettel való filozófiai foglalatosság számos fordulóponton keresztül ugyan, de teljesen szervesen nőtt ki az én szellemi előéletemből.

S. J.: Érdekes, hogy outsider pozíciót említ, amikor Önről tudható, hogy tudományos sikereket halmozott föl, és egyébként is Ön a Magyar Tudományos Akadémia egyik intézetének a vezetője. Úgy érzi, hogy az Ön által képviselt megközelítés nem kapott tudományos elismerést?

Ny. K.: Az outsider pozíció és bizonyos külsődleges sikerek bőven összeegyeztethetők egymással. Én mindenképpen megkülönböztetem magam a mainstream, vagyis főáram-gondolkodástól, de ezt nem tűztem ki célul, csak így alakult. Ráadásul, bizonyos dolgokra kívülről jobb az ember rálátása, és adott esetben eredetibb ötletei születhetnek, mint ha belülről nézné ugyanazt.

S. J.: Mi állt a másik oldalon, valamiféle elitista katedra-filozófia?

Ny. K.: A katedra-filozófia jó szó, bár mi iskola-filozófiáról szoktunk beszélni. Nem akarok senkit megbántani, de ennek a képviselői úgy gondolják, hogy vannak öröktől adott filozófiai problémák, ezeket legjobban

a filozófusok könyveiből lehet megismerni, és egy filozófus akkor jár el helyesen, ha harminc filozófiakönyvből ír egy harmincegyediket. Én ugyan imádok filozófiai könyveket olvasni, de nagyon el lennék keseredve, hogyha a filozófia problémáit ezekben a könyvekben vágnám megtalálni... Ez az outsider pozíció kétségkívül nem azt jelenti, hogy bizonyos gondolatokat ne tudtam volna átplántálni a következő generációba. Sőt, a szóbeliség-írásbeliség paradigma a magyar filozófiában párját ritkító módon sikeres lett, és nagyon sok fiatal és kevésbé fiatal ember csatlakozott hozzá.

S. J.: Pontosan mit ért ezen a paradigmán?

Ny. K.: Kezdjük az előzményekkel! Magyarországon a húszas-harmincas években volt néhány kitűnő szerző, mint Balogh József klasszika-filológus, aki a hangos és a halk olvasás jelenségével foglalkozott, Hájnal István, a kiváló történész, akit Glatz Ferenc vagy Lakatos László könyvéből ismerhetünk, és aki az írásbeliség történetével is foglalkozott. Balázs Béla költő és filmesztéta, aki szintén a szövegek emberi gondolkodásra gyakorolt hatását elemelte. Az 1924-ben kiadott nevezetes könyvében – *A látható ember* címűben – arról írt, hogy a könyvnyomtatás hogyan nyomta el a szövegekkel az ember eredetileg képi gondolkodását. Ez tehát koherens magyar gondolati áramlat volt, amely koherenciáját nem abból merítette, hogy a szerzők egymást olvasták, hanem azt hiszem, hogy abból, amit a magyarul gondolkodó és író emberek számára egyrészt a Monarchia közelmúltja és közelsége jelentett, másrészt ez a furcsa, elszigetelt nyelvi helyzet, amelyben alkottak. Babits úgy fogalmazott, hogy az elmélet nem más, mint a gyakorlat hiánya. Nem kell csodálkoznunk azon, hogy ha a kommunikáció-filozófia iránti fogékonyság éppen olyan kultúrákban alakul ki, amelyeknek kommunikációs nehézségei vannak. Arról van szó, hogy a mindenki által érthetetlen nyelvünk predesztinál minket,

magyarokat a kommunikáció-filozófiára. A kommunikáció-filozófia a szóbeliség, az írásbeliség, a képi gondolkodás különbségeivel foglalkozó elméleteket jelenti. Érdekes és ismeretlen összefüggés, hogy a McLuhan körüli torontói iskolában, ahová egyébként Polányi Károly is tartozott, az ötvenes években Balázs Bélát és Hajnal Istvánt, azaz Étienne Hajnal francia nyelvű tanulmányait olvasták. Lábjegyzetek és hivatkozások bizonyítják, hogy amit ma McLuhan-i gondolat néven ismerünk a Gutenberg-galaxis végéről, az eredetileg Magyarországon, magyar szerzőktől született. Mindez azt jelenti, hogy amit én és mások is képviselünk, vagyis hogy a kommunikáció technológiája a gondolatátadásban mennyire fontos, ez egy eredetileg itthonról indult hagyomány folytatása. Ez lenne az a bizonyos szóbeliség-írásbéliesség paradigma, de ehhez persze más nagy nevek is tartoznak. McLuhant már említettem, Walter J. Ong, Elizabeth Eisenstein, Watt, Goody, Eric Havelock, és még sok más kitűnő gondolkodó.

S. J.: Ez a nagyon is koherens rendszer, amit felvázolt, és szerzőkkel, elméletekkel alátámasztott, logikusan épült föl a gondolkodásában, vagy fokozatosan állt össze a puzzle a fejében?

Ny. K.: A végeredményt az eleje felől nem lehetett látni, így puzzle-szerűen állt össze a kép. Hajnal István számomra meglepetésszerű felfedezés volt a nyolcvanas évek vége felé. Véletlen műve volt, hogy beleütköztem Eric Havelock-ba és a többi szerzőbe, és amikor kezdenek összeállni a puzzle-darabok, az ember már a hiányokat is látja, utánanéző a fehér foltoknak, továbbolvas. ... Kezdetben megrendítő volt, hogy te jó Isten, itt van ez a kontinens, a létéről sem tudtam, mi történt volna velem, ha nem fedezem fel? Egyébként most is úgy gondolom, hogy nagyon buta vagyok, és rengeteg dolgot nem tudok, de ha visszagondolok az elmúlt évek folyamatos váltoállásaira, azért úgy látom, hogy az az épület, ami most körülvesz,

tulajdonképpen fölhasznált minden építőanyagot, amivel az elmúlt évek során kísérleteztem. A szóbeliség, az írásbéliesség és az internet problémája mellett megjelent a képi gondolkodás problematikája. A képi kommunikáció, mint a kommunikáció egyik neme felveti azt a nagy kérdést, hogy mi van az ember fejében, mit akarunk kommunikálni. A múlt században évtizedeken át azt gondoltuk, azt sajkóztuk, hogy az ember gondolkodása alapvetően verbális, a gondolkodó ember szövegeket mond magának a saját agyában. Ezzel szemben, az emberi agyban, mentális világunkban a képek, szavak, szagok, tapintások, nyomások együtt vannak jelen, és a kommunikációnak az volna a feladata, hogy ezt a színes világot ember-től emberig közvetítse. Látható, hogy a gutenbergi ember nagyon szerencsés volt csodálatos könyveivel, és az újkori tudomány, az európai technikai civilizáció mind a nyomtatott könyveknek köszönheti létét. Ezzel együtt, most így utólag elképzelhető, hogy milyen elképesztő lelki kényszerzubbonyt jelentett évszázadokon keresztül a gondolkodó embernek az, hogy a színes és sokdimenziósan észlelt külső és belső világot a lineáris szöveg kalodájába volt kénytelen zárni. Vállalom azt az eretnek tézist, hogy a nyugati filozófiájának története nem más, mint a frusztrációk sorozata, amelyet a filozófusok éltek át, amikor a gazdag belső mentális világ élményét pusztán írásban voltak kénytelenek közölni. Úgy vélem, hogy a filozófiának a képi gondolkodás problémája az egyik mozgatóereje, merthogy a filozófia nemtudatos belső feszítő kérdése az, hogy egy szövegben nem elmondható vagy nagyon rosszul elmondható világot kell szövegben kommunikálnia.

S. J.: A filozófia mégiscsak évszázadokig „elvolt” ezzel a szövegben való kommunikációval. ...

NY. K.: Ha úgy érti, hogy születtek filozófiai művek – persze, csak hogy ha kezem-

be veszem Kant *A tiszta ész kritikáját*, és azt látom, hogy borzalmasan nehéz gondolatokat borzalmasan nehéz mondatokban fejez ki, akkor az iskola-filozófiai reakció szerint ez természetes, hiszen a filozófia egy mély és nehéz dolog, nem is várhatunk mást. A pajkos kommunikációelméleti, képfilozófiai megközelítés pedig azt mondatja velem, hogy: hát persze, hogy ilyen nehezek ezek a mondatok, amikor a szerző olyasmit akar kifejezni, amit szavakkal nem is lehet. Immanuel Kantnak talán egy képeskönyvet kellett volna szerkesztenie, s akkor érthetőbb lenne, hogy mire gondolt. De Kant nem szerkesztett képeskönyvet, mert az ő korában képet tenni a könyvbe sokkal nehezebb vállalkozás volt, mint szöveget elhelyezni. A szedő undorodott tőle, a nyomdász sem örült neki, szegény Kant mit tehetett? Nem volt fényképezőgép, sem komputergrafika, és nem mindenki rajzmester... de ha mondjuk mégis, akkor kezdődik a fametszés, rézmetszés nehéz munkája... Magyarán, az intellektuellek évszázadokon keresztül azt szokták meg, hogy ha valamit közölni akartak, akkor azt *szövegben* kellett közölniük, és ennek nemcsak előnyei, hanem hátrányai is voltak. Ma az értelmiség valóságos kommunikációs felszabadulást él meg, amikor semmit nem veszünk el, hiszen a szövegek velünk maradnak, de nagyon sokat nyerünk, mert most a képek nyelvét is a magunkévá tudjuk tenni...

S. J.: Az, hogy Ön ennyire „előreszaladt”, a személyiségéből fakad, vagy egyszerűen rátevédt egy tudományos útra, és azon következetesen halad?

NY. K.: Rengeteget tanultam Lukács Györgytől, a szociológizáló filozófiatörténetben ő volt az alapmodell, az objektiváció-elméletet is az idős Lukács közvetítette számomra. Az én fejemben Hajnal István és Lukács György koherens csillagzatokat jelentenek. Amit „előreszaladásnak” nevez, az abból eredhet, hogy én matematika-filozófia

szakot végeztem, tehát a tanulmányaim nem kizárólag filozófiai tanulmányok voltak. Én elég későn fedeztem fel ezt a diszciplínát mint létező jelenséget, és így nem jártam be a filozófiai nevelődés tipikus útját, amikor az ember többé-kevésbé természetesnek veszi a filozófiai szakma elfogadott igazságait. Ha a gondolkodásomban tettenérhető bizonyos eredetiség, akkor az éppen a már említett outsiderségből fakad. Ami a személyiségvonásaimat illeti, az egyetlen dolog, ami a teljesítményemben meghatározó, az a szorgalom. Nem vagyok másoknál sem ügyesebb, sem élesebb eszű, csak igen szorgalmas vagyok, és addig csinállok valamit, amíg úgy nem érzem, hogy most készen van...

S. J.: Az elmúlt években létrehozott egy kutatócsoportot, ami az információs társadalom új jelenségeit, a társadalomra való hatását vizsgálja. Ezt a kutatócsoportot létrehozni, működtetni, szervezni, lehetővé tenni a publikációkat – nagyon sok energiát követel, azután az intézetvezetés felelőssége is az Öné. Nem sok ez egy kicsit?

NY. K.: Szabadidőm az nincs, ha erre gondol... De ma már senkinek nincs szabadideje. A nálam ügyesebben életszervező barátaimnál is azt látom, hogy a munkán kívül nem jut idejük másra. Önmagában filozófiai problémává vált, hogy milyen mértékben gyorsult fel az idő, Heidegger idejében még volt lét és idő, most úgy tűnik, hogy lét van és nincs hozzá idő. Az életnek új megoldásokat, képleteket kell majd kiizzadnia, mert a munkatempó fokozódásának ez a tendenciája sem logikailag, sem biológiailag nem tartható. A múltkor – vasárnap délután – eleresztettem egy e-mailt egy Németországban élő kitűnő barátomnak, és arra gondoltam, hogy másnapra kapom majd meg a választ. Ám azonnal válaszolt, és a válasz nyomán rögtön írnom kellett a Svédországban élő kiváló kollégának, aki szintén azonnal válaszolt, és én szomorúan vontam le a következtetést,

hogy tavasz van, vasárnap délután, és nem én vagyok az egyetlen szerencsétlen, aki itt dolgozik a számítógép előtt... De valóban: a kommunikációfilozófiai kutatások megszervezése sokdimenziós feladat volt. Az MTA Filozófiai Kutatóintézetét hét éve van szerencsém igazgatni, és az intézmény már a megelőző évek során is identitásproblémákkal küzdött. A tudományos életben, sőt, a Magyar Tudományos Akadémián is többször felvetődött, hogy egy ország, ahol annyi kitűnő filozófiai tanszék van, miért tartson el még egy külön akadémiai intézetet is...

Én úgy gondoltam, hogy egyrészt szükség lehet egy olyan műhelyre, amelyet az oktatás mindennapi teendői nem befolyásolnak, másrészt szükséges, hogy az Akadémián egy sajátos profilú műhely legyen. Ezt a profilt gondoltam fölfedezni a kommunikációelméleti-kommunikációfilozófiai megközelítésben. A tudományos élet igazolta ezt az elképzelést, és miközben ebben az intézetben kiváló munkatársaim saját diszciplínájuk és saját eddigi tevékenységük mentén kutatnak, középkori nyelvfilozófiát vagy bármit, ami foglalkoztatja őket, ugyanakkor az intézetnek van egy közös profilja, és ez a kommunikációfilozófia. Ebbe a témába mindenki becsatlakoztathatja saját szemléletét és kutatásait, és azt hiszem, eddigi eredményeinkkel nem kell szégyenkeznünk. Ezenkívül gyakorlati-elméleti kísérletünk a virtuális egyetem, az internetes felsőfokú tartalomszolgáltatás. Bárki előtt nyitva áll, aki az interneten keresztül képeket nézgetve, magyar szövegek kíséretében tanulni akar valami okosat a filozófiáról, vagy a filozófiaközeli diszciplínákról... Meglepné, ha tudná, hogy például a határon túl magyarok mennyivel könnyebben jutnak hozzá egy internetes kapcsolathoz, mint friss magyar könyvekhez. Itt nem egyszerűen arról van szó, hogy meglévő szövegeket fölnyomunk a webre, hanem új szemlélettel, szerkesztésmóddal, hipertextuálisan, hiperme-

diálisan próbálunk felépíteni egy 21. századi tartalmat. Ehhez sokszor a tudományrendszer másfajta, az eddigiektől eltérő összefüggéseit kell szem előtt tartanunk, ez tehát egy olyanfajta filozófiai munka, amelynek gyakorlati vetülete van. Végül, az egyik vezető magyar mobilszolgáltató szponzorálásával, sőt elméleti együttműködésével az intézethez telepítve már két éve folyik egy interdiszciplináris kutatás. A kutatás feltételei lehetővé teszik, hogy szokatlanul hosszú távra tudjunk tervezni, két jól sikerült konferencia és kötet van már mögöttünk a mobilinformációs társadalom témaköréből, ami azért is fontos, mert az előrejelzések szerint rövid időn belül az internet-hozzáférés uralkodó módja a mobil hozzáférés lesz. Ilyen értelemben a jövő kontúrját rajzolgatjuk. Magyarországon, azt hiszem, ez köztudott, az internet-robbanás nem következett be a maga idejében, és hogy miért nem, ez hosszú történet lenne... de a mobil-robbanás kétségkívül bekövetkezett. Tehát az Internet valójában a mobillal érkezik el Magyarországra, így hát a mobilkommunikáció kutatása számunkra nem divattéma. Néhány hónapja vettem kezembe az első rokon tárgyú angolszász kötetet, a brit szerkesztésű könyv szociológiai megközelítésben szól a mobilkommunikáció jelentőségéről, és megkönynyebbülten olvastam, mert igazolta, hogy mi itt nemzetközi mércével is helytálló társadalomfilozófiai kutatást végzünk. Nem véletlen, hogy a májusi konferenciánkra olyan kiváló szakemberek is elfogadták a meghívást, mint Robin Dunbar vagy Barbara Tversky.

Dunbar sok nyelvre lefordított könyvében az emberi pletyka társadalmi funkciójáról ír, arról, hogy hogyan ápoljuk egymást a nyelv segítségével. Ezt a majmok körében megfigyelhető kurkászáshoz hasonlítja. Mi túl sokan vagyunk ahhoz, hogy egymás hátát és fejbüdját vakarásszuk, ezért inkább fecsegünk, a beszéd segítségével foglalkozunk egymással. Barbara Tversky, a Stanford egyetemről, a

térbeli megismeréssel foglalkozik, egyszerűen ennek a konferenciának az anyagát németül, magyarul és angolul is megjelentetjük. Nagyon érdekes elméleti jövő vár ránk.

S. J.: Azt mondja, hogy a jövő kontúrjait rajzolgatják. Milyen lesz ez a jövő?

NY. K.: Manuel Castells jelentette meg néhány évvel ezelőtt azt a trilógiát, amelyet az információs társadalom megalapozó elméleti művének tartanak: *The Information Age*. Ez egy végtelenül pesszimista, 1400 oldalas könyv, amely a globalizáció következtében szegényekre és gazdagokra szét-eső világról szól, fundamentalizmusok, nacionalizmusok, erőszak, szegénység és a háború megjelenését jósolja. Ez sajnos bejött, de úgy vélem, hogy az emberi kommunikációnak az a szakasza, amelyet most élünk meg, mindezen borzalmak ellenére egy örömteli, felszabadító fázist is jelent. Egyszerűen azért, mert közelebb kerültünk az ember eredeti biológiai és társadalmi természetéhez, és egy új kulturális forradalom kezdetét éljük át. Ne felejtjük el, hogy minden új, nagy kommunikációs technológia először a szemtetet és a zavaros habot hozza, és a gondolkodó emberek mindig is iszonyattal fordulnak el attól, ami újat hoz. Platon iszonyattal fordult el az írástól, amelyet egyébként használt. Ugyanígy fordultak el a könyvnyomtatás hajnalán a géppel előállított könyvtől, amely egyébként még évtizedeken keresztül megpróbálta mimelni a kézírásos könyvet, csak azért, hogy valahogy akceptálható legyen. Nem volt még olyan kommunikációtechnológiai újítás, amelytől az eddigi kultúrát ne féltették volna.

Ehhez képest utólag tudjuk, hogy az írásbeliség megjelenése soha nem látott kulturális virágzást és forradalmat hozott Görögországban. A könyvnyomtatás szintén egy új kulturális fölemelkedés hajnalát jelentette. Ma pedig, aki ismeri a világhálót, pontosan tudja, hogy olyan méretű, csodálatos gazdag-

ságú világgönyvtárat látogathat, amely azelőtt soha nem létezett.

S. J.: Lám, mások szerint éppen az az egyik baja korunknak, hogy túl sok van mindenkiből... Tárgyakból, eszmékből, információkból, adatokból és az ezeket szállító eszközökből...

NY. K.: Ezt abszolút elismerem, hiszen mi is beszéltünk arról, hogy túl sok van mindenkiből, és az idő a szűk keresztmetszet. De úgy vélem, hogy új életviteleknek, érintkezési mintáknak kell kialakulniuk. Meg kell találnunk a tartalmak, az élmények, az érintkezések bőségével való új gazdálkodás módzatait. Az egyéni invenció és a társadalmi gyakorlat együtt fogják kimunkálni azokat a megoldásokat, amelyekkel majd élhető lesz ez a bőség. De az, hogy mindenkiből túl sok van, nem jelenti azt, hogy valamiben szegényebbek lettünk. Egy jó film megjelenése a regény mellett nem jelenti a kulturális hanyatlást.

S. J.: Értem, hogy az életét most a munka vezeti, de valahogy mégsem a számítógép előtt ülve látom magam előtt, hanem Dunabogdányban, a kertjében üldögélve egy pohár vörösborral...

NY. K.: Sokszor nézem a dunabogdányi hegytetőről a Dunát, valóban egy pohár vörösbor társaságában, a kertben üldögélve hallgatom a madarakat, vagy zenét hallgatok a szobámban.

De sajnos az időm nagy részében mégiscsak a gép előtt ülök, és e-maileket írok vagy fogadok. Tanulmányokat írok, fordítok vagy olvasok. Sajátos módszerem van arra, hogy elkerüljem a sokkot, hogy mondjuk 300 levél vár a postámban: állandóan *on-line* vagyok, és így negyedóránként prüttyög egyet a gép, jelzi, hogy érkezett öt-hat e-mail, ezekre gyorsan válaszolok, és így egy darabig nyugalom van. Megúszom a sokkot, hogy egyszerre túl sok minden történik, ez jobban megfelel lelki háztartásomnak.

Akadémia

BOLYAI JÁNOS-EMLÉKKONFERENCIA AZ AKADÉMIÁN

Prékopa András

akadémikus, egyetemi tanár; a Bolyai János-emlékkonferencia programbizottságának elnöke
prekopa@cs.elte.hu

Bolyai János, a magyar tudomány legnagyobb alakja, 1802. december 15-én született Kolozsvárott. Születésének 200. évfordulója alkalmából a Magyar Tudományos Akadémia, az Eötvös Loránd Tudományegyetem, a Debreceni és a Szegedi Egyetem, a kolozsvári Babes-Bolyai Egyetem, az erdélyi Sapientia Egyetem, az MTA Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézete, valamint Számítástechnikai és Automatizálási Kutatóintézete ez év július 8-12. között nemzetközi tudományos konferenciát rendezett az Akadémia székházában. A konferencia témája a hiperbolikus geometria volt.

Bolyai János 1831-ben és 1832-ben tette közzé – röviden *Appendix* címen emlegett – művét. Marosvásárhelyen jelent meg az apa, Bolyai Farkas, *Tentamen* címmel idézett kétkötetes, monumentális könyve első kötetének függelékeként 1832-ben (a második kötet egy évvel később). Az *Appendix* azonban különnyomatként már 1831-ben is megjelent. E műben Bolyai János egy több mint kétezer éves problémát oldott meg. Tudományos eredményének hatása nemcsak a matematika további fejlődésére, de az egyetemes emberi gondolkodásra is hatással volt.

Kr. e. 300. körül írta Eukleidész, a híres alexandriai görög matematikus *Elemek* című művét. A szerző korábban Platón athéni akadémiján tanult, művében összefoglalta korának matematikai, köztük geometriai ismereteit. Ez az első olyan mű, mely a matematikai ismereteket rendszerezetten adja elő, bizonyos állításokat elfogadva, másokat deduktív módon bizonyítva. Az elfogadott állításoknak két csoportját különbözteti meg: posztulátumok (követelmények) és axiómák (közönséges ismeretek). Az előbbiek csoportjába öt, az utóbbiakéba kilenc állítás tartozik. Az utóbbiak nem kifejezetten geometriai jellegűek, és igaz voltak mindenki számára nyilvánvaló. Ezekre az axióma elnevezést később kezdték alkalmazni. Az előbbiek viszont egyfelől geometriai jellegűek, másfelől pedig állításuk tartalma nem nyilvánvaló, tehát érvényességüket csupán posztuláljuk. Mindamelllett szemléletünk alapján az első négy posztulátum igaz voltát el tudjuk fogadni (például bármely két ponton át húzható egyenes), az ötödik érvényessége vagy érvénytelensége azonban a pusztán szemléletre támaszkodva nem dönthető el. Ez, a ma leginkább használatos ekvivalens formában kimondva, azt követeli, hogy a

síkban adott egyeneshez egy rajta kívül fekvő ponton át egy és csakis egy párhuzamos húzható. Egy másik, ugyancsak ekvivalens állítás azt mondja ki, hogy minden háromszög szögeinek összege egyenlő két derékszöggel (azaz 180 fokkal). Az ötödik posztulátum nem szemléletes, mert nem tudunk egyeneseket a végtelenségig meghosszabbítani.

Több mint kétezer éven át eldöntetlen volt, hogy az ötödik posztulátum levezethető-e a többi posztulátumból és axiómából, vagy sem. Általános volt a vélemény, hogy az előbbi lehetőség áll fenn, és a tudományos világ arra várt, hogy jön valaki, aki elvégzi a bizonyítást. Az idők folyamán nagy számú hamis bizonyítás született. A 18. század végén a paralelák kérdéskörének legkiválóbb szakembere a göttingeni Kaestner professzor volt, aki magánkönyvtárában sok erről szóló könyvet gyűjtött össze, egyik tanítványával pedig disszertációt is íratott ennek történetéről és a hamis bizonyításokról.

Bolyai Farkas 1796-1799 között, Gauss pedig 1795-1798 között volt a göttingeni egyetem hallgatója, így a problémáról mindketten nyilván Kaestnertől hallottak. A két ifjú között életre szóló barátság szövődött, ez azonban elválásuk után csak levelezésben jutott kifejezésre, személyesen többé nem találkoztak. A problémával Bolyai Farkas is, Gauss is foglalkozott. Bolyai Farkas neve az állítás ekvivalens átfogalmazásai révén bekerült a matematikátörténetbe. Gauss szerepének kérdésére még visszatérünk.

Bolyai János az *Appendixben* felépített egy olyan geometriát, mely az ötödik posztulátumtól független – ennek abszolút geometria a neve –, és egy másikat, mely az ötödik posztulátum tagadására épül. A tagadás két lehetőséget rejt magában: adott

egyeneshez egy rajta kívül fekvő ponton át egy párhuzamos egyenes sem húzható, illetve végtelen sok húzható. Bolyainál az utóbbi esetről van szó, és az erre épülő geometriát ma hiperbolikus geometriának nevezzük. Az elnevezés oka az, hogy ezt a geometriát a hiperboloid két diszjunkt része akármelyikén meg tudjuk valósítani.

Bolyai János tehát felfedezte a nemeuklidészi geometriát. Ennél azonban sokkal többről van szó. Míg Eukleidésznél a geometria afféle természettudomány, jellemző, hogy Eukleidész még definiálja a pont, egyenes, sík, alakzat stb. fogalmát, addig Bolyainál a geometria absztrakt logikai struktúráként jelenik meg. Ennek egyik változata az euklidészi, másik a hiperbolikus geometria, de ma már, éppen Bolyai munkásságának köszönhetően, a különböző geometriák nagy sokasága áll rendelkezésre. A geometriának a valóságtól való elszakadása paradox módon annak széleskörű alkalmazási lehetőségét eredményezte, ezt a 20. század fizikai elméletei ki is aknázták (például a relativitáselméletben).

A Bolyai-geometriával körülbelül egy időben született meg az absztrakt algebra, és vált intenzívebbé az analízis egzakt megalapozására való törekvés. A 19. század második felében az axiomatizálási kedv még a műszaki tudományokra is áterjedt.

