

Kémiai PANORÁMA

2020. évfolyam 23. szám

COVID-19

Koronavírusvakcinák

RÉGI TITKOK

Új távlatok

MOTORBENZIN ÉS LÉGSZENNYEZÉS

A FÉMEK REAKTIVITÁSA

Fémek főszerepben

HATVAN ÉVE HUNYT EL MAX VON LAUE

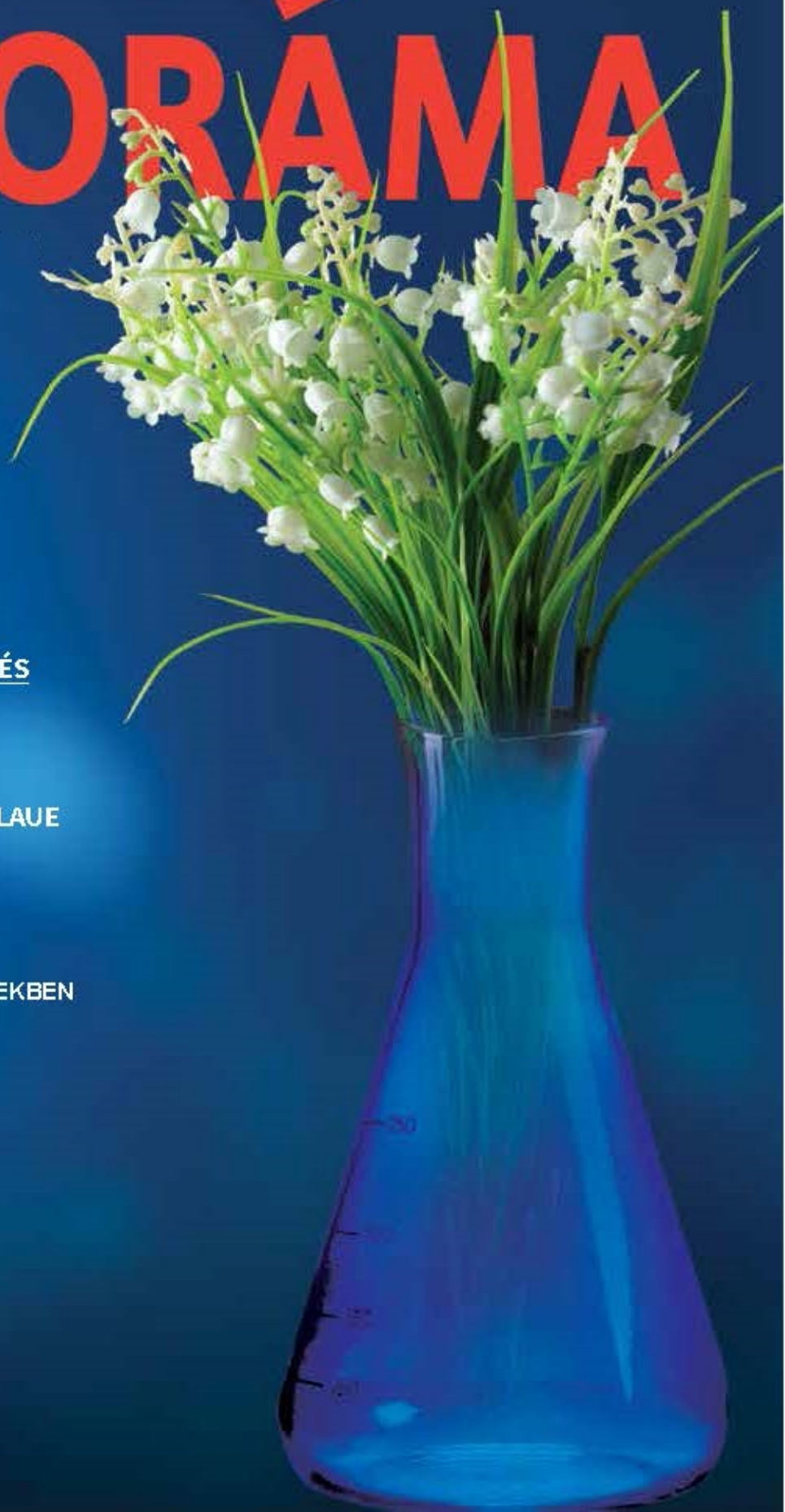
A fizika egyik legszebb teljesítménye

NYIKOLAJ ZELINSZKIJ

Egy kiváló orosz vegyész

GYÓGYÍTÓ MOLEKULÁK NÖVÉNYEKBEN

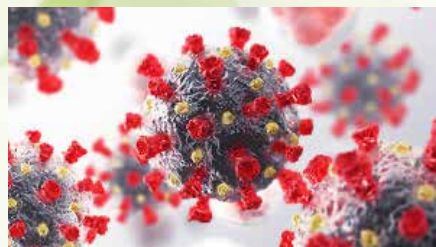
Egy nyári öröm



Kedves Olvasónk!

A 2020-as év elsősorban a COVID-19 világjárvány jegyében telt. Nem kerülhetjük meg mi sem, hogy e pandémia kémiai vonatkozásaival foglalkozzunk. S talán nem véletlen, hogy most, amikor az egészség, a betegség megelőzése és gyógyítása mind-mind előtérben álló kérdések, a koronavírus vakcinák által kínált lehetőségeket taglaló írásunk mellett még több, további orvostudományi és gyógyszerészeti cikkkel is jelentkezzünk. De természetesen nem szeretnénk, ha pusztán csak e szomorú aktuálitás szerkesztené lapszámunkat. Ezért ezúttal is több olyan írást válogattunk Olvasóinknak, amelyekből a kémia szépsége önmagában, ha tetszik: önértékén megismerhető – s reményeink szerint: megszerethető!

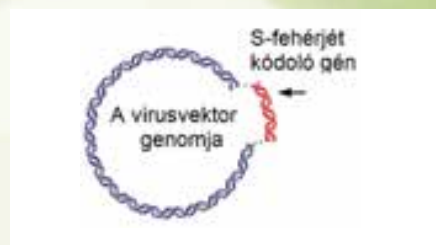
A Szerkesztőség



4-5

COVID-19

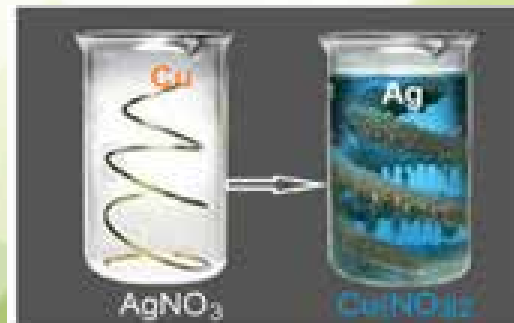
Koronavírus vakcinák
Szerkesztőség



12-13

KÉMIAI NOBEL-DÍJ 2019

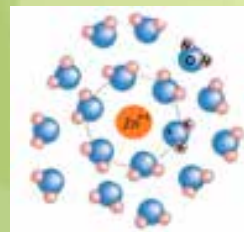
Szerkesztőség



6-11

**A FÉMEK
REAKTIVITÁSA**

Fémek
főszerepben
Pálinkás Gábor



14-15

**HATVAN ÉVE HUNYT EL MAX VON
LAUE**

A fizika egyik legszebb teljesítménye
Ménés András

A szerkesztőség köszönetet mond a Természettudományi Kutatóközpontnak, az MTA Folyóirat-pályázatának, továbbá az MTA Kémiai Osztályának a támogatásáért.

A Kémiai Panoráma magazin az ÚMFT TÁMOP 4.2.3 KMR/1/2008-0006 pályázat keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával, továbbá az MTA Kémiai Osztálya és a Servier Gyógyszerkutató Intézet támogatásával valósult meg.





16-20

RÉGI TITKOK, ÚJ TÁVLATOK -
Gyantába zárt titkok
Motorbenzin és légszennyezés
Váratlan újdonság az élelmezés
terén



Bébi-béka végtagokkal,
mögötte egy bogár



A legkisebb ismert
dinoszarusz koponyája



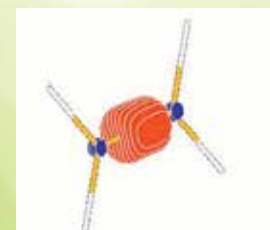
21-23

GYÓGYÍTÓ
MOLEKULÁK
NÖVÉNYEKBE:
Egynyári öröm-
Kőszegi Lídia



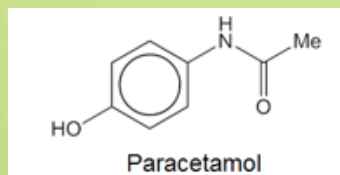
31-36

A KÉMIA ELMÉLETE
Vannak-e atomi pályák molekulákban?
Mayer István (1943-2020)



24-27

GYÓGYÍTÓ MOLEKULÁK
Paracetamol - Klorokin,
hidroxiklorokin - B3-Vitamin
Bella József



28-30

NYIKOLAJ ZELINSZKIJ
Egy kiváló orosz vegyész
Simonyi Miklós



37-38

VÁLOGATÁS AZ ÉLET ÉS TUDOMÁNY
ÍRÁSAIBÓL
Kémiai újdonságok
Gőzon Ákos összeállítása

39

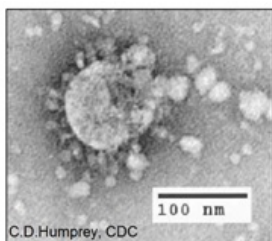
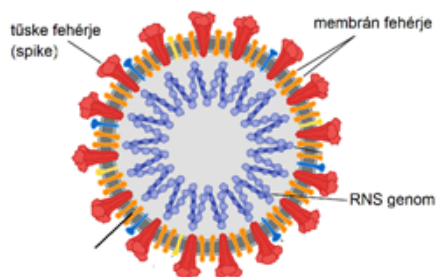
INZELT GYÖRGY:
TERMÉSZETTUDOMÁNY HÁBORÚBAN
ÉS BÉKEIDŐBEN -- KÉMIKUSOK,
TALÁLmányok, FELFEDEZÉSEK
Simonyi Miklós

Koronavírus vakcinák



A koronavírusok az influenzát, a súlyos akut légzési szindrómát (SARS, Severe Acute Respiratory Syndrome) és a Közel-keleti légúti szindrómát (MERS, Middle East Respiratory Syndrome) okozó RNS-vírusok családjába tartoznak.

Szerkezetükre jellemző, hogy az RNS genom örökítő anyagot lipid burok veszi körbe, amelynek felszínéről tüske formájú glikoprotein fehérjék (S-fehérje) állnak ki. Az S fehérje egy erősen glikozilezett nagyméretű transzmembrán fehérje, amely a vírus típusától függően 1160–1400 aminosavból áll. A tüske fehérjék teszik lehetővé a vírusok behatolását a szervezet sejtjeibe. A vírus mikroszkópos képe koronára hasonlít, emiatt kapta a koronavírus nevet. A koronavírusok gyorsan replikálódnak, emberek és más emlősök között terjednek, világjárványt, pandémiát okoznak. A COVID-19-fertőzést okozó vírus, rokona a SARS-t okozó vírusnak. Emiatt nevezték el a kutatók az új vírust SARS-CoV-2-vírusnak.



A vírus pásztázó elektronmikroszkópos képe

A Covid-19 betegséget okozó vírus, a SARS-CoV-2 elleni vakcinák különböző típusait fejlesztik világszerte. Egyesek a vakcinák előállításának hagyományos módszerein alapulnak, mások pedig újabb módszereket alkalmaznak. A vakcinák serkentik az emberi szervezet saját védő immunválaszait, így ha egy személy kórokozóval fertőzött, az immunrendszer gyorsan megakadályozhatja a megbetegedést és a fertőzés terjedését. A vakcinák utánozzák a természetes fertőzést, de anélkül, hogy valóban megbetegítenék az embert.

Napjainkban (2020. november) világszerte több mint 150 koronavírus-vakcina áll fejlesztés vagy már klinikai kísérletek alatt - és remény van arra, hogy közülük több is hatásos és rövid idő alatt megkapja az engedélyt a védőoltások megkezdésére. A kutatók humán klinikai vizsgálatokban 53 vakcinát tesztelnek, és legalább 87 preklinikai vizsgálatot végeznek állatkísérletekben. A fejlesztés alatt álló Covid-19 elleni védőoltások többségükben különböznek a már ismert védőoltásoktól. A hagyományos oltások, magát a vírus gyengített vagy teljesen inaktívált formáját injektálják kis mennyiségben a szervezetbe. Fehérvérsejtjeink érzékelve a vírust, specifikus fehérjéket, antitesteket hoznak létre védelmet nyújtva ezáltal ellene. Immunrendszerünknek vannak olyan sejtjei, az úgynevezett T-limfociták, amelyek emlékeznek erre a vírust, így, ha szervezetünk a jövőben ismét

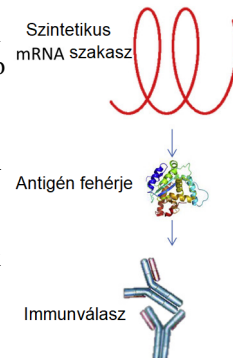
találkozik a fertőzőanyaggal, akkor azt antigénként felismerve, azonnal előállíthatja a speciális ellenanyagot, az antitesteket. A hagyományos oltóanyagok elkészítése, tesztelése és jóváhagyása évekig vagy évtizedekig tart. Inaktívált vírus vakcina az influenza, a gyermekbénulás, a hepatitis A és veszettség elleni védőoltás is.

A legtöbb engedélyezéshez közel álló covid-19 oltóanyag nem magát a vírus gyengített formáját használja ellenanyag termelésre. A vakcina a vírus egy vagy több saját génjét – messzendezszer-RNS (mRNS) vagy DNS egy rövid szakaszát – juttatja sejtjeinkbe az immunválasz kiváltására. Más fejlesztés alatt álló oltóanyagok ugyanezt a hatást a vírusfehérjével vagy annak valamilyen fragmensével érik el.

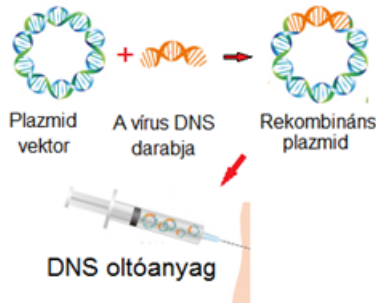
NUKLEINSAV VAKCINÁK

A nukleinsav vakcinák olyan védőoltások, amelyek a koronavírus egy vagy több szintetikus mRNA szakaszát juttatják a sejtjeinkbe, az immunválasz kiváltására. A gén többnyire a tüske fehérje (spike protein, S-fehérje) szintetizálásának kódja. Ez a típusú vakcina géntechnológiával módosított RNS-t, DNS-t vagy ezeknek azt a részét használja, amely kódolja az S-fehérje másolatának elkészítését. A kórokozó valamely fehérjéjét kódoló nukleinsav szakaszt általában plazmiddal viszik be az oltóanyagba, majd aztán a szervezetbe.

A plazmid egy kicsi, kör alakú DNS-darab, mely a kromoszóma DNS-től függetlenül replikálódik. A plazmidok



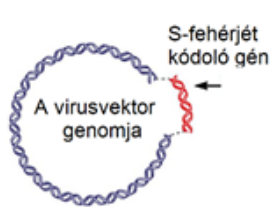
elsősorban a baktériumokban található meg, de megtalálhatók a többsejtű szervezetekben is.



A kód a szervezetbe jutva S fehérjét szintetizál, majd a szervezet sejtjei a fehérjét antigénként észlelve, beindítják az immunválaszt, antitesteket hoznak létre. A SARS-CoV-2 vírus genetikai szekvenciáját már a pandémia kezdetén ismerték, viszonylag egyszerű volt genetikai vakcina jelölteket létrehozni.

Más típusokhoz képest a mRNS vakcinákat könnyebb kifejleszteni és előállítani, mivel nem igénylik vírusok tenyésztését a sejtekben. A Moderna és a Pfizer/BioNTech, a Sanofi gyógyszergyártó vállalatok, továbbá az Imperial College által kifejlesztett oltóanyagok mRNS alapúak. A Moderna és a Pfizer november hónapban már beszámolt a III. fázisú klinikai kísérleteik biztató eredményeiről.

VIRÁLVEKTOROS VAKCINÁK



A vírusvektor vakcinák általában adenovírust használnak a SARS-CoV-2 DNS gének bejuttatására a szervezetbe, géntechnológiával

beépítve az S-fehérjét kódoló gént a szállítóvírus genomjába. A vírus DNS nem integrálódik a szervezet genomjába (vagyis a test teljes DNS-ébe), hanem átmásolódik mRNS-be, amely kódolja a vírus fehérjét.

Az adenovírusok olyan gyakori vírusok, amelyek megfázásszerű tüneteket, lázat, torokfájást, hasmenést okoznak.

A vírusvektor csak szállító rendszerként működik, és eszközt biztosít a sejtbe történő behatolásához. Maga a vírus



ártalmatlan, és azáltal, hogy a sejtek csak antigéneket termelnek, a szervezet fertőzés kialakulása nélkül képes immunreakciót kialakítani.

A jelenlegi kísérleti SARS-CoV-2 vírusvektoros vakcinák nem replikálódó emberi vagy csimpánz legyengített adenovírusokat használnak. A legyengült vektorok nem replikálódnak, mert fontos géneket töröltek bennük. Ilyenek az AstraZeneca, az Oxfordi Egyetem, a Johnson & Johnson és az Oroszország Egészségügyi Minisztériumához tartozó Gamaleya Kutatóintézet által készítették is.

FEHÉRJE ALAPÚ VAKCINÁK

Több fejlesztés alatt álló vakcina csak vírusfehérjét tartalmaz genetikai anyag nélkül. Egyesek teljes vírusfehérjét (S-protein) használnak, mások csak azok darabjait, amellyel a vírus kötődni képes.

A vírusfehérjek előállításának egyik módja az élesztő- vagy rovarsejtekben történő termelés. A fehérjealapú vakcinák különféle módon csomagolhatók és kombinálhatók olyan kis mennyiségű adalékanyagokkal, amelyek javítják vagy fokozzák az immunválaszt.

A fehérje alapú vakcinák az inaktívált vakcinákhoz hasonlóan működnek, védő immunválasz indukálnak anélkül, hogy fertőzést okoznának. Ez azért van, mert a vírus replikációjához szükséges gének nem szerepelnek az oltóanyagban. Ilyen típusú vakcinákat régóta széles körben használnak és biztonságuk és hatékonyságuk igazolódott. Ilyenek például a hepatitis B vírus elleni, az övsömör és a szamárköhögést okozó baktériumok elleni védőoltások.

SARS-CoV-2 fehérjealapú vakcinákat fejlesztenek a Novavax, a Sanofi, a GlaxoSmithKline, és a SpyBiotech gyógyszergyártó vállalatok.

Korábbi más célú vakcinák és gyógyszerek a Covid-19 ellen

Számos klinikai kísérlet folyik más fertőzések ellen kidolgozott vakcinák és gyógyszerek alkalmazására a koronavírus fertőzés kezelésére, a fertőzés korai szakaszában. Ilyen a korábban az Ebola vírus védőoltásaként használt antivirális remdesivir, a favipiravir influenza gyógyszer, a BCG vakcina, a hidroxiklorokin és a klorokin malária gyógyszerek.

Hazai kutatók, kutatócsoportok, gyógyszergyártó cégek is részt vesznek a koronavírus elleni vakcinák, illetve a betegség kezelésére alkalmas gyógyszerek kutatásában, fejlesztésében.

Az érdeklődő olvasó a koronavírus járványról és az ezzel kapcsolatos hazai kutatásokról további ismereteket kaphat az MTA honlapján fellelhető a járványhoz kapcsolódó cikkekből és előadások videó anyagaiból.

* IRODALOM

- A koronavírus által okozott Covid-19 pandémia
 Váradi András, Ferenczy Tamás, Falus Ferenc
 Orvosi Hetiép, 2020; 161(17): 644–651.
https://mta.hu/mta_hirei/az-mtahu-osszeallitasi-a-koronavirus-helyzetrol-110465
 National Geographic
 Johns Hopkins University of Medicine
 Nature



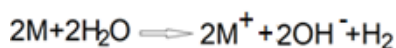
Fémek főszerepben

A fémek más vegyületekkel kémiai reakciókban vegyértékelektronjaik leadásával (oxidáció) és kationok képzésével vesznek részt.



Az (s) jelölés szilárdfázist, (g) gázfázist, (aq) vizes fázist, oldatot jelöl a következőkben.

A fémek eltérő reaktivitásúak. Az alkálifémek a legreakcióképesebb elemek közé tartoznak. Könnyen leadják vegyértékelektronjukat és hidrogénfejlődés mellett hevesen, néhányan pl. a lítium, nátrium, kálium robbanásszerűen lépnek reakcióba vízzel és erős bázisokat (alkáli-hidroxidokat) képeznek. Reagálnak még halogénnel, oxigénnel, alkoholokkal és ammóniával is.



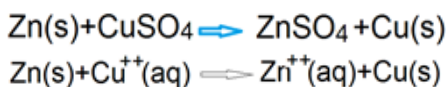
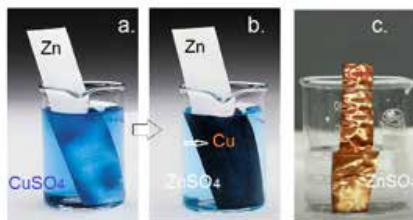
Az alkáliföldfémek vízzel való reakciója nem annyira heves, mint az alkálifémek esetében. A Ca reakcióját melegítéssel kell segíteni, a Mg csak vízgőzzel lép reakcióba.

A reakció helyettesítési reakció. A fémekből képződő kationok lecserélik a víz protonjait, amelyek – felvéve a fém által leadott elektronokat – hidrogén gázként távoznak az oldatból. A fém kationok a visszamaradt hidroxid anionokkal fémhidroxid vegyületet, bázisokat képeznek. Az alkáli fémhidroxidok vízben oldódnak és a képződött vegyület disszociált formában az oldatban marad.

A reaktívabb fém könnyebben ad le elektronokat (oxidálódik) és képez

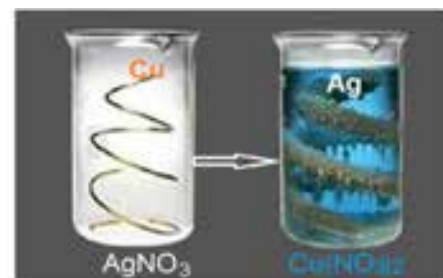
anionokat az oldatban, mint a kevésbé reaktív, emiatt aztán könnyebben helyettesíti (redukálja) a kevésbé reaktív fémekeket azok vegyületeiben. Nézzük meg például az alábbi eseteket.