Bolyai munkássága révén tehát világossá vált, hogy a matematika elsősorban az elvont struktúrák tudománya. Az elvont struktúrákat a valósággal más tudományok kötik össze (például a fizika). Részben ezek révén keletkeznek az új matematikai struktúrák, melyek azután további alkalmazásokat is eredményeznek. Az axiomatikus gondolkodás az emberi gondolkodás természetéhez tartozik, ez is Bolyai felfedezé-



sének következményeként válik egyre világosabbá. Miután a milétoszi Thalész és a számoszi Püthagorasz új ismeretek szerzésére bevezette a matematikába a bizonyítás módszerét, és Eukleidész rendet teremtett a matematikai állítások körében, csak idő kérdése volt, hogy világossá váljék az elvont struktúrák szerepe gondolkodásunkban.

A nemeuklideszi geometria felfedezésének érdemében Bolyai János osztozik Nyikolaj Ivanovics Lobacsevszkij orosz matematikussal, aki 1829-1830-ban tette közzé hasonló tartalmú értekezését a Kazanyi Hírmondóban orosz nyelven. Hazájukban mindkettejük felfedezését mély csend fogadta, Bolyait azonban külföldről még bírálat is érte. Amikor apja az *Appendixet* Gaussnak megküldte, azt a választ kapta, hogy János művét nem dicsérheti, mert saját magát dicsérné, ugyanis az abban foglaltak szinte szóról szóra megegyeznek az ő harminc-harmincöt éves meditációjával. Gauss 1855-ben bekövetkezett halála után hagyatékát feldolgozták, és nem találtak írásos bizonyítékot a fenti állításra. Örök rejtély marad, hogy milyen felfedezései voltak Gaussnak a nemeuklideszi geometria vonatkozásában, ám alig valami lelhető fel erről írásos hagyatékában.

Bolyai János művének jelentőségét külföldön fedezték fel. Az első jelzések Németországból, Franciaországból és Olaszországból érkeztek 1867-68 körül, a hazai elismerés csak ezeket követte. Bolyai János 1860. január 27-én meghalt, nem érte meg tehát személyének és művének elismerését. Életében több sérelem is érte. Nem lett tagja a Tudós Társaságnak (Bolyai Farkas igen, 1832-ben), sőt, 1836-ban Vállas Antal matematikus, akadémikus a hazai matematikai eredményekről szóló összefoglaló cikke Bolyai Jánosnak sem a nevét, sem főművét, az *Appendixet* nem is említette. A 19. század végére azonban a helyzet megváltozott. Az *Appendixet* több nyelvre, köztük magyarra is lefordították, a *Tentament* (az *Appendix-*

szel) újból kiadták. A Bolyai-kutatásba bekapcsolódott a német Paul Stäckel matematikatörténész, aki 1911-ben adta ki két-kötetes, német nyelvű művét a két Bolyai életéről és munkásságáról, ez 1914-ben magyarul is megjelent. 1902-ben megszületett a Bolyai-díj. 1905-ben Poincaré, 1910-ben Hilbert lett a díjazott. A kor jeles magyar matematikusai közül is sokan cikkeztek Bolyai János matematikai felfedezéséről.

Jóllehet száz évvel ezelőtt a Bolyai-hagyatékban már több művet felfedeztek, a teljes, tizennégyezer oldalát számláló hagyaték átnézésére csak a második világháború után került sor. Benkő Samu kolozsvári professzor 1952 és 1967 között rendszerezte a kéziratokat. A nem matematikai jellegűeket át is tanulmányozta, majd megírta szép könyveit az újból megismert Bolyai Jánosról és apjáról, Farkasról. A háromezer oldalnyi matematikai kéziratot a marosvásárhelyi Kiss Elemér professzor tanulmányozta át az 1990-es években. Szenzációs felfedezést tett, a kéziratokban olyan matematikai eredményeket talált, melyek újak voltak Bolyai korában.

Bolyai János születésének 100., 150. és 175. évfordulóját hazai keretek között ünnepelték meg Kolozsvárott, illetve az utóbbi kettőt az Akadémián. Bár Bolyai nevét és művét a geometria művelőinek jelentős része ismeri, még ezeknek a többsége sem tudja pontosan, hogy Bolyai, Lobacsevszkij és Gauss között milyen mértékben oszlik meg a felfedezés érdeme. Hosszú ideig csak Lobacsevszkijnek tulajdonították a nemeuklideszi geometria felfedezését, Bolyai neve alig jött szóba. Stäckel 1911-ben német nyelven megjelent monográfiája sokat javított Bolyai János nemzetközi megismertetése és elismeretése terén. Mai, globalizálódó világunkban azonban az angol a tudományos nyelv, angolul pedig kevés írás jelent meg Bolyairól, még saját művei között is vannak olyanok, melyeknek a mai napig sincs angol fordítása.

Ilyen körülmények között született meg a döntés, hogy angol nyelvű nemzetközi tudományos konferenciát szervezzünk a hiperbolikus geometriáról.

A konferencia 2002. július 8-12. között zajlott a Magyar Tudományos Akadémia Roosevelt téri székházában. 220 regisztrált résztvevő érkezett 25 országból: Ausztrália, Ausztria, Belgium, Cseh Köztársaság, Franciaország, Ghána, Görögország, Hollandia, Izrael, Japán, Jugoszlávia, Kanada, Dél-Korea, Lengyelország, Magyarország, Németország, Norvégia, Olaszország, Oroszország, Románia, Spanyolország, Svájc, Svédország, Nagy-Britannia, USA. A hazai és a környező országokbeli magyar érdeklődők számára regisztrálás nélkül is lehetővé tettük az előadások látogatását, így a teljes résztvevői létszám 300 körül volt.

A konferencián minden délelőtt 45 perces plenáris előadások hangzottak el, az első, hétfői napon három, azt követően pedig minden nap négy, így számuk összesen 19 volt. Minden délután öt szekcióban folyt a tanácskozás. Az ezeken elhangzott 30 perces előadások jelentős részét meghívott előadók tartották, a bejelentett előadásokkal együtt számuk 150 volt. Az utolsó, pénteki napot magyar nappá nyilvánítottuk. Ezen a napon a négy plenáris előadás közül három volt magyar nyelvű, a délutáni előadások zöme is magyarul hangzott el.

A konferencia a hiperbolikus geometrián túl annak alkalmazásaival, oktatásával, filozófiai, matematikatörténeti, kultúrtörténeti vonatkozásaival, továbbá Bolyai János életével és munkásságával is foglalkozott.

A hétfő reggel tartott megnyitó ülésen Császár Ákos akadémikus, a szervezőbizottság elnöke elnökölt. Mádl Ferenc akadémikus, köztársasági elnök megnyitója után Keviczky László akadémikus, az MTA alelnöke üdvözölte a résztvevőket. Ezt követte Prékopa András akadémikus, a programbizottság elnökének a beszéde, melyben Bolyai

János életének eseményeit és tudományos eredményeit foglalta össze. A beszédet Somogyi Péter hegedűművész játéka szakította meg, aki Paganini-capricciót adott elő, arra emlékezve, hogy Bolyai János kitűnő hegedűs is volt, és épp az előadott virtuóz darabok voltak a kedvencei. Az utolsó szónok Csiszár Imre akadémikus, a Bolyai János Matematikai Társulat elnöke volt, majd ismét egy Paganini-capriccio következett. A megnyitó ülést Járai Zsigmondnak, a Magyar Nemzeti Bank elnökének felszólalása zárta, bemutatta a Bank által a Bolyai évfordulóra veretett, 3000 Ft-os pénzérmét, melyet Kiss György szobrász- és éremművész tervezett. Ennek egy-egy példányával a helyszínen megajándékozta a megnyitóülés elnökségének tagjait.

A Bolyai-évfordulóra Széchenyi Kinga szobrászművész emléklapketet készített, melyet a konferencia plenáris előadói, jeles Bolyai-kutatók és néhány, a szervezésben jeleskedő személy kapott meg. Az emléklapett a marosvásárhelyi Kultúrpalota homlokzatán lévő, Bolyai Jánost ábrázoló dombormű alapján készült (képünk). Bolyai Jánosról hiteles kép nem maradt fenn. A második világháború után, ma már ismeretlen okból, de alaptalanul, Bolyai arcképének tekintettek egy festményt. Újabbban azonban általános meggyőződésé vált, hogy a Kultúrpalota domborműve valóban Bolyai Jánost ábrázolja. (Az összesen hat, névalírással ellátott dombormű közül ötről Weszely Tibor megállapította, hogy azokat a személyeket ábrázolják, akiknek neve a domborművek alatt szerepel; a hatodik alatt Bolyai János neve áll, és Bolyai Farkas domborműve mellett helyezkedik el; ezen túlmenően egyéb okok is szólnak az említett felfogás mellett.) A plakett fényképmásolata a konferencia legtöbb kiadványán is látható.

A konferenciával egyidejűleg az Akadémiai Könyvtár Kézirattára nagyszerű kiállítást rendezett a könyvtár Bolyai-gyűjteményéből. Az igen értékes Bolyai-dokumentu-

mok mellett kiállításra került Eukleidész *Elemek* című, 1482-ben Velencében nyomtatott művének egy példánya. Ez a mű latin nyelven jelent meg, és a legelső nyomtatott változata az *Elemeknek*, egyben az első, nyomtatásban megjelent matematikai mű. A nívós kiállítás Rozsondai Mariannak, a Kézirattár vezetőjének, Mázi Bélának és Horányi Károlynak, a Kézirattár kutatóinak munkáját dicséri. A szép kiállítású magyar és angol nyelvű katalógust a konferencia minden résztvevője megkapta. A katalógusban e sorok írójának a *Bolyai János forradalma* című cikke is szerepel, rövidített változatban, mind a két nyelven.

A szegedi kollégák kezdeményezésére és az MTA Matematikai Osztályának finanszírozásával a konferenciára elkészült az *Appendix* új, latin-magyar-angol nyelvű kiadása. A konferencia minden résztvevője kapott ebből egy példányt.

A résztvevők ingyen hozzájuthattak a *Természet Világa* 2002. júliusi számához, melyben e sorok írója Bolyai János forradalma című háromrészes cikkének első része van. Ugyancsak ingyen hozzá lehetett jutni Fráter Jánosné *A Bolyai-gyűjtemény* című, 1968-ban kiadott könyvéhez, melyben az Akadémia Bolyai-gyűjteményének katalógusát tette közzé a szerző.

A konferencia plenáris előadói körében a leghíresebb személy a 95. életévét betöltött kanadai H. S. M. Coxeter professzor volt. A professzort, aki Bolyai János nagy tisztelője, a legnagyobb élő klasszikus geométernek tartják. A télen súlyos beteg volt, de szerencsésen felépült; az őt elkísérő lánya szerint a Bolyai-emlékkonferencián való részvételi szándéka tartotta életben. Coxeter, első plenáris előadóként, egy érdekes, új tudományos eredményéről számolt be a megnyitó ülés után. Philip Beecroft angol matematikus 1842-ben az euklideszi geometria keretében bebizonyította egy érdekes tételt a síkban elhelyezkedő körökkel kapcsolatban (minden

kör négyeshez, melynek körei páronként érintik egymást, hozzárendelhető egy másik, ugyanezzel a tulajdonsággal rendelkező kör négyes oly módon, hogy az összesen nyolc kör akármelyike ortogonálisan metszi a másik négyes három körét). Coxeter, a bizonyítás alapos elemzése után felfedezte, hogy az állítás a Bolyai-féle abszolút geometriában is igaz.

Az első nap második plenáris előadója a német Walter Benz professzor volt. Előadásában a hiperbolikus geometria olyan realizációjával foglalkozott, melyben a dimenzió nem játszik szerepet. A hétfői első napon a harmadik plenáris előadó Jeremy Gray angol matematikátörténész professzor volt. Gray, a nemeuklideszi geometria történetének egyik világszerte legismertebb kutatója, Gauss ezel kapcsolatos írásával foglalkozott, és kimutatta, hogy Gauss e téren csak nagyon kevés írást hagyott maga után. Valószínűleg létre tudott volna hozni a Bolyai-Lobacsevszkij geometriához hasonló alkotást, ezt azonban ő sohasem tette meg. Számunkra nagyon fontos volt Gray előadása, mert sokan még ma is Gauss-t tekintik a nemeuklideszi geometria igazi felfedezőjének.

A keddi délelőtti plenáris előadók közül az első, a jelenleg Amerikában dolgozó Lovász László akadémikus volt, előadásában a hiperbolikus tér gráfelméleti reprezentációjával foglalkozott. Utána két amerikai professzor, Robert Connelby és Charles Radin következtek. A hiperbolikus és az euklideszi tér hasonlóságáról, illetve a hiperbolikus térbeli sűrű körelhelyezési problémáról tartottak előadást. A negyedik előadó, az amerikai Jeff Weeks professzor elbűvölt bennünket csodálatos, a hiperbolikus geometriát komputeresen megjelenítő képeivel és animációival.

Ismeretes, hogy a Bolyai-Lobacsevszkij teret az olasz Beltrami 1868-ban publikált híres dolgozatában az euklideszi tér állandó görbületű sokaságaival realizálta. Erre való

tekintettel sok könyvben és cikkben azt olvassuk, hogy a hiperbolikus geometria a Riemann-féle geometria speciális esete. Ez nem egészen van így, ugyanis a hiperbolikus geometria elvont, modellmentes formában is létezik, míg a Riemann-geometria Gauss felületelméletéhez kapcsolódva, ún. sokaságokkal (paramétereiktől függő mennyiségekkel) foglalkozik. Tehát eleve egy modelltől indul ki (Riemann ezt az elméletet egy 1854-ben tartott magántanári előadásában kezdeményezte). Mindamellett szoros kapcsolat van a hiperbolikus geometria és a Riemann-geometria között. Erről, végig a konferencia során, több szekcióban sok előadás hangzott el. Ezzel foglalkozott az egyik szerdai plenáris előadó is, az amerikai John Ratcliffe professzor. Egy másik, az egész konferencián végighúzó témakörrel együttes a diszkrét geometria körébe tartozik.

A geometria és a csoportelmélet szoros kapcsolatának felfedezése a német Felix Klein műve. Eszerint minden geometria valamely transzformációcsoportra nézve invariáns tulajdonságokkal foglalkozik. Az orosz Ernest Vinberg professzor előadása a hiperbolikus reflexiócsoportok terén elért eredményeket foglalta össze. Az Amerikai Egyesült Államokban élő Igor Rivin professzor a háromdimenziós euklideszi, gömbi és hiperbolikus poliéderekkel kapcsolatos eredményekkel, alkalmazásával és történetükkel foglalkozott. A negyedik szerdai előadó, az amerikai Jim Cannon professzor háromdimenziós hiperbolikus cellarendszerekkel, azok evolúciójával és biológiai alkalmazásával foglalkozott.

A csütörtöki plenáris előadások fizikai jellegűek, illetve azzal szoros kapcsolatban állók voltak. Szalay Sándor Amerikában élő akadémikus előadását oly módon lehet jellemezni, hogy *Eukleidész visszavág*. Az elmúlt néhány évben új teleszkópokat fejlesztettek ki, melyek használatával meg lehetett növelni a kozmológiai adatok mennyiségét és minőségét. Ezek révén a világegyetem geometriájára vo-

natkozólag is új megállapítást lehetett tenni: kozmikus méretekben a tér görbülete zéró, a tér tehát ebben a méretben az euklideszi geometriát követi. „Kis” méretekben változatlanul a nemeuklideszi geometriák (hiperbolikus, Riemann-féle, stb.) érvényesek, tehát nincs szó arról, hogy ezzel a relativitáselmélet érvényét veszítette volna. Csupán arról van szó, hogy a világegyetemben az anyagsűrűség elhanyagolhatóan kicsi. Abraham Ungar professzor előadásában új kalkulust vezetett be a relativisztikus sebességekre, és a nyert formulákat összefüggésbe hozta a Bolyai-Lobacsevskij geometriával. Nem kevésbé volt érdekes a további két csütörtöki előadás is. Az egyiket az Amerikában élő Helgason professzor tartotta a hiperbolikus térbeli Fourier-transzformáltokról, a másikat az Angliában élő Stratmann professzor a hiperbolikus sokaságok fraktál geometriájáról.

A pénteki utolsó napon egy fizikai jellegű előadás hangzott el a nemeuklideszi geometria és a fizika kapcsolatáról, különös tekintettel a fekete lyukak elméletére. Az előadást Perjés Zoltán professzor tartotta. Ezt követte három jeles Bolyai-kutató előadása. Kiss Elemér professzor ismertette azokat a felfedezéseket, amelyeket az 1990-es években tett, amikor feldolgozta a 3000 oldalnyi Bolyai-kéziratot. Bemutatta, hogy milyen nehézséget okozott a kéziratok pusztá elolvasása és megértése is. Vizsgálódását azonban siker koronázta, mert jelentős, eddig nem ismert olyan tudományos eredményeket talált, melyek abban az időben újak voltak, és legalább egy eredményt csak Bolyai halála után közel negyven évvel fedeztek fel. Benkő Samu professzor nagyszerű, történelmi vonatkozású előadásában azt boncolgatta, hogy a két sajtófényű, szellemi értelemben vett csillagot – a két Bolyait – milyen történelmi és kulturális előzmények, továbbá egyetemes és honi művelődési hagyományok hozták létre. Végül az erdélyi születésű, de Párizsban élő Tóth Imre professzor, aki Ben-

kő Samuhoz és Kiss Elemérhez hasonlóan a Bolyai-kutatás kiemelkedő egyénisége, Bolyai János művének filozófiai és kultúrtörténeti vonatkozásait feszegette. Matematikusként végezte az egyetemet, de pályáját filozófusként folytatta, kétirányú képzettsége lehetővé tette, hogy feltárja a Bolyai-geometria és a kultúrtörténet mély összefüggéseit. A három magyar nyelvű plenáris előadást Halász Sylvia matematikus doktor tolmácsolta kitűnő angolsággal, kiváltva a hallgatóság elismerését.

A péntek délután magyar nyelven elhangzott előadások, szám szerint tizennyolc, igen sok, Bolyai Jánossal és geometriájával kapcsolatos érdekességbe engedtek betekintést. Ezek közül csupán néhánynak a megemlítésére szorítkozhatunk. Kálmán Attila a Bolyai-geometria középiskolai oktatási problémáit fejtegette. Évek óta végzi már ezt az oktatómunkát, és részletesen, de a középiskolások szintjén előadható módon kidolgozta az elméletet. Oláh-Gál Róbert a középkorig visszamenően feldolgozta a Bolyaiak családfáját és történetét, erről tartott összefoglaló előadást. Kolumbán József újból áttekintette a Bolyai-kultusz történetét, sokat adva hozzá eddigi ismereteinkhez. Ács Tibor, Bolyai János katonaeveinek szakavatott kutatója összefoglalta az ezzel kapcsolatos legújabb kutatási eredményeit. Gábos Zoltán és Toró Tibor kolozsvári illetve temesvári professzorok a Bolyai-geometria és a fizika

kapcsolatát világították meg. Toró Tibor szerint Bolyai János a relativitáselmélet előfutárának tekinthető. Weszely Tibor arról beszélt, hogy a differenciálegeometria kezdeti eredményei már Bolyai *Appendixében* megtalálhatók. Végül Jung János marosvásárhelyi orvosprofesszor előadását említjük meg, melyben a rendelkezésre álló dokumentumok felhasználásával pontos képet tudott adni azokról a betegségekről, amelyekben az egykor erős fizikumú katonatiszt, Bolyai János huszonöt éves korától szenvedett.

A konferencia a nagyvilág elé tárta Bolyai János életével, tudományos eredményeivel kapcsolatos ismereteinket, és azt is, hogy 170 évvel azok publikálása után hol tart ma a tudomány.

A szervezés technikai részét az MTA SZTAKI Konferenciaszervező Irodája végezte Hencsey Gusztáv vezetésével. A konferencia kiadványai (programfüzet, előadás-kivonatok füzet), a hirdető plakátok stb. a nagy eseményhez méltó módon ízlésesek voltak. A kiállítás plakátjai is megnyerték mindenki tetszését. Hétfőn este gazdagon terített asztalok várták az állófogadáson résztvevőket az Akadémia dísztermében. A csütörtök esti bankett helyszínéül az „Európa” hajó szerepelt, felejthetetlen látványt nyújtva mindannyiunknak, mialatt elsuhant a Duna-part kivilágított épületei között és valamennyi híd alatt, mi ezalatt zseniális hazánkfiát és világraszóló alkotását ünnepeltük.

Tudomány, politika

IGÉNYEK, REMÉNYEK, ESÉLYEK

A K+F ÉS AZ INNOVÁCIÓ TÁMOGATÁSI ESÉLYEI AZ EU STRUKTURÁLIS ALAPJAIBÓL

Imre József

habilitált doktor, főosztályvezető-h., Oktatási Minisztérium – jozsef.imre@om.hu

Qui timide rogat, docet negare.
(Aki félénken kér, elutasításra készlet.)
Seneca

*Miért szükséges a K+F
és az innováció támogatása?*

A fejlett országok az átalakulás útján vannak a tudásalapú társadalom, illetve a tudásalapú gazdaság felé, amely a tudás és az információ hatékony termelésére, diffúziójára és alkalmazására épül. A tudományt és a technológiát egyre inkább a hosszú távú növekedés legfontosabb forrásának, legdinamikusabb elemének tekintik, amelyek a gazdaságok szerkezeti átalakulásában, a termelékenység növelésében, a munkahelyteremtésben és az életminőség javításában egyaránt fontos szerepet játszanak. Csak azok az országok, régiók, közösségek lehetnek versenyképesek és sikeresek az új típusú gazdaságban, amelyek nagy szellemi hozzáadott értéket megtestesítő termékek és szolgáltatások előállítására képesek. Egy nemzet pozíciója egyre inkább a tudástól, a társadalom tanulási és megújulási képességétől függ. Az igazi értéket, a versenyelőnyt ma a képzett, rugalmas munkaerő, az új tudás gyors megszerzésének és adap-

tálásának képessége, az információ, a kooperáció, a magas műszaki/technológiai színvonal és az ambiciózus vállalkozások jelentik. A tudomány, a kutatás, a technológia felértékelődött, aktív társadalom-, illetve gazdaságpolitikaformáló tényezővé vált.

Az állam *innovációbarát gazdasági és jogszabályi környezet kialakításával, valamint közvetlen támogatásokkal* segítheti elő a tudományos és technológiai fejlődést, ezáltal a gazdaság versenyképességének fokozását. Hatékony fejlődés – miként azt az utóbbi évek OECD kutatásai [OECD, 1999] is igazolták – csak a teljes *nemzeti innovációs rendszernek*¹ mint komplex, integrált rendszernek a harmonizált fejlesztésével

¹ A *nemzeti innovációs rendszer* (National Innovation System, NIS) egy adott nemzetgazdaságban az innováció és a tudás, illetve a technológiai diffúzió hatékonyságát befolyásoló piaci és nem piaci intézmények összességének, a közöttük működő kölcsönhatásoknak, termelési és szolgáltatási jellegű kapcsolatoknak, valamint a működésüket befolyásoló szabályozásoknak a komplex rendszerét jelenti.

² Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA), a Felsőoktatási Kutatási Program (FKP), a Műszaki Fejlesztési Alapprogramok (MÚFA), a Nemzeti Kutatási és Fejlesztési Programok (NKFP), valamint a Nemzeti Információs Infrastruktúra Fejlesztési Program (NIIF).

érhető el. A K+F és az innovációs folyamatok sikerét az emberi erőforrás, az intézményrendszer, az infrastruktúra és a működési feltételrendszer következetes, strukturált továbbfejlesztése révén lehet garantálni.

Magyarországon a K+F és az innováció támogatására jelenleg egymást jól kiegészítő, nagy formátumú, pályázati alapon szervezett támogatási rendszerek² (a költségvetési cél-előirányzatok által finanszírozva) működnek. Ezek összehangolt fejlesztése, a hatékonysági kritikus értékeket elérő forrásallokáció biztosítása, valamint a fejlesztési stratégiák által kialakított arányok érvényesítése garantálhatja a tudomány és a technológia, illetve a nemzeti innovációs rendszer kiegyensúlyozott, fenntartható fejlődését.

A K+F nemzeti szintű finanszírozási forrásait (2000-ben 105,4 milliárd Ft) a központi költségvetési forrásokon (49,5 %) túl a vállalati (37,8 %) és a külföldi (10,6 %), valamint egyéb hazai (2,1 %) források jelentették.

Az Európai Unióhoz történő csatlakozást követően Magyarország előtt is megnyílnak az Európai Unió támogatási forrásai, mint például a Strukturális Alapok és a Kohéziós Alap, amelyek az európai gazdasági-társadalmi kohézió erősítésének és a regionális különbségek csökkentésének érdekében *a K+F és az innováció területén is* egyre növekvő mértékű támogatásokat nyújtanak. Magyarország EU-tagországgént jelentős mértékű közösségi K+F és innovációs forrásokhoz juthat. Ahhoz azonban, hogy a csatlakozás pillanatától élhessünk a rendelkezésre álló lehetőségekkel, a már megkezdett felkészülési folyamat során teljesítenünk kell az EU által előírt és nagyon szigorúan megkövetelt feltételeket. Ezek az elvárások mindenekelőtt a források hatékony és ellenőrizhető felhasználására irányulnak.

³ Structural Funds, SF (A továbbiakban ismertetjük a legfontosabb fogalmak általánosan használt angol megfelelőit is.)

A Strukturális Alapok³ (SA) céljai, eszközei, jellemzői

Az Európai Közösséget létrehozó szerződés előírja, hogy a gazdasági és szociális kohézió erősítése érdekében törekedni kell a különböző régiók közötti fejlődési egyenlőtlenségek és a leghátrányosabb helyzetű régiók (beleértve a vidéki területeket is) lemaradásának csökkentésére. Ezt a tevékenységet a Strukturális Alapokon, az Európai Beruházási Bankon⁴ (EBB) keresztül és a többi közösségi pénzügyi forrásból kell támogatni. A Strukturális Alapokra vonatkozó előírásokat 1999-ben egységes rendeletbe foglalták [EU Council, 1999].

A Strukturális Alapok⁵, az EBB és a többi közösségi pénzügyi forrás a következő három kiemelt célkitűzés⁶ megvalósításához járul hozzá:

1. célkitűzés: a fejlődésben elmaradó⁷ régiók fejlődésének és strukturális átalakulásának elősegítése;

2. célkitűzés: a strukturális problémákkal küzdő területek gazdasági és társadalmi átalakulásának támogatása;

⁴ European Investment Bank, EIB

⁵ A Strukturális Alapok magukba foglalják: az *Európai Regionális Fejlesztési Alapot*, ERFA (European Regional Development Fund, ERDF) az *Európai Szociális Alapot*, ESZA (European Social Fund, ESF), az *Európai Mezőgazdasági Orientációs és Garanciaalap*, EMOGA *Orientációs Szekcióját* (European Agricultural Guidance and Guarantee Fund, EAGGF Guidance Section) és a *Halászati Orientációs Pénzügyi Eszközt*, HOPE (Financial Instrument for Fisheries Guidance FIGF).

⁶ A célkitűzések megvalósításához hozzájárulnak: 1. célkitűzés: A SA minden alapja; 2. célkitűzés: ERFA, ESZA; 3. célkitűzés: ESZA.

⁷ Elmaradott régióknak azok a NUTS II szintnek megfelelő régiók (illetve országok) tekinthetők, ahol az egy főre eső GDP – vásárlóerő-paritáson és az 1999. március 26-án rendelkezésre álló utolsó három év adatai szerint - nem éri el a közösségi átlag 75 %-át. (NUTS, Nomenclature des Unités Territoriales Statistiques – Területi Statisztikai Egységek Nomenklatúrája. A Bizottság összeállította a tervezési időszakra vonatkozóan a NUTS II szintű régiók listáját.)

3. célkitűzés: az oktatási, képzési és foglalkoztatási politikák és rendszerek alkalmazását és korszerűsítését célzó támogatás.

E kiemelt célokat követve *további általános célként* fogalmazódik meg a hozzájárulás: (a) a harmonikus, kiegyensúlyozott és tartós fejlődéshez; (b) a foglalkoztatás és az emberi erőforrások fejlődéséhez; (c) a *fenntarthatóság* elvének érvényesítéséhez, a környezet védelméhez és rehabilitációjához; (d) az *egyenlő esélyek* elvének érvényesítéséhez a nemek között, valamint kisebb ségek és speciális célcsoportok körében.

Az alapok tervezési és végrehajtási folyamatában az EU bizonyos alapelvek érvényesítését várja el:

- A *programozás* alapelve többéves, integrált megközelítési módot feltételez, amely stratégiai összehangolást igényel a célok, a prioritások, a végrehajtási eszközök (projektek) és a finanszírozási források között.

- A *partnerség* alapelve a közösségi jellegre utal, az Európai Bizottság nagy hangsúlyt fektet arra, hogy valamennyi érintett partner hatékonyan vegyen részt az SA tervezésében, programjainak előkészítésében és végrehajtásában.

- Az *addicionalitás* azt jelenti, hogy a közösségi források „csak” kiegészítik és nem helyettesítik a nemzeti és regionális forrásokat, azaz a helyi források nem csökkenhetnek a támogatott területeken.

- A *koncentráció* alapelve a források szétaprózódásának elkerülését, illetve a hatékonyságot garantáló jelentős nagyságrendű támogatások érvényesítését szolgálja.

- A *szubszidiaritás* arra utal, hogy minden ügyet a még alkalmas legalacsonyabb szinten kell végrehajtani, azaz csak a helyi szinten nem megoldható ügyeket kell központiilag kezelni.

- A *rugalmasság* a reagálóképességet jelenti a program (hét éves) időszaka alatt megváltozó körülményekre.

- A *koherencia* az érintett regionális, nemzeti és EU-politikák összehangolása a maximális szinergia elérése érdekében.

A Strukturális Alapok tervezési dokumentumai

A Strukturális Alapok támogatásai meghatározott tervezési ciklusokra, azok kezdetekor igényelhetők.⁸ A jelenlegi tervidőszak hét évet (2000–2006) ölel át. A támogatásokat csak a tagországok régiói vehetik igénybe, így Magyarország EU-tagországgként – a legkedvezőbb csatlakozási forgatókönyv szerint is – csak hároméves időszakra (2004–2006) pályázhat. A Strukturális Alapok egyik alapkövetelménye, hogy az elmaradott vagy strukturális problémákkal küzdő régióknak vagy országnak a regionális, illetve nemzeti stratégiai tervdokumentumokkal teljesen összehangolt tervet kell benyújtani. Egy egész országra kiterjedően *nemzeti fejlesztési tervet*⁹ (NFT) kell készíteni. Egy önállóan pályázó régió, különösen ahol a közösségi támogatás egy adott szint alatt marad, *egységes programozási dokumentum*¹⁰ keretében nyerhet támogatást. A jelenlegi tervezési szempontok szerint Magyarországnak az egész országra (nemzetgazdaságra) kiterjedő egységes nemzeti fejlesztési tervet kell készítenie.

A benyújtott NFT értékelését követően mintegy hat hónap alatt a Bizottság – a tagállammal egyetértésben – elkészíti a *közösségi támogatási keret*¹¹ (KTK) elnevezésű dokumentumot, amely a támogatás átfogó,

⁸ Az eddigi tervezési ciklusok időtartama folyamatosan növekvő trendet mutat: 1989–1993, 1994–1999, 2000–2006.

⁹ National Development Plan, NDP

¹⁰ Single Programming Document. (Ez egy olyan egységes dokumentumot jelent, amely ugyanazt az információt tartalmazza egy régióra vonatkozóan, mint amely a közösségi támogatási keretben és az operatív programban található. A Bizottság hagyja jóvá.)

¹¹ Community Support Framework, CSF

a Bizottság által jóváhagyott alapidokumentuma. Ez tartalmazza az alapok és a tagállam szándékaival kapcsolatos stratégiát és prioritásokat, azok sajátos céljait, az alapok és más pénzügyi források hozzájárulását. A dokumentum szerkezete a prioritásokhoz igazodik, amelyek operatív programok formájában valósulnak meg.

A NFT-vel párhuzamosan a pályázó tagállamnak *operatív programokat*¹² (OP) kell készítenie, amelyek a prioritások, valamint a kapcsolódó, több évre szóló intézkedések egységes rendszerét tartalmazzák. Az OP megvalósításának az EU közösségi források csak kiegészítő elemei lehetnek. Az operatív programokat a Bizottság hagyja jóvá. Az OP-k részletes kifejtését szolgálja az ún. *programkiegészítő dokumentum* (Programme Complement), amelyet szintén a Bizottságnak kell tájékoztatás céljából bemutatni legkésőbb három hónappal azután, hogy a Bizottság döntött a pénzügyi allokációról. [EU Commission, 1999a]

A nemzeti fejlesztési terv

A nemzeti fejlesztési terv (a továbbiakban NFT) tartalmazza a tagállam által a fentiekben hivatkozott 1-3 célkitűzés megvalósítási szükségleteire irányuló helyzetelemzést, illetve a célkitűzések megvalósításához szükséges stratégiát, prioritásokat és a tervezett legfontosabb intézkedéseket azok specifikus céljaival és a kapcsolódó pénzügyi erőforrásokkal együtt, valamint a végrehajtott intézményi struktúra ismertetését.

A *prioritás* (priority) jelenti azokat a stratégiai beavatkozási területeket, amelyekhez a célok elérése érdekében a pénzügyi kereteket hozzárendelik. Mind a nemzeti fejlesztési tervben, illetve a közösségi támogatási keretben lefektetett stratégiának, mind az egyes operatív programoknak vannak prioritásai. Az NFT/KTK prioritásait a

megkülönböztetés érdekében szokták prioritási tengelynek (priority axis) vagy stratégiai, fejlesztési, ill. fő prioritásnak is nevezni.

A magyar NFT-nek öt prioritási tengelye van: a humánerőforrás-fejlesztés, a gazdasági versenyképesség, a környezetvédelem és az infrastruktúra, az agrár- és vidékfejlesztés, valamint a regionális fejlesztés. Mindegyikhez egy-egy OP tartozik.

Az operatív programok

Az operatív program a Bizottság által elfogadott, a közösségi támogatási keret megvalósítását célzó dokumentum, amely több évre kiterjedő prioritások összehangolt együttesét határozza meg. Az OP külön dokumentum, amelyet a közösségi támogatási keret alapjául szolgáló nemzeti fejlesztési tervvel egy időben és az után is be lehet nyújtani. Noha formailag az OP-kat az Európai Bizottság a KTK elfogadását követően hagyja jóvá, azokat általában még a KTK elfogadása előtt kéri benyújtani a Bizottság. Az OP-k hivatalos benyújtásának időpontja döntő jelentőségű a projektek elismerhető költségeinek tekintetében, mivel a támogatásból projektköltség csak *a benyújtás napjától kezdődően* fizethető ki (ismerhető el). Az OP mindig az NFT-re mint keretdokumentumra támaszkodik, mégis a tökéletes szinergia biztosítása érdekében az NFT és az OP-k kidolgozása inkább folyamatos egyeztetést igénylő, párhuzamos tevékenység, mint egymást követő tervezési munkafázisok sora.

Az operatív programok tartalmi követelményei a prioritások, az intézkedések vázlatos ismertetése, a pénzügyi terv, valamint a megvalósításra vonatkozó rendelkezések kidolgozása. A magyar támogatási rendszerben az OP prioritásainak lényegileg az egyes célleírányzatok feleltethetők meg – ezek azok az alapegységek, amelyekhez a költségvetésben egy „sor” tartozik, és amelyeknek meghatározott céljuk van.

¹² Operational Program, OP

Az OP tartalmazza azoknak az intézkedéseknek az összefoglaló leírását, amelyek a prioritások megvalósítását szolgálják. Az *intézkedés* (measure) azon eszköz, amelynek segítségével a prioritásokat az évek során végrehajtják és amely lehetővé teszi a feladatok finanszírozását. Az intézkedések tehát az OP alapegységei. Részletes ismertetésükre a *programkiegészítő dokumentumban* kerül sor, akárcsak az intézkedések számszerűsítésére. A magyar támogatási rendszerben leginkább az egyes pályázati kiírásokból épül fel egy intézkedés. A magyar pályázati rendszer többnyire elaprózott, ezért valószínűleg összevonásokkal csökkenteni kell a pályázatok számát. Az OP ismerteti az egyes intézkedések megnevezését, leírását, általános céljait és specifikus célkitűzéseit, a megcélzott kedvezményezetteket, az egyes intézkedések hozzávetőleges pénzügyi súlyát, valamint az egyes intézkedéseket végrehajtó testületeket. Az OP tartalmazza az egyes prioritásokra és évekre lebontott indikatív pénzügyi tervet, meghatározva az előirányzott különböző közösségi pénzügyi forrásokat, valamint az igénybe vehető állami és a becsült magánfinanszírozás teljes összegét.

A szükséges intézményrendszer

Az EU a támogatások hatékony és szabályszerű felhasználásának biztosítása érdekében az SA tagországi menedzselésre jogszabályban [EU Council, 1999] részletesen szabályozott intézményi struktúrát követel meg. A magyar intézményrendszer kialakítása folyamatban van, a felkészülési szerves részét képezi.

Az *irányító hatóság* (managing authority) országos, regionális vagy helyi szintű közigazgatási vagy azon kívül eső testület, melyet a tagállam a támogatás kezelésére jelöl ki. A tagállam meghatározza az irányító hatósággal fennálló viszonyának minden részletét, s ugyancsak meghatározza a Bizottság és az irányító hatóság közti kapcsolattartás összes

körülményét. Ha a tagállam úgy dönt, az irányító hatóság és a szóban forgó támogatás kifizető hatósága lehet ugyanaz a testület.

A *monitoringbizottságnak* (monitoring committee) döntő szerepe van a KTK végrehajtásában. A monitoringbizottság a tagállamban részt vevő hatóságok és szervezetek, valamint az EU Bizottság és az Európai Befektetési Bank képviselőiből áll. Fő feladatai: a koordináció; a KTK végrehajtásának monitorozása; a szükséges elemzések elvégzése; a KTK módosításának szükség szerinti elősegítése, valamint bizonyos pénzügyi források ebből eredő átcsoportosítása. (A módosítások a tagállamokkal és a Bizottsággal egyetértésben születnek meg, mégpedig a különböző esetekre vonatkozóan lefektetett megállapodásokkal összhangban.) Minden operatív programhoz feláll egy megfelelő összetételű monitoringbizottság, szükség esetén egy alprogramhoz vagy egy adott régió szintjén is külön bizottság állítható fel. Az OP monitoringbizottságok főbb feladatai: a program végrehajtásának figyelése; az intézkedések hatékony megvalósításának segítése; a törvényes rendelkezések betartásának biztosítása; a teljesítés és a tervek összevetése; valamint hozzájárulás a programok, illetve költségvetésük bármilyen módosításához.

A *kifizető hatóság* (paying authority) a tagállamok által létrehozott egy vagy több nemzeti, regionális vagy helyi hatóságot vagy szervezetet jelent, amelynek feladata az alapok kifizetéseinek menedzselése, lebonyolítása. A kifizető hatóság az igazolt fizetési kérelmeket összeállítja és benyújtja a Bizottsághoz, illetve fogadja a Bizottságtól érkező kifizetéseket. Visszaszerzi az alapoknak visszajáró pénzeket, illetve gondoskodik ellenőrzési kötelezettségeinek ellátásáról.

Értékelés

Az értékelés és a monitoring egymást kiegészítő tevékenységek. A *monitorozás* (monitoring) folyamatos adatgyűjtés, egy adott

fejlesztés pénzügyi és fizikai megvalósításának nyomon követése annak érdekében, hogy a menedzsment információhoz juthasson és szükség esetén beavatkozhatson. Az *értékelés* (evaluation) feladata viszont a célok tükrében a program-megvalósítás jellegének, eredményeinek elemzése, hatásainak vizsgálata az adott beavatkozási területre és annak környezetére. A monitorozás folyamatos tevékenység, elsősorban a Monitoring Bizottságok végzik, az értékelés viszont időszakos feladat, amelyet a szakapparátuson kívül független külső szakértők is végezhetnek.

Közösségi pénzek felhasználása során az EU alapvető követelménye a jól tervezett és szervezett értékelési rendszer. A pontos értékelés létfontosságú a programok sikere szempontjából. Az értékelés a tagállamok és a Bizottság közös feladata. Az illetékes hatóságoknak a szabályok értelmében gondoskodniuk kell arról, hogy az értékelés a lehető leghatékonyabb legyen, és hogy az értékelési jelentések igény esetén mindenki számára rendelkezésre álljanak. A program életpályája szempontjából az értékelés három fázisban történhet:

- Az *előzetes* („*ex ante*”) értékelés a fejlesztési terv kidolgozásáért felelős hatóságok feladata. Megvizsgálja a régió, illetve az érintett ágazat erős és gyenge pontjait, a stratégia és a célkitűzések relevanciáját, majd előzetes értékelést készít a segítségnyújtásról és annak számszerűsített céljairól.

- A *folyamat közbeni* („*on-going*”, „*mid-term*”) értékelés a program végrehajtásának monitorozásán alapul és magában foglalja a segítségnyújtás első eredményeinek középtávú értékelését. A középtávú értékelés a programokat kezelő hatóság feladata a Bizottsággal együttműködve. Megvizsgálja, hogy a kezdeti eredmények hogyan viszonyulnak az *ex ante* értékeléshez, a kitűzött célokhoz, valamint vizsgálja a programok pénzügyi irányítási, megvalósítási és moni-

tozási tevékenységének minőségét. Ezt az értékelést független elemzők végzik és küldik el az érintett monitoring bizottságnak, majd pedig az EU Bizottságnak.

- Az *utólagos* („*ex post*”) értékelés az EU Bizottság feladata, a tagállammal és az irányító hatóságokkal együttműködésben. A KTK egészét érinti, értékeli a források felhasználását, a segítségnyújtás hatását és hatékonyságát, valamint azt, hogy ezek mennyire felelnek meg az *ex ante* értékelésnek. Az eredmények tanulsággal szolgálhatnak a gazdasági és társadalmi kohézió tapasztalatait illetően, továbbá segíthetnek a következő programkészítési időszak előkészítésében, hatékonyságának fokozásában.

Az elemzések és előrejelzések számszerű megjelenítéséhez, a programok monitorozásához és kiértékeléséhez harmonizált jelzőszám- vagy indikátorrendszert alkalmaznak [EU Commission, 1999b]. A program mutatók (indikátorok) négy fő típusa kerül alkalmazásra:

- az *input* (*forrás*) mutatók a program megvalósításához szükséges pénzügyi, emberi és természeti erőforrásokra vonatkoznak;

- az *output* mutatók az intézkedések megvalósításának folyamatát jelző fizikai jellegű mennyiségek, értékek, általában magára a támogatott fejlesztésre vagy tevékenységre irányulnak;

- az *eredmény* mutatók a megvalósult célokra, a programból eredő közvetlen eredményekre, előnyökre vonatkoznak;

- a *hatás* mutatók pedig az átfogó célok teljesülését, a programnak a környezetére gyakorolt, hosszabb távú hatásait veszi számba.

A mutatókkal szemben támasztott követelményeket foglalja össze a SMART¹³ be-

¹³ SMART – **S**pecific (sajátosan jellemző, fajlagos), **M**easurable (mérhető), **A**vailable/**A**chievable (rendelkezésre álló), **R**elevant (a tárgyhoz tartozó), **T**imely (aktuális).

tűszó. A Strukturális Alapok tervezési dokumentumainak tartalmazniuk kell a megfelelő jelzőszámokat. Az EU által elvárt monitoring és értékelési kultúra hazai meghonosítása és feltételrendszerének megteremtése a következő időszak egyik fontos feladata.

A támogatás mértéke az SA forrásaiból

Az SA 2000-2006 közötti kötelezettségvállalásaihoz – 1999. évi áron számolva – 195 milliárd euró áll rendelkezésre megközelítően arányos évenkénti elosztásban. Az SA 69,7 %-át (vagyis összesen 135,9 milliárd eurót) az 1. célkitűzéshez rendelik. A Strukturális Alapokból származó évi összes bevétel bármely tagállamban – a Kohéziós Alapból származó támogatással együtt – nem haladhatja meg az adott ország GDP-jének 4 %-át.

Mind a Strukturális Alap, mind a Kohéziós Alap a tagállamokkal (ahol lehet, a magán-szektorral) közösen finanszírozza a fejlesztési intézkedéseket. Ez a közösségi segítségnyújtás az érintett országok pénzügyi lehetőségeinek kiegészítését célozza, nem pedig azok helyettesítését szolgálja. Adott ország ciklusban egy intézkedés egyszerre csak egy alapból kaphat pénzügyi támogatást. Az alapok hozzájárulása főképp vissza nem térítendő támogatás, de más formákat is ölthet (visszatérítendő támogatás, kamattámogatás, garancia, tőkerészesedés, kockázati tőketulajdon vagy más finanszírozási forma).

A Strukturális Alapok által nyújtott *társfinanszírozás* mértéke négy feltételtől függ: (1) az adott feladat súlyától és jelentőségétől; (2) a tagállam pénzügyi kapacitásaitól és viszonylagos gazdagsági helyzetétől; (3) az akció, az intézkedés konkrét regionális vagy közösségi fontosságától; (4) valamint a tevékenység konkrét jellemzőitől (a költségek nagyságától).

Az 1. célkitűzésbe tartozó régiókban (így a későbbi tagállamokban) az EU-támogatás mértéke *nem haladhatja meg az összköltség 75 %-át* és általános szabályként *nem lehet*

kevesebb az összes közkiadás 50 %-ánál. (A Kohéziós Alap által támogatott projektek esetében a segítségnyújtás mértéke kivételes esetekben az összköltség 80 %-át is elérheti.) Az 1. célkitűzésbe tartozó régiókban infrastrukturális beruházás esetén az alapok hozzájárulása nem haladhatja meg az összes beszámítható költség 40 %-át, amely rendkívüli esetben még legfeljebb 10 %-kal megemelhető. Cégekbe történő beruházás esetén a hozzájárulás nem haladhatja meg az összes költség 35 %-át, amely 10 %-kal megemelhető kis- és középvállalatok (KKV) nem visszatérítés-mentes támogatásakor.

A fenti szabályok értelemszerűen a közpénzekből és az egyéb forrásokból származó támogatások programszintű arányaira vonatkoznak. A kedvezményezett szintjén természetesen figyelembe kell venni az EU-versenyszabályokat, illetve a már harmonizált hazai vonatkozó jogszabályokat.¹⁴

A K+F és innováció támogatása az SA eszközeivel

Az Európai Tanács 2000. márciusban tartott lisszaboni ülésén általános célként fogalmazta meg, hogy: „*a tudásalapú gazdaságba és társadalomba való átmenet előkészítése az információs társadalomra és a K+F-re irányuló határozottabb politikákkal, valamint a versenyképességet és az innovációt segítő szerkezeti reform folyamatának erősítésével*” történjen. Új, az erőforrások koncentrációját célzó integrált stratégiát hirdetett meg az Európai Bizottság 2000 januárjában *Az európai kutatási térség felé* című közleményében [EU Commission, 2000a]. Az európai kutatási térség¹⁵ regionális vonatkozásait fogalmazta meg konkrét akciók formájában az Európai Bizottság 2001. októberi, *Az európai kutatási térség regionális dimenziói*

¹⁴ A kormány 163/2001. (IX. 14.) korm. rendelete a vállalkozásoknak nyújtott állami támogatások tilalma alóli mentességek egységes rendjéről.

¹⁵ European Research Area, ERA

címet viselő közleménye [EU Commission, 2001a], amely Magyarország számára is új, régiótudatos fejlesztési modellt kínál. A területi szemléletű megközelítés a nemzeti kutatási és innovációpolitikákban egyrészt a regionális tudatosság fokozására – vagyis e politikákban a régiók szükségleteinek érvényesítésére –, másrészt a régiók kutatási és innovációs kapacitásainak kiépítésére irányul.

A Strukturális Alapok 1988-as reformjuk óta növekvő jelentőségük a közösségi politikákban. A támogatások a kohéziós gondokkal küzdő országokban a GDP 1,6-3,8 %-át kitevő évenkénti fejlesztési forrást jelentettek. A kutatás-fejlesztés és az innováció (KFI) növekvő súllyal jelenik meg a strukturális fejlesztési célterületek között, elősegítve a hosszú távú versenyképesség megalapozását, illetve megerősítését. A régiók közötti KFI különbségek mérséklését az EU fontos feladatként fogalmazta meg [EU Commission, 2001b], hiszen az 1. célkitűzés alá eső elmaradott régiókhoz a 15 tagország népességének 26,6 %-a, GDP-jének 15 %-a, míg a K+F személyi állománynak csupán 4 %-a és a szabadalmi tevékenységnek csak 2 %-a tartozik. Ezek a kiegyensúlyozatlan területi eloszlások indokolták a K+F és az innovációs fejlesztések súlyának erőteljes növelését. Míg az SA első programozási időszakában (1988–1993) a KFI-támogatás 1,4 milliárd ECU volt, addig a második periódusban (1994–1999) ez az érték 5 milliárd ECU fölé, több mint 3,5-szeresére emelkedett [EU Commission, 2000].¹⁶

¹⁶ A SA támogatásait vizsgáló elemzés az 1. és a 6. célkitűzés alá eső területekre terjed ki. *Megjegyzés:* Az EU 1989-1999 között a régiókat jellemzőik alapján 6 célkitűzési kategóriába sorolta (2000-től viszont ezek számát háromra csökkentette): 1. *célkitűzés:* a fejlődésben elmaradott régiók (a terület GDP/fő átlaga elmarad az EU átlagának 75 %-ától) fejlesztésének és strukturális alkalmazkodásának támogatása; 6. *célkitűzés:* a ritkán lakott északi területek fejlesztése.

Az 1. táblázat adatai szerint a KFI részesedése a teljes SA támogatásból 3,2 %-ról 5,3 %-ra nőtt. Ez az SA támogatás a négy ún. kohéziós ország¹⁷ esetében a teljes nemzeti K+F ráfordításoknak (GERD¹⁸) 3,6 %, illetve 8,6 %-a volt. (A zárójelbe tett értékek a számtani középértéket jelentik.) Kiemelkedő Portugália teljesítménye az 1994-1999-es ciklusban, amelynek során nemzeti K+F ráfordításainak 28,7 %-át tudta az SA forrásaiból elnyerni. Az alacsony GERD értéktől eltekintve (GERD/GDP = 0,65 %) ehhez az impozáns eredményhez Portugáliának nagyon hatékony felkészülésre, érdekérvényesítésre és abszorpciós képességre volt szüksége.

Ha az alapok támogatásának átlagos megoszlását intézkedési területenként elemezzük (1. 2. táblázat), a támogatások több mint harmadát a vállalatoknál folyó KFI tevékenység kapta. Közel 30 %-os támogatást kapott a KFI-infrastruktúra, az eszközök és az épületek fejlesztése, korszerűsítése. Mintegy 15 %-os támogatásban részesültek az egyetemi és kutatóintézetek kutatások, beleértve a vállalatokkal közösen végzett kutatási tevékenységet is. Hasonló nagyságrendű támogatást kaptak a technológiatranszfer és az innováció fejlesztését, valamint a hálózatok kialakítását segítő tevékenységek. Az emberi erőforrás fejlesztésére, képzésére, valamint a tanácsadó szolgáltatásokra fordított csekély támogatás oka, hogy az elemzés az Európai Regionális Fejlesztési Alap (ERFA) támogatásait vizsgálja és nem tartalmazza az Európai Szociális Alap (ESZA) támogatásait, amelyek e területeket segítik. A 2. táblázat példaként néhány ország esetében is bemutatja az intézkedési területek szerinti megoszlást. Ezeknek a szemléltetési céllal közölt

¹⁷ A vizsgált időszakban az 1. célkitűzés hatálya alá eső, (NFT-t benyújtó), kohéziós gondokkal küzdő EU-tagországok – Görögország, Írország, Portugália, Spanyolország.

¹⁸ Gross Expenditure of Research and Development – teljes nemzeti K+F ráfordítás

Országok (az 1. és a 6. célkitűzés alá eső régiók)	1989-1993			1994-1999		
	KFI SA támogatás* [mECU]	KFI rész az össz SA-ból [%]	SA támogatás/ nemzeti GERD [%]	KFI SA támogatás* [mECU]	KFI rész az össz SA-ból [%]	SA támogatás/ nemzeti GERD [%]
Görögország	68	0,9	4,6	592	4,2	16,4
Írország	166	3,7	8,8	316	5,6	6,3
Portugália	383	4,5	21,6	963	6,9	28,7
Spanyolország	220	2,2	1,2	1262	4,8	5,1
A 4 kohéziós ország összesen	837	2,7	3,6 (9,1)	3133	5,2	8,6 (14,2)
Olaszország	413	4,9	0,7	951	6,4	1,5
EU-tagországok összesen	1422	3,2		5022	5,3	

1. táblázat • A Strukturális Alapok támogatása néhány országban (Forrás: Sixth Periodic Report DGXVI 1999, valamint Second European Indicators Report DGXII 1997)
*ESZA nélküli értékek

intézkedési terület millió ECU	allokált támogatás	allokáció %				
		EU összes	Görögország	Portugália	Spanyolország	Olaszország
vállalati kutatások	1347	35,6	42,9	15,3	18,9	41,4
infrastruktúra, eszköz és épület	1121	29,7	17,8	26,3	50,0	18,7
közfinanszírozású intézményi kutatások	552	14,6	30,8	21,8	2,1	18,7
technológiatranszfer, innováció, hálózatok	507	13,4	–	7,4	29,0	16,1
humán erőforrás és képzés	237	6,3	8,5	29,2	–	5,0
tanácsadó szolgáltatások	15	0,4	–	–	–	0,1
összesen:	3780	100,0	100,0	100,0	100,0	100,0

2. táblázat • A Strukturális Alapok KFI intézkedési területek szerinti megoszlása (Forrás: Sixth Periodic Report DGXVI 1999, valamint Second European Indicators Report DGXII 1997) *ESZA nélküli értékek

adatoknak a mélyebb elemzése csupán a helyi adottságok és stratégiai elképzelések alapos ismeretének birtokában lehetséges.