Ha cinklemezre helyezünk vizes rézszulfát oldatba (kékszínű) (a), rövid idő elteltével spontán, réz válik ki a cinklemezre, továbbá elszíntelenedik az oldat (b), mivel egy része szintelen cinkszulfát oldattá alakul. Az oldat kissé felmelegszik, mert a helyettesítési reakciót hő leadás kíséri, majd lassan leadja a hőt a környezetnek. Fordított esetben, ha rézlemezre helyezünk cinkszulfát oldatba, semmi nem történik (c).

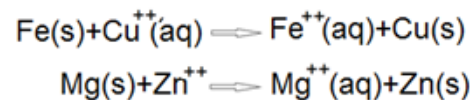
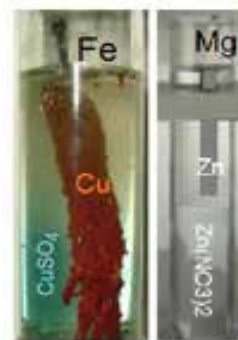


A cink elektronokat adott le, oxidálódott, a réz anion elektronokat vett fel, redukálódott. Az ilyen reakciókat redoxireakcióknak is nevezik.

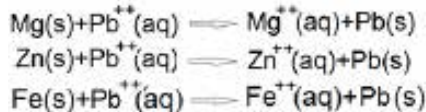
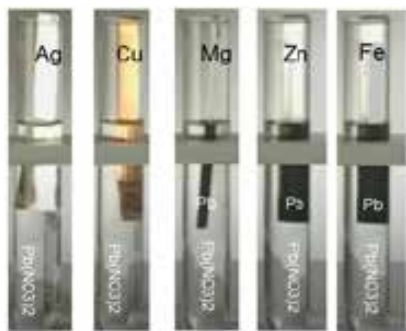
Hasonló jelenség játszódik le rézdróttal, ha vizes ezüstnitrát oldatba helyezzük. Egy idő után a rézre ezüst válik ki és a réz oldatba megy, az oldat megkékül. A fordított esetben (ezüstlemez réznitrát oldatban) ismét nem figyelhetünk meg változást.



Ez a jelenség játszódik le az alábbi két esetben is. A réz kiválik az oldatból a vasszögre vagy a másik esetben a Zn kiválik a Mg lemezre.

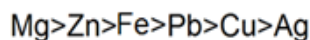


Tanulságos az alábbi kísérlet is, melyben Ag, Cu, Mg, Zn, Fe fémlemezket helyeztek vizes ólomnitrát oldatba. Az ezüst és a réz hosszabb idő után sem reagált az ólomnitrát oldattal, de a magnézium- a cink- és a vaslemezekre ólom vált ki és amíg az nem borította be a lemezeket, a Mg, a Zn és a Fe elkezdte helyettesíteni az ólmot az oldatban. A fémkiválás, miután beborította a másik fémet, leáll. Az oldatot megrázva, letisztítva a másik fémet, újra megindul.



A bemutatott kísérletekben is helyettesítési reakciók zajlottak le. A reaktívabb fém kationjai helyettesítették az oldatban levő kevésbé reaktív fém kationjait. Az előző által leadott elektronokat az utóbbi felvette és fémként kivált az oldatból. Fordított esetekben a reakció nem megy végbe.

Összefoglalva a fenti kísérleteket aszerint, hogy melyik fém ad le könnyebben elektronokat, a vizsgált fémek, a reaktivitásuk alapján, a következő sorrendbe állíthatóak:

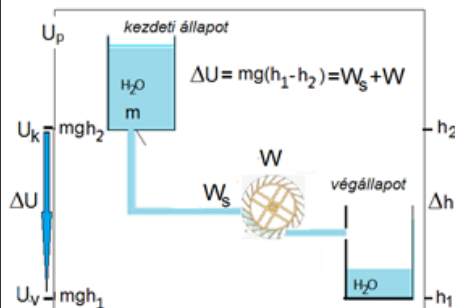


A reaktívabb fém helyettesíteni képes a vizes oldatban a kevésbé reaktívát. A helyettesítési reakció spontán, külső behatás nélkül lejátszódik, irreverzibilis (a fordított reakció külső behatás nélkül spontán nem megy végbe) és hőenergia szabadul fel. A fordított reakció lejátszódásához kívülről kell energiát befektetnünk.

Kérdés, hogy mi az oka a fémek eltérő reaktivitásának és mi a spontán reakciók hajtóereje.

A spontán folyamatokhoz valóban szükséges hajtóerő. Jól illusztrálja ezt az alábbi mechanikai példa is. Egy magasra (h_2) helyezett víztartályból, a szelep kinyitását követően, spontán lefolyik a víz az alacsonyabbra helyezett (h_1) tartályba. A közben elhelyezett malomkerék forogni fog és munkát tud végezni. A spontán folyamat hajtóereje a két szint, a végállapot és a kezdeti állapot, potenciális

energiájának különbsége ΔU . Mivel a víztömegnek kezdeti állapotban nagyobb a potenciális energiája, mint a végállapotban, az energiaváltozás



$$\Delta U = U_{\text{végállapot}} - U_{\text{kezdeti állapot}} < 0$$

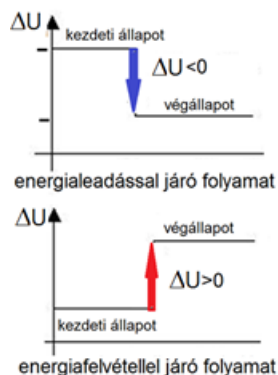
Ez az energiakülönbség a malomkerék által végzett hasznos munkává W és súrlódási munkává W_s (veszteség) fog alakulni.

$$\Delta U = U_v - U_k = mg(h_1 - h_2) = W_s + W$$

Mivel a rendszer potenciális energiaváltozása negatív $\Delta U < 0$, így a rendszer által végzett munka előjele is negatív lesz (a rendszer által végzett munka, negatív előjelű, a rendszeren a környezet által végzett munka pozitív előjelű). A súrlódási munka W_s hővé fog alakulni (Q), amelyet a rendszer átad a környezetének. Az energia-megmaradás törvénye, helyesen az alábbi módon alakul;

$$\Delta U = -Q - W$$

A fordított folyamat – a víz visszatöltése a felső tartályba-, csak külső munka befektetésével, a malomkerék fordított irányú forgatásával valósítható meg.

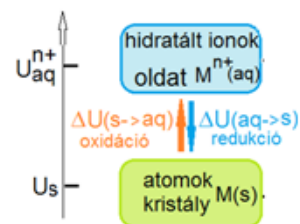


A FÉMEK BELSŐENERGIÁJA, KOHÉZIÓS RÁCSENERGIA

A bemutatott spontán helyettesítési reakciókban az egyik fém M_1 hosszútávon rendezett szilárdfázisból, rendezetlenebb oldatfázisba került, míg a másik M_2 , a fordított változáson ment keresztül. Az M_1 helyettesítette az M_2 fémet az oldatban, atom- és elektrontranszfer is lejátszódott. A reakció folyamán hő szabadult fel, amelyet a rendszer leadott a környezetnek. Hasonló a helyzet a mechanikai példához. A potenciális energiaváltozásnak megfelel a rendszer belsőenergiájának változása: ΔU , amelynek egy részét a kémiai reakció használta el, másik része hő (ΔQ) formában felszabadult (veszteség).

A BELSŐ ENERGIA

A belső energia (U) a termodinamika egyik alapfogalma. A rendszerben, az anyagalmazban tárolt összes energiát jelenti. A részecskék mozgási energiájából (haladó, forgó, rezgő), a vonzási energiából, az atomok elektronburkainak energiáiból, valamint a molekulák kötési energiájából, tevődik össze. Nagysága a vizsgált részecskék számával arányosan nő, függ a hőmérséklettől és a nyomástól is. A rendszer állapotváltozásai során változik belső energiája és változhat rendezettsége is. A belső energia állapotfüggvény. Az állapothatározók (térfogat, nyomás, hőmérséklet, tömeg) olyan többváltozós függvénye, amelynek változása csak a rendszer kezdeti és végállapotától függ, és független az úttól, amelyen a rendszer a kezdeti állapotból a végállapotba jutott. Az állapotfüggvények a potenciális energiához hasonlóak. A belsőenergia



abszolút értéke nem meghatározható, csak a változása mérhető.

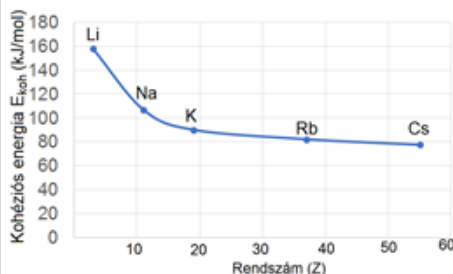
A szilárd anyagok atomjait összekötő kohéziós erők ionos, kovalens vagy fémes kötések. A szilárd fémek kristályos szerkezetűek. A szilárdságuk a fémes kötés következménye. A kohéziós energia az atomokat összetartó erők elszakításához és kölcsönhatásmentes távolságba juttatásukhoz szükséges energiamennyiség. A nagysága a periódusos rendszerben a néhány kJ/mol-tól a 840 kJ/mol-ig (a legmagasabb olvadáspontú wolfram) terjed. Ahhoz, hogy a kristályt összetevő atomok közötti erők elszakadjanak, a kohéziós rácsenergiával megegyező energiát kell befektetni.

A kohéziós rácsenergia a fémes kötés energiája, amely akkor szabadul fel, ha szabad (gázállapotú) fématomok szilárd (vagy folyékony) fémet hoznak létre. Előjelétől eltérően megegyezik azzal az energiával, amely a kristály független atomokra bontásához (atomizációs energia, vagy szublimációs energia) szükséges. Értékei standard állapotban (298,3, 10⁵Pa) különböző fémek 1 mol mennyiségeire (standard szublimációs entalpia) táblázatokban fellelhetőek. A kötés kialakulásakor a fématomok leadják lazán kötött vegyértékelektronjaikat, és így pozitív töltésű fémionok keletkeznek. A szabaddá vált elektronok a fémionokat körülvevő, negatív töltésű elektronfelhőt képeznek. A fémes kötés a fémionok és az elektronfelhő között fellépő elektrosztatikus kölcsönhatás.

A fémes kötések két kategóriába sorolhatók. Az első az az eset, amikor a vegyértékelektronok a fémionok részlegesen töltött s és p pályáiról származnak; ez a kötés elég gyenge. A második kategóriában a kötésben részvevő elektronok részben töltött d elektronpályákról származnak. Ez a kötés erősebb.

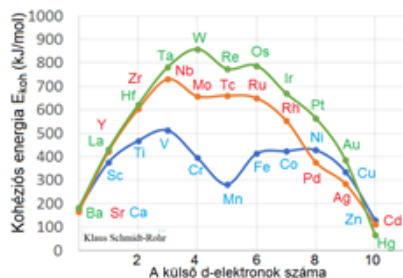
Az egyszerű fémek (alkáli- és alkáliföldfémek) kötéseit s és p elektronjaik hozzák létre. Ezen fématomok vegyértékelektronjai nem

betöltött s és p pályákon vannak. A betöltetlen héjak elektronjai leválnak a fémionról és szabadon mozognak a kristály egészén keresztül.



Másfajta fémes kötés található azokban az átmenetifémekben, amelyek atomjait betöltetlen d-pályák jellemzik. Ilyenek az átmeneti fémek. (Kivétel pld. a Zn, Cd és a Hg, Pb, melyek külső d pályái betöltöttek.) A kohéziós összetartó energia sokkal nagyobb a betöltetlen d-pályákkal rendelkező átmenetifémekben.

A d-pályák szorosabban kötődnek az ionhoz, mint az s és p-pályák és kovalens kötést képeznek a szomszédos atomokon található betöltetlen d-pályákkal.

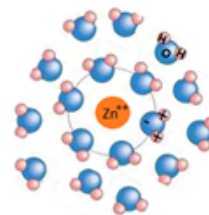


A szilárd fémek belső energiája a kohéziós kristályrács energia, amely akkor szabadul fel, ha szabad (gázállapotú) fématomok szilárd (vagy folyadék) fémet hoznak létre.

FÉMIONOK HIDRATÁCIÓS ENERGIÁJA

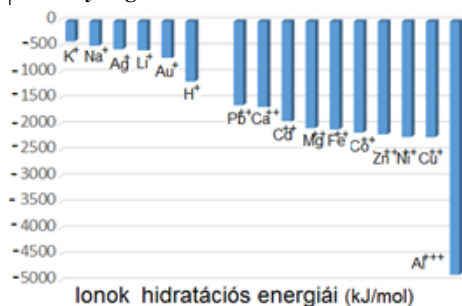
Az oldódás során az oldószer molekulái körülveszik a feloldott anyag részecskéit, másodrendű kötésekkel, (dipólus-dipólus, ion-dipólus, hidrogénkötés vagy Van der Waals-erők) és burkot, rövidtávon rendezett szolvátszférát alakítanak ki körülötte. Ez bizonyos mértékig akadályozza a molekulák szabad mozgását. Vizes oldatban az oldószer burkot hidrátszférának nevezünk, a

folyamatot pedig hidratációnak. A hidratáció folyamán oldatban új kötések alakulnak ki az ionok és a vízmolekulák között, tehát ez mindig energiatermelő folyamat. Az oldódás során változik a rendszer rendezettsége is. Oldatban jóval nagyobb a részecskék rendezetlensége, mint szilárdfázisban.



A hidratációs energia az az energiamennyiség, mely akkor szabadul fel, amikor kialakul az ion körül a hidrátburok.

Hidratációs energia: 1 mól gázhalmazállapotú ion, vagy molekula hidratálódásakor felszabaduló energia. Az oldódási folyamatban a felhasznált rácsenergia és a felszabadult hidratációs energia jelenti az oldáshőt. Oldáshő: az a hőmennyiség, amely felszabadul vagy felhasználdódik, ha az anyag 1 mólnyi mennyisége feloldódik.



AZ ENTRÓPIA

A termodinamikai rendszerek egy nagyon fontos jellemzője, a részecskék rendezettségének mértéke. A szilárd kristályos anyagban az atomok, molekulák, ionok erős kötődése miatt jóval nagyobb a rendezettség, mint például folyadék- vagy gázhalmazállapotban, ahol a részecskék mozgása kevésbé korlátozott. Általános tapasztalat, hogy ha egy rendszerrel hőt közlünk, növekszik a részecskék rendezetlensége is. Másrészt a



közölt hő, egy adott nagyságú alacsonyabb hőmérsékletű rendszerben nagyobb rendezetlenséget okoz, mint egy nagyobb hőmérsékletűben, mivel a nagyobb mértékben rendezetlen környezetben a rendezetlenség már kevésbé növekszik. Ezen tapasztalatok alapján vezette be Rudolf Clausius a XIX. században a rendezetlenség jellemzésére az entrópia fogalmát, mint a hő és hőmérséklet hányadosát:

$$\Delta S_{\text{rendszer}} = \frac{\Delta Q}{T}$$

Az entrópia (S) is állapotfüggvény, értéke a rendezetlenség növekedésével növekszik.

$$S_{\text{szilárd}} < S_{\text{oldat}} < S_{\text{gáz}}$$

Az egyetlen olyan állapotfüggvény, melynek abszolút értéke is ismert. Az abszolút tiszta kristályos anyagok entrópiája abszolút 0 hőmérsékleten (-273,15 Co) zérus (Nernst).

A szabadenergia- és az entrópia-változások mérhetőek kalorimetrikus kísérletekben.

A rendszer kezdeti és végállapotaihoz különböző belső energia tartozik. Az átmenetek alkalmával végbemenő belsőenergia változások nagyságát és a változások irányát a termodinamika I. és II. törvénye határozza meg. Az I. törvény, az energiamegmaradás törvénye korlátozza a megengedett változásokat, a II. törvény az entrópiát használja a spontán változások azonosítására, az I. törvény által megengedett változások közül.

A termodinamika I. főtétele szerint, energia- és anyagtranszportot megengedő nyílt rendszer esetében a rendszer belső energiája, csak a rendszer és környezete közötti hőcsere és munkavégzés útján változhat.

$$\Delta U = \Delta Q + \Delta W$$

A termodinamika II. törvénye a spontán változás irányát megszabó törvény. A törvény szerint, a természetben olyan irreverzibilis spontán változások

valószínűsülnek meg, melyek során a rendezetlenség növekszik, vagyis a termodinamikai rendszer teljes entrópiája (a rendszer és környezete entrópiájának összege) növekszik. Az állítás elszigetelt rendszerre is igaz, kivéve azt az ideális esetet, ha a változás reverzibilis.

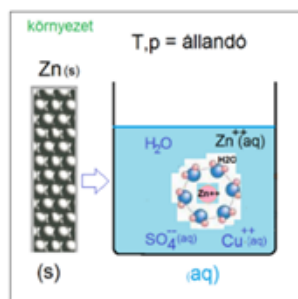
$$\Delta S_{\text{tot}} = \Delta S_{\text{rendszer}} + \Delta S_{\text{környezet}} > 0$$

Spontán lejátszódó folyamatokra a teljes entrópiaváltozás mindig pozitív.

Egyensúlyban a teljes entrópiának maximuma van.

A mindennapi élet tapasztalatai alapján is megállapíthatjuk, hogy az önként végbemenő folyamatokat a rendezetlenség növekedése kíséri.

A következőkben az egyszerűség kedvéért, nyílt rendszerekben, izoterm és izobár körülmények között lefolyó spontán állapotváltozásokra korlátozzuk a tárgyalást. Laboratóriumi körülmények között, nyitott főzőpohárban lejátszódó kémiai reakciók esetén, mint például a fémek reaktivitásának tárgyalásakor bemutatott példákban, jól teljesülnek ezek a feltételek. Általánosabb esetek tárgyalását az érdeklődő olvasó megtalálja a megjelölt irodalomban.



Tekintsük át, miből tevődik össze a belsőenergia nem hasznosítható része.

Spontán állapotváltozások izobár-izoterm körülmények között - szabadenergia.

Ilyen állapotváltozások során a felszabaduló belsőenergia egy része a körülmények fenntartására fordítódik ΔU_{pT} , nem hasznosítható a rendszerben. A rendszernek fenn kell tartani az állandó nyomást és hőmérsékletet. A belső energia azon részét, amely megmarad hő

közlésre vagy egyéb munkavégzésre, szabadentalpiának vagy Gibbs szabadenergiának (G) nevezzük.

$$\Delta G_{pT} = \Delta U - \Delta U_{pT}$$

A p és T állapothatározók fenntartására elhasznált belsőenergia ΔU_{pT} két járulékból tevődik össze. Egyrészt állandó nyomáson a felszabaduló hő egy része növelné a rendszerben a nyomást, emiatt a rendszer a nyomás fenntartásához kitérítve, térfogati munkát végez. A térfogati munka a nyomás és a térfogatváltozás szorzata lesz.

$$\Delta W_{\text{térf.}} = -p\Delta V.$$

Negatív az előjele, mert a rendszer végzi a munkát és így csökken a belsőenergiája. A rendszer állandó nyomáson hasznosítható belső energiáját entalpiának (H) nevezzük, mely szintén állapotfüggvény;

$$\Delta H_p = \Delta Q_p + \Delta W_e = \Delta U + p\Delta V$$

Másrészt a hő az egyetlen energiatípus, amely izoterm körülmények között nem alakítható át veszteség nélkül más energiatípusává. Állandó hőmérsékleten lejátszó változás esetén a felszabaduló hő egy része az izoterm körülmények fenntartására fordítódik. Az át nem alakítható rész, a rendszer entrópia-változásának és a hőmérsékletének szorzataként adható meg.

$$\Delta Q = T \Delta S_{\text{rendszer}}$$

A fentiek alapján állandó nyomáson és hőmérsékleten lejátszó változások során, a belsőenergiából a körülmények fenntartására felhasznált belsőenergia ΔU_{pT} ,

$$\Delta U_{pT} = -p\Delta V + T\Delta S_{\text{rendszer}}$$

Az állandó nyomáson és hőmérsékleten a rendszer belsőenergia-változása

$$\Delta U = \Delta G + T\Delta S_{\text{rendszer}} - p\Delta V$$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S_{\text{rendszer}}$$

A FÉMEK REAKTIVITÁSA

A változások irányát kijelölő II. főtétel alapján, mely szerint a spontán folyamatok esetén a teljes entrópia-változás mindig pozitív, belátható, hogy a rendszer szabadenergia-változása csak negatív lehet;

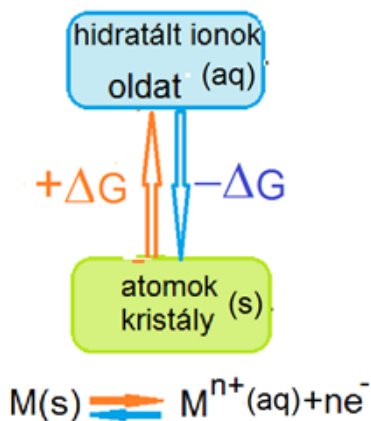
$$\Delta G < 0$$

A REAKTIVITÁS MÉRTÉKE

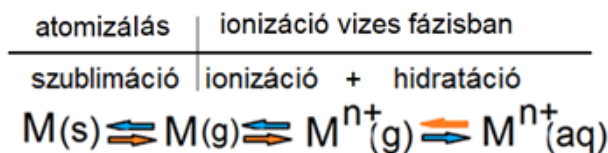
A bemutatott spontán helyettesítési reakciókban az egyik fém M₁ atomjai, rendezett kristályos szilárdfázisból kilépve atomizálódtak, (szublimáció), majd vegyértékelektronjaikat leadva ionizálódtak és jóval kevésbé rendezett állapotú oldatfázisba kerültek, ahol a kationjaik (pozitív töltések) az oldat vízmolekuláival rövidtávon rendezett hidrátburkot képezve, hidratálódtak. A két utóbbi összegét vizes fázisú ionizációnak nevezzük. A folyamatot kísérő szabadenergia- változás:

$$\Delta G_{M_1}(s \rightarrow aq) = G_{M_1}^{++}(aq) - G_{M_1}(s)$$

A másik fém (M₂) anionjai a fordított utat járták be. Az oldat vízmolekuláival kialakított hidrátburkaikat leadva dehidratálódtak, elektronokat felvéve fématomokká rekombinálódtak, majd végül megszilárdulva kristályosodtak és kiváltak.



Ha a két folyamat egymás mellett spontán lejátsszódik, (a bemutatott kísérletek) a két fém szabadenergia-változásainak különbsége negatív érték lesz. A kezdeti állapotból a végállapotba



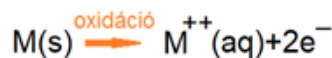
több lépésben jut el mindkét fém. (piros színű nyilak energia-felvételt, a kékek energia-leadást jelölnek) Két fém közül az lesz reaktívabb, amelynek oxidációjához kevesebb energiára van szükség (könnyebben, megoldatba), mint a másik fém.

$$\Delta G_{M_1}(s \rightarrow aq) < \Delta G_{M_2}(s \rightarrow aq)$$

A fémek eltérő reakcióképességét egyrészt kohéziós szabadentalpiáik, másrészt a vizes fázisú ionizációs szabadentalpiáik okozza.

A vizes fázisú ionizációs energia analógja a gázfázisú ionizációs energiának. A kohéziós energiák az atomizálási vagy a szublimációs szabadentalpiákból, a vizes fázisú ionizációs energiák a gázfázisú ionizációs energiák és a hidratációs szabadentalpiák összegeként számíthatók. A szükséges szabadentalpiák és ionizációs energiák tankönyvek táblázataiban és termokémiai adatbázisokban található standard állapotban 298,3 K (25 °C) hőmérsékleten és 10⁵ Pa (1atm) nyomáson.

Példaként elemezzük a cink és a réz oxidációjának energetikai viszonyait.



Nulla referencia pontként válasszuk a fématomok kölcsönhatásmentes gázállapotát $G_M(\text{gáz})=0$. Viszonyítsuk ehhez a referenciaponthoz a szabadentalpia változásokat. A szilárd fémek kohéziós energiája ekkor a szublimációs szabadentalpiájuk negatív előjellel. A két elektron leadása miatt az ionizációs energia, az első és a második elektron ionizációs energiájának összege lesz.

Az oxidáció energetikai viszonyait

illusztrálja az alábbi ábra, a táblázatban megadott moláris standard kohéziós szabadentalpiák $\Delta G_M(s \rightarrow g)$, gázfázisú ionizációs energiák $I_e(M(g) \rightarrow M^{++}(g))$ és moláris standard hidratációs szabadentalpiák $\Delta G(M^{++}(g) \rightarrow M^{++}(aq))$ alapján.

Megjegyezzük, hogy a moláris standard hidratációs szabadentalpiákat a táblázatok konvencionálisan ΔG_{konv} , a proton hidratációs szabadentalpiájához képest adják meg. Emiatt a táblázatokban ez utóbbi szerepel zérus referenciapontként. Miután 1998-ban klaszter kísérletekben meghatározták a proton abszolút hidratációs szabadentalpiáját (Tissandier et al), amelynek értéke $\Delta G(H^+(aq)) = -1105$ kJ/mol-nak adódott, az ionok abszolút moláris hidratációs szabadentalpiája is meghatározható;

$$\Delta G_{\text{abs}}(M_{\text{hidr}}^{++}) = \Delta G_{\text{konv}}(M_{\text{hidr}}^{++}) + (-1105n)$$

ahol n, a kationok töltéseinek száma.

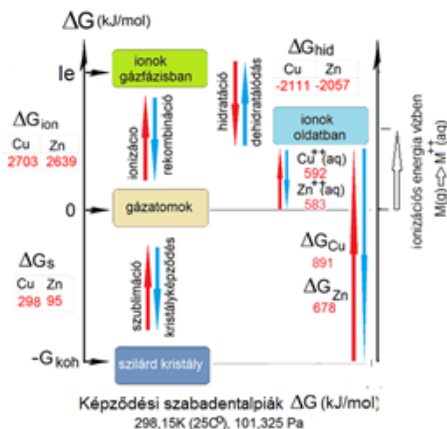
$$\Delta G_M(s \rightarrow aq) = \Delta G_{M^{++}}(aq) - \Delta G_M(s)$$

kJ/mol	M(s)	M ⁺⁺ (g)	M ⁺⁺ (hidr)	M ⁺⁺ (aq)	M(s) → M ⁺⁺ (aq)
	ΔG	I _e	ΔG	ΔG	ΔG
M	koh	ioniz	hidr	IE+hidr	s->aq
Zn	-95	2639	-2056	583	678
Cu	-299	2703	-2111	592	891

$M(s) \rightarrow M(g) \rightarrow M^{++}(g) \rightarrow M^{++}(aq)$
Szabadentalpia változások

A táblázatban az ionok $\Delta G_{\text{abs}}(M^{++}(\text{hidr}))$ abszolút hidratációs szabadentalpiái szerepelnek.

Látható, hogy az $M(s) \rightarrow M^{++}(s)$ oxidációs reakció során mindkét fém teljes szabadentalpia-változása pozitív, tehát a szilárd-fázisból oldatfázisba történő átmenethez energia szükséges $\Delta G(s \rightarrow aq) > 0$. A fordított irányú változás során viszont energia szabadul fel $\Delta G(aq \rightarrow s) < 0$.



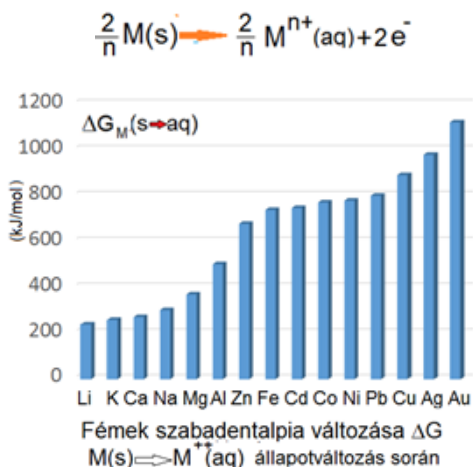
Mivel a cinkhez szükséges kevesebb energia, hogy oldatba kerüljön, reaktívabb fém, mint a réz.

$$\Delta G_{Zn} = 678 < \Delta G_{Cu} = 891$$

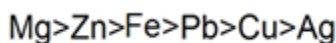
A bemutatott kísérletekben a reaktívabb fém oldódásához szükséges energiát, a fordított úton változó, oldatból kiváló fém által leadott energia fedezte.

A fémek reaktivitásának hajtóereje a fentiek alapján oldatfázisú és szilárdfázisú állapotaik közötti szabadenergia-különbség. Minél kisebb ez a különbség, annál reaktívabb lesz a fém, annál könnyebben oldódik vízben és helyettesít más fémet kémiai reakciókban.

Az alábbi ábra feltünteteti több fémre – az összehasonlíthatóság miatt – két elektron leadásával járó oxidációhoz tartozó, a fentiekhez hasonló módon számított,

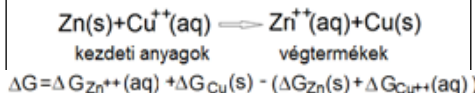


teljes szabadentalpia változásokat. (Egy vegyértékű fémek 2 mólnyi, 3 vegyértékűnek 2/3 mólnyi mennyisége szükséges 2 elektron leadásához) A legreaktívabb fém a Li, (legkevesebb az energiaszükséglete ahhoz, hogy szilárdfázisból oldatfázisba kerüljön), a többi fém reaktivitása az ábrán megjelölt sorrendben csökken. Az ábra megerősíti a bemutatott kísérletekben résztvevő fémek reaktivitásának sorrendjét is.



Végezetül megvizsgáljuk Zn/Cu teljes redoxreakcióval együtt járó ΔG szabadentalpia-változást és megmutatjuk, hogy a reakció valóban spontán lezajlik, vagyis $\Delta G < 0$

A Hess tétel alapján a helyettesítési reakció szabadentalpiája a végtermékek és a kezdeti anyagok szabadentalpiáinak különbsége, amely az előzőek alapján nem más, mint,



$$\Delta G = \Delta G_{Zn}(s \Rightarrow aq) - \Delta G_{Cu}(s \Rightarrow aq)$$

A szabadentalpia fentebbi táblázatából az értékeket behelyettesítve,

$$\Delta G = -213 \text{ kJ/mol} < 0$$

az entalpiaváltozás negatívnak adódik, tehát a reakció valóban spontán zajlik le, a fordítottja viszont nem.

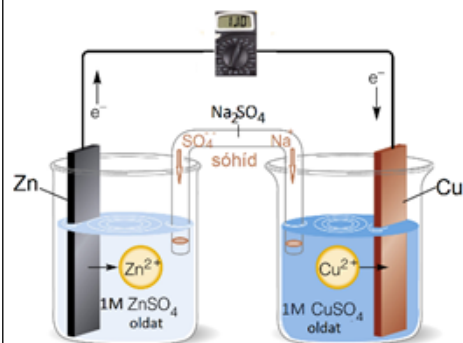
A szabadentalpia-változás a rendszer maximálisan egyéb munkavégzésre – például elektromos munkavégzésre – felhasználható energiája. Ezt hasznosítják az energiatárolásra felhasználható galvánelemek és akkumulátorok is. Például a Zn/Cu Daniell elem $E=1,1$ Volt feszültségének (elektromos hajtóerejének) is a forrása, a Zn/Cu redoxreakció, $\Delta G = -213$ kJ/mol szabadentalpia változása. A galvánelemek feszültsége és a szabadentalpia-változás közötti összefüggést Nernst határozta meg; ahol $F=96,5$ (kJ/Volt) a Faraday állandó,

$$\Delta G = \Delta W_{\text{elektromos}} = -n F E_{\text{cella}}$$

n a töltések száma, E_{cella} a galvánelem feszültsége (Volt). Az összefüggés alapján

$$E_{\text{Daniell}} = 213/2 \cdot 96,5 = 1,1 \text{ Volt}$$

A bemutatott kísérletekben ez a többlet szabadentalpia, veszteségként hővé alakult.



Daniell elem

A galvánelemről és az akkumulátorokról, például a Li-akkumulátorok működéséről, a kémiai energia elektromos energiává történő átalakításáról, a magazin következő számában megjelenő írás fog tájékoztatni.

Pálinkás Gábor

IRODALOM

- Bajnóczy Gábor Termodinamika I. Kun Róbert, BME, TERMODINAMIKA (jegyzet). <https://www.webelements.com/lead/thermochemistry.html>
- Klaus Schmidt-Rohr J. Chem. Educ. 2018, 95, 1801
- Standard thermodynamical properties of substances [https://en.wikipedia.org/wiki/Ionization_energies_of_the_elements_\(data_page\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Ionization_energies_of_the_elements_(data_page))
- http://www.knowledgedoor.com/2/elements_handbook/cohesive_energy.html
- Michael D. Tissandier, et al. J. Phys. Chem. A 1998, 102, 7787
- Fawcett, W. R. Thermodynamic Parameters for the Solvation of Monatomic Ions in Water. J. Phys. Chem. B 1999, 103, 11181.
- Sulinet termokémia



Kémiai Nobel-díj

2019-ben a Svéd Királyi Tudományos Akadémia, a lítium-ion-akkumulátor kifejlesztéséért, egy amerikai, egy brit és egy japán tudóst díjazott kémiai Nobel-díjjal.



John B. Goodenough
The University of Texas at Austin, USA



M. Stanley Whittingham
Binghamton University,
State University of New York, USA



Akira Yoshino
Asahi Kasei Corporation, Tokyo, Japan
Meijo University, Nagoya, Japan

A lítium-ion akkumulátorokat elterjedten használják a hordozható elektronikus eszközök áramellátására.

Azóta, hogy a lítium-ion-akkumulátorok 1991-ben először piacra kerültek, megváltoztatták életünket. Ma már világszerte használják a hordozható elektronikus eszközök, mobiltelefonok, laptopok energiaforrásaként. A lítiumion-akkumulátorok tették lehetővé elektromos autók fejlesztését és a megújuló energiaforrásokból - például a napenergiából és a szélenergiából származó energia tárolását is. A lítiumion-akkumulátorok előnye, hogy az anód és a katód közötti oda-vissza (fogyasztás-töltés) áramló lítium-ionokon és nem az elektródákat lebontó kémiai reakciókon alapulnak. Stanley Whittingham készítette el az első lítiumion-akkumulátort. Anódját fémes lítiumból, katódját olyan anyagból,

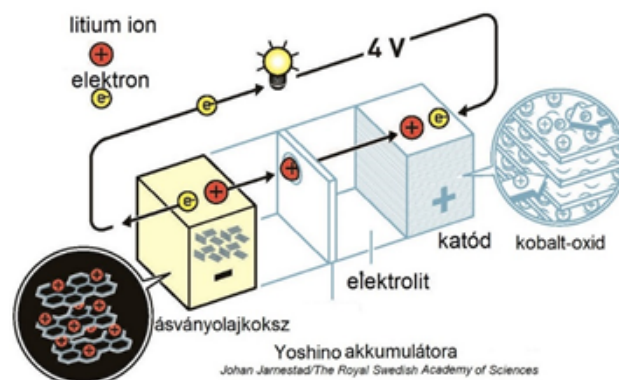
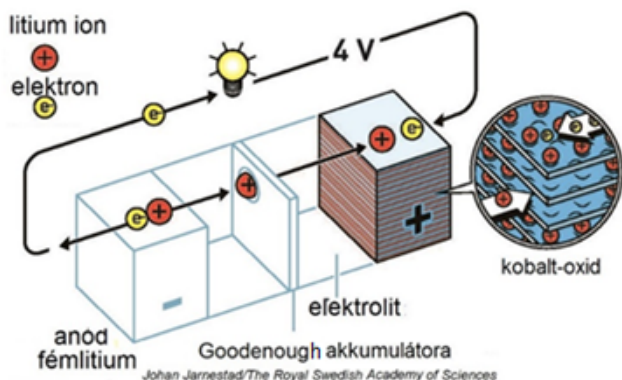
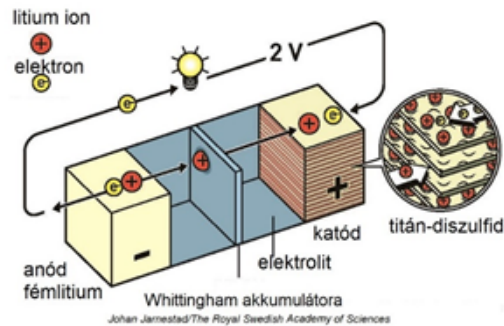
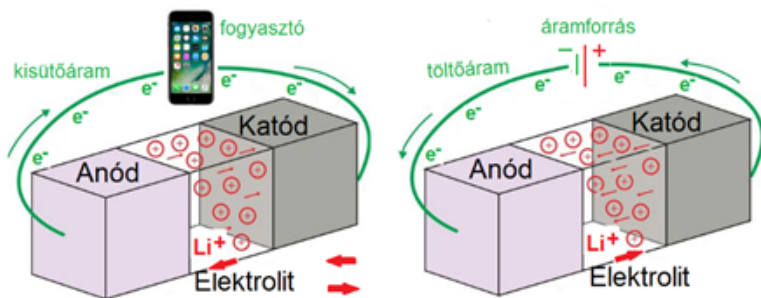
titán-diszulfidból állította elő, amely molekuláris szinten a lítium ionok befogadására képes üregekkel rendelkezik. Az akkumulátor feszültsége alig több, mint 2V volt. A fém lítium azonban reaktív és az akkumulátor túl robbanásveszélyes volt ahhoz, hogy biztonságosan használni lehessen.

John Goodenough javasolta kutatásai alapján, hogy a katód még nagyobb potenciállal bír, ha fém-szulfid helyett fém-oxidból, például kobalt-oxidból készítik. 1980-ban kimutatta, hogy az interkalált lítium-ionokkal készített kobalt-oxid katód akár négy voltot is képes előállítani. A Goodenough katódja alapján Akira Yoshino 1985-ben

készítette el az első kereskedelmi leg életképes lítium-ion akkumulátort, lecserélve a reaktív lítium fémanódot is, ásványolajkocszba ágyazott fémes lítiummal, amely hasonlóan, mint a katód kobalt-oxidja, képes interkalálni a lítium ionokat. Ez egy könnyű, tartós és több százszor feltölthető akkumulátort eredményezett, mielőtt a teljesítménye romlott volna.

John B. Goodenough, M. Stanley Whittingham és Akira Yoshino felfedezései vitathatatlanul jelentős hatással voltak technológiai fejlődésünkre. A Li-ion akkumulátoroknak nem csak a hordozható informatikai eszközök és az





elektromos meghajtású járművek forradalmában van jelentős szerepük, de hozzájárulnak a jelenleg fosszilis tüzelőanyagokról környezetbarát tüzelőanyagokra történő váltáshoz is.

Azonban a Li-ion akkumulátorok fejlesztése nem tud versenyezni azzal a ténnyel, hogy kevés lítium található a bolygónkon. Ez azzal a kockázattal jár, hogy előbb-utóbb nem lesznek megfizethetőek a lítium alapú

áramforrások. Másrészt, becslések szerint, ha ebben az ütemben szaporodnak az elektromos járművek és a nagyméretű napelem telepek 2035-re kimerülnek a lítium lelőhelyek.

Ezért kritikus fontosságú alternatív akkumulátor-technológiák kifejlesztése más a Földön nagy volumenben előforduló elemek alapján. Több másik mellett az egyik ígéretes jelölt a periódusos rendszerben szomszédos

nátrium. Nagyon hasonló kémiai tulajdonságú és igen elterjedt a Földön.

Az elmúlt évtizedekben lezajlott gyors fejlődést követően számíthatunk az energiátárolás technológiájának további rohamos fejlődésére.

A Nobel-bizottság sajtóközleménye alapján
<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2019/press-release/>
 Szerkesztőség

Hatalmas Li-ion akkumulátor telepek

2018 novemberében megkezdte működését egy 60MW teljesítményű napelem-telep Dél-Ausztráliában. A napelemek energiája nagy részének



tárolására Tesla Li-ion akkumulátor-telepet használnak. Az akkumulátor-telep az igényeknek megfelelően megújuló energiával segíti a távvezeték hálózat kiegyensúlyozását.

2019-ben a gépkocsi akkumulátorokat gyártó Tesla Energy vállalat egy újabb szerződést kötött a világ legnagyobb energiátároló telepének megépítésére Dél-Ausztráliában. A 100 MW-os Li-ion akkumulátor telep 2021-ben fog elkészülni. Az energiátároló áramellátását a Neoen, a szél- és napenergiát biztosító francia vállalat által



üzemeltetett szélerőmű biztosítja. Az energiát biztosító napelem-telep elkészült, a szélerőmű még építés alatt áll.

A fizika egyik legszebb teljesítménye

Max von Laue 1912-ben ellátogatott Münchenbe egy tanár kollégájához, az elméleti fizikus Arnold Sommerfeldhez és tanúja lett egy beszélgetésnek; Sommerfeld tanítványával – Peter Paul Ewalddal – vitatta meg annak doktori munkáját a fény terjedéséről kristályokon keresztül. Laue meglepetten értesült arról, hogy a kristályok szerkezete – atomjaik elrendezése miatt – olyan, mint egy háromdimenziós rács vagy rostély. Ebből az értesülésből született egy korszakos kísérlet, és fejlődött ki a röntgendiffrakció elmélete. Laue Nobel-díja lett az eredmény.

Ewald később megalapította az *Acta Crystallographica* nemzetközi folyóiratot, aminek szerkesztője lett. A röntgendiffrakció minden egyéb módszernél pontosabban mutatja meg a molekulák szerkezetét, és a huszadik században a természettudományok kutatási eszközévé vált. A röntgenkristallográfia a mikroszkóp és a szinképelemzés versenytársa az anyagvizsgálatokor. Ezen felül Laue felfedezése bizonyítékot szolgáltatott rá, hogy a röntgensugár az elektromágneses szinkép része. Albert Einstein szerint Laue felfedezése „a fizika egyik legszebb teljesítménye”.

Max Theodor Felix von Laue 1879. október 9-én született Németországban, a Koblenz melletti Pfaffendorfban, a katonatiszt Julius Laue és Minna Zerenner fiaként. (A család 1913-ban nemességet kapott, így lett a tudós neve von Laue.) Gyermekkorában a szülei sokat költöztek az apja hivatása miatt. Úgy említik, figyelmes, kíváncsi gyerek volt, aki korán érdeklődni kezdett a fizika iránt, gyakran látogatta Berlinben az Uránia nevezetű tudományos társaság kiállításait. Középiskoláit javarészt a strassburgi protestáns gimnáziumban végezte, ahol 1898-ban érettségizett. Egy évig a Strassburgi Egyetemen tanult fizikát, kémiát és matematikát. Ezután tovább ment a Göttingeni, a Münchener majd a Berlieni Egyetemre, ahol Max



Arnold Sommerfeld



Peter Paul Ewald



Max von Laue

Planck volt a konzulense. 1903-ban doktorált. Disszertációja optikával foglalkozott, a fényhullámok kölcsönhatását elemezte.

1905-ben visszatért a berlini Elméleti Fizikai Intézetbe, ahol Max Planck asszisztense lett. Laue volt az egyik első fiatal fizikus, aki megértette Einstein 1905-ben közzétett, a speciális relativitásról szóló elméletének fontosságát, és azt elkezdte alkalmazni a fénytanban. 1907-ben korai fénytani kísérletei fontos bizonyítékot szolgáltatottak a relativitás elméletének helyességére. Munkássága nagymértékben segített az elmélet elfogadásában. 1911-ben Das Relativitätssprinzip (A relativitás elv) címmel közreadott egy átfogó tankönyvet a még vitatott kérdéstről. Időközben 1909-ben optikát és termodinamikát kezdett tanítani a Münchener Egyetemen, ahol összebarátkozott Arnold Sommerfelddel.

A röntgensugarat – 1895-ös felfedezését

követően – sok elmélet és kísérlet próbálta érthetővé tenni. Charles Barkla kísérletei azt érzékeltették, hogy a röntgensugarak az elektromágneses szinkép részei, de sokkal rövidebb a hullámhosszuk, mint a fényé, erre azonban nem volt kísérleti bizonyíték. 1912-ben Sommerfeld numerikus értéket javasolt ezeknek a hullámhosszaknak, amiből Laue azt feltételezte, hogy ha a röntgensugarak hullámai rövidebbek a látható fénynél, valamilyen diffrakciós ráccsal láthatóvá lehet őket tenni. És ekkor eszébe jutott a kristályok rácsszerkezete.