A támogatások mértéke és azok ágazatonkénti, illetve területenkénti megoszlása országonként teljesen eltérő képet mutat. A fenti adatok nagyon karakterisztikusan szemléltetik, hogy az EU strukturális támogatásai – legyenek bár szigorúan egységes elvek és előírások által szabályozva – alapvetően az adott országnak az NFT-ben (illetve az operatív programokban) stratégiai tervekkel kölőn alátámasztott és a KTK egyeztetési tárgyalásain kellő súllyal képviselt fejlesztéseire irányulnak. Ezekben az összehasonlító elemzésekben szereplő országok példái azt igazolják, hogy az SA támogatásai nem valamilyen normatív elosztási elv alapján illetik meg az adott régiót vagy országot, hanem nagyon alapos tervezés, felkészülés, a helyi erőforrások koncentrációja, valamint következetes tárgyalási érdekvéonyesítés eredményeként lehet jelentős közösségi forrásokat elnyerni.

Hol tart a magyar tervezési folyamat?

A nemzeti fejlesztési tervet az EU-csatlakozás (az SA igénybevételei jogosultság) várható időpontja előtt 6-9 hónappal célszerű benyújtani. A legkedvezőbb csatlakozási forgatókönyv 2004-es időpontját alapul véve a magyar NFT benyújtása legkésőbb 2003 tavaszán esedékes. A tervezési folyamat 2000 végén kezdődött, a 2246/2002. (VIII. 15.) kormányhatározat szerint az NFT és az OP-k elkészítésének határideje 2002 decembere.

A magyar kormány *Fejlesztéspolitikai Koordinációs Tárcaközi Bizottságot*¹⁹ (FKTB) hozott létre az NFT koordináció, egyeztetési és ellenőrzési munkáinak elvégzésére. Több funkcionális bizottság és munkacsoport alakult, operatív programonként

¹⁹ Az FKTB létrehozásáról a 2171/1999. (VII. 8.) számú kormányhatározat döntött.

is külön munkacsoportok működnek. A NFT készítésének nemzeti szintű államigazgatási koordinálását kezdetben a Gazdasági Minisztérium végezte, majd 2002 júliusától a koordinációs feladatokat a Miniszterelnöki Hivatal keretében államtitkár irányításával működő Nemzeti Fejlesztési Terv és EU-támogatások Hivatala végzi.²⁰ A szakterület kiemelkedő szakértőinek bevonásával az NFT stratégia kialakításának segítésére Integrációs Fejlesztéspolitikai Munkacsoportot alakult. Kormányhatározat²¹ jelölte ki operatív programonként az irányító hatóságokat. Folyamatban van a pénzügyi és a monitoring intézményi rendszer kialakítása, harmonizálása.

Az NFT és az OP-k tervezési munkái során a helyzetelemzés készítése, a SWOT analízis²¹ elvégzése, a célstruktúra összeállítása, a prioritások kialakítása, a stratégia megfogalmazása, valamint a pénzügyi alapadatok strukturálása folyamatos egyeztetéssel, visszacsatolásokkal, korrekciókkal történik. A magyar NFT négy szektorális (gazdasági versenyképesség, humán erőforrás-fejlesztés, környezetvédelem és infrastruktúra, valamint agrárgazdaság- és vidékfejlesztés) és egy átfogó regionális OP-t tervez.

A *gazdasági versenyképesség operatív program* (GVOP) egyik alprogramját képezi a *kutatás-fejlesztés, innováció* (KFI). A GVOP koordinálásáért a Gazdasági és Közlekedési Minisztérium (GKM) illetékes egysége felelős, a KFI alprogram szakmai munkáit az Oktatási Minisztérium kutatás-fejlesztésért felelős államtitkársága koordinálja. A GVOP legfontosabb prioritásai a befektetés-ösztönzésre, a kis- és középvállalkozások fejlesztésére, a turizmusfejlesztésre, a kutatás-fejlesztés és innovációra, valamint az információs és tudásalapú gazdaság kiépítésének elősegítésére irányulnak.

²⁰ A kormány 2199/2002. (VI. 26.) korm. határozata

²¹ SWOT – *Strengths* (erőségek), *Weaknesses* (gyengeségek), *Opportunities* (lehetőségek), *Threats* (veszélyek) meghatározásán alapuló elemző módszer.

A KFI alprogram a helyzetértékelés és a SWOT analízis eredményeire alapozva a tudásbázis, valamint az innovációs képességek és teljesítmények erősítését az alábbi prioritási területeken kívánja megvalósítani:

- stratégiai jelentőségű, kooperatív kutatási és technológia-fejlesztési tevékenységek támogatása;

- K+F erőforrások (beruházások, technikai infrastruktúra, emberi erőforrások) fejlesztése;

- a vállalati és regionális innováció-képesség, a tudás- és technológiatranszfer, valamint a K+F együttműködés és hálózatépítés fejlesztésének támogatása.

A szükséges eszközrendszer, a források és a működési struktúrák megtervezése, ezt követően a hatékony megvalósítás feltételeinek megteremtése a feladatunk.

Súlyponti feladatok az SA forrásainak elnyerésére a KFI területén

A strukturális alapok által nyújtott lehetőségek komoly kihívásokat, feladatokat jelentenek a kutatás-fejlesztéssel és az innovációval foglalkozó valamennyi szakember számára az elkövetkező évek során. A súlyponti feladatok a következők szerint foglalhatók össze:

- A hazai támogatási rendszer továbbfejlesztést igényel, az EU rendszereivel történő harmonizációja szükséges [Tétényi, 2000].

- Elő kell segíteni a KTI politikai dokumentumokban, illetve a támogatási rendszerekben a régiótudatos szemlélet megerősítését [Kleinheincz, 2002].

- Folyamatos együttműködési, partnerségi viszonyt kell kialakítani a program minden érdekelt résztvevője között.

- A program teljes időtartamán átívelő monitoring és értékelési kultúrát kell kifejleszteni, illetve meg kell teremteni ennek feltételrendszerét.

- Erősíteni kell a pályázati (abszorpció) képességeket egyéni, intézményi, regionális és nemzeti szinten egyaránt, amely a személyi, a tárgyi és a pénzügyi feltételek együttes fejlesztését igényli.

- Ki kell építeni a kutatás-fejlesztés, innováció regionális menedzselésének személyi, infrastrukturális és intézményi feltételeit.

- Meg kell tervezni és elő kell teremteni a projektek hazai finanszírozásának költségvetési eredetű központi és helyi, valamint az egyéb üzleti forrásait.

- Erősíteni kell a KTI szféra érdekérvényesítő képességét mind a tervezési és a forrásallokációs tárgyalási, mind a megvalósítási fázisokban.

A feladatok elvégzésében az időtényezőnek is fontos szerepe van. A tét nem csupán a jelen pályázati ciklusban még elérhető források megszerzése, hanem a felkészülés során olyan menedzselési, kooperációs szemlélet meghonosítása, pályázati kultúra kialakítása, intézményi struktúra kiépítése, mechanizmusok automatikussá válása, amelyek a tudásbázis továbbfejlesztését, az innovációs képességek erősítését és a nemzetközi versenyképesség fokozását segíthetik elő.

Aki félénken kér, vagyis határozatlanul fogalmazza meg céljait, bátoratlanul képviseli érdekeit, nem kellő felkészüléssel ül a tárgyalóasztalhoz, annak igényei és reményei nem a reális esélyek szintjén valósulnak meg. A sikert a kitartó munka, az alapos felkészültség és a határozott érdekérvényesítés hozza meg a Strukturális Alapok által nyújtott lehetőségek kutatás-fejlesztési és innovációs célú kiaknázása területén is.

Kulcsszavak: *nemzeti fejlesztési terv, közösségi támogatási keret, operatív program, Európai Unió, Strukturális Alapok, K+F, innováció, támogatás, társfinanszírozás*

IRODALOM

- EU Commission (1999a). Vademecum for Structural Funds Plans and Programming Documents, Methodological Working Paper 1 for the New Programming Period 2000-2006, European Commission
- EU Commission (1999b). Indicators for Monitoring and Evaluation, Methodological Working Paper 3 for the New Programming Period 2000-2006, European Commission
- EU Commission (2000a). Communication from the Commission to the Council, the European Parliament, the Economic and Social Committee and the Committee of the Regions. Towards a European Research Area. Commission of the European Communities, Brussels, 18 January 2000, COM 6
- EU Commission (2000). European Commission: Impact of the Structural Funds 1994-1999 on Research, Technology Development and Innovation (RTDI) in Objective 1 and 6 Regions
- EU Commission (2001a). Communication from the Commission. The Regional Dimensions of the European Research Area. Commission of the European Communities, Brussels, 03. 10. 2001, COM 549 final
- EU Commission (2001b). Communication from the Commission to the Member States. The Regions and the New Economy. Guidelines for Innovative Actions under the ERDF in 2000-2006, Brussels, 31/01
- EU Council (1999). Council Regulation (EC) No 1260/1999 of 21 June 1999 laying down general provisions on the Structural Funds
- Kleinheincz Ferenc (2002). Regionális innovációpolitika az Európai Unióban, magyar tanulságokkal. Magyar Felsőoktatás, **4.** 10-11.
- OECD (1999). Managing National Innovation System, OECD, Paris,
- Tétényi Tamás (2000). A fejlesztéspolitika átalakítása Magyarországon. Ipari Szemle, **2.** 4-10.



HOGYAN HOZHATNÁNK HAZA A KÜLFÖLDÖN DOLGOZÓ, TEHETSÉGES FIATAL MAGYAR KUTATÓKAT?

– Javaslat egy „inkubátorház” létrehozására –

Csermely Péter

a biol. tud. dokt., egyetemi tanár (Semmelweis Egyetem) – csermely@puskin.sote.hu

Málnási-Csizmadia András

PhD, egyetemi adjunktus (Eötvös Loránd Tudományegyetem) – amc26@leicester.ac.uk

Kovács Mihály

PhD, Visiting Fellow (National Institutes of Health, Bethesda, USA) – kovacsm@nhlbi.nih.gov

Bevezetés

A magyar tudományos és gazdasági színvonal mára elérte azt a szintet, amelyben a következő tényezők megváltoztatásának sikere alapvetően meghatározhatja a további fejlődést:

1. Ma Magyarországon a kutatók humán erőforrás-értéke és a kutatás gazdasági értéke *virtuális*. A magyar tudomány, gazdaság, sőt, az egész társadalom fejlődésének kulcskérdése, hogy sikerül-e ezt a virtuális értéket mielőbb valódi gazdasági értékévé konvertálni.

2. Sikerül-e valódi hidat építenünk az akadémiai-egyetemi alapkutatás és az alkalmazott-ipari kutatás-fejlesztés közé.

3. Sikerül-e koncentrálnunk a legmagasabbban képzett társadalmi réteg, vagyis tudományos kutatóink tevékenységét, valamint hazacsábítanunk a jelenleg külföldön dolgozó, értékteremtő, tehetséges, dolgozó, fiatal kutatógárdát.

A fenti alapkérdésekben a továbblépés egyetlen lehetősége az, ha létrehozunk az állami befektetés és a kockázati tőke minél

hatékonyabb, valós ötvözését, kollaborációját. Mindez kiindulópontja lenne a hazai high-tech-biotech ipari szektor a jelenleginél sokkal gyorsabb felépítésének is. Ennek kidolgozásához a legjobb példa a finn modell, amely tíz év alatt megteremtette Európa legfejlettebb, legerősebb és legprofitábilisabb hightech-biotech iparágát, amely révén az ország a világ legversenyképesebb gazdaságává vált.

Sok más korábbi lehetőség mellett a Nemzeti Kutatás-Fejlesztési Pályázati rendszer alap elképzelése előremutató volt abból a szempontból is, hogy számottevő források koncentráálásával megpróbálta bevonní a külső ipari tőkét az alap- és alkalmazott kutatásba, ugyanakkor erős törekvése volt, hogy a kutatási területeket fókuszálja. Mindazonáltal ezeket a célokat csak részben sikerült elérni, mert igen sok esetben a bevont külső tőke és hozzáadott munka virtuális volt, valamint nem sikerült alapvetően új, fókuszált konzorciumokat létrehozni, hanem a már korábban meglévő kutatócsoportok a pályázat lehetőségeit aknázták ki a régebbi kutatások folytatására. Ennek következménye,

hogy ez a rendszer nem indított a kezdeti reményekhez képest jelentős változásokat a magyar tudomány területén, és nem sikerült valódi hidat verni az egyetemi-akadémiai alapkutatás és az alkalmazott kutatás közé. Ennek fontos jele, hogy – néhány bátor kezdeményezéstől eltekintve – az elmúlt években nem alakulnak nagy számban hightech-biotech cégek Magyarországon.

Véleményünk szerint nemcsak a pályázati rendszerben kell új utakat keresni és nyitni, hanem friss, dinamikus erőket is be kell csábítani a magyar tudományba, akik tudásuk és munkájuk révén a megfelelően kialakított környezetben képesek az összeköttetést megteremteni az alap- és az alkalmazott kutatás között. Mindazonáltal ezek a kutatócsoportok csirái lehetnek későbbi életképes, messze nem csak a gyógyszerkutatás területén működő hightech-biotech cégeknek.

Célunk az kell hogy legyen, hogy az egyetemi/akadémiai kutatásban felgyülemlett intellektuális értéket az országon belül konvertáljuk gazdasági értékévé. A mai magyar gazdaság ezt az értéket nem tudja hasznosítani. A világot mindenhol az egyetemi/akadémiai kutatásban felgyülemlett tudást viszonylag kis méretű kutatói cégek „szivattyúzzák át” az ipari – elsősorban hightech-biotech – kutatásba. Ahhoz, hogy az ilyen vállalkozások alapítása vonzó perspektíva legyen, működésük pedig hatékony és életképes lehessen, megfelelő környezetet kell biztosítani. Magyarországon ezt a környezetet a leghatékonyabban olyan inkubátorházak létrehozásával lehet elérni, amelyekben a cégek alapításához szükséges előkutatásokat (a tudás előkészítését az „átszivattyúzáshoz”) hatékony környezetben lehet véghezvinni. Finnországban – ahol az európai biotech cégek több mint 10 %-a található – a biotech vállalkozások túlnyomó többsége az egyetemeken szunnyadó tudás és humán erőforrás alapján, inkubátorházak segítségével született.

Az alábbiakban leírjuk elképzelésünket egy inkubátorház létrehozásáról, amelyben találkozhat az állami befektetés és a kockázati tőke, a legjobb kutatók koncentrálódhatnak, s kiindulópontja, inkubátora lehet szilárd kutatási alapokon nyugvó hightech-biotech cégeknek. Elképzeléseink nagyban támaszkodnak a sikeres finn kezdeményezésekre.

Inkubátorház

A fentiek alapján az általunk kidolgozott javaslatok egyik fontos eleme, hogy a tudományra fordítható összegek bővülésével *kezdődjön meg egy olyan „inkubátorház” létrehozása*, ahová a külföldön nevet szerzett fiatal kutatókat önálló laboratórium nyitásának lehetőségével lehetne csábítani. Az intézmény a kísérletes tudományozások művelőinek teremtene átmeneti (3-6 éves) lehetőséget. Az alapstruktúra (épület, közmű, könyvtár, adminisztráció, műszervásárlási indulócsomag, kutatástámogatási indulócsomag, alapfizetés mind a kutató, mind néhány munkatársa számára) biztosításán felüli összegeket az inkubátorház munkacsoport-vezetőinek pályázatokkal és/vagy kockázati tőke bevonással kellene „összeszedniük”. Tartós sikertelenség esetén az intézetből kikerülnének, sikeres működés esetén pedig elsősorban hightech-biotech cégek alapítására lehetne ösztönözni-segíteni őket. Az inkubátorházban „nevelkedett” kutatók bázisát képezhetik a jövőbeni ipari kutatóintézetek vezetőinek. Természetesen nem lennének elzárva az egyetemi-akadémiai karrier folytatásától sem.

Az inkubátorház filozófiája

Az inkubátorház tevékenysége széles perspektívájú alapkutatáson alapulna, és azt olyan, tudatosan kialakított szerkezetben végelné, amely biztosítja a nagyfokú hatékonyságot, ezáltal a kockázati tőkének és az államnak biztonságos befektetési terepet jelentene hosszabb távon is. Legfőbb tulajdonságai:

1. Infrastrukturális háttérét az állam biztosítja.

2. Flexibilis és dinamikus működését kis kutatócsoportok teszik lehetővé.

3. A csoportok olyan fókuszált alapkutatót végeznek, amely 3-6 év alatt megalapozza a profitorientált alkalmazott kutatás (esetleg kísérleti fejlesztés) elindítását.

4. Az intézmény a kutatócsoportok kooperációját elősegíti, ezáltal nemcsak újabb interdiszciplináris projekteket iniciálhat, hanem esetlegesen csoportfúziókkal nagyobb esélyt teremt a további életképes működésre, vállalkozások alapítására.

5. Hatékony igazgatási háttérrel rendelkezik, amely közvetlen segítséget nyújt a pályázati és szerződés-kötési tevékenységekhez, az egyes csoportok és az egész intézmény PR-munkájához, illetve a pályázatok gazdasági és pénzügyi menedzslését is végzi. Ugyancsak hatékonyan hajtja végre a csoportok tevékenységével összefüggő egyéb adminisztratív és szervezési feladatokat.

6. A csoportok tevékenységi periódusának lejártaival az igazgatási háttér széles körű segítséget (kapcsolatépítés, PR, jogi háttér stb.) nyújtana a kutatócsoport további működésének megszervezéséhez, mindennek előtt a cégalapításhoz.

Az igazgatási háttér megszervezése azért is fontos, mert a kutatóknak nemcsak idejük és energiájuk nem marad tevékenységük ilyen irányú menedzselésére, hanem nyilvánvalóan ezeken a területeken szakértelmük sem lehet olyan szinten, hogy ezeket az esszenciális feladatokat professzionális módon véghezvigyék.

Az inkubátorház igazi potenciálja a humán erőforrás

Az utóbbi évek szomorú tapasztalata, hogy a korábbihoz képest nagy létszámú doktoranduszi évfolyamok kibocsátásával ugrás-szerűen megnőtt a külföldre kerülő tehetséges magyar kutatók száma. Mindez alapve-

tően nem baj, hiszen a két-három éves külföldi (leginkább: amerikai) tapasztalat az ígéretes tehetségek további életútja szempontjából nélkülözhetetlen. Ugyanakkor, a kinti életforma a méltó visszatérés lehetősége nélkül állandósodhat. Ez még jó esetben is ahhoz vezet, hogy a fiatal tudósgenerációk hazai pénzen kiképzett legjobbjai a külföldi tudományos potenciált növelik, rossz esetben pedig jó néhány fiatal magyar tehetség tudományos kizsákmányolását, és – végső soron – elkallódását okozza. Személyes tapasztalatból tudható, hogy a kint élő kutatók döntő többsége hazavágyik, és elemi egzisztenciális, valamint kutatói igényei kielégítése esetén vállalná az itthoni mostohább és küzdelmesebb feltételeket is. Az ország helyzetének javulásában bízva a „hazajövetel”-ből így könnyen végleges „ittmaradás” lehet, ami viszonylag kis „befektetéssel” a minőség kiáramlása helyett a minőség visszaáramlását idézheti elő. Ugyanakkor többek között ez az a gazdag szellemi potenciál, amit hosszú évtizedeken keresztül, jelentős befektetéssel az ország kinevelt. A jelen döntéshozói előtt áll a választás lehetősége, hogy ezt az „aranybányát” kiaknázzuk, vagy – itthon illetve külföldön – veszni hagyjuk.

Hol, a fiatal kutató életpályájának mely szakaszán, és hogyan lehetne a leghatékonyabban beavatkozni a kiáramlás felgyorsulása, de visszafordíthatatlanná talán még nem vált folyamatába?

A legtöbb tehetséges fiatal kutató életének fordulópontja az önálló műhely, önálló laboratórium kialakítása. Erre – hazai önös szempontjaink alapján: szerencsénkre – külföldön is, de sajnos hazánkban is kevés esély kínálkozik. (Az OM, az MTA, az OTKA néhány kezdeményezése, egy-két intézmény példamutató gyakorlata a pénzhiány miatt inkább gesztus-, semmint megoldásértékűek.) Az itthoni önálló laboratórium létrehozása nehézkes a legtöbb olyan esetben, ahol a már meglévő struktúrába kellene beillesz-

kedni, akár egy már működő tanszék, akár egy tudományos kutatóintézet részeként. Ilyenkor többnyire (tisztelet a néhány kivételnek) már a rendelkezésre álló hely sem elég, de az önállóság kibontakozásának rendszerint a meglehetősen jól kitapintható (érzékeltetett) függelmi viszonyok is határt szabnak. Az a kutató, aki már megalapozta a karrierjét külföldön, túl kockázatosnak tartja újra elkezdni a küzdelmet a magyar hierarchiában, másrészt pedig az állami kutatóhelyeken az állam nem képes akkora juttatást adni, amely külföldről nézve is elfogadható lenne az életszínvonal és a kutatás fenntartására.

A hazatérés felé billenti a képzeletbeli mérleg serpenyőjét, ha kiépítjük a perspektivikus hazatérés lehetőségét. Ez leginkább akkor áll fenn, ha a kint élő fiatal, tehetséges kutatók olyan körülmények elérésére pályázhatnak, amelyek jó esélyt csillantanak fel arra, hogy kutatásaik révén később high-tech-biotech céget alapíthassanak, vagy megalapozott hazai karrierjük révén az itthoni tudományos élet vezetőivé válhassanak. Magyarországon az inkubátorház(ak) kiépítésével megteremthetők azok a körülmények, amelyek között ezek a későbbi vállalkozások reménykeltők, életképesek, profitábilisak lehetnek.

Természetesen egy ilyen lehetőség rengeteg pénzbe kerül. Így a felállítandó laboratóriumoknak a beköltözők állandó kutatóhelyeként történő működtetése még akkor is elviselhetetlen terheket jelentene, ha e lehetőségben csak a legjobb kutatók részesülhének. Még fontosabb ellenérv azonban az állandósult laboratórium ellen az, hogy „intézményrendszeren kívülsége” az amúgy is széttagolt (felsőoktatás, MTA, minisztériumi kutatóintézet) magyar kutatási struktúra egy újabb elemét hozná létre. Így a tényleges önállóságot biztosító, független laboratóriumként csak egy olyan hely jöhet szóba, amely e lehetőséget csak egy jól meghatározott,

átmeneti időszakra adja meg. Ezután a kutatóhely tagjai a kiválóságukat vagy egy új iparszerkezet megteremtésében kamatoztathatják, vagy már az itthoni szakmai közvélemény előtt is bizonyítottként vezető posztokon „becsatornázódnak” a hazai kutatási intézményrendszer létező elemeibe.

A továbbiakban a fenti elveken működő inkubátorház létrehozására egy lehetséges indítójavaslatot fogalmaztunk meg.

Az inkubátorház kutatói

A szóba jövő kutatók köre

Az inkubátorházba alapvetően a 30 és 40 év közötti, kiemelkedően tehetséges, kísérletes tudományzakot művelő magyar kutatók kerülnének be. A fenti korhatár természetesen csak irányelv, amelytől indokolt esetben lehetőség lenne az eltérésre. A kutatók tématerületében nem lenne semmilyen különleges korlátozás, hiszen a tudományterületek zömének merev elhatárolása mára már amúgy is mesterségesé vált, és a ház létrehozásának egyik fontos célja az interdiszciplináris kapcsolatok kiépítése, az ott dolgozók látókörének szélesítése lenne. A tudományfejlődés trendjei, valamint az infrastruktúra biztosíthatósága miatt megfontolandó, hogy a művelhető tudományterületek az élettudományi orientációval bíró területekre szűküljenek.

Bekerülés

A résztvevőket széleskörű nemzetközi hírverés után évente meghirdetett, nyílt pályázattal választaná ki egy neves hazai tudósegyéniségekből összeálló grémium, amely részben vagy egészben átfedésben lehetne az inkubátorházat irányító Tudományos Tanáccsal. A pályázat legfontosabb része egy 3-6 éves alapkutatási projekt-terv, amely perspektivikus és szilárd alapot biztosít a további alkalmazott kutatáshoz. Előnyben kell részesíteni azt a pályázót, aki már ebben

a fázisban be tudja mutatni a jövőbeni alkalmazott kutatásra alapozott vállalkozásának modelljét, cégfilozófiáját, a tudományos és piaci trendeket, elképzeléseket. Pontosan be kell mutatni azokat a lehetőségeket vagy már meglévő támogatásokat, amelyek a program anyagi háttérét biztosítják. A pályázóknak az adott tudományterületen addig elért eredményei különös hangsúlyt esnek latba a kiválasztásnál. Elképzelésünk szerint nemcsak egyéni pályázók, hanem két-, kivételes esetben háromfős kutatócsoportok is pályázhatnak. Ilyen csapatok jól megalapozott munkaterv mellett adott esetben nagyobb eséllyel tudnának független kutatói csoportot, vállalkozást indítani a inkubátorházban eltöltött idő után.

Mit kapna a sikeres pályázó?

- az inkubátorház infrastruktúráját (saját maga számára szoba, kb. 3-6 munkatárs foglalkoztatására elegendő laboratóriumi és irodahely, közművek ingyenes használata, könyvtár, az inkubátorház központi műszerparkja alapvető műszerekkel – sejt kultúra, centrifuga, mikroszkóp stb. – valamint az inkubátorház központi adminisztrációja, amely a gazdasági ügyek vitelét, valamint a központi műszerpark/könyvtár stb. felügyeletét látna el

- a jelenlegi professzori fizetéssel egyenértékű fizetést
- három további munkatárs foglalkoztatására elegendő alapbérkeretet fejenként kb. egy jelenlegi doktorandusz ösztöndíja kétszeresének megfelelő összegben
- egy képzett szakasszisztens foglalkoztatására elegendő bérkeretet
- a kezdeti kisműszerek beszerzésére és a kutatások megindítására szolgáló „indulótöke” 10-20 millió Ft összegben. Az indulótöke a kutatások dologi költségeinek fedezésére csak az első évben lenne használható. A dologi költségeket a 2. évtől kezdve a kutatóknak saját grantjaikból kellene fedezniük.