Azonnal azt javasolta a kollégáinak, hogy végezzenek el egy kísérletet, amelyben irányítsanak röntgensugarakat títágyeni lyukakon keresztül cink-szulfid kristályra. A kristály mögé fényérzékeny lemezt helyeztek el. Az eredmény szép, szimmetrikus minta lett. Még aznap este – 1912. április 21-e volt -- miközben



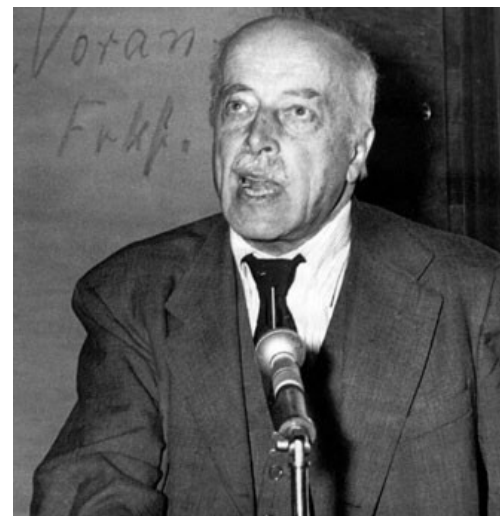
hazafelé tartott, rájött, hogy az optikai rács segítségével milyen nagy lehetőségek nyílnak meg a számítások előtt. Hasonló és egyéni mintákat lehet nyerni egy sor természetes molekulából. A röntgendiffrakció nem csupán a molekula alapvető szerkezetét tárta fel, hanem egyúttal olyan eszközt is szolgáltatott, amellyel meg lehetett mérni a röntgensugár hullámhosszát.

Laue munkásságának jelentőségét csaknem azonnal elismerték. Valóságos csúcsmunka lett belőle, többen is gyorsan alkalmazták és kiterjesztették. William Lawrance Bragg és apja, William Henry Bragg hamarosan kidolgozták a röntgenkristallográfiát, amelyet arra használtak, hogy a kristályok és molekulák szerkezetét tanulmányozzák. Maurice de Broglie kifejlesztette a röntgenspektroszkópiát, amelyet Henry Moseley azonnal alkalmazott, hogy megvizsgálja a periódusos rendszer elemeit. Az elemek kísérletileg mért röntgenfrekvenciája alapján empirikus szabályt állapított meg az elemek rendszámának kiszámítására. Laue 1914-ben Nobel-díjat vehetett át, Braggék a következő évben kapták meg ezt a kitüntetést. Moseley 27 éves korában elesett az I. Világháborúban a gallipoli vérfürdőben.

Laue 1919-ben, miután sok éven át Zürichben és Würzburgban tanított, visszatért, hogy az idős Max Planckkal dolgozzék a Berlini Egyetemen. Noha később eredményes kutatásokat végzett a

szupravezetéssel kapcsolatban, Laue sok tekintetben klasszikus fizikus maradt, így nem sokkal járult hozzá a kvantumelmélet kifejlesztéséhez. 1910-ben vette feleségül Magdalena Degent, két gyermekük született. Laue kereste az elementáris élményeket, szerette a hegymászást és a vitorlázást.

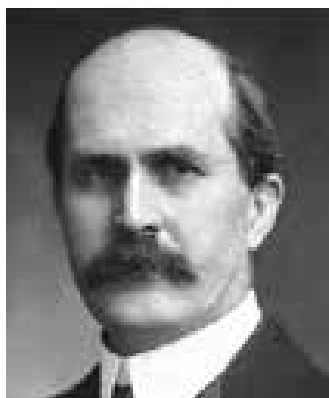
Laue volt a leghíresebb alakja a náci korszak alatti német tudomány sajnálatos történetének. A Porosz tudományos Akadémiának mindössze két tagja csatlakozott Laue tiltakozásához, amikor a nagy nyomásnak engedve Albert Einstein 1933-ban kilépett a Vilmos Császár Intézet kötelékéből. Laue neveltségessé tette azt a náci koholmányt, hogy a relativitás elmélete „a zsidók óriási trükkje”, és ezt a retorikát azokkal a büntetőszankciókkal hasonlította össze, amelyeket az egyház alkalmazott Galileo Galilei ellen a tizenhetedik században. Megtámadta az ugyancsak Nobel-díjas Johannes Stark antiszemita nézeteit, és kevés sikerrel, de próbálta megvédeni a német fizikát az agyelszívás katasztrofális következményeitől. Noha kifejezetten náciellenes volt, mégis Németországban maradt, csak Nobel-aranyérmét küldte ki Koppenhágába, hogy el ne kobozzák tőle. Ezt Hevesy György 1943-ban – Dánia német megszállása idején – királyvízben feloldotta, majd a háború után az oldatból visszanyert aranyat a Nobel Society részére elküldte, amiből az aranyérmet újra előállították és tulajdonosának visszaküldték. Laue a második



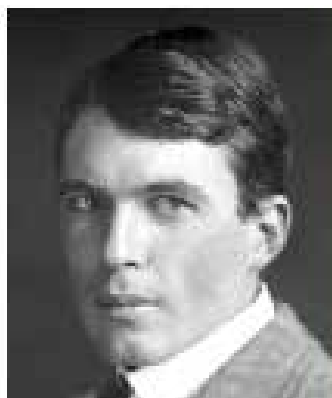
világháború végéig visszavonult a tanítástól. Az a tény, hogy nem vett részt Adolf Hitler uránal kapcsolatos terveiben, nem mentette meg attól, hogy a szövetségesek a háború végén a fiatalabb és sokkal szorgalmasabb Werner Heisenberggel együtt Angliába internálják.

Pályafutásának vége felé Laue igyekezett részt venni a német tudomány újjáépítésében. 1950-ben kinevezték a Fritz Haber Fizikai Kémiai Intézet élére. Posztján maradt egészen 1959-ig. Neumann Jánoshoz hasonlóan élvezte a gyors kocsikat. 1960. április 8-án egy balesetben megsérült, amikor összeütközött egy motorkerékpárral. Két héttel később, 1960. április 23-án halt meg. Németország és a tudósvilág egyaránt meggyászolták.

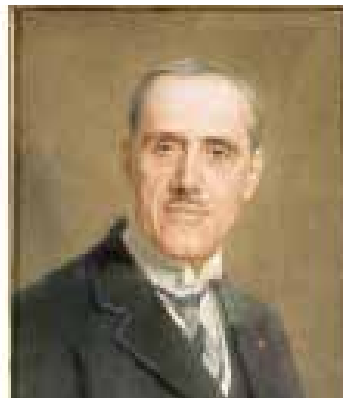
Ménes András



Henry Bragg



Lawrence Bragg



Maurice de Broglie



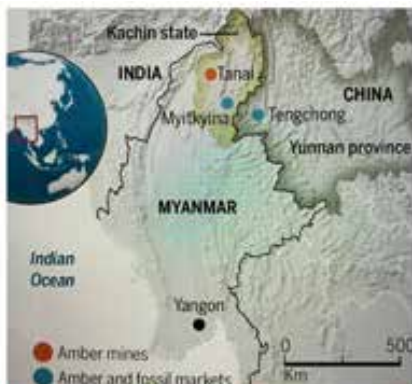
Henry Moseley

Gyantába zárt titkok

Vegyészek számára közismert vegyület a borostyánkősav (sói a szukcinátok), de az már kevésbé, hogy honnan ered a neve.

Először Agricola (Georg Pauer) állította elő 1550-ben borostyánkő hevítésével. A borostyánkő trópusi tűlevelű fák megkövesedett gyantája. Sárga-, vagy narancsszínű átlátszó, kellemes tapintású anyag, amelyet az ember drágakőként az új-kőkorszak, azaz 10-12ezer év óta használ. Ennél jóval értékesebb tulajdonsága azonban, hogy a 145 – 60 millió évvel ezelőtti kréta-korból hoz üzeneteket. A fákból kifolyó gyanta ugyanis sok rovar és kisállatot zárt magába és ezzel a régmúlt korok élővilágának hírnöke lett.

A borostyánkő egyik forrása Mianmar államszövetség (korábbi nevén Burma), egy India, Kína, Thaiföld és az Indiai Óceán közé ékelődő, hazánk nál 7-szer nagyobb területű, 56 milliós népességű ország. Ennek északi részén



Borostyánkő bányák és piacok

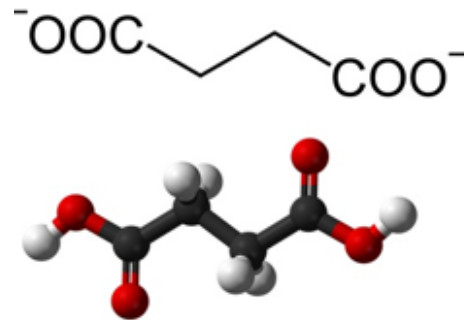
fekvő, Kacsin állam Tanai tartománya a kőületek forrása, amelyek értékesítése a kínai határ mindkét oldalán található piacokon folyik (Science, 364, 722-729, 2019).

Mintegy 99 millió évvel ezelőtt egy trópusi tengerparti erdőben hemzsegték a különböző élőlények. Kártevők támadásai, vagy viharok által letört ágak miatt a fák törzse nagy mennyiségű illatos gyantát bocsátott ki, ami körül folyta és magába zárta a fatörzsrre települt élőlényeket. Beszivároghatva a szövetekbe a gyanta megvédte a foglyul ejtett lényeket a gombáktól és rothadástól. Idővel az illatanyagok elpárologtak, a gyanta molekulái polimerizáltak, megkeményedtek és létrehozták a borostyánkőveket.

A kővek korának becslése a bányában talált vulkáni hamu radiometrikus meghatározásából származik. Paleontológusok szerint a mianmari borostyánkővek kora egy 5 millió éves periódust fog át. Más lelőhelyek kővei (pl. a Balti országok partjaira tengeri áramlatokkal kimosott leletek) sokkal fiatalabbak. A burmai leletek az élőlények nagy változatosságát mutatják és a paleontológusok számára ritka kincseket rejtenek.

Az alábbiakban Xing Lida kínai antropológus által talált és publikált leletek láthatók.

A történethez szomorú társadalmi háttér társul. A burmai borostyánkő nem csak a kutatók álma, egyúttal egy etnikai aknamező. Kacsin állam szembenálló politikai frakciók küzdelmének területe a természeti kincsek (jadekővek, épületfa és borostyánkő) megszerzéséért, amiből



Borostyánkősav
(etán-1,2-dikarbonsav)



99 millió éves skorpió



Egy bébi-kígyó



Legkorábbi kőzet bébi-csiga fejről



Bébi-béka lábszára és lábfeje



Bébi-béka végtagokkal, mögötte egy bogár



A legkisebb ismert dinoszarusz koponyája



Kacsin-i katona ellenőríz egy falut borostyán bányák közelében



Borostyánkő bánya Miammar Tanai tartományban



A karkötők között borostyánkövet vizsgálnak a Tengcsong-i piacon

fegyverbeszerzésüket kívánják finanszírozni. Ezért a kormány is fegyvereket küld a helyszínre a helyzet ellenőrzésére.

2014-ben Xing megpróbált a borostyán bányák közelébe kerülni, hogy lássa a kövek eredetét, de Tanai tartomány – a kormány és a kacsin-i függetlenségi erők harcának terepe – idegenek részére nem látogatható. Eljutott Myitkyin városkába, a kövületek árusításának mianmari piacára, ahonnan barátja segítségével hagyományos köntösbe, longyi-ba burkolózva elérte a bányákat.

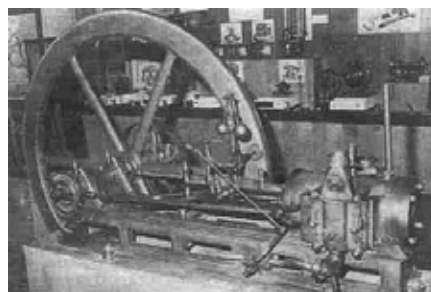
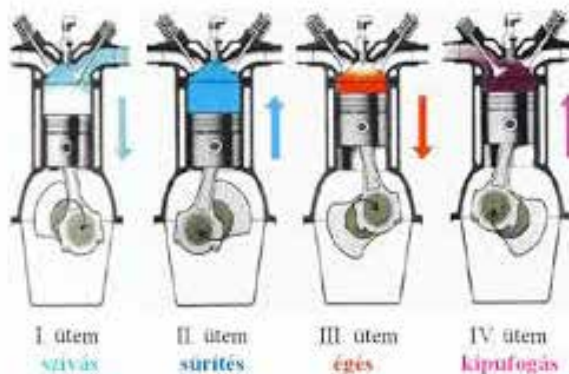
A bányák egy dús növényzettel borított vidék letarolt, csupasz hegyoldalán található, ahol sátrak alatt szédítő, 100 m mélységet is elérő nyílásokat nyitottak. Az aknák szélessége csak kis termetű bányászok leereszkedését teszik lehetővé. Addig ásnak le, amíg borostyánkő-réteghez nem érnek. Ekkor horizontális alagutakat vájnak ki és kézi szerszámokkal szedik ki a kövületeket, majd hozzák felszínre. A bányászok saját felelősségükre dolgoznak, baleset esetén maguk viselik a gyógyítás költségeit. Mindez magyarázza a leletek árát: Xing szerint egy rovar tartalmú golf labda méretű kövület reális ára 900 US\$.

A Jurassic Park-i álom, DNS mintavétel a borostyánba zárt őslényekről még eddig nem sikerült, de a kutatók kémiai nyomokat találtak a kövületekben: pigmenteket, amik védtek az élőlényeket a krétakori nap sugaraitól, kitint a rovarok páncéljából, lignint és cellulózt növényi maradványokból, aminosavakat egy madár tollából, ami sejteti, hogy proteintörredékek is lehetnek a kövekben. Az analízisekhez eddig a borostyánba zárt tollakat kalapáccsal porrá törték, de a

kutatók kíméletesebb módszereket szeretnének alkalmazni biomolekulák tanulmányozására. Megkezdték szinkrotron képalkotás kidolgozását: röntgensugár hatására a mintában lévő kémiai elemek környezetüktől függő, jellemző hullámhosszú fluoreszcens fényt bocsátanak ki. Még egy évtizednyi feladatot kell megoldani ahhoz, hogy feltárják a kövekbe rejtett gazdag információt.

MOTORBENZIN ÉS LÉGSZENNYEZÉS

Kevesebb kémiaóra unalmasabb, mint a kőolajleparlással foglalkozó. Nehezen találni benne konkrét vegyületet, kémiai



Az első belsőégésű motort 1876-ban hozták létre Németországban (Nicolaus Otto, Eugen Langen).



átalakulást. A hallgatók általában azt jegyzik meg, hogy a paraffinok – mint nevük eredete, parum affinis sugallja – kevésbé reakcióképesek.

Itt kezdődik a kémiatanítás problémája, mint arra Alexander Todd, a Cambridge Egyetem professzora hívta fel a figyelmet.

„A diákok robbanómotorral hajtott járműveken érkeznek az egyetemre és ott azt hallják, hogy a paraffinok inerteek.”

Persze, más a reakcióképesség égésnél, mint szerveskémiai reagensekkel szemben szobahőmérsékleten, folyadékfázisban.

Az első belsőégésű motort 1876-ban hozták létre Németországban (Nicolaus Otto, Eugen Langen). Hajtóanyagá

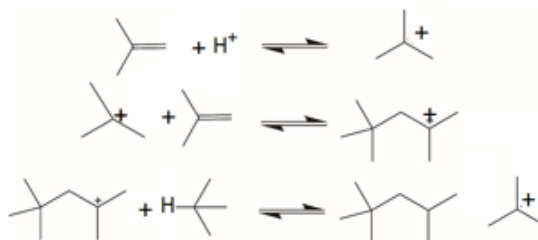
illékony, 85°C forráspontú szénhidrogén megfelelt a korai karburátorok (elpárologtatók) számára. A befeckendező karburátor megjelenésével kevésbé illékony üzemanyag is használhatóvá vált. 1890-től kezdve a motorokat hajók hajtására kezdték alkalmazni, majd a repülőgépek megjelenésével azokat is motorbenzinnel hajtották. 1910-től kezdve az autógyártás felfutása megnövelte a benzin iránti igényt, ugyanakkor az elektromosság elterjedésével szükségtelemmé vált a

korábban világításra használt lámpaolaj (kerozin). Mivel a benzin és a kerozin a kőolajlepelálás sztenderd termékei voltak, szükség lett a kőolajipar technológiai fejlesztésére. A megoldás 1911-ben született meg a kőolaj termikus bontásával (krakkolás), ami lehetővé tette a benzin termelésének növelését a nehezebb frakciók rovására. A benzin minőségét eleinte Baumé fokban kifejezett fajsúlyával jellemezték. 1917-ben a Standard Oil (akkor a legnagyobb amerikai olajfinomító) bejelentette, hogy a benzin legfontosabb tulajdonsága az illékonyág. Az akkor gyártott benzinek oktánszáma 40 és 60 közötti értékre becsülhető. Az I. Világháború alatt kiderült, hogy a motorbenzinek teljesítménye elégtelen a repülésre. Csak 1922-re ismerték fel, hogy a krakk-benzin nem használható repülésre. A krakkolás ugyanis mono- és diolefíneket (egyszeresen és kétszeresen telítetlen szénhidrogéneket) hoz létre és ezek könnyen polimerizálnak, gumyszerű bevonatokat képeznek a motorok belsejében. Az autógyárak jobb minőségű benzint igényeltek az olajtársaságoktól, amelyek az autógyártókat okolták a motorok fejletlenségéért és nagy fogyasztásáért.

A krakk-benzinek autókban való használata során felfigyeltek az égés rendellenességeire és a motor kopogására. Utóbbi ólom-tetraetil (PbEt₂) adalékkal küszöbölték ki, de az ólom felhasználása több halálesettel járt együtt. Az adalék felhasználását 1925-ben be akarták tiltani, de az ítélet ellen fellépő General Motors, DuPont és Standard Oil vizsgálatokkal bizonyította, hogy az ólomadalék felhasználása nem okoz közegészségügyi veszélyt, így az adalék alkalmazása érvényben maradt.

Egyidejűleg a kutatás kiderítette, hogy a szénhidrogén szerkezete meghatározza a benzin tulajdonságait. A benzin egyenesláncú szénhidrogén komponensei okozzák a kopogást, míg az aromás (gyűrűs) szénhidrogének nem.

Jobb üzemanyagok előállításához nagymértékben járult hozzá Vladimir N.



Az izooktán ipari szintézise Oláh szerint

Ipatyev, a szentpétervári tüzéségi akadémia professzora, egy orosz emigráns vegyész. A 20. század elején úgy találta, hogy szervesetlen anyagok nyomás alatt befolyásolják szerves vegyületek reakcióit. 1908-ban autoklávot tervezett („Ipatyev bombája”), ő volt a heterogén katalízis egyik felfedezője. 1930-ban külföldre szökött, majd Csikágóban az UOP olajtársaságnál a kémiai kutatás igazgatója lett. Csoportjával eljárásokat dolgoztak ki szénhidrogének izomerizálására, az olcsó bután és izobután izooktánná történő átalakítására.

Ettől kezdve a benzin minőségét oktánszámmal fejezték ki és a repülés céljára 87-es oktánszámú benzint írtak elő. További bonyodalmat okozott az, hogy a jobb benzinnel és a motorok teljesítményének növelésével a repülők nagyobb magasságba tudtak emelkedni, ami az üzemanyag megfagyásával



John Mooney a katalitikus konverter feltalálója



Oláh György az ipari karbokationok ipari alkalmazója

fenyegetett: 300 m magasság emelkedés 2°C csökkenéssel jár és 12.000 m magasban a hőmérséklet -57°C, ahol a benzol-adalék (olvadáspontja 6°C) megfagy és eltömi a motor üregeit. 1941-re a benzin minőségének javulásával a repülők részére háromféle oktánszámot írtak elő: 73, 91 és 100, az utóbbit a hadsereg részére.

Érdekes megjegyezni, hogy a 100-as oktánszámú benzin korabeli előállítására a Shell Olajtársaság repülésügyi menedzserének



(Jimmy Doolittle) köszönhető, aki meggyőzte a vállalatot, hogy investáljanak a 100-as oktánszámú benzin nagy mennyiségű előállításának technológiájába, amikor nem létezett még olyan repülő, ami ezt igényelte volna. A munkatársak egy része ezt „Doolittle milliódolláros hülyeségének” bélyegezte, de az idő őt igazolta. Korábban az amerikai hadsereg kipróbált 100 oktánszámú benzint, ami tiszta izooktán volt és gallononként (3,78 l) 25 dollárba került. A Shell benzinje 1936-ban került piacra. 1938-ra az ára 17,5 cent volt alig drágább, mint a 87-es oktánszámú üzemanyag.

Az izooktán előállításának legfejlettebb módszere Oláh György és munkatársainak a 1980-as években kidolgozott, karbokationok kutatási eredményeit hasznosító eljárása. (fentti ábra)

A II. Világháború után az autógyártás nagy fellendülésnek indult. Az autók számának növekedésével előtérbe került a kipufogók által okozott légszennyezés

kiküszöbölése főként a nagy városokra (pl. Los Angeles) jellemző füst-köd (smoke-fog = smog) képződésének elkerülése céljából. 1970 után kezdődött az ólommentes benzin forgalmazása, ami kedvezett új katalitikus konverterek kifejlesztésének. Míg a kezdeti konverterek a motorból távozó gázok teljes elégetésével csökkentették a CO és szénhidrogének kibocsátását, nem tudták megoldani a nitrogén oxidok eltávolítását. Ezt a feladatot John J. Mooney mérnök és munkatársai oldották meg. 1973-ban kerámiából egy méhkaptárra emlékeztető, pórusos szerkezetet készítettek, amelynek belső hajszálvékony járatait platina és ródiium oxidok keverékével vonták be. Ezt először egy Volvo teherautóba szerelték be. Ezzel sikerült mindhárom légszennyező gáz kibocsátását csökkenteni.

A nagyüzemi gyártás 1976-ban indult meg. Későbbi fejlesztéssel a katalitikus konvertert a kibocsátott gáz összetételét érzékelő katalitikus vezérléssel ellátva az üzemanyagfogyasztás jelentős csökkentését is el tudták érni. Mooney későbbi szabadalmi alapján a szerkezetet beépítették láncfűrészekbe, fűnyírókba és lombtakarítókba is, amelyekben 40%-os üzemanyagmegtakarítást értek el.