Első ránézésre ez a juttatáscsomag – amely a jelenleg elérhető legjobb magyar grantoknál is messze jobb – fejedelmi adománynak tűnhet. Azonban egyrészt számos olyan elemet (hely, fizetés, munkatársak) tartalmaz, amelyet az „ittthoni fejlődésű” és szerencsés környezetben lévő pályatárs igényel, de más forrásokból beszerezhet. Másrészt a dologi költségek előteremtésének, valamint az átmeneti helyzetnek (amely a sikertelenség esetén a házból való kikerülésben éri el csúcspontját) kényszerítő hatása miatt a bekerültek legalább annyira a „pszichológushoz járó, túlhajszolt, szerencsétlen flótás”, mint amennyire az „Istenek kegyeltje, szerencsés fickó” megjelölést érdemelnék ki. Harmadrészt: kevesebb a kinti lehetőségekkel nem lehet versenyezni, és az elképzelés nem a másutt nem kellő, bukott alakok hazahozatalát célozza.

Meddig kapná a sikeres pályázó a fenti juttatásokat?

A fenti juttatások három évre járnának. Cél lenne a gyors rotáció, hogy a kutatók minél előbb független vállalkozást, kutatócsoportot hozzanak létre. A juttatások meghosszabbítására az első három év eltelté előtt újra lehetne pályázni. Az inkubátorházat irányító Tudományos Tanácsnak kirívó eredménytelenség (például a dologi költségek fedezésére szolgáló grantok meg nem szerzése) esetén joga lenne a pályázókat az inkubátorházból három év előtt is „kitenni”. Az inkubátorház Tudományos Tanácsa és az igazgatás feladata lenne, hogy a ház sikeres tagjait mielőbb a függetlenség megteremtésére ösztönözze és segítse.

Az inkubátorház irányítása

Az irányítás kettős lenne, szakmai és adminisztratív. A szakmai irányítást az inkubátorház viszonylag szűk létszámú (5-7 fős) Tudományos Tanácsa végezné, amely zömében a hazai tudományos élet és high-tech

cégek neves egyéniségeit, valamint az adminisztratív irányítás vezetőjét foglalná magába, és később kiegészülne az inkubátorház kutatóinak 3-5 képviselőjével. A Tudományos Tanács ellenőrizné és szakmailag irányítaná az inkubátorház igazgatóságát.

Az igazgatóság közvetlen segítséget nyújtana a kutatócsoportoknak a pályázati és szerződéskötési tevékenységekhez, az egyes csoportok és az egész intézmény PR-munkájához, illetve a pályázatok gazdasági és pénzügyi menedzselését végezné. Ugyancsak hatékonyan szervezné a csoportok tevékenységével összefüggő egyéb adminisztratív feladatokat is (utazás, konferenciaszervezés, tudományos szolgáltatókkal való kapcsolattartás és szerződések stb.). A csoportok tevékenységi periódusának lejártaival az igazgatási háttér széleskörű segítséget (kapcsolatépítés, PR, jogi háttér stb.) nyújtana a kutatócsoport további működésének megszervezéséhez, mindenekelőtt a cégalapításhoz. Az igazgatóság részeként az adminisztratív irányítás a gazdasági ügyeket intézné (beleértve a kutatók grantjainak gazdasági adminisztrálását, illetve a beszerzések megszervezését, a bérnyilvántartást stb.), valamint a helyiségek, a könyvtár és a közös üzemeltetésű műszerek beszerzésére, gondozására, karbantartására terjedne ki.

Az inkubátorháznak a szó szokott értelmében vett igazgatója nem lenne; az igazgató az igazgatóságot vezető, nem kutatói besztású személy lenne. Mindkét irányítás (Tudományos Tanács, illetve igazgató) egyik alapvető feladata lenne, hogy az inkubátorház működtetéséhez pótlólagos forrásokat próbáljon meg szerezni, illetve elősegítse az inkubátorház munkájával, eredményeivel kapcsolatos informálást, PR-tevékenységet.

Az inkubátorház kapcsolatrendszere, jogállása

Az inkubátorháznak mind tudományos együttműködések révén, mind pedig szá-

mos más módon szervesen kellene kapcsolódnia az MTA kutatóhálózatához és a hazai felsőoktatáshoz. Ez a kettős kapcsolódás a Tudományos Tanács összetételében is tükröződné. A felsőoktatáshoz való szoros kapcsolatnak mind a művelt tudományszakokhoz kötődő doktori programokba való bekapcsolódásban, mind pedig a „kikerülő” sikeres kutatók majdani elhelyezésének elősegítésében jelentkeznie kell. A kettős kapcsolódás kellő biztosítása esetén szervezettel az inkubátorház esetleg MTA kutatóintézetként, vagy a fentiek miatt célszerűbben, közvetlen graduális oktatási feladattal nem bíró (főként a posztgraduális képzésben részt vevő) egyetemi intézetként is megalkulhat.

Az inkubátorház helye

A fentiekből következően az inkubátorháznak valamely tradicionális egyetemi centrumban, azaz abc-sorrendben: Budapesten, Debrecenben, Pécsen illetve Szegeden kell felépülnie. Akárhol is kerül sor a létesítésre, sikeres működés, valamint kellő kormányzati szándék esetén távlatibb tervként felmerül más inkubátorházak felépítése is, amely(ke)t természetesen az elsőtől különböző egyetemi városban kellene elhelyezni.

Az inkubátorház mérete

Az inkubátorházba a „kritikus tömeg” biztosítása, és az amúgy is nehéz kiválasztás lehetővé tétele érdekében évente legalább négy kutatót kellene felvenni. Ezek szerint az első intézménynek legalább 12 munkacsoport elhelyezésére kell alkalmasnak lennie.

(A táblázatot lásd a következő oldalon)

KÖLTSÉGBECSLÉS

Alapítási költségek

telek (önkormányzati-egyetemi apport?)	
az épület létrehozásának költségei:	500 MFt
12, egyenként kb. 50 m ² -es labor/iroda komplexet tartalmazó kb. 20 x 25 m-es, háromemeletes épület 250 eFt/m ² építési költséggel számolva:	300 MFt
hidegszobák, könyvtár, előadóterem, társalgó, irodák, műszertermek, állatház, lift és a laborok alapberendezése:	200 MFt
kezdő központi műszerpark:	300 MFt
könyvtár: (CD-ROM, ill. Internet)	50 MFt
összesen kb.	850 MFt

Megnevezés	1. év	2. év	3. év
<i>Bérlőköltség</i>			
kutatói	20	40	60
munkatársi	20	40	60
asszisztensi	9	18	27
adminisztratív részleg (igazgató, titkárnő, 2 gazdaságis, irodaszolga, anyagbeszerző, könyvtáros, szervergazda, PR-szakember, 2 takarító, 2 portás, állatgondozó)	38	38	38
<i>Dologi kiadások + beszerzések</i>			
közmű, telefon	12	12	12
könyvtárfenntartás, -fejlesztés	4	4	4
műszerparkfejlesztés	25	25	25
működtetés, karbantartás	15	16	18
adminisztratív részleg rezsije	3	3	3
kutatói „indulótöke”	60	60	60
Összesen	206	219	268

Források

Az inkubátorház létrehozása alapvetően az állami K+F források terhére képzelhető el. Egy ilyen terv kivitelezése azonban a magántőke (és ezen belül elsősorban természetesen a kockázati tőke) érdeklődését is felkeltheti. Számos olyan alapkutatóval foglalkozó cég ismeretes, amely akár egy nagyobb K+F cég „fiókkintézményeként”, akár az alapkutatói eredményeket igen korai fejlesztési stádiumban értékesítő céggént működik. Ezek a cégek általában egy jól meghatározott profil és induló program köré szerveződnek, amely – eredeti indító ötletei és felsorakoztatott szellemi potenciálja révén – felkelti a

befektetők (vagy egy, az adott szakterületen a távlatokban is fejleszteni kívánó nagyobb K+F cég) figyelmét.

A kockázati tőke mellett egy hasonló tervnek nemzetközi (EU) források is megnyerhetőek lennének, mint ahogy arra Lengyelországnak az alábbiakban részletezett példája esetén az UNESCO részvállalásával már volt példa.

Egy működő példa

Az inkubátorház fentiekben ismertetett modelljéhez hasonló, legközelebbi működő példa Varsóban található. 1995-ben írta alá a lengyel kormány az UNESCO-val azt a szerződést, amely utat nyitott az „International

Institute of Molecular and Cell Biology in Warsaw" (<http://www.iimcb.gov.pl>) létrehozásához. A szerződést a Lengyel Tudományos Akadémia és az UNESCO informális megbeszélései készítettek elő, és a lengyel parlament ratifikációja, valamint az intézet alapszabályának törvénybe iktatása szentesítette. Az intézetbe ötéves periódusra kerülnek a kutatók. A tudományos előrehaladásukat az első három év után egy tudományos bizottság értékeli – vagy a szerződésük megszüntetésére, vagy meghosszabbítására tesz javaslatot. Az intézetben hét laboratórium található, amelyet központi műszerszobák, más központi helyiségek és egy „training laboratory” egészít ki. A lengyel intézet egyetlen lényeges különbsége a fenti „inkubátorház”-modelltől, hogy – az UNESCO részvétele miatt is – az intézetbe történő jelentkezés minden náció számára nyitott, így a hét laboratórium vezetője közül „csak” öt lengyel kutató.

Miért hasznos?

Zárásként hadd foglaljuk össze még egyszer, miért is lenne hasznos egy, a fentiekben ismertetethez hasonló inkubátorház létrehozása:

- tervezett módon megteremti a kiindulási pontot magyar hightech-biotech iparág kialakítására;
- új átjárási lehetőséget biztosít az alap-és alkalmazott kutatások között;
- hazához és itthon „hasznosít” jó néhány, világszínvonalon is kiemelkedő magyar kutatót;
- bemutatja, hogy az ország „elég erős” már ahhoz, hogy hazahívja az eddig külföldön dolgozó legjobb kutatóit;
- új, élvonalbeli tudományterületeket és technikákat honosít meg a magyar kutatóhelyeken;

- segít a kutatóhelyek, a vezető kutatói állomány, az itthoni kutatói életpálya mobilitásának növelésében;
- ösztönzi a magyar alaptudomány perspektivikusabb művelését;
- színvonalbeli és bérfeszültségek felvállalásával segít felkészíteni a hazai kutatói közösséget az EU kutatási színvonal direkt érvényesülésére;
- elősegíti az alapkutatási eredmények gyors K+F hasznosulását;
- segíti a nagy, nyugati K+F cégek magyarországi megjelenését, megtelepedését;
- hozzájárul az élvonalbeli Ph D képzéshez;
- új, dinamikus, interdiszciplináris kutatási centrumot (centrumokat) alakít ki.

Az ország alapvető érdeke, hogy a magyar alapkutatásban olyan fordulat következzen be, amely megteremti a lehetőséget arra, hogy az alkalmazott kutatás és fejlesztés valódi bázisává váljon. Ezáltal a magyar kutatás és a magyar kutatók virtuális gazdasági értéke valódi gazdasági érdekké konvertálódna. Ez a folyamat nem csak ennek a rétegnek a társadalmi presztízsét növeli meg, hanem az országnak is az egyetlen lehetősége arra, hogy a fejlett országok felé irányuló fejlődése tartós legyen. Szemünk előtt lebeghet Finnország és más hasonló kis országok modellje, amelyekben a magántőke és az állam felismerte az egyetlen kiterjesztési lehetőséget, és tudatosan befektetett az általunk felvázoltéhoz hasonló, tudományos tevékenységet hatékonyan művelő vállalkozásokba. Reméljük, hogy elképzelésünk (amelynek részleteit csak a konkrét példa jobb bemutatásának kedvéért dolgoztuk ki ilyen aprólékosan) előbb-utóbb felkelti kutatótársaink, tudománypolitikaink és a kockázati tőke képviselőinek érdeklődését. Bármilyen tanácsot, véleményt a szerzők szívesen fogadnak a címben közölt e-mailjeiken.

Megemlékezés

Életének 79. évében elhunyt Hajdú Péter, az uráli, azaz a finnugor és szomójéd nyelvtudomány és őstörténet nemzetközileg ismert és elismert művelője, több vonatkozásban is megújítója. Halálával súlyos veszteség érte a magyar és a nemzetközi tudományos életet.

Hajdú Péter 1941-től 1945-ig a Pázmány Péter Tudományegyetemen tanult, ott szerzett diplomát magyar és német szakon. Magas szintű ismereteit tudományos kutatóként és egyetemi oktatóként kamatoztatta, továbbá tudományszervezőként is jelentős szerepe volt a magyar tudományos közéletben és az uráli nyelvtudomány szellemi felfrissítésében.

A háború utáni években az Országos Széchényi Könyvtár kutatójaként a készlet helyi Festetics-kastély könyvtárában dolgozott. 1951-ben került vissza családjával együtt Budapestre, akkor az MTA Nyelvtudományi Intézetének Finnugor Osztályán működött közre az etimológiai szótári munkálatok beindításában. Fontos szerepe volt abban is, hogy a magyar egyetemeken létrejött a finnugor szak. 1959-ben ő szervezte meg a Szegedi Egyetemen (akkor: József Attila Tudományegyetem) a finnugor tanszéket, amelynek 1974-ig volt professzora, ekkor az MTA Nyelvtudományi Intézetének igazgatójává nevezték ki. E posztot 1982-ig töltötte be. Az Eötvös Loránd Tudományegye-



HAJDÚ PÉTER
(1923 – 2002)

tem professzoraként is – 1982 és 1994 között – számos, kutatóvá érett magyar és külföldi szakember mestere volt. Ezzel részben egy időben, 1985 és 1990 között a Magyar Tudományos Akadémia Nyelv- és Irodalomtudományok Osztályának elnökeként irányította az osztályhoz tartozó területeket. 1991 és 1995 között kutató-professzorként dolgozott. 1996-ban vonult nyugdíjba, de nem szakadt el a tudományos közélettől.

Hajdú Péter elsősorban a szomójéd nyelvek kutatójaként kezdte pályáját, érdeklődése fokozatosan fordult a magyar nyelv közelebbi és távolabbi finnugor rokonai felé. Alapvető fontosságúnak bizonyult az uráli őstörténettel kapcsolatos nézeteinek közreadása. Szegedi és budapesti professzorként több nemzedéknyi leendő kutatót látott el korszerű szakmai ismeretekkel. E téren fontos teljesítménye volt, hogy egyetemi jegyzetekkel és tankönyvekkel segítette az ifjúság tudományos ismereteinek megalapozását, az uralisztika és a magyar nyelvészet művelőinek tájékozódását. E munkákat nagyszabású összefoglalásként idegen nyelveken is közreadta. Monográfiái közül a társszerzőségben készült *Urali nyelvrokonaink* (Budapest, 1978 és 1980) a legfontosabbak egyike, amely németül is megjelent: *Die Uralische Sprachen und Literaturen* (Budapest-Hamburg, 1987). Ennek nyelvészeti része volt az ő munkája, ezt

kiadták olaszul is (Torino, 1992). A szamojéd nyelvészet alapművének minősül a több kiadást megért *Chrestomathia Samiedica* (Budapest, 1968, 1982 és 1989). Nem egyetemi tankönyvei közül is érdemes néhányat megemlíteni: *A magyarság kialakulásának előzményei* (Budapest, 1953), *A szamojéd népek és nyelvek* (Budapest, 1949), ugyanez angolul: *The Somoyed Peoples and Languages* (Bloomington-Den Haag, 1963 és 1968). Több alkalommal is foglalkozott a magyar nyelv rokonságáról badarságokat terjesztők tevékenységével, vállalkozott a nagyközönségnek szánt tudományos ismeretterjesztésre is, e téren *A finnugor népek és nyelvek* (Budapest, 1962) tekinthető a legfontosabbnak, amelyet felfrissítve és alaposan átdolgozva publikáltak lengyelül (Varsó, 1971), angolul (London, 1975) és oroszul (Moszkva, 1985) is. Gazdag publikációs jegyzéke közel négyszáz tételt – tanulmányokat, kritikákat, megemlékezéseket önálló műveket – tartalmaz. Szerkesztőként is beírta nevét a tudománytörténetbe: mintegy tíz tanulmánykötetnek volt szerkesztője vagy társszerkesztője.

A tudományterületén működők megbecsülését jelzi, hogy a Nyelvtudományi Társaság választmánya és a Modern Filológiai

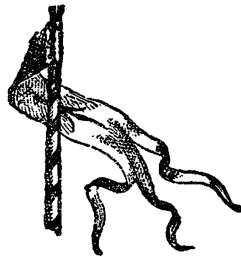
Társaság tagjává, a Reguly Társaság tiszteleti tagjává, az International Committee of Finno-Ugric Congresses alelnökévé, majd tiszteleti tagjává, a Finn Akadémia külső tagjává, a Societé Finno-Ougrienne és a Societas Uralo-Altica tiszteleti tagjává, a Finnish Literary Society és a Kalevala Seura külső tagjává választotta. A tudományos közéletnek az Uralisztikai (Finnugor) Komplex Bizottság elnökeként, a Nyelvtudományi Közlemények főszerkesztőjeként, a Telegdi alapítvány kuratóriumi tagjaként is éveken át résztvevője volt.

Tevékenységének elismeréseként a Szegedi Egyetem és az Uppsalai Egyetem díszdoktorává fogadta, Magyarországon a Munka Érdemrenddel, a Munkácsi Bernátdíjjal és a Széchenyi-díjjal, Finnországban a Finn Oroszlánrenddel tüntették ki. Tagjává választotta a Magyar Tudományos Akadémia (I. tag 1970-ben, r. tag 1976-ban) és külső tagjává a Finn Akadémia.

Hajdú Péter az uralisztika egyik legjelentősebb művelője volt. Munkásságának ismerete a jelen és a jövő generációk számára nélkülözhetetlen.

Honti László

egyetemi tanár (Udine, Olaszország),
az MTA külső tagja



Nyár elején távozott közülünk Mérei Gyula akadémikus, a Szegedi Tudományegyetem (működése idején József Attila Tudományegyetem) nyugalmazott tanára. Személyében a magyar történettársadalom országosan és nemzetközileg ismert alakját veszítettük el. Ismerése nem kopott meg annak ellenére sem, hogy élete utolsó szakaszában teljesen visszavonult, és új művek sem kerültek ki keze alól.

Mérei Gyula egyetemi tanulmányait Budapesten, a Pázmány Péter Tudományegyetemen végezte 1929-1934 között. A történelem-latin szakos tanári diploma megszerzése után kutatói pályára lépett, amelyben nyilván szerepük volt azoknak a kiváló tanároknak, akikkel egyetemi évei során találkozott. Közülük Szegfű Gyulát kell kiemelnünk, akire Mérei Gyula gyakran hivatkozott mint mesterére, és büszkén emlegette hozzá füződő személyes jó viszonyát. Később, egyetemi oktatóként tanítványaitól keményen megkövetelte Szegfű Gyula munkásságának ismeretét. Szegfű hatása is érezhető Mérei 1934-ben megvédett bölcsészdoktori disszertációján, amely a *Magyar politikai pártprogramok 1867 – 1914* címet viselte.

Mérei Gyula pályája kezdetén (1938-1948) tíz évet töltött el a Budapesti Kereskedelmi és Iparkamara munkatársaként. Ezek az évek – az 1934-38 közötti bécsi kutatóösztöndíj után – alapozták meg gazdaságtörténeti szemléletmódját és alakították ki ez irányú érdeklődését. Az eredmények tanulmányok, cikkek sorában mutatkoztak meg, közülük a legfontosabbak: *Mezőgazdaság és agrártársadalom Magyarországon 1790-1948* (Bp., 1948); *A magyar céhrendszer 1848 előtt* (Századok 1948.); *Magyar*



MÉREI GYULA

1911–2002

iparfejlődés 1790-1848 (Bp., 1951). A művek tanulsága szerint gazdasági elemzései az 1790 és 1848 közötti időszakra koncentráltak. Ezek után kézenfekvő volt, amikor az 1970-es években elindult a magyar történettudomány nagy vállalkozása (a köznyelvben csak „tíz-kötetesként” emlegetett sorozat), akkor az 5. kötetnek, amely az 1790-1848 közötti szakaszt tárgyalta, Mérei Gyula lett a főszerkesztője. A sokszerzős kötetben a gaz-

daságtörténeti fejezetet szerzőként is jegyezte.

A gazdaságtörténeti művek mellett nyomon követhető politikátörténeti érdeklődése is, amely kutatásainak másik meghatározó szegmense lett. *Polgári radikalizmus Magyarországon 1900-1918* (Bp., 1947) című kötetén gazdaságtörténeti munkáival párhuzamosan dolgozott. Politikátörténeti munkássága került előtérbe, amikor 1948-1951 között a Magyar Országos Levéltár munkatársa lett. A történeti évfordulók is közrejátszottak abban, hogy 1848-49 eseményeivel behatóbban kezdett foglalkozni. E témában megjelent művei közül a *Munkásmozgalmak 1848/49-ben* (Bp., 1948) és a társszerzőkkel írt Kossuth életrajz (Bp., 1952) tartozik az ismertebbek közé.

Mérei Gyula életében a kutatás 1945-től kiegészült az egyetemi oktatással is. 1945-ben lett egyetemi magántanár a Pázmány Péter Tudományegyetemen. Önálló katedrához 1951-ben jutott, amikor egyetemi docensi, majd egy évre rá egyetemi tanári kinevezést kapott a szegedi József Attila Tudományegyetemre, ahol egyúttal a Legújabbkori Magyar Történeti Tanszék vezetője is lett. Ettől kezdve nyugállományba vonulásáig a szegedi egyetem meghatározó szemé-

lyisége volt. A tanszék vezetése mellett 1960-64 között a Bölcsészettudományi Kar dékánja is. Ott bábáskodott az 1957-ben induló szegedi egyetemi folyóirat, az *Acta Historica* létrehozásánál, amelynek 19-20. századi történeti köteteit nyugdíjazásáig szerkesztette.

Egyetemi oktatóként a 19-20. század magyar és egyetemes történetét oktatta. Sokat tett a hallgatók eszmetörténeti és historiográfiai ismereteinek elmélyítéséért. Munkásságában ekkor nagyobb hangsúlyt kaptak az egyetemes történeti kérdések: *Föderációs tervek Délkelet-Európában és a Habsburg monarchia 1848-1918* (Bp., 1965). Mérei Gyula 1967-ben szerezte meg az akadémiai doktori címet, ezt követően jelentek meg összegző munkái: *A magyar októberi forradalom és a polgári pártok* (Bp., 1969) és *A magyar polgári pártok programjai 1867-1918* (Bp., 1971). Ezt követte a már említett „tízkötetes” ötödik kötete 1980-ban.

Mérei Gyulát kutatómunkája és a tudományos szervezésben való folyamatos közre-

működése (Szegedi Akadémiai Bizottság) elismeréseként 1973-ban a Magyar Tudományos Akadémia levelező tagjai sorába választotta. 1979-ben levelező tagból rendes taggá lépett elő. Eredményes munkáját nemcsak az akadémiai tagság, hanem számos kitüntetés is jelezte, nem utolsósorban pedig a tanítványok sora, akiket elindított kutatói pályájukon. Szakirodalmi és oktató munkáját mindvégig kritikus szemlélet jellemezte, de sajnos nemigen írt recenziót, így ilyen irányú megnyilvánulásai leginkább kollégái, tanítványai emlékeiben élnek.

Élete utolsó két évtizede visszavonultságban, a betegséggel való küzdelemben telt el, a végül is a vesztesek sorába kellett állnia. Tőle búcsúznunk kellett, de művei – akár vitára inspirálva – továbbra is ott állnak a könyvtári polcokon.

Font Márta

*a tört. tud. kandidátusa, egy. tanár,
a Középkori és Korajtkori Történeti Tanszék
vezetője, a PTE BTK dékánja*



Könyvszemle

Lee Congdon: Seeing Red

Az Egyesült Államokban működő kitünő eszmetörténész, a magyar gondolkodástörténet ismert kutatója legújabb könyvében – mint az alcím érthetővé teszi – azokat a válszokat elemzi, amelyeket az emigrációba vonult magyar értelmiségiek fogalmaztak a kommunizmus kihívásra. A munka a szerző korábbi monográfiájában (*Exile and Social Thought. Hungarian Intellectuals in Germany and Austria, 1919-1933*, Princeton: Princeton University Press, 1991) összefoglalt kutatásainak folytatásaként is fölfogható, egyszerre kitérítőt és leszűkített tematikával. Egrészt ugyanis, a korábbi vállalkozástól eltérően, a mostani könyv nem csupán a németországi és ausztriai emigránsok működését elemzi, s nem csupán a magyarországi kommün bukásától a náci hatalomátvételig terjedő időkeretben: érdeklődése a teljes 20. századi magyar emigrációra kiterjed, noha középpontjában inkább az angol nyelvterület emigrációja áll. Másrészt, nem általánosságban vizsgálja a magyar emigránsok működését: vizsgálódásai a kommunista ideológia kihívására adott válaszokra – és a szovjet gyakorlat teoretikus reflexióira – irányulnak.

A megközelítés nem véletlen: Congdon szerint a mögöttünk hagyott évszázad „nagy története” éppen a kommunizmus. Gondolatmenetének kiindulásaként a *Wille zur Macht* Nietzschejének ismert próféciját idézi a következő évszázadok nihilizmusának elkerülhetetlen följöveteléről. A prófécia – mondja – beteljesedett: a posztkeresztény,

modern-későmodern világkorszak a 20. században valóban a nihilizmus diadalmas előretörését hozta magával – vele együtt pedig a nihilizmussal szembesezhető új hitek megjelenését. A kommunizmus: ezeknek az új hiteknek a leghatásosabb és legfélelmetesebb változata. Valamiféle sajátos, racionális és materialista hitként meggyőzi követőit, hogy megragadható a történelem logikája, és garanciát nyújt számukra, hogy a mennyország igenis lehozható a földre. A javarészt zsidó származású, radikális nézetekkel induló értelmiségiekből álló magyar emigráció két generációját – az első világháború végét, a kommün bukását követően Ausztriába és Németországba, majd onnan Angliába, az Egyesült Államokba vagy a Szovjetunióba települő idősebb, és az 1956-os forradalmat követően Angliába érkező fiatalabb generációt – ez a kommunista hit ragadja magával: tagjai ennek az új, evilági hitnek lesznek szenvedélyes elkötelezettjei és/vagy meggyőződéses bírálói.

A kötet főszerelői: Arthur Koestler, Polányi Károly, Polányi Mihály, Kolnai Aurél, Mészáros István, Lakatos Imre és Szamuely Tibor. A névsorban nemcsak az a figyelemre méltó, hogy ki került bele: az is, hogy ki maradt ki belőle. Hogy csupán az idősebb generációhoz tartozó gondolkodókat említsünk, nem szerepel benne például a két, talán legnagyobb magyar emigráns: Lukács György és Mannheim Károly. Az egyetemes magyar filozófiatörténet legjelentősebb gondolkodójaként számon tartott, a *Geschichte und Klassenbewusstsein* a kommunista hit alighanem legzseniálisabb és legdiabolikusabb művét megalkotó Lukács csak a hatá-

sával jelenik meg: mint aki előbb a századelő Vasárnapi Körével, utóbb a második világháború utáni korszak Budapesti Iskolájával meghatározó gondolkodói nemzedékeket bocsát útjára. A leglátványosabb emigrációs karriert befutó, tudásszociológiájával a német, „tudatos társadalomszervezési programjával” pedig az angolszász tudományosságban kiemelkedő sikereket elérő Mannheim alig néhány utalás erejéig tűnik föl csupán. Említsük meg azonnal: a föltűnő hiányt az magyarázza, hogy mindketten Congdon említett korábbi kötetének főszereplői voltak.

A kötet finom elemzések sorában bontja ki a magyar emigránsoknak a kommunizmus visszautasíthatatlan kihívására fogalmazott különféle, gyakran egymással, sőt, önmagukkal is vitatkozó válaszait. A magyar emigránsok a háborús összeomlást és a gazdasági világválságot a nyugati kapitalista civilizáció haldoklásaként, a „szovjet kísérletet” ellenben valamiféle „új civilizáció” ígéreteként élik meg. Ezt az egyetemes tapasztalatot azonban, érdekes megfigyelni, gondolatilag igen eltérő módon dolgozzák föl. A legszívrányosabb válasz talán Koestleré: ő a szovjetkommunizmus igenlésének is, tagadásának is könyörtelenül radikális képviselője lesz. Előbb, a harmincas évek derekáig elkötelezett kommunista, utóbb, a harmincas évektől nem kevésbé elkötelezett antikommunista: szovjetunióbeli utazásának és a spanyol polgárháborúnak a tapasztalatait még hithű kommunista párttagként reflektálja, hogy azután a *Darkness at Noon* parabolájával és ragyogó esszéivel nyilvánosan megtagadva saját eszmei-politikai múltját, harcias antikommunistává válik. A gazdaságfilozófus-gazdaságtörténész Polányi Károly szocialista-keresztényszocialista nézeteitől jut el a kommunizmus és a szovjet kísérlet iránti rokonszenvig, hogy azután ezzel voltaképp sohase szakítson. Fölfogása szerint a fasizmus azért rombolja le a demokráciát,

hogy a kapitalizmust megvédelmezhesse, a kommunizmusnak ellenben a demokrácia korlátozása árán sikerül lerombolnia a kapitalizmust. Nagyhatású liberalizmuskritikai műve, a *The Great Transformation* az önszabályozó kapitalista piacot kártékony utópiaként leplezi le. Polányi Mihály és Kolnai Aurél ezzel szemben kezdettől fogva következetesen elutasító választ fogalmaz a kommunizmus kihívására. A kémikus-tudományfilozófus Polányi tudományfilozófiai megközelítésből alakítja ki antikommunista meggyőződését: a központosított kommunista tudományirányítás kártékony következményeinek megtapasztalása vezeti az autonóm tudósok tevékenysége nyomán megszülető szabad tudomány eszméjének, átfogóbban pedig a szabad társadalom magasabbrendűségének megfogalmazásához. A politikai gondolkodó Kolnai Aurél pedig politikafilozófiai belátásokból kiindulva lesz előbb a jobboldali, utóbb mindinkább a baloldali totalitarizmus elkötelezett kritikusa: nagyszabású fasizmuskritikájában, a *The War against the West*-ben az előbbivel, az „antikommunizmus tévedéseit” bíráló munkájában pedig az utóbbival szemben igyekszik megvédeni a Nyugat intézményes rendjét és szellemi alapjait.

Ahogy az első, ugyanúgy a második nemzedék is színes képet mutat. Mészáros is, Lakatos is, Szamuely is a kommunista baloldali radikalizmus felől indul, ám máshová érkezik el. A politikafilozófus Mészáros a baloldali radikalizmussal szakítva sem adja föl antikapitalista meggyőződését és marxista-neomarxista orientációját: kései grandiózus összefoglalásában, a *Beyond Capital*-ban is a tőkés társadalom meghaladásának alternatíváit vizsgálja. A tudományfilozófus Lakatos ellenben, leszámolva saját szektáriánus kommunizmusával, egészen a konzervatívizmusig jut el: londoni professzorként már a hatvannyolcas diákmozgalmakkal szemben igyekszik megvédelmezni a tudomány

szabadságát. A történész Szamuely – a magyar Tanácsköztársaság politikai vezetőjének unokaöccse – a hatvanas évek radikális légkörében hasonlóképpen jobboldalinak tűnik föl: nagymonográfiájában, a *The Russian Tradition*-ben a szovjetkommunizmust a nyugati hagyománnyal szembeállított, sajátos orosz hagyomány örököséként értelmezi.

Congdon megközelítése alapvetően tudásszociológiai: rekonstrukciós munkáját következetesen a történelmi-szociológiai tényezők felől elindulva kezdi meg. Eljárása ugyanakkor nem jár redukcionizmussal: az elemzések rendkívül nyitottan követik az egyes gondolatrendszerek sajátosságait. Munkája nemcsak a főszereplők életszerű miniportréival és műveik érzékeny interpretációjával szolgál; érdekes intézménytörténeti elemzéseket is átnyújt. Ilyen, izgalmas eszmétörténeti adalékokat hordozó intézménytörténeti fejezetben számol be például a tudomány szabadságának védelmére a negyvenes évek Angliájában szerveződő társaságról, vagy a magyar emigránsoknak a háború éveiben Károlyi Mihály kezdeményezésére létrejött demokratikus mozgalmról.

A kötet utószava túltekint az antikommunizmuson. Az itt olvasható gondolatmenet szellemes keretbe foglalja a kötet egészének anyagát. A magyar emigránsok kiküzdött antikommunizmusa eszerint megújítja az életnek értelmet és irányt adó hitek keresését. Ahogy korábban a kommunizmus hitet nyújtott a posztkeresztény világkorszak embere számára és védelemmel szolgált a nihi-

lizmus kihívásával szemben, úgy az anti-kommunizmus ismét fölébreszti a hit szükségletét: új, mélyebb szellemi és morális keresés számára nyit utat. Ebben – magyarázza Congdon – megegyezik a kései Koestler, Polányi Mihály és Kolnai egyaránt. A kései Koestler ismeretterjesztő tudománytörténeti esszéjében, a *The Sleepwalkers*-ben rehabilitálja a – modern tudománnyal szembeszegett és annál alacsonyabb rendűnek ítélt – vallást; a kései Polányi Mihály összefoglaló tudományfilozófiai nagymonográfiájában, a *Personal Knowledge*-ban – a tudást és a hitet szembeállító „kritikai filozófiával” szemben – a tudás és a hit kapcsolatát helyreállító „posztkritikai filozófia” kidolgozására vállalkozik; a kései Kolnai morálfilozófiai kísérleteiben a változékony történeti ethosz fölött álló „objektív morális konszenzus” létezése mellett érvel.

„Tudjuk, és büszkeségünk, hogy tudjuk, hogy az ember alkotánál fogva vallásos állat” – állítja Lee Congdon könyvének Burke-től származó mottója. A magyar emigráns értelmiségiek szellemi küzdelme – a nihilizmussal szembeszegett hittel, majd a hamis hit bukása után új hitek keresésével – a nyugati ember mögöttünk hagyott évszázadának paradigmaticus történetét képezi. (*Lee Congdon: Seeing Red. Hungarian Intellectuals in Exile and the Challenge of Communism. Northern Illinois University Press, DeKalb, 2001. XII + 223 o.*)

Percz László

Dr. habil. phil., egyetemi docens (BME)

Tilkovszky Loránt: *Ausztria és Magyarország a vészterhes Európában*

Aki egy kicsit is jártas a diplomácia történetében, tudja, hogy a követi jelentés igazi kincseshánya a történész számára, a csupán

érelklődőnek pedig izgalmas, akár irodalmi magaslatokba is szárnyaló olvasmányélmény, ha a jelentések szerzőjét jó tollal ajándékozta meg a sors. A két háború között Budapestben dolgozó osztrák diplomaták persze nem pályázhatnak semmiféle irodalmi díjra. A történész nem is ezeket az értékeket kereste aprólékos részletességgel megírt jelen-

téseikben, hanem elsősorban azt, hogy milyenek láttak bennünket a húszas évek elején, s főleg a harmincas években egészen az Anschlussig. S hogy ez miért érdekes? A szerző, Tilkovszky Loránt szerint azért, mert e korszak „Magyarországának képét sok rosszindulatú elfogultsággal rajzolták meg a kisantant szövetségbe tömörült országok Budapestre akkreditált képviselői”. Az osztrák diplomaták jelentéseitől persze nem lesz rózsaszínűbb ez a kép, hiszen ők is saját érdekeikre figyeltek. Mégis tárgyilagosabban írnak hazánkról, mert a két ország között kevesebb volt az ellentét, így a budapesti követség munkatársai az együttműködés lehetőségeire figyelhettek, s arra, ami összekötött minket. Egy osztrák követnek Budapest természetesen nem volt ismeretlen. A helyzet mégis szokatlan volt, mert még a közelmúlt-hoz tartozott az, hogy az osztrák diplomaták egy nagyhatalom képviselőiként jelenthettek Bécsbe, a két háború között pedig hozzá kellett szokni a kisállami léthez, ráadásul Hitler hatalomra jutásával ez is végveszélybe került. 1933 után ezért a mindenkori osztrák követ számára fontos volt, hogy a magyar politikusok hogyan vélekednek az Anschlussról. Gömbös már miniszterelnöksége kezdetén a két ország egymásrautaltságát hangsúlyozta. A parlament feloszlatásakor pedig arra ösztönözték a magyar külpolitikát, hogy azokkal keresse a kapcsolatot, akik képesek megvédeni az osztrák függetlenséget. Bajcsy-Zsilinszky egyenesen a háború veszélyét látta az Anschlussban, a legitimista Sigray pedig a világháború rémét idézte fel, amely Magyarország függetlenségének végét jelentheti.

1938-ra aztán minden megváltozott. Kánya külügyminiszter február végén nemcsak Ausztria, de Magyarország és egész Európa sorsával kapcsolatban is pesszimistán nyilatkozott az osztrák követnek. Igaz, ellenkező vélemények is voltak. Bethlen azt fejtette ki a Pesti Hírlapban, hogy az Anschluss közelebb viszi Magyarországot a revízióhoz. A

már említett Bajcsy-Zsilinszky a tragédia küszöbén arról írt cikket, hogy „*Schuschnigg győzni fog!*”, mármint az Ausztria függetlenségéről megtartott népszavazáson. Ez a vélemény éppúgy abszurd drámába illő, mint az osztrák katonai attasé még 1937. novemberi jelentése, amelyben Horthy kötelező érvényű megállapodást javasolt Bécsnek Berlinnel, hogy Ausztria így kerülje el a német megszállást, amikor a németek Csehszlovákia ellen vonulnak. Az abszurditást a kormányzó is érezhette, mert hangsúlyozta, hogy saját nézetéről van szó, s az osztrák követnek már fel sem vetette. A tragédia előtti két hétben aztán megszűntek a jelentések Budapestről. Amikor újrakezdődnek, már nincs budapesti osztrák követség, csak németbirodalmi főkonzulátus.

A kötetben az osztrák kérdés drámai története mellett apró, jelentéktelennek látszó információkkal is találkozunk, mert egy követ mindenről írt, néha locsogott, de ez volt a munkája. Megtudjuk, hogy Gömbös nem igazán beszélt jól a francia nyelvet, s azt, hogy nincs újdonság a magyar történelemben, mert cseresznye-ügye már Gömbösnek is volt, csak nem Chilével, hanem Németországgal kapcsolatban. Megismerjük Göring nagyotmondásainak egyikét, miszerint a szerbeknél általánosnak mondható a német nyelvtudás, ez alól csak a budapesti jugoszláv követ jelent kivételt. Ehhez azt is hozzáteszi a porosz miniszterelnök, hogy a legegyszerűbb délszláv ember is közös határt akar Németországgal. Az új budapesti szovjet követről azt tudjuk meg, hogy 30 szobás főúri palotát keresett, s amikor megbízólevelének átadásakor megjelent Horthy-nál, a kormányzó hosszasan megvárakoztatta. 1936 közepén a csehszlovák-szovjet együttműködésről kapunk információt. A könyv természetéből következően ez elsősorban magyar szempontból volt érdekes, mert Budapestet Németországhoz közelítette. A szovjet befolyás erősödésére Csehszlovákia-

ban a recenzens is talált dokumentumokat saját kutatásai során a párizsi külügyi és katonai levéltárakban. S ezt azért tartja említésre méltónak, mert ha a szovjet-csehszlovák együttműködést más levéltárak adatai is megerősítik, részletekkel gazdagítják, a harmincas évek végének hatalmi összefüggései új megvilágításba kerülhetnek.

Az előbbi rövid ízelítő is meggyőzheti az olvasót arról, hogy Tilkovszky Loránt könyve információkban rendkívül gazdag. Ezt elsősorban annak köszönheti, hogy a dokumentumkötet és a monografikus feldolgozás szerencsés ötvözetét valósította meg. Részletesen bemutatja a bécsi levéltárakban összegyűjtött, Budapestről származó osztrák jelentéseket, miközben a korszak szakirodalmának, köztük saját kutatásainak eredményeit beépíti a dokumentumok hiányosságainak pótlására, s a forrásokban felvetett kérdések magyarázatahoz. Munkája az image-kutatásokhoz sorolható, hiszen az osztrák diplomaták feljegyzéseiből kirajzolódik a trianoni Magyarország képe, s közben a környező országokról éppúgy bőséges információt találunk, mint az egész közép-európai régió, s benne a Magyarország sorsát is meghatározó nagypolitikáról. A könyvben persze nem találkozunk matematikai módszerekre alapozott tartalomelemzéssel, statisztikai adatokkal, és egyéb, ún. kvantitatív módszerek-

kel, mert Tilkovszky Loránt munkája hagyományos feldolgozás. Egy olyan alapkutatás, amely a történelem iránt érdeklődő számára olvasmányosságával jelenthet élményt, míg a kutató egy eddig még feltáratlan területről kap információkat. A könyv ezért nem csupán az image-kutatások egyik jól sikerült darabja, hanem úttörő vállalkozás is abban az értelemben, hogy a szerző módszeresen megvizsgálta, mit produkált az osztrák követség Budapesten. Ezzel azt is megmutatta, hogy a magyar történetírásnak még a látszólag agyonkutatott két világháború közti időszakra is vannak tartozásai, hiszen Budapesten nem csupán osztrák követség működött. S még annyi megjegyzés: lehet, hogy a könyv megérdemelt volna egy vastagabb borítót, mert a korszak kutatói gyakran fogják lapozni. A recenzens persze jól tudja, ez elsősorban pénzkérdés, és a szerző már annak is örül, ha munkája megjelenik. A maradandó és értékes könyveket persze nem mindig a jó kiállításúak között kell keresni. (*Ausztria és Magyarország a vészterhes Európában. A budapesti osztrák követség megfigyelései és helyzetelemzései 1933-1938. évi politikai jelentéseiben, Paulus-Publishing Bt., Budapest, 2002., 230 o.*)

Majoros István

a történelemtud. kandidátusa
egyetemi docens (ELTE)

Ádám György: Az emberi elme színe és fonákja

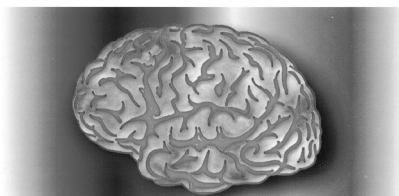
*Tanulmányok, esszék, interjúk
az agyról és a tudás átadásáról.*

Miért éppen én? Mi jogosít fel arra, hogy az Ádám professzor 80. születésnapja alkalmából megjelenő gyűjteménykötetről recenziót írjak? Ismeretségünk 1952-ben kezdődött, amikor aspirantúrája megkezdésére

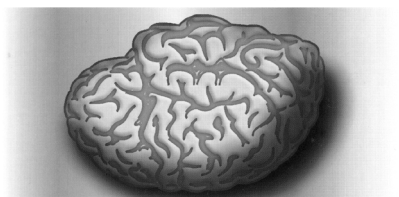
megjelent a leningrádi, I. P. Pavlovról elnevezett orvosgyermek diákszállójában, ahol én mint negyedéves medikus laktam. Könyvnyű volt megszeretni kedves egyéniségét, az egyetemista lelkesedésével hallgatni mindazt, amit az élettani, főleg pedig az idegrendszeri kutatásokról beszélt, hiszen akkorra már bennem is megfogalmazódott: idegéletlenül szeretnék foglalkozni! Amikor 1955-ben orvosi diplomát kaptam, Ádám György megvédte kandidátusi disszertációját és elfogadott famulusának. 30 évig dolgoztunk együtt, tőle tanultam a kutatás

ÁDÁM GYÖRGY az emberi elme

SZÍNE



ÉS FONÁKJA



Tanulmányok, esszék, interjúk az agyról és a tudás átadásáról



alfáját és ómegáját a központi gyakornokságtól az egyetemi tanárságig, de az egyetemi oktatómunka lényegét is mellette sajátítottam el. Ez a gondolkodásban, kutatásban együtt töltött három évtized – házastársi kapcsolatnak sem volna rövid ez az idő –, amely alatt irányításával kialakítottuk a Budapesti Orvostudományi Egyetem Élettani Intézetében az „Ádám Labor”-t, majd az ELTE TTK biológiai tanszékei sorában az Összehasonlító Élettani Tanszéket, ahol Ádám György ma is mint emeritus kutatóprofesszor dolgozik. Úgy érzem, ezek az együtt töltött évek, a számtalan társszerzőként megírt tudományos munka feljogosít arra, hogy a most megjelent munkájáról írjak.

Nem, nem összefoglalni kívánom a könyvben megjelenteket, hiszen az lehetetlen, értelmetlen volna. Az utóbbi 30 év során megjelent 25 interjú, esszé, tanulmány felöleli Ádám professzor érdeklődési körét: részint a pszichofiziológia területét a zsigeri

afferenciától a memória, a tanulás mechanizmusainak vizsgálatáig; részint a kutatómunka eredményeinek tisztességes értelmezéséig, ideértve az áltudás elleni harc fontosságát, jelentőségét.

A kötetben található cikkekből is egyértelműen kiviláglik az, amiben Ádám professzor mindig is kiemelkedő volt: bonyolult kérdésekről olyan egyszerűen, világosan tud beszélni, hogy gondolatai eljutnak az egyszerű, józan paraszti ésszel rendelkező emberig, magyarázatai nyomán sokszor meglepődünk, hogy miért is nem értettük meg ezt még eddig, hiszen olyan világos! Ez a készség nem mindenkinek adatik meg, de akinek osztályrészül jutott, annak kötelessége használni, és Ádám György élt ezzel a lehetőséggel, hiszen mint a TIT elnökének számtalan módja nyílt a széleskörű ismeretterjesztésre. Azért csodáltam mindig, mert ezek a világos, egyszerűnek tűnő magyarázatok ugyanakkor soha nem jelentettek vulgarizálást. Fontos szempont lehetett ez, amikor a Magyar Pedagógiai Társaság Ádám akadémikust választotta elnökévé.

„...ez a kötet nem emlékek összessége”, írja beköszöntőjében a szerző. Reméljük, mihamarabb meg fogja írni memoárját, ami minden kétséget kizáróan izgalmas és tanulságos olvasmány lesz. Széleskörű érdeklődésének kialakulásában minden kétséget kizáróan szerepet játszott az a sokoldalú hatás, amely befolyásolta azonosságtudatát – mint ahogyan hangsúlyozza – az „erdélyinek” nevezhető kulturális keveredés, annak pozitívumaival és negatívumaival együtt. Az a nyitottság, tudományos kíváncsiság, ami egész életén át hajtotta, hajtja mind a mai napig, biztosan – legalábbis részben – széleskörű nyelvtudására alapozódik: a magyar anyanyelv mellett az iskolában gyermekkorban elsajátított román, a francia és a német, majd aspiránsként az orosz, és a tudomány számára nélkülözhetetlen angol nyelv olyan szintű ismerete, hogy a felsorol-

tak bármelyikén képes magas szintű tudományos előadásokat tartani.

Tudományos érdeklődésének alakulásában alapvető volt a Pavlov Intézetben K. M. Bikov professzor mellett aspiránsként eltöltött három év, hiszen itt mélyült el a zsigeri információ-feldolgozás iránti érdeklődése. Ezzel a klinikai és tudományos szempontból egyaránt fontos témával világszerte aránylag kevesen foglalkoznak, mivel kísérletileg nehezen megközelíthető, a nyert információ kiértékelése sokszor jóval bonyolultabb, mint a magatartás más vonatkozásainak elemzése. Széleskörű érdeklődését bizonyítja, hogy a technikai lehetőségek megteremtésével rövid idővel az Orvosegyetemi laboratórium felállítása után korszerű elektrofiziológiai kísérleteket is végezhattünk; ismereteinket a modern nyugati módszerekkel is kiegészíthettük. Adám György francia, angol és amerikai kapcsolatai, rövidebb-hosszabb tanulmányújtjai biztosították számára és munkatársai részére annak a különböző tudományos irányzatokat szintetizáló koncepciónak a kialakulását, ami jelen kötet interjúiból is egyértelműen tükröződik. Az érdeklődés középpontjába az emlékezés, a tanulás, a tudat kerül, persze e kérdésekről nem lehet beszélni a tudattalan vagy a tudati határállapotok érintése nélkül.

E kérdések viszont nem csak a tudósokat érdeklik, hanem vonzzák a sarlatánok áltudományos érdeklődését is. Ez adja a kötet harmadik részének témáját: azok az interjúk, amelyek „az emberi elme fonákját” mutatják be. Tagadhatatlan, amit Adám akadémikus hangsúlyoz, hogy az áltudás kiirthatatlanul együtt terjed a valódi ismeretekkel, sőt gyakran gyorsabban és szilárdabban rögzül az érdeklődő átlagember fejében, mint a valódi tudományos eredmény. Alapvető e téren a média szerepe, sajnos azonban a fárasztó, rendszerint monoton tudományos munka a – főként laikus – néző és olvasó számára kevésbé vonzó, kevésbé érdekes, mint az áltudományos csalók, csodadoktorok rendszerint varázslatos, szípkorkázó „felfedezései”.

„Csüggedt sodródás az árral? vagy átgondoltan cselekvés?” Mit kellene tenni? Hogyan? Nehéz kérdések, amelyekre, mint az MTA Elnöki Informatikai Bizottságának tagja Adám professzorral együtt kerestük a választ. „A tudás, a valódi ismeret hiányát azonnal betölti az ál-tudás, a torz és káros hiedelem, a megismerés terén nincs légtüres tér! A kommunikálni hivatott szakembereknek ezt fel kell ismerniük!” (Okker Kft. Kiadó, Budapest, 2002. 204 oldal)

Dr. Mészáros István

egyetemi tanár, az orvostudomány doktora

Agrártermelés – élelmiszerminőség – élelmiszer-biztonság

Magyarország az ezredfordulón gyűjtőnévvel a Magyar Tudományos Akadémián az elmúlt években végzett stratégiai kutatások keretében, és a Földművelésügyi és Vidékfejlesztési Minisztérium támogatásával, Kovács Ferenc akadémikus, programvezető irányításával számos nagyjelentőségű tanulmány foglalta össze az agrártermelés és az élelmiszergazdaság legfontosabb probléma-

köreit, különös tekintettel az EU - csatlakozás igényeire. A program keretében készült tanulmánykötetek közül itt három, az élelmiszer-biztonság témakörét illető kiadványra szeretném felhívni a figyelmet. A termék-lánc-szemlélet fontosságát az adja, hogy az élelmiszerbiztonságot veszélyeztető vegyi és biológiai-mikrobiológiai tényezők nagymértékben függvényei a környezetterhelésnek.

A Penészgombák – mikotoxinok a táplálékláncban című kötetben a programvezető szerkesztő (Kovács Ferenc) bevezetőjében a számos penészgomba által termelt



mérgező anyagnak – a mikotoxinoknak – a táplálékláncot károsító hatásait tekinti át, kitérve mind a növénytermesztésben, mind az állattenyésztésben okozott károokra és az ételmezés-egészségügyi vonatkozásokra. Bata Árpád foglalja össze a hazailag legfontosabb mikotoxinok meghatározásának analitikai módszereit. Külön rész tanulmány (Barna-Vetró Ildikó és Solti László) foglalkozik a mikotoxinok mérésére alkalmas enzim-immunanalitikai módszerekkel. A következő négy fejezetben a hazai állattenyésztésben is óriási gazdasági veszteséget okozó, gyakoribb fuzárium toxinok biológiai és gazdasági hatásait elemzi számos hazai specialista (Rafai Pál, Bata Árpád, Fazekas Béla, Zomborszky Kovács Melinda). Banczerowski Januszné a mikotoxinok idegrendszert károsító hatásáról ad áttekintést. A kukorica hibridek rezisztenciájával kapcsolatos vizsgálatokat Bata Árpád és ifj. Kovács Gábor foglalják össze. Nagyívű fejezet foglalkozik a búza kalászfuzáriumával szembeni komplex védekezéssel (Mesterházy Ákos).

A kötet zárófejezetében Repa Imre és számos szerzőtársa (Romvári Róbert, Bajzik Gábor, Bogner Péter, Petrás Zsolt, Zomborszky Kovács Melinda, Horn Péter) az állattudomány területén alkalmazott keresztmetszeti képalkotás módszereit: computer tomográfus – CT) vizsgálat, ultrahang képalkotó vizsgálati eljárás (UH), mágneses rezonancia elven alapuló (MR) vizsgálatok – mutatják be, amelyek a mikotoxinok okozta elváltozások korai felismerésében is nagy jelentőségű, modern diagnosztikai eljárások.

Az Agrártermelés – Élelmiszerminőség – Népegészségügy című kiadvány első fejezetében Kovács Ferenc akadémikus az agrártermelés és a környezet kapcsolatán keresztül áttekintést ad a téma feldolgozásának szempontjairól, a környezetvédelem és az életminőség összefüggéseiről, továbbá – az Egyesült Államok példáján illusztrálva – a fenntartható fejlődés nemzetközi problematikájáról. Nagyszámú szerzőtársa a további fejezetekben a talajvédelem fontosságát, a talajt erő gyakoribb vegyi szennyeződések, azoknak az egészségre gyakorolt hatásait és az ilyen környezetterhelés magyarországi helyzetét, a penészgomba és mikotoxin-szennyeződés ételmezés-egészségügyi vonatkozásait taglalják. Ismertetik a nem nélkülözhető kémiai növényvédelem helyes alkalmazásával és az élelmiszerbiztonsági szempontokat figyelembe vevő állattartással és takarmányozással kapcsolatos ajánlásokat. Az állattartás EU-konform környezetvédelmi szabályozásának tudományos előkészítése (Dohy János, Wittmann Mihály), a zoonózisok elleni védekezés (Mikola István, Nagy Attila), valamint a zoonózisok környezetszennyező szerepe és csökkentésüknek lehetőségei (Nagy Attila, Mikola István, Nagy Béla) különös jelentőségű feladatokat taglalnak. Rövid, csupán utalás jellegű fejezetek foglalkoznak a modern biotechnológia alkalmazásainak környezetvé-

delmi lehetőségeivel (Balázs Ervin), a mezőgazdasági vízgazdálkodás környezetvédelmi kérdéseivel (Cselötei László) és az erdők, erdősítesek környezetvédelmi szerepével (Solymosi Rezső).