Ipatyev 85 évesen 1952-ben, Oláh 89 évesen 1917. márciusában, Mooney 90 éves korában 2020. júniusában halt meg.

VÁRATLAN ÚJDONSÁG AZ ÉLELMEZÉS TERÉN

Együnk férgeket.

Na ne! Micsoda felháborító javaslat!

Nem könnyű felismerni, hogy a fenti kérdés által kiváltott undorunk civilizációnknak az a része, amelyet Kolumbusz Kristóftól örököltünk. Az új világ rovarevő bennszülöttjeit ugyanis a primitív vadság képviselőiként jellemezte, „amivel indokolta azok embertelenségét és e népek rabszolgasorba taszítását” írja Julie Lesnik, a Wayne State Egyetem antropológusa, az Ehető Rovarok és az Ember Fejlődése című könyvében. Kolumbusz nem volt az egyedüli tényező abban, hogy a hódítások kora a rovarokkal



való táplálkozást megvetette az európai népek és az Amerikába betelepülő európaiak körében. További ellenszenvet táplált a rovarok által veszélyeztetett mezőgazdasági termelés, amit rabszolgák tartottak fenn.

De az undor nem volt minden korra jellemző: Arisztotelész szerette a tücsköket, a Vezúv kitörésekor meghalt idősebb Plinius megette bogarak lárváit. A görög bölcsek nem is annyira különböztek más kontinensek rovarevő népeinek kultúrájától. Ma világszerte százmilliók fogyasztanak többezer rovarat a bennünk élő ellenszenv, entomofógia dacára.

Talán különbséget kellene tennünk rovarok és férgek között. Hogyan fogják ki

halaikat a pecások? Ez sosem keltett ellenérzést a halak fogyasztásával szemben. A természetes környezetben nevelt baromfi (tanyasi csirke) tojása és húsa különösen vonzó számunkra, pedig a kapirgáló tyúkok sok kukacot megesznek.

Az előrelátók úgy vélik, a tápanyagokban gazdag rovarok fontosak lehetnek a jövő protein forrásaiban. A rovaroknak energiájukat nem kell testhőmérsékletük fenntartására fordítani, táplálékukat nagyrészt testanyagává (fehérjévé) alakíthatják. Persze, addig még sok idő eltelik, amíg rászokunk a pirított sáskára, vagy a hangya-burgerre. Van ennek azonban egy járhatóbb útja is.

Ötletes vállalkozók rovarokat tenyésztenek állati eledelként különösen halak számára, vagy csirketápként és így elkerülik, hogy a rovarok közvetlenül az ebédlőasztalra kerüljenek.

Legkedvezőbbek a **liszt-kukacok** és a fekete legyek (utóbbiaknak főleg a lárvái). A legyek még azt az előnyt is nyújtják, hogy táplálékuk sem jelent költséget, hiszen hulladékon is megélnek.

Jelenleg, ha rovarot találunk egy élelmiszerben, azt romlottnak minősítjük.





Kolumbusz szobra Barcelonában

Amikor a rovarok termelése tömegessé válik és a termék mentes lesz kórokozóktól és toxinoktól, az várhatóan élelemnek fog minősülni. Az élelmiszerek minősítése bizonyára változásokon megy át.

„Vertikális gazdaság” az Ynsect francia cég módszere, ami az egyik legfejlettebb rovar-tenyésztő vállalkozás. A módszert elterjedten alkalmazzák városokban saláta-zöldségek termelésére. A termesztés tálcákon történik, amiket robot mozgat. Az Ynsect burgundiai kísérleti üzeme 20 m magas és 10.000 kukacot nevel. A lárvákat 10 hetes korukban szelektálják: egy részüket bebáboztatják a következő generáció



Bogarak és legyek az ipari tápláléklánc részévé válnak

létrehozására, a többit megtisztítják és forró gőzben megfőzik, olajtartalmát kisajtolják, a maradékot porítják és megőrlik. A kapott termék halgazdaságokba kerül lazac és pisztráng tenyésztésére, vagy háztartásokba kutyaeledel céljára. A kísérleti gazdaság 30 tonna proteindús tápot termel havonta, amit tovább akarnak bővíteni.

Az Egyesült Államok Washington államában a Beta Hatch társaság liszt-kukacokat tenyészt egy öreg gyümölcslé üzemben a környék halgazdaságai részére. Azt remélik, rövidesen elérik a burgundiai üzem által termelt mennyiséget.

Versenytársuk, az AgriProtein hasonló mennyiségben tenyészt fekete legyeket Cape Town-i üzemében, Dél-Afrikában. A kukacoknál sokkal fürgébb legyeket milliószám tartják nagy kalickákban. A termékeny nőtények által lerakott petéket üreges tálcákon gyűjtik és rendszeresen ellenőrzik, hogy a lárvák



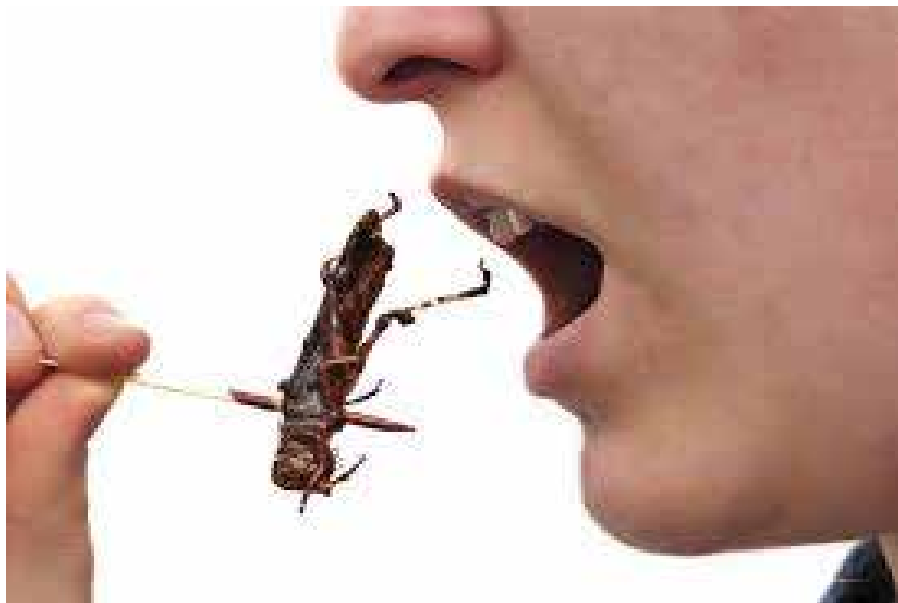
azonos méretűek legyenek; a nagyobb lárvák ugyanis felfalják a kisebbeket. 10 napos korukban olajat préselnek belőlük és feldolgozzák az Ynsect eljárásához hasonlóan.

A kukac- és légy-tenyésztés közti különbség az, hogy a kukacok vegetáriánusok, az Ynsect üzem búzakorpát használ tápanyagként. Az AgriProtein a lárvákat vágóhídi vérbe kevert korpával, míg a felnőtt legyeket tejjel és melisszal táplálja. De a tápanyagot újabban hatósági szabályozás írja elő. Az Európai Unió csak 2017-ben adott engedélyt a halak kukac-proteinnel történő táplálására, és csak azzal a feltétellel, hogy a kukacokat engedélyezett állati tápon tenyésztik. Az AgriProtein a tápokot a célország szabályaihoz igazítja.

A hatósági szabályozás sokunk számára megnyugtató, de akadályokat gördít a vállalkozók elé. Az AgriProtein tervei szerint a legyek tenyésztése lehetőséget adna a hulladék feldolgozására, ami különösen a szegény országokban lenne fontos. Ennek érdekében már azt is kidolgozták, hogyan vonják ki a születésszabályzó- és növekedési hormonokat emberi és állati ürülékből, nehogy azok a termékekben megjelenjenek.

Vajon túlnépesedő világunkban mi mindenhez kell még hozzászoknunk?

Simonyi Miklós





Egynyári üröm

Az egynyári üröm, *Artemisia annua* (másnéven egyéves üröm, édes üröm) az őszirózsafélék családjába tartozó növényfajta. Újabb rendszerezők az őszirózsafélék Asteroideae alcsaládjának Anthemideae nemzetségcsoportjába sorolják. A kellemes illatú növény szára, termőhelytől függően 0,5-2,5 m magas, barázdált, összetett füzérvirágzatban végződik.



Az intenzív aromás illatú 3-5 cm hosszú levelei kétszárnyúak. Pirosuló vagy sárga szélbeporzású virágjai júliustól októberig nyílnak. Termése barna színű és tojásdad alakú. Az északi féltéke sztyeppéin, félsivatagos vidékeinken terem. Magyarországon is honos, elsősorban az Alföld déli részén növekszik.

Az egynyári üröm a hagyományos népi gyógyászatban több, mint 2000 év óta jelen van, lázcsillapításra és malária ellen használták. A kínai népi gyógyászat már időszámítás előtt is használta gyógyításra a növény leveleinek kivonatát. A növény kínai neve Qinghao. Régi írások szerint aranyeret és bőrbetegségeket is kezeltek vele. Több országban salátazöldségként fogyasztják ma is. A népi gyógyászatban más ürömfajokat is felhasználnak, ilyenek a fehér üröm, fekete üröm és tárkony.

A **malária** főleg a trópusi vidékeken előforduló szúnyogfajta (*Anopheles szúnyog*) által terjesztett, *Plasmodium* nembe tartozó egysejtű parazita által okozott betegség. A kórokozót a szúnyogok maláriás beteg véréből kiszívva, ismételt csípéssel nyálukat bejuttatva adják be a következő ember

véráramába. A világon a megbetegedések száma évente megközelíti az 500 milliót és a szövődmények miatti halálozás meghaladja az 1 milliót.

Érdekes megjegyezni, hogy Diószegi Sámuel botanikus, a XIX. század elején kiadott könyvében is megemlíti az egynyári üröm jótékony hatását a gyógyításban és a malária kezelésében is:

„Mikor a testen sérelem, vagy vágás esik; jó az Ürömtaplót a sebre borítani, mert az a vér folyását azonnal elállítja. A Tárkony Üröm levelei jó szaguk, kedves tsípős fűszerszámos ízük, szélűző, és gyomor erősítő erővel bírnak. Termesztik kertekben, és bizonyos ételeket készítenek vele, mint fűszerszámmal.” „Az üröm igen jó sárgaságban, máj- és lépdagadásban és a napos hideglelésben”.

Hosszú időn keresztül a malária gyógyítására az egyetlen terápiás szer a kínafa kérgéből nyert alkaloid, a **kinin** volt. Ez csak a vérben levő parazitákat képes elpusztítani, a test egyéb szöveteiben levőket nem. Ma már több új gyógyszer létezik a malária megelőzésre, illetve a betegség gyógyítására, ilyenek

például a **kinin, artemizinin, klorokin és hidroxiklorokin** hatóanyagokat tartalmazó gyógyszerek is. (lásd a magazin 19. számában a kininről és a jelen számában a klorokiklinről és hidroxikloroklinról írásainkat)

Az egynyári üröm maláriaellenes hatásának tudományos kutatása az 1970-es évek elején kezdődött meg, mivel a maláriát okozó parazita kórokozók a korábban bevált maláriaellenes szerekkel (Kinin és Klorokin) szemben fokozott rezisztenciát alakítottak ki. Farmakológiai és klinikai vizsgálatokban ekkor sikerült igazolni a növény és egyik hatóanyagának az artemizinin molekulának maláriaellenes gyógyhatását Tu Youyou kínai gyógyszerész kutatónak. Az ötletet – a kutató elmondása szerint – a Tradicionális Kínai Orvoslás ősi írott receptjei

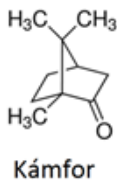
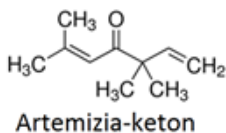
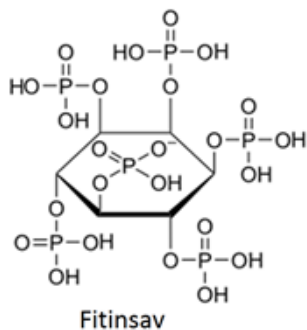


© Nobel Media AB. Photo: A. Mahmoud

adták. **Tu Youyou** az artemizinin növényből történő kivonásáért és a molekula gyógyhatásának kimutatásáért 2015-ben megkapta a Kémiai Nobel-Díjat. Ezt követően az artemizinin alapú gyógyszerek több millió ember életét mentették meg és vezettek gyógyulásukhoz.

A NÖVÉNY MOLEKULÁRIS KOMPONENSEI

Az egyvári üröm képes számos



antioxidáns fenol vegyület szintetizálására. A növény szárított leveléből több, mint 100 vegyület kimutattak, szénhidrátokat, zsírokat, proteinek, fitosavat, tanninokat és tokoferolt (E-Vitamin). A fitosav (inizitol hexafoszfát) szerepe a foszfor tárolása a növényben. A szárított levelek artemizinin-tartalma 0% és 1,5% között van. A hazai fajták mintegy 0,05%-ot tartalmaznak.

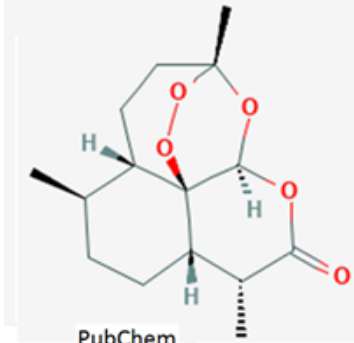
A növény termőhelytől függően 0,3-1% illóolajat tartalmaz, Jellemző fő komponensei: monoterpén származékok, artemizia-ke-ton (~30%), kámfor (16%), eugenol, etc. A monoterpének közül többet az illatszeripar használ fel. A

növény leveleiből kivont illóolaj artemizinin tartalma megközelítőleg 15-20 %.

A GYÓGYHATÁSÚ MOLEKULA

A növényből kinyerhető, maláriát gyógyító molekulának bizonyult Artemizinin egy szokatlan peroxid-hidat tartalmazó szeszkviterpén lakton.

A szeszkviterpén laktonok, lakton

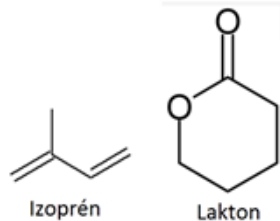


Artemizinin

gyűrűt tartalmazó

szeszkviterpenoidok. (Három izoprén egységet tartalmazó terpenoidok). A laktonok gyűrűs belső észterek. Jellemző csoportjuk az észterekével azonos: $-O-CO-$, amely a **laktonok** esetén a gyűrű része. A gyűrűs vegyületek közül általában az 5 és 6 atomosak a legstabilabbak.

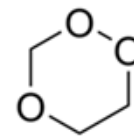
A terpenoidok öt szénatomos izoprén



egységből felépített vegyületek, több ezer kombinációban előfordulnak. A terpének és a terpenoidok közötti különbség az, hogy a terpének szénhidrogének, míg a terpenoidok oxigént tartalmaznak.

Kimutatták, hogy a molekula peroxid gyűrűje (1-2-4 trioxan) játszik szerepet gyógyhatásának mechanizmusában.

Az artemizinin hatásmechanizmusát számos kutató vizsgálta. Megállapították, hogy amikor a maláriát okozó parazita



1-2-4 Trioxan

megfertőzi a vörösvérsejtet, a hemoglobinból vas-porfirin komplexet (hemet) szabadít fel. A vas redukálja az artemizinin peroxid-kötését és egy többvegyértékű vas-oxo vegyületet hoz létre, amely egy reakciósorozatot indít be. Ennek során reaktív oxigén gyökök képződnek, amelyek elpusztítják a parazitát.

A kristályos molekula rosszul oldódik vízben és olajokban, emiatt szervezetbe juttatása orálisan vagy rektálisan, az emésztőrendszeren keresztül történhet. A molekula bizonyos módosításai alkalmasak injekció formájában történő bevitelére. A rezisztencia elkerülésére más gyógyszerekkel történő kombinált kezeléseket alkalmaznak, két különböző gyógyszert kombinálnak egy tablettában. Ez azért fontos, hogy biztosítsák mindkét gyógyszer alkalmazását. A kísérő gyógyszerek közé tartoznak a lumefantrin, a mefloquin, az amodiaquin.

A növény gyógyhatása

A növény kivonatait, például a szárított leveleiből készített teát is, használják a malária tüneteinek csökkentésére. A tea felnőttek számára, rövidtávon fogyasztva biztonságosnak bizonyult. Az 5-9 g szárított levélből készített tea 4-7 napig, napi három részre elosztva, javíthatja a tüneteket és csökkentheti az aktív paraziták számát a maláriában szenvedőknél. Azonban, a teák artemizinin mennyisége túl kicsi ahhoz, hogy elpusztítsa a maláriát okozó összes parazitát, ahhoz viszont elég, hogy ellenállóvá tegye ezeket, rezisztenciát kialakítva az artemizinin is tartalmazó, erőteljesebb malária gyógyszerekkel szembeni további kezeléssel szemben. Emiatt a WHO (World Health Organization) nem javasolja a teák önálló fogyasztását. Hasonló a véleménye magáról az artemizininről és

származékairól is, ezeket sem ajánlja orális monoterápiaként. Az artemizinin lehetséges mellékhatásai bőrkürités, hányinger, hányás, remegés, ritka esetben májproblémák is felléphetnek.

A kutatók az artemizinin és származékainak több más betegséggel szembeni gyógyhatását is vizsgálták. Több in vitro és in vivo vizsgálat valószínűsíti az artemizinin és származékai aktivitását a herpeszvírus család DNS-vírusai, például a humán herpesz vírus 6, az Epstein-Barr vírus és a Hepatitis B vírus ellen is.

Kevés ismeret áll rendelkezésre a molekula hatékonyságáról olyan RNS vírusok esetében, mint például a hepatitis C vírus, az influenza vírus.

Felmerült az artemizinin rákos betegségek gyógyítására történő felhasználása is. A korai vizsgálatok ígéretes eredményeket mutattak, de a kutatások korlátozottak. Jelenleg nem folytatnak klinikai vizsgálatokat. További

kutatásokra van szükség, hogy biztosan kiderüljön, segíthet-e. Az eddigi kutatások az artemizint a bevált kezelésekhez kiegészítőként használták, nem pedig alternatívaként.

A Covid-19 koronavírus pandemia megindulásakor, hatékony gyógyszer hiányában, felmerült az ismert malária- és Ebola-vírus ellenes szerek, kinin, artemizinin, klorokin és hidroxiklorokin, kipróbálása a járvány elleni védekezésben. (lásd, jelen számban a Gyógyító molekulák című írásunkat)

A hagyományos kínai orvoslásban alkalmazott gyógynövényes kezeléseket már a korábbi koronavírus járványok, a Sars-CoV (Ázsia 2003) és Mers-CoV (Szaud-Arábia 2012) kezelésére is megvizsgálták. 2005-ben kínai kutatók, az édes üröm alkoholos kivonatát a második leghatékonyabb növényi gyógyszernek találták a Sars-CoV vírus ellen.

Tekintettel a két vírus közötti

hasonlóságra, a kutatók már a Covid-19 pandémia kezdetén megkezdtek növényi kivonatok és artemizinin-származékok új koronavírus elleni hatékonyságának vizsgálatát. A vizsgálatok jelenleg is folynak, azonban még egyetlen korábbi más ismert vírussal szemben hatásos gyógyszer hatékonysága sem igazolt egyértelműen az új koronavírus ellen.

Kószegi Lídia



IRODA,OM

Varga Szilárd, a Malária hagyományos gyógyszere, a kinin, Kémiai Panoráma, 2019, 21. szám

Diószegi Sámuel: Orvosi fűvészkönyv, mint a magyar fűvészkönyv praktika része (Debreczen, 1813)

Jorge F S Ferreira, Devanand L Luthria,

Tomikazu Sasaki, Arne Heyerick

Molecules, 2010 Apr 29;15(5):3135-70.

Chemical Composition of Artemisia annua L. Leaves and Antioxidant Potential of Extracts as a Function of Extraction Solvents

Shahid Iqbal, et al, Molecules 17(5):6020-32, December 2012

Sanja Čavar, M Maksimović, D Vidic, A Parić, Industrial Crops and Products 37 (1), 479-485

Mithun Rudrapal, Diapk Chetia, Drug Design, Development and Therapy Volume 10:3575-3590

Patrick R. Arsenaault, Kristin K. Wobbe, Pamela J. Weathers, Current Medicinal Chemistry

Volume 15, Issue 27, 2008

Thomas Efferth, Biotechnology Advances, Volume 36, Issue 6, 1 November 2018, Pages 1730-1737

Cumming, Jared N.; Ploypradith, Poonsakdi; Posner, Gary H, Advances in Pharmacology (San Diego) (1997), 37 253-297.

Gary H. Posner Jared N. Cumming Poonsakdi Ploypradith Chang Ho Oh J. Am. Chem. Soc. 1995, 117, 21, 5885-5886

<https://www.mpg.de/14663263/artemisia-annua-corona-virus>

<https://cen.acs.org/biological-chemistry/infectious-disease/Artemisinin-raises-hopes-fears-amid-COVID-19/98/i21>

Ruiyuan Cao, et al, ACS Infect. Dis. 2020, 6, 9, 2524-2531

<https://www.who.int/malaria/areas/treatment/overview/en/>

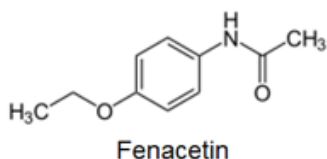


Paracetamol

A paracetamol (Amerikában acetaminofen) széles körben használt fájdalomcsillapító és lázcsökkentő hatású gyógyszer. A fejfájás, izomfájdalom, ízületi fájdalmak csökkentésére is használható. Hasonló hatást fejt ki, mint az aszpirin és ibuprofen. Számos vény nélkül kapható gyógyszer hatóanyaga, mint például a Panadol, Rubofen, Coldrex, Neocitran. Súlyos fájdalmak, például daganatos és műtét utáni fájdalom esetén is alkalmazzák opioid fájdalomcsillapítóval kombinálva. Terápiás dózisában (500 mg 4-6 óránként) adva a paracetamol biztonságos és hatékony fájdalomcsillapító.

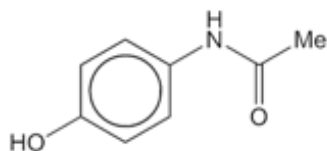
Bár már 1893-ban felfedezték egy korábbi fájdalomcsillapítót – fenacetint – szedő személy vizeletében, forgalomba gyógyszerként csak 1950-ben került, miután kiderült, hogy a paracetamol a fenacetin metabolitja és gyógyhatását valójában a szervezetben történő lebomlását követően a paracetamol okozta.

Bár évente sok milliárd adag paracetamolt forgalmaznak, a



hatásmechanizmusának kérdése a mai napig nem zárult le, a kutatók több elképzelést is leírtak az irodalomban.

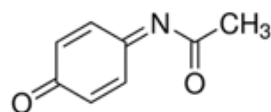
Az egyik feltételezés szerint az aszpirinhoz és ibuprofenhez hasonlóan blokkolja a fájdalmat és gyulladást jelző molekulák, a ciklooxygenáz (COX) enzimek aktivitását. Egy másik magyarázat az, hogy a paracetamol csökkenti magát a gyulladáscsökkentő vegyületek, a prosztaglandinok termelését. Ezt az aszpirin is gátolja, de a paracetamolnak kisebb a gyulladáscsökkentő hatása. Ugyanakkor az aszpirin gátolja a véralvadást elősegítő



Paracetamol

vegyületek, a tromboxánok termelését, a paracetamol nem. Valószínű, hogy a paracetamol mindkét útvonalon kifejti hatását.

Maga a gyógyszer nem mérgező, de mivel a májban lévő enzimek lebontják és



N-acetil-p-benzokinon

a metabolitja egy mérgező vegyület, az N-acetil-p-benzokinon imin képződik belőle, huzamos szedése esetén lehet káros mellékhatása. Kis mennyiségben ez a vegyület kiválasztódik, de nagy mennyiségben elárasztja a méregtelenítő szerveket és károsíthatja a májszöveteket. A gyógyszer szedése előtt tájékozódjunk,



mellékhatásairól, a szükséges dóziszról és arról, hogy milyen esetben nem ajánlott a gyógyszer szedése.



IRODALOM:

<http://www.chemistryexplained.com/A-Ar/Acetaminophen.html#ixzz6ccrnnqki>
<https://www.worldofmolecules.com/drugs/tylenol.htm>
 Carmen Drahl, CEN, 92, Issue 29, 2014
<https://www.acs.org/content/acs/en/molecule-of-the-week/archive/a/acetaminophen.html>





Klorokin, hidroxiklorokin

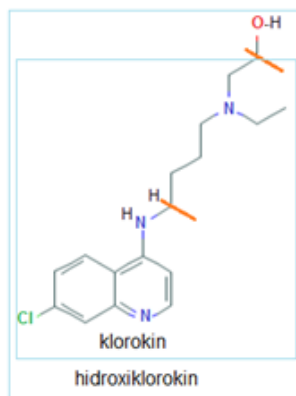
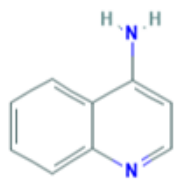
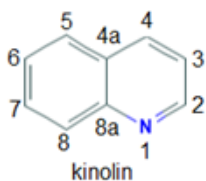
A klorokin és a hidroxiklorokin 4-aminokinolin származékok, amelyeket hagyományosan a malária megelőzésére és kezelésére használnak. A vegyületek gyógyhatásának felismerése előtt, a malária gyógyítására évszázadokon keresztül, a kínafa kérgéből kinyerhető kinin volt. Mivel enyhe immunszuppresszáns hatásuk is van, néhány autoimmun betegség gyógyítására is használják mindkét vegyületet, például reumás izületi gyulladásos betegségek (rheumatoid arthritis), lupus betegség (a test immunrendszere tévedésből az egészséges testszöveteket támadja meg) és a fényérzékeny bőrkítörések kezelésére.

A kinolin aromás heterociklusos vegyület, melyben egy benzol és egy piridin gyűrű kapcsolódik két szomszédos szénatomon.

A klorokin molekulában az aminokinolin aminocsoportjának egyik hidrogénjét dietilamino-pentán csoport helyettesíti és a kinolin váz 7. helyzetéhez klór atom kapcsolódik. A hidroxiklorokin molekula, a klorokin molekula egyik N-dietil csoportjának hidroxilezésével keletkezik.

A hidroxiklorokint főleg szulfát sóként alkalmazzák, általában abban az esetben, ha a klorokinnal szemben már kialakult a rezisztencia.

Újabb vizsgálatok adatai arra utalnak,



hidroxiklorokin

hogy a hidroxiklorokin hatásos a 2-es típusú diabétesz kezelésére is. A molekula az inzulint bontó enzimek gátlásával, növeli az inzulin intracelluláris felhasználását és gyulladáscsökkentő hatása is van.

A koronavírus pandemia megjelenését követően felmerült a hidroxiklorokin felhasználása COVID-19 vírussal fertőzött betegek gyógyítására is. Bár 2020. március 28-án az USA Élelmiszerek és Gyógyszerek forgalmazását engedélyező hivatala (Food and Drug Administration) jóváhagyta a klorokin és a hidroxiklorokin sürgősségi alkalmazását a COVID-19 kezelésére, 2020. június 15-én a negatív adatok halmozódása miatt visszavonta hozzájárulását. Jelenleg felhasználása a koronavírus fertőzés esetében csak klinikai kísérletekben fordul elő.

Állatkísérletekben a hidroxiklorokin hatásosnak bizonyult az elmúlt évtized közepén Afrikában robbanásszerűen terjedő Zikavírus fertőzéssel szemben is.

A Zika vírus ízeltlábúak által terjesztett fertőző vírus. Nevét az ugandai Zika-erdőről kapta. Egyes majomfajokat és az embert fertőzi meg, a főleg trópusi övezetben élő szúnyogok csípésén keresztül, és ún. Zika-lázat okoz.

A betegség általában enyhe lefolyású, nem halálos, azonban a fertőzés terhes nők magzatára különösen veszélyes, súlyos fejlődési rendellenességet, ún.

kisfejtésűséget okozhat, valamint más szövődmények is felléphetnek. A kutatók 2017-ben Zika vírussal fertőzött egerekkel végzett kísérletekben kimutatták, hogy a hidroxiklorokin jelentősen csökkenti a fertőzést a placenta sejtjeiben. Eredményeik alapján humán klinikai kísérleteket javasoltak. A klorokin és a



hidroxiklorokin hajlamos rezisztencia kialakulására. Ilyen esetekben más malária ellenes gyógyszert használnak kezelésre, például az egynyári üröm gyógynövényből kinyerhető artemizininint (lásd a magazin jelen számában megjelent írást az egynyári üröm gyógynövényről).

A túladagolás tünetei: fejfájás, gyomorbélrendszeri tünetek, álmoság, szédülés, súlyos látászavarok, hirtelen vakság, vérnyomásesés, ritmuszavarok, görcsök, eszméletvesztés, keringési-, légzési elégtelenség, kóma. A gyerekek különösen érzékenyek a klorokin mellékhatásaira és már csekély mértékű túladagolás is veszélyes lehet.

A gyógyszer szedése előtt tájékozódjunk, mellékhatásairól, a szükséges dóziszról és arról, hogy milyen esetben nem ajánlott a gyógyszer szedése.



IRODALOM:

Malária hagyományos gyógyszere: a Kinin, Varga Szilárd, Panoráma, 21. szám
<http://www.chemistryexplained.com/A-Molecule of the Week Archive ACS, September 18, 2017>
Bethany Halford C&EN, 95 (29), p 11 July 17, 2017
Bin Cao, J Exp Med 214 (8): 2303, 2017.
 OTSz http://otszonline.hu/cikk/hidroxiklorokin_2_es_tipusu_diabetesben



B3-Vitamin

A B3 vitamin a nyolc B-vitamin egyike. Vízoldható. A szervezetünk csak a napi anyagcseréhez szükséges mennyiséget tárolja, a többi kiürül a vizelettel, izzadsággal. Fontos szerepet játszik az elfogyasztott táplálék energiává alakításában. A megnevezés egy három vitamér molekulából álló vitamincsaládot jelöl. (Vitamereknek nevezzük azokat a kémiai és metabolikus tulajdonságaik alapján rokon vegyületeket, amelyek minőségileg azonos vitamin-aktivitást mutatnak).

A három vitamér: a nikotinamid (niacinamid), a nikotinsav (niacin) és a nikotinamin-ribozid. A családot

B3-komplexnek is nevezik. Megjegyzendő, hogy a nikotinamid megnevezés félrevezető, mivel nincs köze a dohány nikotin molekulájához. Ezért újabban a niacinamid megnevezés szerepel helyette.

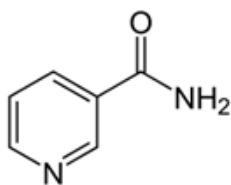
A vitamin az emberi és állati szervezetekhez kis mennyiségben nélkülözhetetlen szerves molekula, amelynek előállítására a szervezet általában nem képes és csak a táplálékkal jut hozzá. A vitaminokat nem a kémiai szerkezetük, hanem biokémiai aktivitásuk alapján osztályozzák. Adott biológiai hatást több vegyület (vitamér) is eredményezhet.

A szervezetben a B3-vitamereknek fontos szerepük van. Mindhárom

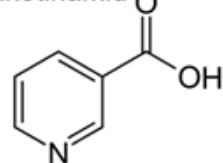
molekula szervezetünkben nikotinamid-adenin-dinukleotiddá (NAD⁺) alakul. A NAD az emberi és az állati élethez elengedhetlenül szükséges vegyület. A B3-vitamin a NAD prekursora.

A prekursor olyan vegyület, mely egy másik vegyületet előállító reakcióban vesz részt. Az enzimek a biokémiai reakciókat katalizáló biológiai katalizátorok. A koenzim egy kis szerves molekula, amely az enzimhez kapcsolódik és elősegíti az enzim működését. A legtöbb koenzim a vízoldható B-vitaminokból származik.

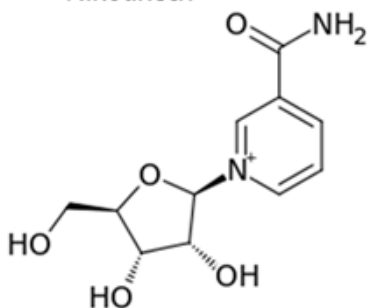
A NAD és foszforilezett változata, a nikotinamid-adenin-dinukleotid-foszfát (NADP), a hibás DNS-részletek helyreállításában és a kalcium-mobilizáció



Nikotinamid



Nikotinsav



Nikotinamid-ribozid

során lejátszódó transzferreakciókban játszik szerepet. Mindkettő fontos a glükóz, zsír és alkohol metabolizmusában is. Előállításukhoz a szervezetnek szüksége van B3-vitaminra és/vagy triptofánra.

Kimutatták, hogy a B3-vitamin koleszterinszint-csökkentő, antioxidáns és gyulladáscsökkentő hatással is bír.

A B3-vitamerek táplálékokkal jutnak a szervezetünkbe. Kivétel a niacin, amelynek körülbelül 50%-a a fehérjék bioszintéziséhez szükséges triptofán nevű alfa-aminosavból szintetizálódik a szervezetünkben.

A niacinban gazdag ételek közé tartoznak a tejtermékek, a baromfi, a hal, a sovány hús, a dió és a tojás. A hüvelyesek, dúsított kenyerek és gabonafélék szintén tartalmaznak niacint.

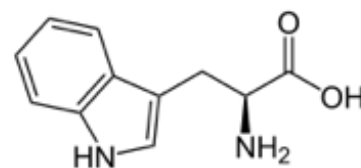
A triptofán esszenciális aminosav, a szervezet nem tudja előállítani, ezért ez is táplálékkal kerül szervezetünkbe. Megjegyzendő, hogy a triptofán niacinná történő átalakításához, a szervezetének szüksége van B-6-vitaminra is, mely szintén a táplálékkal kerül a szervezetünkbe. A triptofán fehérjében



gazdag élelmiszerekben található meg. Elsősorban csokoládéban, zabpehelyben, tejtermékekben, vörös húsokban, baromfihúsban, halakban, tojásban, csicszeriborsóban, napraforgómagban, tökmagban, földimogyoróban.

Vitamin-hiány akkor fordul elő, ha nem jut a szervezetbe elegendő B-3-vitamin vagy triptofán. Akkor is előfordulhat B-3-vitaminhiány, ha egy betegség megakadályozza a B3-vitamin felszívódását. Ilyen például a hasmenés, májbetegség vagy alkoholizmus.

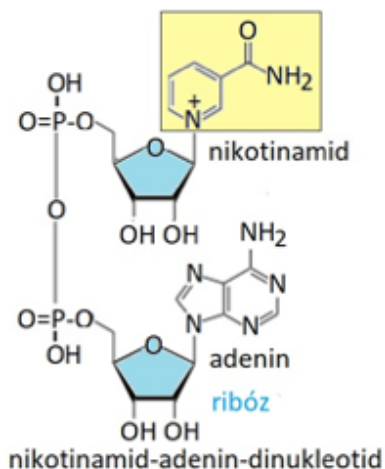
A súlyos B-3-vitaminhiány pellagra nevű betegséget okoz. Tünetei:



Triptofán

bőrelváltozások, a nyálkahártyák duzzanata, irritációja, fájdalom és égés a torokban, a mellkasban vagy a gyomorban, zavartság, memóriaproblémák, depresszió és akár paranoia is. Néhány embernél a teljes kezét vagy lábát lefedő elváltozások alakulnak ki. A tünetek némelyike kisebb hiány esetében is felléphet.

Az egészséges táplálékot tartalmazó változatos étrenddel élő fogyasztók nincsenek kitéve a vitaminhiány veszélyének. Szerkesztőség



nikotinamid-adenin-dinukleotid



IRODALOM:

<http://www.chemistryexplained.com/Ne-Nu/Nicotinamide.html>

https://www.researchgate.net/publication/259641913_The_Chemistry_and_Biochemistry_of_Niacin_B3

Egy kiváló orosz vegyész

A II. Világháborút követő évtized negligálta a kor orosz szakmai kiválóságait, amiért a nyelv elszigeteltsége és a sztálini propaganda közösen okolhatók.

Az 1950-es évek elején hazánkban a természettudományok oktatása számos vélt és valódi eredményt szovjet tudósoknak tulajdonított. A bántó hamisítás egy képzelt kérdés-felelet párban fejeződött ki, amit csak barátok között lehetett elmondani: „Ki teremtette a Világot? Isten, de előzőleg kikérte két szovjet tudós tanácsát!” A kiváltott ellenérzés miatt az igazi teljesítményeket nem ismertük, ami többé-kevésbé igaz volt Nyugat-Európára is, ahol az orosz/szovjet eredményeket csak az űrhajózás megjelenésével kezdték felismerni.

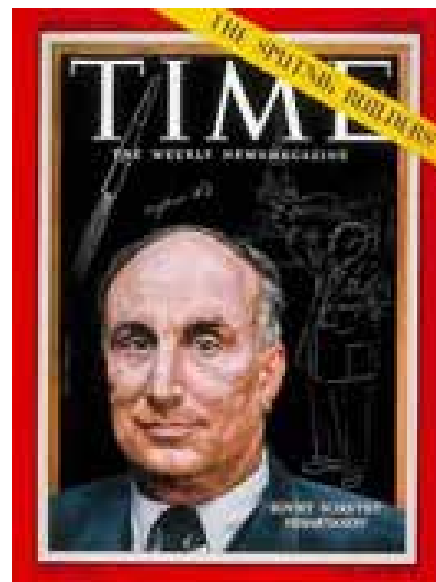
Zelinszkij 1861-ben született Tiraspol-



Zelinszkij ogyesszai egyetemi évei alatt

ban egy nemesi családban. Négy éves korában szülei tuberkolózisban meghaltak és nagyanyja nevelte fel. 1872-től 1880-ig a Richelieu Gimnáziumban tanult Ogyesszában, ahol Dimitrij Mengyelejev is tanított az 1855-56-os tanévben. Zelinszkij a Novorosszijszk Egyetemen tanult tovább Ogyesszában. Az 1862-ben alapított egyetemen kiváló szakemberek tanították a természettudományokat: Ilja Mecsnikov, a későbbi Nobel-díjas embriológiát, Iván Szeccsenov, az orosz fiziológia-iskola megalapítója fiziológiát. Az egyetemnek jól felszerelt kémiai laboratóriuma volt.

Az egyetemet kiváló eredménnyel végezte el és külföldi ösztöndíjban részesült, Lipcsében Johannes Wislicenus mellett, és Göttingenben Viktor Meyer laboratóriumában dolgozott. Lipcsében sztereokémiai kutatásban vett részt, szintéziseket végzett malonészter felhasználásával. Göttingenben tiofén kémia-val foglalkozott. Mustárgáz szintézist végzett és mérgezést kapott, amibe csaknem belehalt. Ez vezetett ahhoz, hogy aktívszén tartalmú gázmaszkot fejlesztett ki. Az I. Világháború alatt a gázmaszk milliók életét mentette meg.

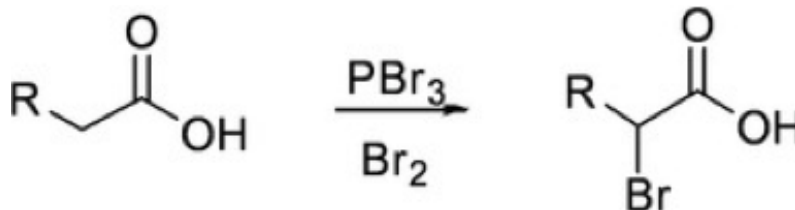


Nyeszmejanov mint Sputnik builder a Time Magazin címlapján
Az Angewandte Chemie legújabb száma Nyikolaj Zelinszkij életrajzát közli (<https://doi.org/10.1002/anie.202005233>).

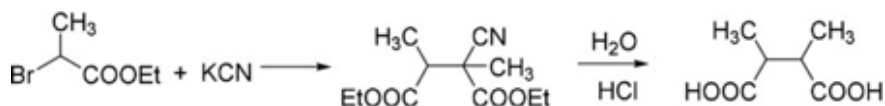
Göttingenben kidolgozta a-halogénezett savak szintézisét.(1. ábra)

Ez lett első publikációjának témája 1887-ben (Berichte, 1887, 20, 2026). Az eljárás később a Hell–Volhard–Zelinszkij reakció nevet kapta.

Zelinszkij 1889-ben tiofén-származékok izomerizációjáról írta meg disszertációját. 1890-ben tanársegéd lett az Ogyesszai



1. ábra α -bróm-propionsav szintézise

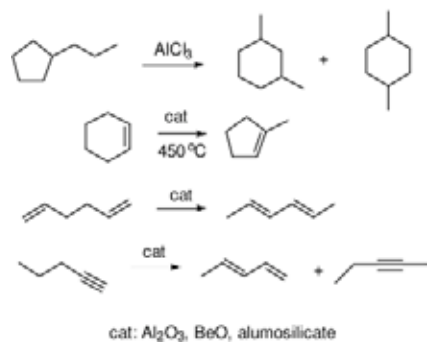


2. ábra dimetilszukcinát szintézise

Egyetemen. 1991-ben doktori címért benyújtott dolgozata az első jelentős sztereokémiai tanulmány volt Oroszországban: dikarbonsav- és zsírsav-sztereoizomerek szintézisét írta le. (2. ábra)

1893-ban az ekkor 54 éves Valgyimir Markovnyikov – aki évek munkájával hozta létre a Moszkvai Egyetem magasszintű kémiai oktatását, szerves és analitikai kémiát tanított – ellentétbe került az Oktatási Minisztériummal az egyetemi autonómia tárgyában és ezért leváltották. Ekkor új korszak kezdődött a 32 éves Zelinszkij életében: meghívták a Moszkvai Egyetem Kémiai Intézetének vezetésére. Kinevezésében nagy szerepet játszottak Mengyelejev és Nyikolaj Mensutkin, aki Mendgyejev utódja volt a Szentpétervári Egyetemen. Zelinszkij kutatást indított szénhidrogénekkal logikus következményeként korábbi – dikarbonsav sztereoizomerekkel végzett – tanulmányainak. Ezzel kiváltotta Markovnyikov nehezítését, aki ezt a területet saját prioritásának vélte. Zelinszkij és Markovnyikov kapcsolata érthetően rossz volt.

A kaukázusi olajlelőhelyek gazdasági jelentősége Zelinszkij figyelmét a szénhidrogének felé irányította.



3. ábra Szénhidrogének katalitikus izomerizációja

Mérnökökkel együttműködve igazolta, hogy hőkezeléssel a szénhidrogének aromatizálódnak és ennek alapján az 1900-as évek elején megépült az első orosz üzem benzol, anilin és más termékek gyártására. A hozamok azonban alacsonyak voltak. 1912-re Pt és Pd katalizátor alkalmazásával Zelinszkij a toluol hozamát 54-68%-ig tudta növelni (3. ábra)

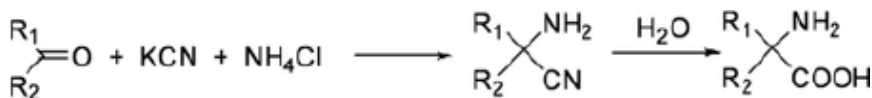
1905-től kezdve tanulmányozta cikloalkánok izomerizációját, a gyűrűk tagszámának növelését és csökkentését. Fontos felfedezése volt oxid katalizátorok (Al₂O₃, SiO₂, BeO), mint szilárd savak alkalmazása ciklohexén- és ciklopentén származékok izomerizálására. A reakciókban konjugált diéneek is képződtek.

1906-ban oxo-vegyületekből káliumcianid és ammóniumhidroxid vizes oldatában kidolgozta α-aminosavak szintézisét (N. Zelinsky, I. Gutt, Zh. Russ. Fiz.-Khim. 1906, 38, 472). (4. ábra)

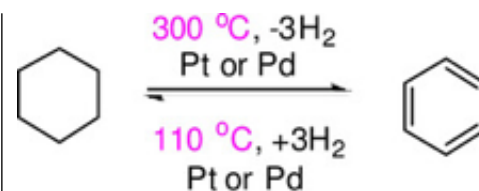
Ebben az időben indult Zelinszkij és Vladimir Ipatyev együttműködése a heterogén katalízis területén. Szénhidrogének katalitikus átalakítása megalapozta a kőolaj finomítást. 1911-ben kidolgozta ciklohexán átalakítását benzollá Pt, vagy Pd jelenlétében 300 °C-on, míg a visszaalakulást 110 °C-on. (5. ábra)

Korábban a nemesfémeket folyadékfázisú hidrogénezésre használta Richard Wilstätter, de Zelinszkij kimutatta, hogy ezek a fémek hatékony katalizátorok gázfázisú hidrogénezési reakciókban is.