A harmadik kötet az *Élelmiszer-biztonság az EU-szabályozás függvényében* címmel jelent meg. Jól tükrözi, hogy az élelmiszer-biztonság milyen kiemelt jelentőségű az EU-csatlakozásban, az élelmiszerek nemzetközi forgalmában, az életminőség javításában valamint a hazai népegészségügyi programban. Az utóbbi programra tekintettel mutatja be a kötet első fejezete (Nagy Attila, Rodler Imre és Zajkás Gábor munkája) az egészséges táplálkozás követelményeit és azok oktatási, ismeretterjesztési, élelmiszer-termelési és szocio-ökonomiai vonzatait. Ebben a fejezetben kapunk áttekintést az ételfertőzések, ételmérgezések mikrobiológiai okozóiról, az élelmiszer-fogyasztót veszélyeztető természetes eredetű toxikus anyagokról, a környezeti szennyezőkről, az élelmiszerekbe a környezet szennyezésével és az állatgyógyászattal összefüggésben bekerülhető szermaradványokról és az élelmiszer technológiák használatához kapcsolódó szennyező anyagokról. A szerzők megfogalmazzák az élelmiszer-szabályozás és -ellenőrzés szerepét az élelmiszer-biztonságban, valamint az Országos Élelmiszer-biztonsági Hivatal feladatait. A második fejezet (Bíró Géza) a tápláléklánc teljes vertikumát követve vázolja a takarmányozás, a növényegészségügy, az állategészségügy, az élelmiszeripar, élelmiszer-kereskedelem, a vendéglátás, a közétkeztetés és a magánháztartások élelmiszer-biztonsági kérdéseit. A harmadik rész (Molnár Zoltán és Szigeti Sándor) az állategészségügyi szolgálat munkáját az élelmiszer-biztonság szempontjából elemzi. A továbbiakban a kötet nemzetközi és hazai áttekintést nyújt a sertéshústermelésben alkalmazott élelmiszer-biztonsági rendszerekről (Rafai Pál). A baktériumok okozta étel-

fertőzési statisztikákban első helyen álló salmonellosisokra tekintettel, indokoltan nagy teret szentel a kötet ennek a problémakörnek (Herpay Laura és Bíró Géza). A gyakorlati adatok világosan mutatják a *S. enteritidis* hazai és nemzetközi előretörését és elterjedtségét, s azt, hogy e betegség döntően baromfi és tojás eredetű élelmiszerfertőzés. Bemutatják az EU-ban 1992-ben megjelent zoonózis rendeletben kitűzött szalmonellagyérítési célokat, a fő szabályozási pontokat és a gyérítés gyakorlatát egyes európai országokban. Áttekintést adnak a védekezés hazai helyzetéről is. Szabó Mária részletesen elemzi a humán salmonellosisok hazai statisztikáját, az ételfertőzések megszorodásának okait és a megelőzés lehetőségeit; míg Szita Géza a veszélyelemzésre és kockázatbecslésre tekintettel összefoglalja a sertés- és a szarvasmarhavágásnál, valamint a baromfi-feldolgozásnál javasolt mintavételi helyeket és szakmailag indokolt vizsgálatokat. Sas Barnabás az élelmiszerek kémiai szennyezettségének vizsgálatát tekinti át, kitérve a vonatkozó jogszabályokra, a mintavétel rendszerére, a vizsgálati rend szabályozásának szükségességére, és az országos monitoringvizsgálati terv végrehajtásának szervezésére. A kötet társszerkesztője, Bíró Géza, zárófejezetben foglalja össze az EU Európai Bizottsága *Élelmiszerbiztonsági Fehérkönyvében* megfogalmazott célkitűzéseket, az EU-csatlakozásra is tekintettel lévő magyarországi élelmiszer-biztonsági stratégia kidolgozásának a szükségességét és az erre való felkészülés tennivalóit.

Az itt ismertetett kiadványokból, látszólagos heterogenitásuk ellenére is nyilvánvaló, hogy az élelmiszer-biztonság, életminőségünk egyik meghatározója szempontjából az ismeretek és információk alapvető fontosságúak. Erre a megállapításra jutott az 1997-ben létrehozott hazai Élelmiszer-biztonsági Tanácsadó Testület a *Magyarország élelmiszer-biztonsági helyzete az ezredfordulón*

című tanulmányában is, egyebek között megállapítva, hogy „az élelmiszer eredetű megbetegedések legnagyobb része tudatlanságból ered, kellő ismeretek birtokában megelőzhető”. A sokat hangoztatott „tudásalapú társadalom” ilyen irányú megteremtése szempontjából az ismertetett kiadványok jelentős stratégiai támaszt adnak. (*Magyarország az ezredfordulón sorozat: I. Kovács Ferenc szerk.: A Penészgombák –*

mikotoxinok a táplálékláncban. II. Kovács Ferenc szerk.: Agrártermelés – Élelmiszer-minőség – Népegészségügy. III. Kovács Ferenc, Bíró Géza szerk.: Élelmiszer-biztonság az EU-szabályozás függvényében. Magyar Tudományos Akadémia Agrártudományok Osztálya, Budapest, 2001-2002., I: 212 o., II: 168 o., III: 242 o.)

Farkas József

az MTA r. tagja, egy. tanár (SZIE)

Hraskó Péter:

A könyvtár foglya

A szerző a KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet nyugalmazott főmunkatársa, akinek a Természet Világában, az Élet és Tudományban, a Fizikai Szemlében megjelent írásaiból, valamint különböző alkalmakkor és különböző fórumokon elhangzott előadásainak írott változataiból áll össze a 15 esszét tartalmazó gyűjtemény.

Hraskó Péter természetszerűleg egy kutató szemléletmódjával közelít témáihoz, ugyanakkor azonban írásaiból azonnal kiérezhető, hogy szenvedélyesen azonnal tanítani – a szó nemes értelmében. Kiforrott tudását és lelkesedését igyekeznek az olvasónak átadni – más szóval tudományt népszerűsít a legmagasabb fokon, azzal hogy gondolkodásra is készítenek.

A válogatásban egyaránt szerepelnek megemlékezések, illetve emlékbeszédek a tudomány kiemelkedő alakjairól (Szilárd Leó, Nikola Tesla, P. A. M. Dirac, Albert Einstein), irodalmi értékű elmélkedés az ókori csillagászat nagy alakjáról (*Látogatásban Hiparkhosznál*) és esszék a fizika egyes alapvető problémáinak értelmezéséről. E rövid ismertetésben nincs mód a teljes spektrum áttekintésére – ezért tessék inkább elolvasni a kötetet. Kedvcsinálónak azonban feltétlenül szólani kell néhány különösen érdekes és értékes részletről.

Nagy fizikusokról és kutatókról sokat hall az ember, ha nem is ismer minden tény. A szerző megemlékezéseit azonban az teszi egyénivé és érdekessé, hogy a tények tárgyilagos ismertetése és értékelése mellett olyan szubjektív, de teljesen megalapozott képet tár elénk, amelyre bizonyosan sokáig emlékezni fogunk. Szilárd Leóról, akinek életrajzát éppen ő fordította le magyar nyelvre, az objektív tények közlése után a következőket jegyzi meg: „... azt hiszem, jobb, ha azzal a beismeréssel kezdem, hogy számomra Szilárd Leó nem egy rokonszenves egyéniség. Az együttérzésemet természetesen egy pillanattig sem tagadom meg tőle, de a rokonszenv az más dolog. Bármennyire barbár dolog is pontokba szedni egy hús-vér embert, most mégis megpróbálom – a magam számára is – feltárba venni az ellenérzésem gyökereit. ...

A tudományban Szilárd végzetesen túlbecsülte az ötlet szerepét. Elsősorban brilliáns ötletemberként volt híres, de sokan tudták, hogy ötletgazdagsága annak tudható be, hogy ötleteit nem dolgozza ki. ...

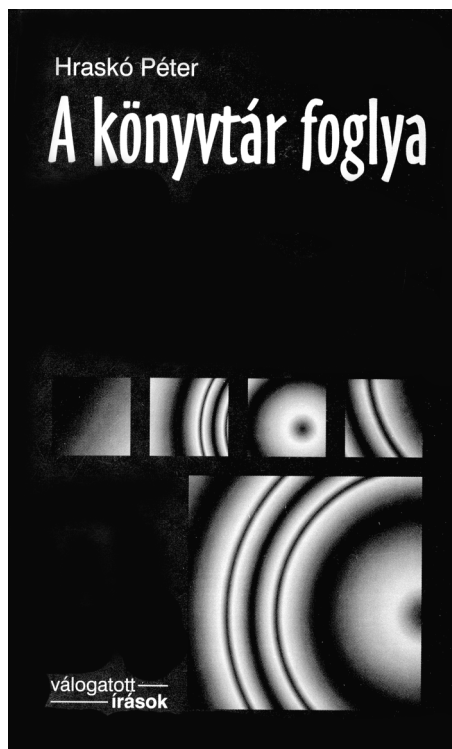
A türelmes, kitaró munka azonban nem tartozott Szilárd erényei közé. Fontosabbnak tartott ötleteit kidolgozás helyett szabadalmaztatta, amivel kiváltotta a tudományos közvélemény rosszallását. Ez az eljárás ugyanis ellentmondott a tudományos kutatás egyik alapelvének, amely szerint a kutatási eredményeket nem egy hivatal, hanem a tudományos közvélemény elé

kell terjeszteni elbírálásra. Szilárd egy másik egészen különös eljárása volt, hogy ötletét levélként megírta és levélben feladta – saját címére. Úgy gondolta, prioritási vita esetén jól jön majd a dátum a postai bélyegzőn.”

A *Nikola Tesla és az üzemanyag nélküli motor* című megemlékezésben Hraskó Péter igyekszik az őt megillető helyre tenni e tragikus sorsú zseniális mérnököt, többek között a váltóáramú motor és a híres Tesla transzformátor feltalálóját, aki furcsa megnyilvánulásai és kijelentései miatt a média kedvence volt, ebből következően a paratudományok művelői körében is óriási kultusza volt és jelenleg is van. A róla kialakított képet kissé árnyaltabbá teszi, hogy esküdt ellensége volt a relativitáselméletnek, és Einstein érvei ellenére (sok más elektromérnökkel együtt) továbbra is hitt az éter létezésében. A negatív vonások ellenére Teslának helye van a legnagyobbak panteonjában, amint azt Hraskó Péter meggyőzően kifejti.

A többi esszé közül hármat kell kiemelni érdekessége és aktualitása miatt. A *Tudomány és nemtudomány* fontos kérdést jár körül, nevezetesen azt, hol húzódik a határ tudomány és az annak nem minősíthető egyéb tevékenység, a nemtudomány (kevésbé udvariasan áltudomány) között. A falszifikálhatóság kritériumának ismertetése és a tudomány működésének felvázolása mellett Hraskó Péter a maga visszafogott és bölcs modorában egyúttal alaposan leszedi a keresztvizet a „paratudományok” hazai fő népszerűsítőiről és gurujáról, Egely Györgyről. Tanulságos néhány mondatot idézni ebből az írásból is:

„Akárhogy is van, a tudomány alapvető kötelessége, hogy nap mint nap felmutassa az érvényes gondolkodás példáit. A mérce, és a – hatalom nélküli – döntőbíró szerepét kell betöltenie az «igaz – nem igaz», a «logikus – nem logikus», a «következik belőle – nem következik belőle» alternatívák megoldásában. A korábbi metaforánkat tovább



fűzve: nem az a dolga, hogy desztillált vizet töltsön a korsónkba, de segítenie kell abban, hogy a kórokozókat távol tarthassuk az ivóvizünkötől. A hétköznapiak diszkurzív logikája mindig különbözni fog a tudományos normáktól, de ha elszakad tőlük, a következő katasztrofális lesz: a süketek párbeszéde válik általános gyakorlattá.”

Manapság, amikor a „kimeríthetetlen vákuumenergia” lecsapolását tervezgetik ambiciózus, de tudományos ismeretekkel nem rendelkező „feltalálók”, újfent aktuális Hraskó Péter 1983-ban, a *Természet Világában* megjelent cikke: *Egy különös közeg, a vákuum*, amely a részletes fizikai ismeretekkel nem rendelkezők számára is világossá teszi, mit is rejtenek magukban a vákuum első látszatra rejtélyes tulajdonságai.

A kvantumelmélet sokak számára még mindig rejtélyes diszciplína, főleg azért, mert megértéséhez ki kell lépnünk hétköznapi

világunk megszokott fogalomrendszeréből. A humán tudományok körében jó ideig sokan a Heisenberg-féle határozatlansági relációra hivatkoztak végső érvként szinte minden, a tudományt érintő vitában – természetesen lényegének megértése, valamint érvényességi körére való tekintet nélkül. Manapság a holizmus és a Bell-egyenlőtlenség a sztár, amely már beférközött a pszichiátria (!) berkeibe is. (Szombati Ágnes: *Mitoszképzés századunkban, szinkronicitás*, Debreceni Szemle, 1999. jún. 274-80 o.)

A gyűjteményben több cikk is foglalkozik ezzel a híres Bell-féle egyenlőtlenséggel és annak következményeivel. Ezért is különösen aktuális az 1991-ből származó *Kvantumelmélet, holizmus, redukció* című cikk,

amely mindenki számára megvilágítja ezeket a fogalmakat, aki hajlandó egy kicsit is elgondolkodni rajtuk.

Hraskó Péter kötete élvezetes és érdekes olvasmány, bár egyes cikkek a használt matematikai formalizmus miatt feltehetően nem vernek egykönnyen hidat a humán kultúrához. Talán kissé optimista az elvárás, hogy a humán kultúra oldaláról is ugyanakkora szándék van a hídverésre, mint a szerző oldalán. Mindenesetre ha e kötetet bárki kezébe veszi, érdekes olvasmányban lesz része, tudása csak gazdagodhat és az írások remélhetőleg szemléletmódjára is hatással lesznek. (*A könyvtár foglya. Typotex, Budapest, 2001, 269 o.*)

Bencze Gyula

az MTA doktora, tud.tanácsadó (KFKI – RMKI)

Fanyar tudomány

Ig Nobel, a hóbortos kistestvér

Előfordult már, hogy megrovóan nézett a söröskancsójukba mélyedőkre? Arra biztosan nem gondolt, hogy ezek az emberek esetleg valamilyen fontos tudományos probléma megoldásán fáradoznak. Pedig előfordulhat. Mi sem bizonyítja ezt jobban, mint Arnd Leike úr kitüntetése. A müncheni Ludwig Maximilian Egyetem fizika tanszékének munkatársa októberben Nobel-díjat kapott „Az exponenciális bomlástörvény igazolása sörhabbal” című tanulmányáért. A dolog egyetlen szépséghibája, hogy ez *nem az a Nobel-díj*. Leike doktor „Ig Nobel”-t kapott.

Ez a komolytalan tudományok díja: meglepő, ám haszontalan felfedezésekért ítélik oda. A díjazott felfedezések kevés gyakorlati haszonnal kecsegtetnek, viszont mosolyt csalnak az arcokra. A nagy Nobel-díj, hóbortos kistestvérét” valódi tudományos munkáért ítélik oda, a sörhabos tanulmányt például a rangos *European Journal of Physics* közölte. A díjakat Bostonban, a Harvard Egyetemen adják át, az *Annals of Improbable Research* folyóirat szervezésében, komoly kiválasztási eljárás után. Sok jelentkező és javasolt közül választják ki az évi tíz díjazottat. Az Ig Nobel (a kifejezés az angol *ignoble* – alantas, nem nemesi származású – jelentésű szóra utal) olyan tudományos eredményért adják, amelyet nem lehet vagy nem érdemes megismételni. Idén alaposan tévedett a zsűri, mivel a sörhabbal végzett kísérleteket meg lehet, sőt érdemes is megismételni!

Leike doktor egy 7,2 cm átmérőjű pohárba töltötte az üvegből a 19 °C hőmérsékletű

sört. A sörhab néhány másodperc alatt elérte maximális magasságát, majd kezdett fokozatosan eltűnni. Ennek a folyamatnak a részleteit vizsgálta a német tudós. 15 másodpercenként megmérte a sörhab magasságát. Háromféle sörrel kísérletezett, a pontosság érdekében természetesen mindegyik fajttal többször megismételte a mérést. Az egyik sör a kutató kedvence, az Erdinger Weissbier volt, emellett az Augustinerbräu München és a Budweiser Budvar szerepelt a vizsgálatokban.

A mérési adatokból megállapította, hogy a sörhab eltűnése a jól ismert exponenciális bomlástörvényt követi, az adatokból pedig meghatározta az egyes sörhabok t bomlási állandóját. Ez a szám megmutatja, hogy mennyire gyors a bomlás: t idő alatt az eredeti mennyiség 63 %-a tűnik el. Leghamarabb az Augustinerbräu habja tűnt el ($t=124$ másodperc), majd a Budweiseré ($t=168$ másodperc), a legtartósabbnak pedig $t=276$ másodperccel a Weissbier habja bizonyult. A szerző természetesen megadta a mérési eredmények bizonytalanságát is, ennek közlésétől itt eltekintünk. Mire lehet felhasználni ezt a tudást? A szerző szerint módszere lehetővé teszi a különböző sörök megkülönböztetését. Például három különböző sört hozatunk, és nem tudjuk, melyik pohárban van a Weissbier. Nem kell más tenni, mint kitartóan figyelni a poharakat – ahol legtovább megmaradt a hab, ott a Weissbier.

A biológiai díj idei nyertese azt elemezte, hogy miért éreznek a házasított struccok kü-

lönös vonzalmat az emberek iránt. A matematikai díj indiai nyertese felvázolt egy módszert az indiai elefántok teljes testfelületének becslésére. Spanyol feltaláló kapta a higiénia díját: mosógépet alkotott kutyák és macskák számára. A békedíjat idén azok a japán kutatók kapták, akiknek sikerült japán nyelvre fordítaniuk a kutyaugatást, és ezzel sokat tettek a fajok közti harmónia és béke megteremtéséért. A százhusz dolláros fordítógép szeptember végén került a boltokba, viszik, mint a cukrot. A kutya nyakörvére mikrofont szerelnek, a hangot parányi adó továbbítja a számítógépnek. A kutyahangokat hat érzelmi kategóriába csoportosították, ezeket azonosítja az akusztikai elemző program. A hat kategóriához összesen kétszáz szót rendeltek hozzá, az adott kategória szavai közül azonban már véletlenül választ a gép. A csivavától német juhászig ötven fajtanál próbálták ki eredményesen a készüléket. A nagy sikerrel való tekintettel folytatják a munkát: megoldják az internetes kutyaüzenet továbbítást, és természetesen más állatfajokra is kiterjesztik a technológiát. Rövidesen nem kell találgatnunk, vajon mit is akar a kertünkben felmordulni oroszlán.

Az orvosi díjat 2002-ben McManus brit orvos kapta egy 1976-os elemzéséért, amelyet a Nature közölt. Mérési adatok szerint a férfiak jobb heréje nagyobb, nehezebb és magasabban van, mint a bal. A díjazott viszont ismert egy régi megfigyelést: 1764-ben egy Winckelmann nevű úr azt figyelte meg, hogy a szobrokon a bal herét ábrázolják nagyobbban. Ezt a mai kutatások nem igazolták, McManus tehát hozzálátott a másik megállapítás ellenőrzéséhez. Százhet ókori és reneszánsz szobrot tanulmányozott olasz múzeumokban. (Ezért őszintén irigyeljük.) Táblázatba foglalt mérési eredményei szerint a művészek valóban helyesen, magasabban ábrázolták a jobb herét, de tévedtek, amikor a bal herét nagyobbra faragták. Talán arra gondoltak, hogy a nehezebb mindig lejjebb

van? McManus szerint a jobb here helyes ábrázolása talán egyszerűen a dolgok jó megfigyelésének köszönhető, de lehet, hogy görög szimbolika rejtőzik mögötte. Eszerint a jobb a férfhoz, a bal a nőhöz kötődik, a fiúgyerek tehát a jobb heréből származik, így a jobb here nyilvánvalóan magasabb helyet érdemel...

A díjak között időnként olyan is akad, amelyet egy-egy ismert embernek ítélnék oda, így állítva pellengérré őket. Idén az Enron, a WorldCom, az Arthur Andersen és több más csődbe ment cég vezetői kaptak közgazdasági díjat, mert sikeresen alkalmazták az üzleti világban az imaginárius számok matematikai fogalmát.

Érdemes néhány korábbi díjazott munkásságát is felidézni. Biztonságtudományi díjat adtak a grizzlymedveálló páncélöltözék kifejlesztéséért és személyes kipróbálásáért. Kémiai díjjal ismerték el a homeopátia új eredményét, mely szerint a víznek nemcsak memóriája van, de az abban tárolt információ telefonon és az Interneten keresztül is továbbítható. Szintén kémiai díjjal ismerték el a kerti grillsütő begyűjtésének leggyorsabb módját: a feltaláló folyékony oxigént használt. Kémiai díj járt a DNS kölniért és parfümért. A megnyugtatónak szánt reklámszöveg szerint egyik sem tartalmaz dezoxiribonukleinsavat, viszont mindkettőt triplán helikális üvegben forgalmazzák. Deepak Chaprának a kvantumfizikát egyedülállóan értelmezve sikerült azt az életre, a szabadságra és a gazdaság keresésére alkalmaznia. (Chapra munkahelye a Kaliforniában működő The Chapra Center for Well Being.)

Rangos helyen, a Lancetben jelent meg az orvosi Ig Nobel-díjjal elismert beszámoló, amelynek alanya, egy férfi, aki megszurta az ujját, öt évig bűzlött. Biológiai díjat kapott egy japán-svájci-cseh kutatócsoport, amely a különböző ízesítésű rágógumik rágcsálása közben megjelenő agyhullámok eltéréseit vizsgálta.

Fizikai díjat érdemelt ki az a brit kutató, aki kísérletileg ellenőrizte Murphy egyik fontos törvényét, mely szerint a vajás kenyér legtöbbször a vajás felére esik. Irodalmi díjat kapott a Biblia rejtett kódjának felfedezője és az az orvosi szakcikk, amelynél a szerzők száma százszor nagyobb volt a dolgozat oldalszámánál (a cikknek 976 szerzője volt). Ugyancsak irodalmi díjas lett Jurij Sztruhov moszkvai kémikus, aki 1981 és 1990 között 948 tudományos közleményt jelentetett meg; 3,9 naponként egyet! Békédíjas angol munka a különböző kivégzési módok során jelentkező fájdalmak összehasonlító elemzése. Meteorológiai díjjal ismerték el „A csirkék tollvesztésének mértéke mint a tornádó szélesebségének mérése” című tanulmányt. Pszichológiai díjat kapott az a kutató, aki galambjait megtanította Monet és Picasso képeinek megkülönböztetésére. Rovartani díjjal ismerték el azt az állatorvost, aki macskák füléből atkákat telepített saját fülébe, és gondosan elemezte a hatásokat. Matematikai díjat kapott az erkölcsök mérésre kidolgozott eljárás, amelynek segítségével megyéről

megyére felbecsülték, hogy Alabama államban hány lakos jut pokolra, ha nem bánja meg bűneit. Szintén matematikai díjas lett az az amerikai, aki pontosan kiszámította, mekkora a valószínűsége annak, hogy Mihail Gorbacsov az Antikrisztus. (A pontos szám: 710 609 175 188 282 000 az 1-hez, kerekítve 711 trillió az 1-hez.)

Békédíjat 1998-ban a brit és a pakisztáni miniszterelnök együtt kapott „az atombombák agresszívan békés felrobbantásáért”. 1996-ban Jacques Chirac francia elnök azzal érdemelte ki a megtiszteltetést, hogy Hirosima bombázásának ötvenedik évfordulóján hajtatót végre atomfegyver-kísérletet. Ide tartozik az egyetlen magyar vonatkozású díj is, Teller Ede 1991-ben odaítélt békédíja. „A hidrogénbomba atyja és a csillagháborús fegyverrendszer élharcosa azokért az egész életén át kifejtett erőfeszítésekért kapott díjat, melyekkel megváltoztatta a béke szó jelentését.” Tellert 1991-ben, rögtön a legelső Ig Nobel-díjak között ismerték el.

Jéki László



Media wave

Egy *Brief Communication* körüli „médiáélmények” összefoglalója

Megjelent egy cikkünk egy nagy nemzetközi tudományos hetilapban a mexikói hullámról (a tömegeknek a stadionokban megfigyelhető hullámozgásáról), és beindult a médiahullám! Észrevételeim talán érdekelhetik, szórakoztathatják kutatótársaimat.

Ha a téma ilyen „hálás” (közismert, sporttal kapcsolatos, érthető), a média rámozdul. A hullám fokozatosan indul be, először egykét, már közel egy héttel a megjelenés előtt befutó e-mail formájában, a megjelenés napján tetőzik, majd pár nap után élesen levág; új hét, új sztori. Az eleinte majdnem kellemes izgalmat idővel felváltja a fáradtság, jönnek az élő interjúk – amikor szegény fizikus néha milliókhoz beszél angolul egy ismeretlen *talkshow* közepén –, s a hét végén az ember kimerülten, ingerülten elhatározza, hogy legközelebb a társszerzőjére hártja a feladatot. . .

Az újságírók stílusa országoként vagy inkább kultúrák szerint jól megkülönböztethető. Úgy látszik, ebben még nem teljes a globalizáció. Egyesek telefonon, mások e-mailben jelentkeztek. A telefonálókról sokszor hamar kiderült, fogalmuk sincs a cikk tartalmáról; a címe alapján hívtak, hogy mondjam már el nekik, mi is a téma egyáltalán.

A svájci: Tisztelt Professzor Úr (még írásban is szinte érezni a túlzott tiszteletteljeséget), használhatjuk-e a honlapjukon (egyébként szabadon) hozzáférhető fényképet? Nagy felbontásban kellene. (Végül nem használták, nem volt elég jó a felbontás nekik.)

A francia, telefonon: Do you speak French, Mister Tamás? (Miszter Tamás, beszél Ön franciául?) Ezután egy – egészen tűrhető angolsággal lefolytatott – hosszas beszélgetés következik arról, hogy van-e a társszer-

zők között olyan, akivel tudna franciául beszélni, majd sorra vesszük a további lehetőségeket, valaki a tanszéken, valaki Franciaországban (!?). Amikor nem találunk ilyet, az interjú a következő fordulatot veszi: Then thank you, bye-bye, (akkor, köszönöm, viszlát!) és leteszi a kagylót! (Persze lehet, hogy egy rádió számára készült interjút kérni, de ezt nem említette. . .)