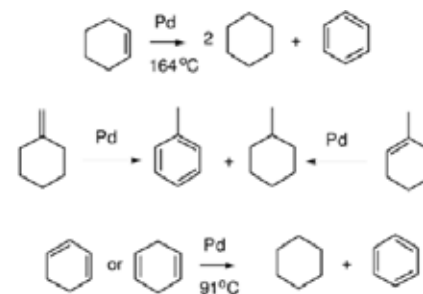
1911-ben Zelinszkij felfedezte ciklohexán származékok katalitikus



4. ábra A Zelinszkij-Stadnikov reakció



5. ábra Ciklohexán és benzol kölcsönös átalakulása



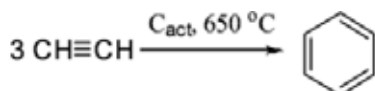
6. ábra Irreverzibilis katalízis

diszproporcionálódási reakcióját, amelyben benzol képződik. Ebben az esetben a hidrogén-donor és hidrogén-akceptor szerepet ugyanaz a molekula tölti be. A reakció platina és palládium felületen megy végbe anélkül, hogy hidrogén képződne, vagy adszorbeálódna külső forrásból. A reakciót „irreverzibilis katalízis” néven nevezte el. (6. ábra)

Még ebben az évben a Moszkvai Egyetem több mint 100 professzora – köztük Zelinszkij – lemondott állásáról tiltakozásul az Oktatási Minisztérium politikája miatt. Zelinszkij Szentpétervárra ment, ahol 1912-től a Pénzügyminisztérium Központi Laboratóriumának igazgatója, egyúttal a Politechnikai Intézet professzora lett. Kísérleteket végzett a kaukázusi kőolaj átalakításával aromás termékekké és kimutatta természetes alumínium szilikátok katalitikus hatását. Munkáját megszakította az I. Világháború és az első gáztámadás után a katonák védelmében nagyfelületű aktív szenet tartalmazó



Katonák Zelinszkij gázmaszkjában



7. ábra A Zelinszkij-Kazanszkij reakció

gázmaszkokat fejlesztett ki. 1916-ban 15 millió gázmaszkot szállítottak a hadseregnek.

1917-ben Zelinszkij családjával együtt visszatért Moszkvába és az egyetemre mint a szerves kémia professzora. Rövidesen a forradalom és a polgárháború lehetetlenné tette a munkát. Következő jelentős munkája – egy újabb kémiai folyamat, amely nevét viseli – csak 1924-ben került publikálásra. Tanítványa, Kazanszkij közreműködésével kimutatta, hogy aktívszén katalizátoron az acetilén aromás vegyületek szintézisére használható. (7. ábra)

Javasolta Pd és Pt katalizátorok alkalmazását aktívszén felületen (Berichte, 1924, 57, 667–669), ami laboratóriumokban az egyik legelterjedtebb módszerré vált. Alkalmazásával bemutatta ciklopentán származékok változatos reakcióit hidrogén

áramban 225–300 °C hőmérsékleten (Berichte, 1931, 64, 183–188). (8. ábra)

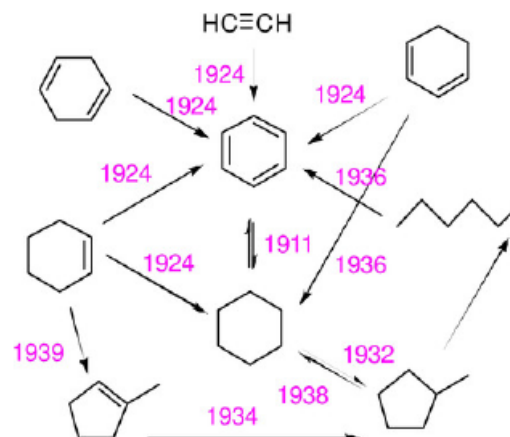
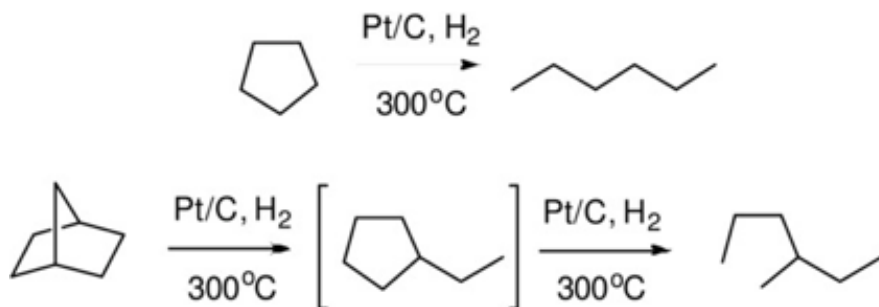
A Zelinszkij által végzett hidrogénezési reakcióról az alábbi ábra nyújt áttekintést a publikációk évszámának feltüntetésével. (9. ábra)

Zelinszkij neve nem csak számos szerves kémiai reakcióval függ össze, hanem felfedezője és megteremtője a heterogén katalízis alapjainak. Ez nagy hatással volt a kőolaj finomítás alapvető folyamataira. Katalízissel kapcsolatos elmélete még a kémia klasszikus fogalmait használta. A fizikai szerves kémia megjelenésével Zelinszkij elméleteit tanítványa Aleksej Balandin fejlesztette tovább (a katalízis multiplet elmélete).

Zelinszkij kitűnő tudós és szervező volt. Több száz tanítványa közül kiemelkedik Alekszander Nyeszmejanov, az Elemorganikus Kémiai Intézet megalapítója, a Szovjet Tudományos Akadémia későbbi elnöke.

Simonyi Miklós

8. ábra Ciklopentán hidrogénezése és termékei



9. ábra Zelinszkij reakciói évszámokkal



Nyikolaj Zelenszkij és tanítványa Aleksej Balandin



Kutyák gázálarcban az első világháborúban.

VANNAK -E atomi pályák molekulákban?

Ismeretes, hogy a különböző anyagok molekulákból, a molekulák pedig atomokból állnak. Minden atom egy pozitív elektromos töltésű atommagból és egy vagy több negatív töltésű elektrontól áll. Az elektron töltése az elemi negatív töltés, míg a mag töltése pozitív, nagyságát tekintve az elektron töltésének egészszámú többszöröse, pontosan annyiszorosa, ahány elektron van az atomban. Így lesz a teljes atom elektromosan semleges.

Azt a rendkívül fontos természet-törvényt, amely szerint az atom rendszáma (a Mengyelejev-féle periódusos rendszerben elfoglalt helye) egyenlő az elemi töltésségeikben mért magtöltéssel (és az atomban lévő elektronok számával), egy méltánytalanul majdnem teljesen elfelejtett, *Antonius van den Broek* (1870–1926) nevű holland közjegyző és amatőr fizikus ismertette fel 1913-ban, nem sokkal azután, hogy Rutherford felfedezte az atommagot¹.

Az atomot alkotó részecskék egészen másként viselkednek, mint a hétköznapi, megszokott (makroszkópikus) tárgyak, egészen más mechanika – az ún. kvantummechanika – vonatkozik rájuk. A XX. század húszas éveinek egyik nagy fizikai felismerése volt az, hogy az elektronok vagy más mikrorészecskék esetében egyszerűen nincs értelme arról beszélni, hogy a részecske egy adott pillanatban a tér egyik adott pontjában van

AZ ELEMEK PERIÓDUSOS RENDSZERE		p-elemek							
		III	IV	V	VI	VII	0		
relatív atomtömeg — 26,98									
vegyjel — Al									
rendszer — 13		az elektronok eloszlása az energiaszinteken							
Alumínium									
d-elemek									
III		IV	V	VI	VII	VIII	VIII	I	II
LANTANOIDÁK		f-elemek							
AKTINOIDÁK									

A periódusos rendszer

s adott sebességgel mozog egy meghatározott irányba. Ennek megfelelően a Newton-féle mechanika egyenletei, amelyek makroszkópikus esetben azt írják

Sajnos tudomásul kell venni, hogy a mikrovilág történéseit nem lehet szemléletes képekkel leírni

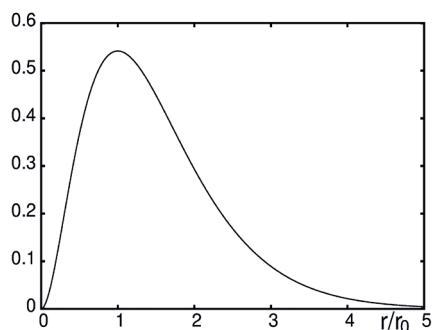
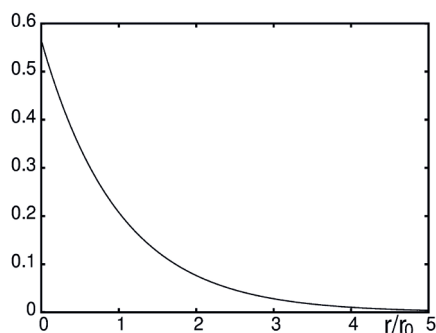
le, hogy hogyan – milyen erők hatására, milyen pontokon keresztül s miként változó sebességgel – jut el egy test az egyik pontból a másikba, nem érvénye-

sek a mikrorészecskékre, amelyeknek így nincs klasszikus értelemben vett pályája. Általában arra a kérdésre nem tudunk válaszolni, hogy a mikrorészecske „most hol van”, csak arra, hogy milyen valószínűséggel található a tér ebben vagy abban a részében. (Persze a részecske valahol csak van, úgyhogy a valószínűségek összege egyet kell adjon.) A valószínűség eloszlását, és általában a részecskék viselkedését egy elég furcsa matematikai konstrukció, a hullámfüggvény írja le, amely az ún. Schrödinger-egyenletnek tesz eleget. A legegyszerűbb esetben a részecske hullámfüggvényének négyzet² adja meg annak valószínűségét, hogy a részecskét az adott pont közelében találjuk, s adott esetben ez a



valószínűség hogyan változik az időben. A hullámfüggvény esetleges előjelváltásai a valószínűségekben közvetlenül nem jelennek meg, de a rendszer viselkedése szempontjából igen fontos információt hordoznak, úgyhogy az előjeltől nem lehet eltekinteni...

Mi most csak az elektronokkal fogunk foglalkozni, a magokat az egyszerűség kedvéért rögzített pontszerű töltéseként kezeljük³. A legegyszerűbb atomban, a hidrogénatomban a hullámfüggvény is viszonylag egyszerű. Különösen



A hidrogén alapállapotú elektron-hullámfüggvénye a magtól való távolság függvényében, illetve az elektronnak az adott sugarú gömbhéjban való tartózkodási valószínűsége

igaz ez a legalacsonyabb energiájú ún. alapállapotra, amire a ψ hullámfüggvény arányos az $\exp(-r/r_0)$ függvénnyel, ahol r az elektronnak a magtól való távolsága, $r_0 = 0.529177\text{Å}$ pedig az ún. Bohr-féle rádiusz, vagy „atomi távolságegység”⁴.

Az $\exp(-r/r_0)$ függvény a magnál ($r = 0$) a legnagyobb. Azonban félreértés lenne azt hinni, hogy a hidrogénatom elektronját legnagyobb valószínűséggel a

mag közelében találjuk. Ez ugyanis függ attól is, hogy adott r távolsághoz mekkora térrész tartozik, s ez r növekedésével növekszik (arányos az r sugarú gömb $4r^2\pi$ felületével), úgyhogy a tartózkodási valószínűség az $r = r_0$ távolságnál a legnagyobb. Ezzel kapcsolatban érdekes lehet megjegyezni, hogy még a kvantummechanika létrehozása előtt Bohr és Sommerfeld megkísérelték az atomok kísérletileg megfigyelt viselkedését úgy leírni, hogy a Naprendszer analógiájára a mag körül keringő elektronokat tételezték fel, de a klasszikus mechanika egyenletei mellé bizonyos plusz feltételeket vezettek be. Ennek az elméletnek értelmében a hidrogénatomban a lehetséges legalacsonyabb energiájú elektronpályára éppen egy r_0 sugarú körpálya adódott – innen a Bohr-féle rádiusz elnevezés. Ez a kapcsolat vezethetett ahhoz a szóhasználatához, hogy a kvantummechanikában az egyetlen elektron koordinátáitól függő hullámfüggvényeket többnyire szintén *pályáknak* nevezük, így beszélünk atompályákról, molekulapályákról, stb. Mi is *ebben az értelemben fogjuk használni a pálya szót* a továbbiakban.

Mint láttuk, a hidrogén alapállapotának hullámfüggvénye csak az r távolságtól függ, attól nem, hogy milyen irányban van az elektron a magtól, vagyis ez egy gömbszimmetrikus elektronpálya (a pálya szó fent említett értelmében). Azonban irányfüggő (szögfüggő) pályák is gyakran előfordulnak. A gömbszimmetrikus pályákat *s-pályáknak*, a fokozatosan komplikáltabb alakú pályákat rendre *p-*, *d-* és *f-pályáknak* nevezik; e jelöléseknek különösebb értelme nincsen, történelmi eredetűek, és bizonyos spektrumvonalak korai elnevezéséből származnak. A hidrogénatom alapállapotát leíró pályát *1s* pályának nevezzük, míg a lehetséges magasabb energiájú – de szintén gömbszimmetrikus – pályák jelölése *2s*, *3s*, stb. Vannak az *egyelektronos* hidrogénatom Schrödinger-egyenletének szögfüggő gerjesztett megoldásai is, ezekre a *2p*, *3p*,... *3d*, *4d*,... stb. jelöléseket használjuk. Az atompá-

lyák jelölésében szereplő szám nem egyszerű sorszám, hanem az ún.

„főkvantumszám”, ami nem lehet kisebb 2-nél egy *p*-típusú, 3-nál egy *d*-típusú pálya esetén, stb. A főkvantumszám egyúttal jellemzi a pályák energiáját is, a hidrogén speciális esetében igaz, hogy a *2s* és *2p* pályák energiája, ill. a *3s*, *3p* és *3d* pályák energiája egyforma.

Egyelektronos rendszerek esetén a hullámfüggvény elsősorban az elektron három térbeli koordinátájától függ. (Ezek lehetnek az *x*, *y*, *z* Descartes-koordináták, vagy pl. a magtól való r távolság és a relatív elfordulást leíró két szög.) Bizonyos esetekben figyelembe kell venni egy negyedik változót is, amit az elektron „*spinjének*” neveznek. Ennek klasszikus analógiája az elektronnak a saját tengelye körül való forgása lehet (to *spin* = pörögni, forogni), de ez a szemléletes kép ugyanannyira tökéletlen, mint amennyire távoli az analógia a mag körüli zárt klasszikus pálya ill. az atom környezetében *kiterjedt „elektronfelhőt”* leíró hullámfüggvény között. (Sajnos a mikrovilág történéseit nem lehet szemléletes képekkel leírni.)

Az elektron spinje kétféle értéket vehet fel, ezeket leginkább „*felfelé*” és „*lefelé*” mutató spineknak szokták nevezni – ezek klasszikus megfelelője az lenne, hogy az óra járásával megegyező vagy ellentétes irányba forog-e az *elektron*. Míg egyelektronos rendszerek esetén a *spin* csak ritkán (pl. mágneses tér jelenlétében) kell figyelembe venni, többelektronos rendszerek esetén nagyon fontossá válik.

Egynél több elektront tartalmazó rendszerek hullámfüggvénye matematikailag sokkal komplikáltabb, mint az egyelektronos rendszereké. Egy kételektronos rendszer hullámfüggvénye már 8 mennyiségtől függ: mindkét elektronhoz tartozik három térbeli koordináta, és mindkettőnek lehet kétféle spinje. Vannak még további komplikációk is. A tapasztalat szerint ugyanis minden elektron (és hasonlóan minden proton, neutron, szén-atommag, stb.) tökéletesen egyforma és egymástól megkülön-

böztethetetlen. Ez azt jelenti, hogy csak nagyon feltételesen lehet arról beszélni, hogy „az első elektron” és a „második elektron” – inkább csak azt lehet mondani, hogy „az egyik elektron” és „a másik” elektron. Ez azt jelenti, hogy ha két elektront felcserélünk egy rendszerben, valójában semmi, de semmi nem változik. Az ember arra számítana, hogy ha a hullámfüggvényben felcserélünk

vált. Mivel a valószínűségeket a hullámfüggvény (abszolút értékének) négyzete határozza meg, ez az előjelváltás természetesen semmiféle fizikai különbséggel nem jár. Ugyanakkor ez az előjelváltással kapcsolatos tulajdonság – vagy, ahogy mondani szokták, a hullámfüggvénynek az elektronok felcserélésére vonatkozó „antiszimetriája” – rendkívül messzemenő következményekkel bír

szerek hullámfüggvénye nem írható le úgy, hogy minden elektronhoz egy-egy elektronállapotot rendelünk – szigorúan véve ez csak akkor lenne lehetséges, ha az elektronok csak az atommaggal (atommagokkal) hatnának kölcsön, de egymással nem. Egy ilyen jellegű leírás azonban elég jó, s számos célra megfelelő közelítés is lehet. Ehhez az kell, hogy az elektronok közötti kölcsönhatást bizonyos értelemben „kiátlagolva”, de figyelembe vegyük. Ezt úgy kell elképzelni, hogy minden elektron mozgását az atommag(ok) és a többi elektron *átlagos* terében vizsgáljuk, vagyis elhanyagoljuk azt, hogy ha az egyik elektron „itt” van, akkor a másik elektron – a köztük lévő taszítás miatt – egy kicsit nagyobb valószínűséggel valahol „ott” lesz.⁵

A fenti közelítésben – ezt Hartree-Fock módszernek nevezik – a bonyolultabb atomok elektronszerkezete a hidrogénatomra kapott megoldásokhoz hasonló $1s$, $2s$, $2p$, stb. függvényekkel írható le, Minden atomnál az $1s$ pálya a legmélyebb energiájú, de más pályák is be vannak töltve. Azonban, a hidrogéntől eltérően, a többi atomra olyan szabályszerűségek érvényesek, hogy az s -típusú pályák energiája alacsonyabb mint az ugyanolyan főkvantumszámú p -pályáké, s a d -pályák energiája még nagyobb... Így az elektronpályák a rendszám növekedésével fokozatosan töltődnek be. A hidrogénél és a héliumnál az $1s$ pálya töltődik be, azután kerül egy ill. két elektron a $2s$ pályára (lítium és berillium), majd fokozatosan betöltődnek a $2p$ pályák is – bór esetén csak egy, neon esetén már hat p -elektron van. Majd megkezdődik a $3s$ ill. $3p$

Próbáljunk konstruálni egy olyan kételektronos hullámfüggvényt, amiben az egyik elektron a $\varphi(x, y, z)$, a másik a $\psi(x, y, z)$ állapotban van. Legyenek „az első” elektron koordinátái x_1, y_1, z_1 , „a másodiké” x_2, y_2, z_2 . Az első ötlet a kételektronos rendszer hullámfüggvényére a $\text{Const}[\varphi(x_1, y_1, z_1) \psi(x_2, y_2, z_2)]$ alak lenne, de az nem vált előjelet a két elektron felcserélésére. Könnyű belátni, hogy a

$$\text{Const}[\varphi(x_1, y_1, z_1) \psi(x_2, y_2, z_2) - \varphi(x_2, y_2, z_2) \psi(x_1, y_1, z_1)] \quad (1)$$

alakú hullámfüggvény már előjelet vált. Mi következik ebből? Lehet-e pl. két elektron ugyanabban az állapotban? Nyilvánvalóan nem, hiszen $\varphi = \psi$ esetén a felírt hullámfüggvényben a két tag csak a szorzótényezők sorrendjében különbözik, s mivel az előjel ellentétes, a hullámfüggvény „eltűnik” (mindenütt nullával egyenlő). Itt jön be a spin: ha a két elektron ugyanabban a *térbeli* állapotban van, de a spinjük irányítása ellentétes, akkor a hullámfüggvény

$$\text{Const}[\varphi^\alpha(x_1, y_1, z_1) \varphi^\beta(x_2, y_2, z_2) - \varphi^\alpha(x_2, y_2, z_2) \varphi^\beta(x_1, y_1, z_1)] \quad (2)$$

alakúvá válik, ahol φ^α -val az egyik irányú, φ^β -val a másik irányú spinnek megfelelő, egyébként azonos függvényeket jelöltük. Ez a hullámfüggvény már nem tűnik el. Ezzel megkapjuk a hullámfüggvény antiszimetriájának (az ún. Pauli elvnek) egy szemléletes – és eredetileg a kísérleti atomspektrumok vizsgálatából származó – megfogalmazását: egy (térbeli) elektronállapotban legfeljebb két elektron lehet, s ez utóbbi esetben a spinjük ellentétes irányú kell, hogy legyen.

két egyforma részecskét, akkor a hullámfüggvénynek nem szabad megváltoznia. Ez így is van bizonyos részecskék esetén, de az elektron nem ilyen. Elektronok esetén a hullámfüggvény két elektron felcserélésére mindig *előjelet*

abban a tekintetben, hogy milyenek is lehetnek a többielektronos rendszerek hullámfüggvényei. Ezzel kapcsolatban nyilvánul meg a spin-tulajdonságok jelentősége is.