Az amerikai a CNN honlapról: e-mailben veszi fel a kapcsolatot, nem kertel, üzenete így kezdődik: Question: (itt jön a kérdés, mindenféle megszólítás nélkül. Egyébként a többi amerikai üzenetben mostanában az indítás egy sima *hello*).

A német: alaposan áttanulmányozta a cikket. Szakmailag elmélyült kérdéseket vet fel, például olyasmit, amiről a következő cikket tervezze írni. Enyhén gyanakvó, érezni, hogy nem érti, ha ő képes a lényegyet megérteni, sőt, rátapintani bizonyos hiányosságokra (mert azt tette), hogy fogadhatták el a cikket a *Nature*-ben?

Magyar: két, már eddig is ismerős tudományos újságíró keresett meg. Szakmailag nagyon színvonalas az együttműködés (ez nem vonatkozik a felhasznált technikai eszközök mindegyikére); a nemzetközi hullámhoz képest a hazainak egy kis késése van.

Kínos pillanatok is adódtak. Az egész dolgot áthatják a meredek, vagy vicces élmények, félreértések, amelyek persze elsősorban az élő adásokhoz köthetőek. Elsőnek itt egy kis csemege; ez szerencsére nem élőben volt. Felhívnak a BBC-től, hogy a cikkünk ügyében egy telefoninterjú céljából fél óra múlva elérhető leszek-e. Elhangzik egy érthetetlen mondattörődék is, de hát van ilyen. Fél

óra múlva hívnak, elhangzik az első kérdés, és nem értem! Van benne minden, ami ismerős, eredmény, statisztika, effektus, meg minden, de egy szó is – valami *jur-o-kon*, amitől az egész mondat értelme összeomlik. Aztán kiderül: az új Eurocoin érmével kapcsolatos allergiáról akartak kérdezni: ez a mi cikkünk utáni publikáció a folyóirat adott számában.

Egyáltalában: minden gyorsan pereg, az ember nem igazán tudja, milyen műsorban lesz, mire készüljön. A felvezetés általában profi, kis bicsaklásokkal. A CNN-es hölgy például megkérdezi: milyen címmel rendelkezik? Professzor vagy doktor? Mondom, hogy prof. Erre ő: – Oh, I see, so you don't have a doctorate yet? (Úgy, szóval Önnek még nincs meg a doktori fokozata!)

Az élő adások előtt végighallgathatom, milyen szövegkörnyezetben, milyen téma után következem. Egyik elbátortalanítóbb, mint a másik. Íme egy csokor:

– Bush nyilatkozik a lehetséges iraki háborúval kapcsolatban

– Ha már háború: a CNN szombat reggeli adásában az előttem levő egy – így mondják – közismert, Amerikában lezajlott háborúról nyilatkozik. Ez a háború a keleti és a nyugati parti rapperek között zajlott, így én egy rapperharcos után nyilatkoztam, kissé elveszve, kikhez is beszélek.

– A BBC-n a közlekedési info után jöttem, egy másik alkalommal pedig az időjárásjelentést követően.

Az élő adások közül a *talkshow*-k elég meredek. Például egy másik BBC adón, amelyik a világban szolgáló angol katonának sugároz, nagyon vidámak voltak a talk show vezetői: egy adott ponton közölték, hogy ők most a stúdióban produkálnak egy hang-mexikói-hullámot, és tényleg visítotak is egy sort, majd reklamálták, hogy a hullám a szoba tulsó végén elakadt.

Belekeveredtem egy Seattle-i CBS adó *talkshow*-jába is. Ez volt a mélypont. Ilyenekről volt szó: hány szurkoló tud hullámot indí-

tani? Válaszuk: ha elég részeg, akkor egy is. Másik válasz, ha nő, és nincs rajta felül semmi, akkor is elég egy. Itt aztán kezdtek elakadni, így a műsorvezetőnek újabb kérdése támadt: Hey, Tom, do you have a wife? – Ezekben az adásokban többször mondták, hogy a University of Hungary-ról vagyok, és az embernek az volt az érzése, hogy az amerikaiak azt hiszik: Hungary Budapest fővárosa.

A kínos pillanatok része, hogy az ember fél, nem érti majd a telefonban a kérdéseket. És valóban, már az első esetben, a felvezető asszisztens hölgy egy recsegő vonalon, különös kiejtéssel hadart instrukciókat a kagylóba (nem is értettem). Szerencsére, mire élesben történnek a dolgok, a vonal kitisztul, és a riporter is kiművelt, jól érthető módon kérdez. Persze nem a *talkshow*-kban, ahol az ember csak ürügy, és a műsorvezetők egymásnak szellemeskednek az interjúalany bőrére, de én ezt nem tudtam előre.

Érdekes, hogy szinte mindegyik újságíró ugyanazokat a kérdéseket tette fel:

– Miért éppen ezzel a kissé szokatlan témával kezdünk foglalkozni?

– Mi volt az a meglepő váratlan eredmény, ami a vizsgálatainkból adódott?

– Mire lehet ezt az egészet majd használni?

Tulajdonképpen ez volt az egészben a legtanulságosabb. Úgy tűnik, az embereket ezek a kérdések sokkal inkább foglalkoztatják, mint a valódi tudományos eredmények. Elgondolkodtató, hogy mi kutatók mennyire másképp tesszük fel magunknak tudományos kérdéseinket.

További tanulság, hogy a hír, beleértve a tudományos híreket, mennyire „áru” jellegű. Ráadásul gyorsan romló. Az új tudományos híreket újságírók százai lesik, ezekből élnek; úgy tűnik, fontos piacot látnak el ezzel a termékkel, gyakran az egyéb árucikkek gyártóinak és forgalmazóinak stílusában. A kíváncsiság olyan alapvető emberi vonás, hogy kielégítéséből jól meg lehet élni.

Vicsek Tamás

Hírek, információk

EGYÜTTMŰKÖDÉSI MEGÁLLAPODÁS

amely létrejött egyrészről a *Foglalkoztatáspolitikai és Munkaügyi Minisztérium* (1055 Bp., Alkotmány u. 3.), másrészről a *Magyar Tudományos Akadémia* (1051 Roosevelt tér 9.) között a foglalkoztatás és képzés tudományos kutatása és elemzése, az eredmények munkaerőpiaci és társadalmi alkalmazásának erősítése céljából.

A foglalkoztatáspolitikai és munkaügyi miniszter, valamint a Magyar Tudományos Akadémia elnöke a foglalkoztatás és humán erőforrás fejlesztésében stratégiai fontosságúnak tekinti a tudomány szerepét. Ennek szellemében a stratégiai fejlesztési és finanszírozási feladatokról közvetlen egyeztetéseket folytatnak, és a jelen megállapodás mellékletében foglalt témakörökben közös projekteket indítanak, kutatási megbízások kiadását, pályázatok kiírását tervezik.

1. A Foglalkoztatáspolitikai és Munkaügyi Minisztérium és a Magyar Tudományos Akadémia a Kormányprogramban meghatározott célok megvalósítása érdekében a Nemzeti Fejlesztési Terv keretei között együttműködik a humán erőforrás, munkaerőpiaci és foglalkoztatáspolitikai témakörök kutatásában.
2. A két fél közös kezdeményezéseket tesz a hazai munkakultúra korszerűsítése érdekében, különös tekintettel az atipikus foglalkoztatás informatikai eszközökkel és megoldásokkal történő támogatása terén. Kutatási pályázatot készítenek elő a távmunka hazai elterjesztését szolgáló informatikai feltételek javítására, a foglalkoztatás bővítésére, valamint a különösen hát-

rányos térségek munkaerőpiaci helyzetének javítására.

3. A két fél közösen kezdeményez felméréseket az esélyegyenlőség jelene és javításának lehetséges módozatai témában, különös tekintettel a hátrányos helyzetű csoportokra.
4. A Foglalkoztatáspolitikai és Munkaügyi Minisztérium támogatja a Magyar Tudományos Akadémia kutatási kezdeményezését, mely a munkanélküliség és foglalkoztatási viszonyok aprófalvas térségekben végbement változását vizsgálja a rendszerváltástól napjainkig.
5. A két fél kezdeményezi, hogy a tudásalapú társadalom kiépülésének és gazdasági hatásának feltárása érdekében az érintett szociális partnerek részvételével kezdődjön meg egy olyan tudományos fórum kialakítása, mely a kutatási célok és fejlesztési feladatok egyeztetésével egy hosszabb távú társadalmi együttműködés széles alapjait teremtheti meg.
6. A Magyar Tudományos Akadémia szakmailag támogatja a Foglalkoztatáspolitikai és Munkaügyi Minisztérium által koordinált, egész életen át tartó képzés programját, kutatási eredményeivel segíti a Program Tanács munkáját.

7. A két fél a foglalkoztatási és regionális kutatások keretei között együttműködik a munkaerőpiaci képzési és átképzési programok eredményességének makro-gazdasági, regionális és kistérségi vizsgálatában.
8. A két fél lehetővé teszi a foglalkoztatottság, a munkaerő-kínálat és -kereslet összefüggéseit, a bérezést és beralakulást elemző tudományos munkálatokban a kutatókkal, elemzésekkel és döntéselőkészítéssel foglalkozó szervezeti egységek közötti együttműködést, a felmérési adatok cseréjét, a munkaügyi adatbázisokhoz való hozzáférést a kutatók, a kutatási eredményekhez való hozzáférést a kormányzat számára.
9. A felek közös műhelybeszélgetéseket, szimpóziumokat, s egyéb szakmai rendezvényeket szerveznek a megállapodásban foglalt témakörökben folyó kutatási-fejlesztési eredmények széleskörű ismertetése érdekében.

Jelen megállapodásban foglalt általános célokat a mellékletben szereplő éves feladatterv ütemezi, megjelölve a résztvevő intézményeket és kutatási témákat, pályázati kezdeményezéseket.

A felek a megállapodás tartalmát, teljesülését az általuk létrehozott vegyes bizottságban évente közösen áttekintik és értékelik, és az éves feladatterveket a vonatkozó belső szabályzatok szerint jóváhagyják.

Budapest, 2002. november

Kiss Péter

miniszter

Foglalkoztatáspolitikai és
Munkaügyi Minisztérium

Vizy E. Szilveszter

elnök

Magyar Tudományos
Akadémia

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA ELNÖKSÉGI ÜLÉSE

Budapest, 2002. november 26.

Napirend:

- A Magyar Tudomány Napja és a közgyűlés értékelése – Előterjesztő: Vizi E. Szilveszter
- A 2002. november 4-i közgyűlés határozatának véglegesítése
Előterjesztő: Somlyódy László
- Tájékoztató az Akadémia 2003. évi költségvetéséről – Előterjesztő: Kroó Norbert
Meghívott: Szamkó Józsefné
- Beszámoló a Magyar Tudomány c. folyóirat 2002. évi működéséről, valamint a 2003. évi terveiről – Előterjesztő: Csányi Vilmos
- Összefoglaló beszámoló a Székház működéséről – Előterjesztő: Meskó Attila
Meghívott: Szemes Imre
- Előterjesztés az Akadémia nemzetközi kapcsolatairól – Előterjesztő: Kroó Norbert
Meghívott: Pusztai János, Kardon Béla

AZ EURÓPAI FIZIKAI TÁRSULAT BUDAPESTI KONFERENCIÁJA

Augusztusban Budapesten tartotta három-évenként esedékes konferenciáját az Európai Fizikai Társulat (EPS). Az 1968-ban alakult, az európai nemzeti fizikai társulatokat és egyéni tagokat tömörítő szervezet „Irányzatok a fizikában” címmel tekintette át a fizika legújabb eredményeit, a fizika jövőjét.

Magyarország, az Eötvös Loránd Fizikai Társulat (ELFT), a ma már csaknem százezer fizikust és fizikatanárt tömörítő szervezet egyik alapítója volt és mindig aktív szerepet vitt az EPS életében. Kroó Norbert akadémikus, az MTA főtitkára korábban az EPS elnöke volt. A nemzetközi szervezet franciaországi központja mellett Budapesten is működött regionális irodát. A konferencia budapesti megrendezését már 1996-ban kezdeményezte Nagy Dénes Lajos, az ELFT akkori főtitkára, a KFKI Részecske- és Magfizikai Kutatóintézet tudományos tanácsadója. A közép- és kelet-európai fizikus egyesületek azonnal támogatták a kezdeményezést, és 1999-ben egyhangú döntéssel ítélték Magyarországnak a rendezés jogát. Nagy Dénes Lajos vezette a konferencia szervezőbizottságát.

A konferenciát annak a felismerésnek a jegyében szervezték, hogy a fizika tudományágból mára már olyan módszerré is vált, amely minden természettudomány alapja, sőt már egyes társadalomtudományi ágakban is megjelent. A „fizika” szó, hagyományos jelentésén túl, mindazon tudományokra is vonatkozik, amelyek a fizika módszereit alkalmazzák. A kémiában és a biológiában hagyományai vannak a fizikai módszerek alkalmazásának, újabban egyre nagyobb szerepet kap a fizika a környezettudományokban. A társadalomtudományok és a fi-

zika kapcsolatára Vicsek Tamás akadémikus adott példát. Előadásában a nagy tömegben mozgó emberek viselkedését írta le fizikai fogalmakkal és egyenletekkel. Felismerései segíthetnek a nagy tömegek optimális mozgásának megtervezésében, a pánik elkerülésében. Az atomerőművek szerepének értékelése is sokoldalú elemzést kíván. Ebben szerepet játszik az atomenergetika társadalmi fogadtatása éppúgy, mint a széndioxid-kibocsátás mentes működés szerepe a globális felmelegedés elkerülésében. A konferencián előadó Martinus Veltman, 1999-ben Nobel-díjjal kitüntetett holland részecskefizikus szerint téved az, aki azt hiszi, hogy a 21. század a biotechnológia százada lesz. A 2000-ben Nobel-díjjal elismert orosz Zsoresz Alfjorov engedékenyebb. Úgy gondolja, az új század első fele még mindig a fizikáé, az onnan elesett módszereké lesz, és azt követi majd a biológia. A konferencián külön szekció foglalkozott a fizikanak a biológiában, az útkutatásban és más területeken való alkalmazásaival.

A konferencia plenáris előadásai igazolták ezt a vélekedést. Váratlan és alapvető felismerések születtek a fizikában, és ezzel párhuzamosan fantasztikus eredményekhez vezettek a korábban megszerzett alapvető ismeretek alkalmazásai. Nagy figyelmet keltett a fény „megállítása”, az egyes atomokon elvégzett alapvető kvantumfizikai kísérletek, a friss részecskefizikai mérési eredmények.

Megállították a fényt! – első hallásra megdöbbenő a hír. Valójában nem is ez a szenzáció, hanem az, hogy a megállított fényt újra elindították, tehát a fény mozgott, megállt, majd újra mozgott. Az amerikai fizi-

kusok kísérletében az atomok sokasága kollektívan zárta magába egy időre a fényre vonatkozó információkat. Az abszolút nullához közeli hőmérsékletre lehűtött, egyetlen kvantumállapotba (Bose-Einstein kondenzátum) rendeződött rubídium atomsokaságra két olyan vörös színű lézernyalábot bocsátottak, melyeknek a színe csak kissé tért el egymástól. Később a segédnyalábot kikapcsolták. Itt nem részletezhető kvantummechanikai folyamatok következtében ekkor megszűnt a kimenő fényjel, az anyagban kialakult újfajta rendezettség, az ún. spinhullám tárolta a belépett fény „leírását”. A segédnyaláb újbóli bekapcsolására kiszabadult az információ, és az eredeti vörös jellel teljesen megegyező vörös fény lépett ki a gázból. Az első sikeres kísérletekben fél milliszekundum volt a tárolás idő. Ez az atomi világban hosszú idő, ennyi idő alatt 150 kilométert tesz meg a fény vákuumban. Az eredmény teljes meglepetés, de nem hozott új fizikai felfedezést, a folyamat valamennyi részlete eddigi ismereteink alapján értelmezhető. Semmilyen eddigi ismeretet nem kell sutba dobni, és nincs szükség új törvények megfogalmazására sem. Ha sikerül egyszer majd kvantumszámítógépet építeni, akkor abban majd szerepet kaphat ez a nemrég felfedezett, a fényt megállító, tároló, újraindító megoldás is.

Az alkalmazások köréből a nanoszerkezetek ismertetése emelkedett ki, gyors ütemben bővülnek a csúcstechnikai megoldások az alig néhány éve megismert nanotartományban. A konferencián rangos díjjal ismerték el egy francia-olasz-amerikai kutatócsoport tagjainak a nanomágnesség megértéséhez való hozzájárulását.

Az alap kutatási eredmények fantasztikusan gyors alkalmazására Zsosz Alfjorov szilárdtestfizikai munkássága kínált példát. A jól ismert szilícium alapú félvezetők után megszülettek a heteroszerkezetű félvezetők. Ezekben néhány atomnyi, maximum néhány

mikrométer vastagságú gallium-arszenid és alumínium-gallium-arszenid rétegeket építenek egymásra. A heteroszerkezetű félvezetőkben kialakított tranzisztorok a hagyományos tranzisztoroknál százszor magasabb frekvencián képesek működni. Az űrtávközlésben heterotranzisztorokra alapozott alacsony zajú, nagyfrekvenciájú erősítőket használnak, ezek a mobiltelefonokban is elterjedtek, mert jobb jel/zaj viszonyt biztosítanak.

Alfjorov hozott létre először ilyen félvezetőket. Az új anyagból sokféle eszközt, egyebek mellett lézert is építettek. Továbbfejlesztett heteroszerkezetű lézerek már szobahőmérsékleten is képesek voltak folytonos üzemre, ez megnyitotta az utat az alkalmazások előtt. Ilyen lézerdíóddal indulhatott meg a távközlés az optikai kábeleken, e nélkül ma nem lenne internet kapcsolatunk. Hasonló, egészen miniatűr lézerek működnek a CD-lejátszóknak, az áruházi vonalkód leolvasókban. Heteroszerkezetű diódák adnak erős jelzőfényt például az autók féklámpájában és a forgalomirányító lámpákban is.

Alfjorov felfedezéseinek történetét igyekeztek a szélesebb nyilvánossággal is megismertetni. A konferencia szervezői ugyanis fontos feladatuknak tartották, hogy a nagyközönség, a laikus adófizető polgár is ismerje meg, mit várhat a tudományos kutatástól, milyen hatással vannak életére a tudomány alkalmazásai. Ezért foglalkoztak az egyik szekcióban a fizikatanítás problémáival.

A jövő kimeríthetetlenek ígérkező energiatermelési lehetőségével, a szabályozott termonukleáris fúzióval is külön ülészak foglalkozott. A fúziós kutatásokban kialakult európai együttműködés modellértékű lehet más tudományterületek számára. Az Európai Unió kutatási programjában kiemelt szerepet kaptak a fúziós kutatások. A fúzió feltételeinek megteremtéséhez nagy berendezést, a plazmát a mágneses térrel összetartó tokamakot kell építeni. Angliában működik az európai országok közös kutatóeszköze, a JET

(Joint European Torus) tokamak, amelynél a világon először, 1991-ben hoztak létre rövid időre atommagfúziót.

H. Bruhns irányítja az Európai Unióban a fúziós kutatások összehangolását. Előadásában elmondta, hogy a következő négy évben a nemzeti ráfordítások mellett 750 millió euró közösségi pénz szának fúziós kutatásokra. Európában kétezer kutató és mérnök, köztük 250 doktorandusz fiatal, dolgozik a programon. Már Magyarország is részese ennek az összehangolt programnak. 2000-ben jött létre a Magyar-EURATOM Fúziós Társulás a KFKI Rézecske- és Magfizikai Kutatóintézet, a KFKI Atomenergia Kutatóintézet és a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem részvételével.

A magyar kutatók 1979 és 1997 között elsősorban itthon, a KFKI-ba telepített kis tokamak mellett kísérleteztek. A plazma állapotát vizsgáló, diagnosztizáló új módszereiket, megoldásaikat később német és svájci tokamakoknál vetették be. Az európai óriás tokamak, a JET tudományos programjában a magyar csoport feladata egy plazmadiagnosztikai módszer bevezetése és alkalmazása. A mai kutatások frontvonalát jelentő JET körül a munkavégzés feltételei is modernnek, nemrég nyílt meg a távmunka lehetősége, az Interneten keresztül irányítják a kísérleteket, kapják meg azonnal a mérési adatokat. Ezt a munkaszervezést a többi nagy európai kutatási program prototípusának tekintik.

A konferencián több előadás foglalkozott az európai fizikusok közös terveivel, az épülő kísérleti nagyberendezésekkel. Hatalmas részecskegyorsító, óriás röntgenlézer, nagy intenzitású neutronforrás, minden eddiginél nagyobb tokamak építése szerepel a tervekben. Tudósok és tudománypolitikusok nyilvános kerekasztal-beszélgetésen elemezték az európai kutatás-fejlesztés jövőjét. A tervezett tokamakot és spallációs neutronforrást kiállításon is bemutatták. Szekcióülést szenteltek annak feltárására, hogyan segít-

het a fizika a fejlődő országok problémáinak megoldásában.

A konferencia szervezői különös figyelmet fordítottak a fiatalok bevonására, a nemzedékek találkozására. Az EPS konferencia előtt rendezték meg a világ fizikushallgatóinak konferenciáját, közülük mintegy 400 fiatal (35 év alattiak) az EPS konferencián is részt vett a támogatóknak köszönhetően. A nagyvonalú támogatók sorából kiemelendő az Európai Bizottság, az EPS, az UNESCO és a Soros György által alapított Open Society Institute. Az ifjúsági poszterverseny legjobbjai plenáris ülésen ismertethették eredményeiket.

A konferencia szervezői éltek a modern technika kínálta új lehetőségekkel, az EPS konferenciák sorában most először a konferencia előadásait az interneten közvetítették, a teljes program később is felkereshető marad (www.eps12.kfki.hu/eurotron/). A keddi esti tudománypolitikai kerekasztal-beszélgetésbe be is lehetett kapcsolódni az interneten keresztül, kérdéseket tehettek fel az érdeklődők.

A nemzetközi találkozó arra is jó alkalmat kínált, hogy a magyar fizikusok végiggondolják tudományáguk helyzetét, jövőbeni lehetőségeit. Az elmúlt évtizedek gazdasági problémáinak következtében rendkívüli mértékben csökkent a kutatóhelyek alapellátása, leromlott a kutatási infrastruktúra is. A kiút a nemzetközi együttműködés, így születtek a kísérleti fizikában nemzetközi mércével is kiemelkedő eredmények. Nagy Dénes Lajos megítélése szerint optimizmusra ad okot az európai csatlakozás közelsége. A magyar kutatástámogatás mértéke is közelíteni fog az európaihoz, és megnyílnak, részben már meg is nyíltak számunkra a kutatástámogatás európai forrásai. A magyar fizika jövőjét a közösen épített és építendő berendezések jelentik, módunk lesz már a tervezéstől kezdve részt venni a munkában.

Jéki László

CONTENTS

Chemistry – Guest Editor: GÖRÖG SÁNDOR

Görög Sándor: Introductory Remarks	1544
Tétényi Pál – Lázár Károly – Paál Zoltán – Simándi László: Catalysis – Science and Technology.....	1548
Berkó András: From Surface Science to Nanotechnology – Study of Reactions at Atomic Level.....	1557
Oláh György – Ánizsfeld Róbert: New Generation of Fuel Cells	1564
Pukánszky Béla: Reinforced and Modified Polymers	1570
Szépölggyi János: Industrial Ecology – Reconsidering the Industry-Environment Relation	1578
Horváth István Tamás: Green Chemistry	1585
Kövesdi István – Dancsó András – Blaskó Gábor: Computer Aided Drug Design ...	1589
Nyiredy Szabolcs: Medicinal Plant Research – Natural Part of Drug Research	1600
Farkas József: Food Safety – Global Problems and Efforts for its Improvement ...	1608
Tóth Klára – Gyurcsányi E. Róbert: Sensors in Analytical Chemistry	1614
Vankó György – Vértes Attila: Synchrotron Radiation in Structural Chemistry	1624
Beck Mihály: Chemistry and Society	1636

Interview

Nyíri Kristóf: From the Vedas to the Internet	1643
Beck Mihály: Chemistry and Society.....	1649

Academy

Prékopa András: János Bolyai Memorial Conference.....	1649
---	------

Science-policy

Imre József: Demands, Prospects, Chances – Chances in Supporting R&D and Innovation from EU Structural Funds.....	1656
Csermely Péter – Málnási-Csizmadia András – Kovács Mihály: How Can We Bring Home the Talented Young Hungarian Scientists Working Abroad?	1668

Obituary

Hajdú Péter (<i>Honti László</i>).....	1676
Mérei Gyula (<i>Fonti Márta</i>).....	1678

Book Review

1680

Wry Science

Jéki László: Ig Nobel, the Whimsical Younger Brother	1692
Vicsek Ferenc: Media wave.....	1695

<i>Informations</i>	1697
---------------------------	------

A Magyar Tudomány az alábbi könyvesboltokban kapható:

Budapesten

Pont Könyvesbolt 1051 Nádor u. 8.
Osiris Könyvesház 1053 Veres Pálné u. 4-6.
Atlantisz Könyvsziget 1052 Piarista köz 1.
Kódex Könyvárúhá és Tankönyvcentrum 1054 Honvéd u. 5.
Írók Boltja 1061 Andrássy út 45.
Balassi Könyvesbolt 1023 Margit u. 1.
Kis Magiszter Könyvesbolt 1053 Magyar u. 40.,

Vidéken

Széchenyi István Közgazdasági és Jogi Könyvesbolt 7624 Pécs, Rókus u. 5/I.
Sziget Könyvesbolt 4032 Debrecen Egyetem tér 1.
Egyetemi Könyvesbolt 3515 Miskolc-Egyetemváros Központi Könyvtár
Könyvesház 9700 Szombathely Hollán E. u. 7.
Könyvkereskedés a Vörös Cédrushoz 9400 Sopron Mátyás Király u. 34/F
Sík Sándor Könyvesbolt 6720 Szeged, Oskola u.27.

Tisztelt Olvasónk!

A Magyar Tudományos Akadémia központi folyóirata, a ***Magyar Tudomány*** továbbra is bemutatja a tudomány helyzetét, legújabb eredményeit, közli a tudományos vitákat, véleményeket.

Kérjük, a 2003. évre is fizesse elő a folyóiratot!

A költségek emelkedését sajnos a fogyasztói árral is kénytelenek vagyunk követni, ezért a MAGYAR TUDOMÁNY ára 2002. januártól havi 504,- Ft-ra változik.

Az éves előfizetői díj 6048,- Ft

Előfizethető: A FOK-TA Bt. címén (1134 Budapest, Gidófalvy L. u. 21.)
a mellékelt csekk befizetésével, a Posta hírlapüzleteiben,
az MP Rt. Hírlapelőfizetési és Elektronikus Posta Igazgatóságánál, Budapest, Pf. 863.