A valóságban a többielektronos rend-



2s **2p_x** **2p_y** **2p_z**
A szénatom négy „vegyértékpályája”: 2s, és három egymásra merőleges 2p; a piros és kék színek ellentétes előjelű pályarészeket jelölnek



pályák betöltődése is... Ezt követően azonban kicsit felbomlik a látszólag egyszerű sorrend, mert a $3d$ és a $4s$ elektronok energiája összemérhetővé válik s ez határozza meg az ún. átmeneti fémek tulajdonságait.⁶

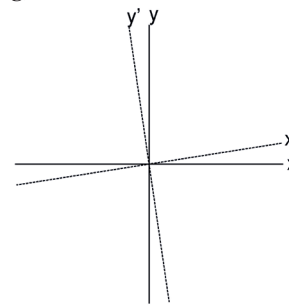
Molekuláknál is alkalmazható a Hartree-Fock módszer.⁷ Ilyenkor az elektronok atompályák helyett „molekulapályákra” kerülnek; ezek általában több atom környezetére – esetleg az egész molekulára – kiterjednek. Természetes annak a kérdésnek a felvetése, hogy vajon milyen kapcsolat is van egy molekula molekulapályái és a molekulát alkotó atomok atompályái között. A legelső – még a számítógép megjelenése előtt kézzel végzett – számítások idején az egyes szabad atomok pályáiból indultak ki, és ezeket kombinálták össze, hogy a Hartree-Fock egyenletek megoldásait közelítsék. Ha pl. a H_2 molekulában a molekulapályát egyszerűen a két atom atompályáinak összegével közelítjük⁸, s arra tesszük a két elektront ellentétes spinnel, akkor már rögtön számot tudunk adni a kémiai kötés jelenségéről: a kétatomos rendszer energiája alacsonyabbnak adódik, mint két szabad hidrogénatom energiájának összege. És egy matematikai tétel garantálja, hogy az atomok szétválasztásához befektetendő energia (az ún. disszociációs energia) nem lehet kisebb, mint a közelítő számításban kapott érték.⁹ Később már nem a szabad atomok pályáit használták, de a legtöbb számítás során máig megmaradtak amellet, hogy a molekulapályákat az „atompályák lineáris kombinációjaként” írják le, abban az értelemben, hogy a számításokban az egyes atomokhoz rendelt – és az atomok elrendezésének kisebb nagyobb változásainál az atommagokkal együtt mozgó – „bázisfüggvényeket” használnak. Különböző technikai okok miatt egyre több és több függvényt használnak minden atomon, így egyre jobban tudják közelíteni a Hartree-Fock egyenletek pontos megoldásait. De ha egy jó közepes minőségűnek nevezhető rutinszámolásban egy hidrogénatomon mondjuk 14

ilyen segéd-pálya (bázispálya), egy szén- vagy oxigénatomon pedig 30 pálya szerepel, akkor – úgy tűnhet – teljesen elvész bármilyen kapcsolat azzal a képpel, hogy a hidrogén szerkezetét egyetlen $1s$ pályája határozza meg, az oxigénatomnak pedig 5 pályája van betöltve ($1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$). Ugyanakkor a kémikusok kvalitatív érvelése nagyon gyakran épp az eredeti atompályák tulajdonságain alapul, és a különböző molekuláknak nagyon sok tulajdonságát lehet megjósolni – de legalábbis értelmezni – épp az atompályák által meghatározott fogalomrendszer segítségével. Végző soron a periódusos rendszer kémiai értelmezése is azon alapul, hogy hasonló – és hasonló módon betöltött – atompályákkal rendelkező atomok kémiai tulajdonságai is hasonlóak. Kérdés az, hogy hogyan lehet az atompályákra vonatkozó klasszikus elképzeléseket fogalmilag összekötni a modern számítások eredményeivel? Különösen élesen vetődik fel ez a kérdés az olyan számítások vonatkozásában, amelyekben egyáltalán nem vesznek fel az egyes atomokhoz tartozó függvényeket. Ezeket az ún. „síkhullám-számításokat”, ha a bonyolult matematikai formalizmust lehántjuk, lényegében úgy tekinthetjük, hogy a molekula környezetében minden irányban felveszünk sok-sok, egymástól egyforma távolságra lévő pontot, és a molekulapályákat az ezekben a pontokban felvett számértékükkel közelítjük.

Általában van egy bizonyos személeti ellentét a molekulák kémiai leírása („a molekula egymással kötésekkel alkotó atomokból áll”) és fizikai leírása („a molekula egymással kölcsönható atommagokból és elektronokból áll”) között. Ennek egyik megnyilvánulása volt az, hogy lényegében elveszett az atompályák és molekulapályák közötti szoros kapcsolat, ahogy a számítások egyre jobbak, de eredményeik szemléletesen egyre nehezebben áttekinthetővé váltak. Ezért érdemes röviden beszámolni a szerzőnek azokról a kutatási eredményeiről, amelyek a különböző molekulákra végzett számítások eredményeinek utólagos

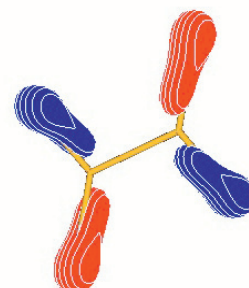
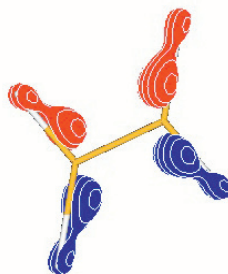
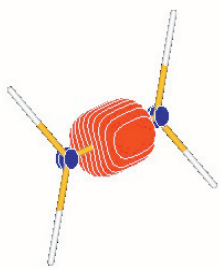
analízisével lehetővé tették egyfajta „effektív” atompályák bevezetését, és a molekulán *belül* is kitüntetett szerepet játszó atompályák képének bizonyos módosítással való helyreállítását. A módosítás szó itt azt jelenti, hogy nem a szabad atomok eredeti pályáihoz jutunk vissza, hanem kimutatjuk, hogy az eredeti atompályák a molekula képződése során kisebb-nagyobb torzulást szenvednek, s esetleg „összekeverednek” – ún. „hibrideket” alkotnak. (Az ilyen „összekeveredés” legegyszerűbb esete, ha két atompálya helyett összegük és különbségük jelenik meg, de felléphetnek három vagy négy pálya bonyolultabb kombinációi is.)

Ahhoz, hogy megértsük, milyen utólagos analízisről van is szó, ki kell térni a vizsgált hullámfüggvényeknek még egy érdekes – sőt meglepőnek tűnő – tulajdonságára. Amikor elvégzünk egy Hartree-Fock (vagy hasonló) számítást, akkor kapunk ennyi és ennyi molekulapályát, és mondhatjuk, hogy a molekula tulajdonságait az határozza meg, hogy ezek mindegyikét két ellentétes spinű elektron tölti be. Például, minden molekulapályához tartozik egy elektronsűrűség, amit – a korábbiakban mondtak-



Elforgatott tengelypár

kal összhangban – úgy kapunk meg, hogy minden pontban vesszük a molekulapálya függvényértékének a négyzetét, és megszorozzuk kettővel – mivel a molekulapályán két (ellentétes spinű) elektron van. A molekula teljes elektronsűrűsége valóban ezeknek az egyes pályákhoz tartozó elektronsűrűségeknak az összegeként adódik. A molekula tulajdonságainak ez az egyértelmű meghatározottsága



sigma1

Az etilén néhány hagyományos (kanonikus) delokalizált molekulapályája

sigma3

sigma5

azonban egy csalóka – és sokszor a kutatót is tévútra vezető – látszat. Ugyanis a pályák maguk nincsenek egyértelműen meghatározva: a molekulának *ugyanazt a sokelektronos hullámfüggvényét* számtalan különböző pálya-készlettel is meg lehet adni, és a molekula tulajdonságait csak a sokelektronos hullámfüggvény, és nem az egyes pályák határozzák meg. Hogy **miként lehetséges ugyanazt a több-**elektronos hullámfüggvényt többféle pálya-készlettel is megadni, azt az (1) egyenlet vizsgálatával lehet egyszerűen illusztrálni. A rövidség kedvéért írjunk az x_1, y_1, z_1 argumentumok helyett 1 -et, és az x_2, y_2, z_2 argumentumok helyett 2 -öt. Akkor a hullámfüggvény tömören a $Const\{\varphi(1)\varphi(2) - \varphi(2)\varphi(1)\}$ alakban írható fel. Most helyettesítsünk be a ψ pálya helyére mindenütt $\psi + a\varphi$ -t, ahol a egy tetszőszerinti szám. Kapjuk a

Látható, hogy a második és a negyedik tag kiejti egymást, és visszacapjuk a hullámfüggvény eredeti kifejezését. Vagyis a betöltött egyelektronos pályák „összekeverése” (esetünkben a ψ pálya felcserélése a $\psi + a\varphi$ pályára) nem változtatja meg a két- vagy többelektronos hullámfüggvényt. A hullámfüggvényt a φ és ψ pályák *együttese* határozza meg, és az eredeti pályák helyett különböző kombinációik is használhatók. Ez képletesen olyan, mint pl. az, hogy a papír síkját egyformán jól meghatározza („kifeszíti”) az x és y tengely-pár vagy a síkban elfordított x' és y' tengely-pár (lásd az ábrát az előző oldalon).

Hasonlóan, a **hullámfüggvényt is egyértelműen meghatározza az, milyen kombinációkat lehet konstruálni az adott pálya-készletből, azaz, hogy „milyen teret feszítnek ki”.** A hullámfüggvény nem változik, ha az eredeti pályák helyett bármilyen

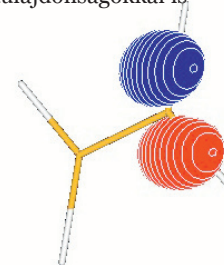
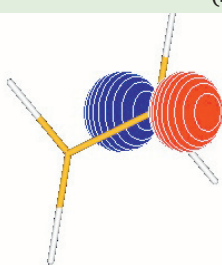
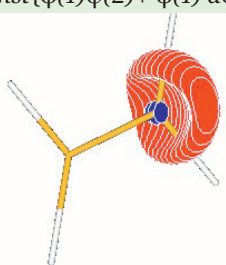
másik olyan pálya-készletet használunk, amelyek „ugyanazt a teret feszítik ki”, vagyis az eredeti pályák kombinációiként írhatók fel és bizonyos kiegészítő feltételeknek is eleget tesznek.¹⁰

A szerző az atompályákkal való kapcsolatot vizsgálatára a következő eljárást javasolta. Határozzuk meg azt, hogy egy-egy molekulapályának mekkora része van az adott atom környezetében. Keressük meg azt a molekulapályát, amelyik az adott atomon a legnagyobb mértékben „lokalizálódik”, illetve a következő legjobban lokalizálódót, és így tovább. A számítások során azt a nagyon érdekes jelenséget figyeltük meg, hogy minden hagyományos szerkezetűnek tekinthető molekulában pontosan annyi molekulapálya lokalizálható az egyes atomokon, ahány atompályáról szoktak beszélni a klasszikus kvalitatív leírásokban – egy a hidrogéneken, öt a széneken, nitrogéneken, oxigéneken, fluoron, kilenc a következő sor elemeinél, stb.¹¹ Ha ezeknek a molekulapályáknak vesszük az adott atomhoz tartozó részét, akkor „effektív” atompályákat kapunk, amelyek még bizonyos nagyon hasznos matematikai tulajdonságokkal is

$$Const\{\varphi(1) [\psi(2)+a\varphi(2)] - \varphi(2) [\psi(1)+a\varphi(1)]\} \quad (3)$$

kifejezést, ami a zárójelek kinyitása után a következő eredményt adja:

$$Const\{\varphi(1)\psi(2)+\varphi(1) a\varphi(2) - \varphi(2)\psi(1) - \varphi(2) a\varphi(1)\}. \quad (4)$$

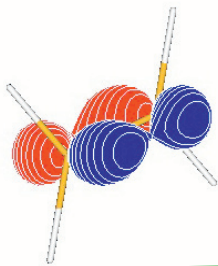


C-2s

Az etilén egyik szénatomjának négy „effektív” atomi vegyértékpályája

C-Pi

C-p_y



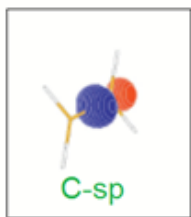
Pi

rendelkeznek: a szabad atom pályáihoz hasonlóan ún. ortogonális rendszert alkotnak. Tehát a hullámfüggvények utólagos analízise lehetővé teszi, hogy megkapjuk az atomok „effektív minimális bázisát”, vagyis azokat az atompályákat, melyek a szabad atomok pályáitól ugyan némileg eltérnek, de azokkal közvetlen kapcsolatba hozhatók.

Elvi szempontból nagyon fontosnak tűnik, hogy ezt az „effektív minimális bázist” akkor is megkapjuk, ha a számolásokat a „síkhullám módszerrel” végezzük, vagyis a számítások során nem használunk fel semmilyen – az egyes atomokhoz köthető és az atommagok köré koncentrálandó – segéd-függvényt (bázis-függvényt).

Eredményeink azt mutatják, hogy az a kvalitív kép, amit a vegyész használ, amikor a molekulák elektronszerkezetét elképzeli, tökéletesen igazolható a modern számítástechnikával kapott bonyolult számítási eredmények alapján is – éppen csak azt ki kell tudni hámozni belőlük.

Utólagosan azt mondhatnánk: ennek így is kell lennie, mert különben a periódusos rendszer nem lenne alkalmas az elemek kémiai tulajdonságainak rendszerezésére...



Az írás megjelent a magazin 7. számában 2011-ben

Mayer István
1943-2020

* Jegyzetek:

1. Van den Broeknek a Nature-ben megjelent cikkét Moseley még idézte 1913-ban, megemlítve, hogy a különböző atomok jellegzetes röntgensugárzására kapott eredményei lényegében kísérletileg igazolták van den Broek feltevezését. Azonban Moseley nem sokkal később fiatalon elesett az első világháborúban, és Rutherford ezután mindíg csak elvesztett szeretett munkatársa, Moseley eredményét emlegette, s van den Broek szerepe feledésbe ment.
2. Pontosabban abszolút értékének négyzete. Ez azért érdekes, mert a hullámfüggvény értéke „komplex szám” is lehet.
3. Ezt az ún. Born–Oppenheimer közelítés teszi lehetővé, amelynek keretében először vizsgáljuk az elektronok mozgását a fixált magok terében, és csak ezt követően – a kapott eredményeket felhasználva – foglalkozunk, ha kell, a magok mozgásával.
4. Az \exp jelölés az $e=2.71828\dots$ szám hatványait jelöli, 1 Ångstrom (Å) = 10^{-8} cm.
5. Ezt nevezik „elektronkorrelációnak”, aminek figyelembevétele fontos, ha pontos energiaértékekre, stb., vagyunk kíváncsiak, de nem szükséges ahhoz, hogy többé-kevésbé szemléletes képet alkossunk az atomok és molekulák elektronszerkezetéről.
6. Az átmeneti fémeknél – a szkandiumtól a rézig – többnyire a 4s pálya töltődik be előbb, és fokozatosan több elektron kerül a 3d pályákra. Hasonló a helyzet a magasabb rendszámú átmeneti fémeknél, míg az ún. ritkaföldfémeknél és aktinidáknál (ezek a periódusos rendszer külön sorai-ban szerepelnek) már f-típusú pályák fokozatos betöltődésére kerül sor.
7. A Hartree-Fock módszer egyenletei nem oldhatók meg egzaktul (tökéletes pontossággal), de igen jó közelítő módszerek állnak rendelkezésre. Ezek függnek a vizsgált rendszertől, a megkívánt pontosságtól és persze a rendelkezésre álló számítási kapacitástól. A mai számítógépekkel – nem túl nagy rendszerekre – már gyakorlatilag pontos megoldások állíthatók elő. A legtöbb esetben a pályákat úgy közelítjük, hogy meghatározott szempontok alapján felvesszünk előre kiválasztott, fixált alakú függvényeket – ezek az ún. bázisfüggvények – és a pályákat ezek összegeként írjuk fel, s az összegben szereplő együtthatók lehető legjobb értékét keressük meg.
8. A gyakorlatban ezt az összeget még meg kell szorozni egy ún. normáló tényezővel, hogy a molekulapályán lévő elektronnak az egész térre vett tartózkodási valószínűsége éppen 1 legyen.
9. Még az 1960-as évek végén végeztek nagyon pontos (az itt tárgyalttól eltérő matematikai módszereket alkalmazó) számításokat a H_2 molekula disszociációs energiájára, és meg is kapták a kísérleti eredményt mintegy 1:6000 relatív pontossággal. Azonban hiába volt a kiváló egyezés, úgy tűnt, hogy valami baj van: a bármilyen jó, de mégis közelítő számított disszociációs energia volt a nagyobb, és nem a kísérleti. Ennek az lett a hatása, hogy építettek egy, a korábinál sokkal nagyobb felbontású műszert, és pontosították a kísérletet. Ezt követően a számított és mért értékek közötti eltérés ismét kb. ugyanakkora lett, de már „a jó irányba” mutatott.
10. A pályáknak „az adott téren belül” való kiválasztásában meglévő szabadságot régóta használják olyan céllal, hogy a számítási eredményeket közelebb hozzák a vegyületek szokásos „szerkezeti képletéhez”. A számításban ugyanis általában olyan pályákat kapunk, amelyek a molekula egészének leírására alkalmasak, s így többnyire a molekula egészére kiterjednek; ha lokális tulajdonságokat (pl. egy atom-pár közötti kémiai kötést) akarunk vizsgálni, akkor a különböző „lokalizált pályák” – melyek ugyanazt a sokelektros hullámfüggvényt adják – sokkal alkalmasabbak lehetnek.
11. Ezeket a számokat úgy kapjuk meg, hogy ha a szabad atomban legalább egy p-típusú pálya be van töltve, akkor a molekulában mind a három azonos főkvantumszámú p-pályát figyelembe kell venni.



A bakteriális kommunikáció gátlása ciklodextrinekkel

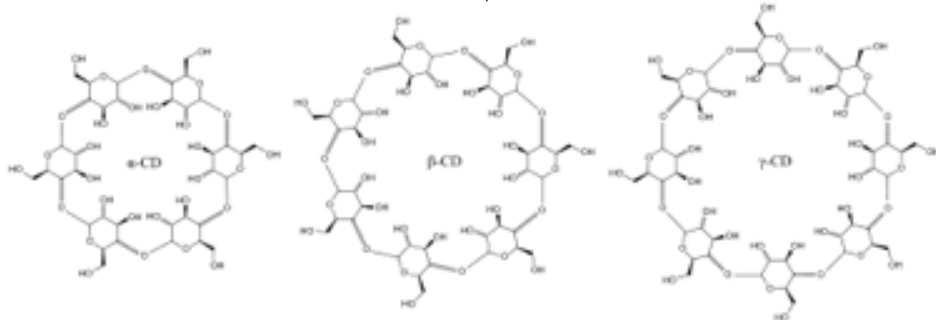
A bakteriális kommunikáció vagy másként kvórum érzékelés lényege a következő: bizonyos baktériumok kis mennyiségben változatos felépítésű jelmolekulákat (szignálmolekulákat, szignálokat) termelnek, amelyek folyamatosan, külön energiabefektetés nélkül – tehát passzív transzporttal – áramlanak a sejten kívüli térbe. Emellett rendelkeznek a jelmolekulák befogására specializálódott receptor fehérjékkel, amelyekhez a szignálmolekulák reverzibilisen kötődhetnek. A kötődések létrejötte serkenti az újabb jelmolekulák termelését, tehát ha egy baktérium az általa megkötött szignálok révén érzékeli, hogy a közelében további baktériumok találhatóak, elárasztja a közvetlen környezetét saját jelmolekuláival, így szorgalmazva az együttműködés létrejöttét. Ha az adott élőhelyen a baktériumközösség felszaporodott, az általuk leadott jelmolekulák környezeti koncentrációja is nagy lesz, tehát a legtöbb receptorukhoz nagy eséllyel jelmolekula fog kapcsolódni, azaz a receptorok telítődnek. Ha a telítődés eléri a küszöbértéket, a populációban élő baktériumok genetikai állományában egyes cél gének átíródnak, ezáltal pedig a mikroorganizmusok fizikai megjelenésében és viselkedésében változás történik. Ennek a változásnak a jellege attól függ, hogy az átíródás

Az 1960-as évek vége óta ismert, hogy a túlélés és az állandóan változó környezeti feltételekhez való gyors alkalmazkodás érdekében a baktériumok képesek egymással kapcsolatot teremteni és kvázi többszintű szervezatként összehangoltan együttműködni.

nyomán megváltozott gén a baktérium mely tulajdonságát – pigment termelését, fénykibocsátását, biofilm képzését, kolonizációs képességeit vagy spóráképzését – kódolja.

(...) A baktériumok közötti kommunikáció mesterséges befolyásolására számos megoldás áll rendelkezésünkre. A cél minden esetben az, hogy oly módon szorítsuk vissza az együttműködést, hogy közben ne tegyünk ki stresszhatásnak a baktériumokat, így megelőzzük az antitestek termelését és az alkalmazott módszerrel szemben ellenállóképesség (rezisztencia) kialakulását. Ezeket a szempontokat figyelembe véve lehetséges például a szignálmolekulák enzimes lebontása, a jelmolekulák termeléséért vagy a detektálásáért felelős enzimrendszer működésének akadályozása. Esetleg a szignálok helyettesíthetők olyan hasonló szerkezetű molekulákkal, amelyek elfoglalják a valódi jelmolekulák helyét a receptorokon, de funkciójukban nem helyettesítik azokat, vagy fizikailag megakadályozható a szignálmolekulák

receptorokhoz való kötődése is. Ez utóbbira kiváló példát szolgáltatnak a ciklodextrin (CD-k). Ezeket a gyűrű alakú glükóz egységekből (glükopiranoz egységekből) álló csonka kúp alakú cukormolekulákat keményítő hasításával állítják elő, amelyhez a ciklodextrin-glükozil-transzferáz (CGTáz) enzimet hívják segítségül. A molekulák külső felülete poláris (hidrofil), ami jó vízoldhatóságot biztosít számukra, belső üregük – amelynek mérete a glükopiranoz egységek számától függ – viszont az ott elhelyezkedő hidrogén atomok és glikozidos hidrogénhid-kötések miatt gyengén apoláris (hidrofób) jellegű. Három csoportba sorolhatjuk a ciklodextrineket az őket felépítő glükopiranoz egységek számától függően: az α -ciklodextrin hat, a β -ciklodextrin hét, a γ -ciklodextrin pedig nyolc glükóz egységből állnak, amelyeket glikozidos kötések kapcsolnak össze. Ebből következik, hogy az alap ciklodextrin közül a legkisebb belső átmérőjű és üregméretű az α -ciklodextrin, legnagyobb pedig a γ -ciklodextrin. A természetes ciklodextrin (α-, β-, γ-CD) kovalens kötésekkel való összekapcsolásával lineáris, térhálós vagy „csöves” szerkezetű polimerek, valamint a ciklodextrin gyűrűhöz különböző csoportok – például metil-, amino-, hidroxipropil- vagy szulfobutilcsoportok – kapcsolásával eltérő tulajdonságú származékok állíthatók elő. Ezeket, valamint az alap ciklodextrineket is széles körben alkalmazzák. A gyógyszeriparban a hatóanyagok biológiai



Ciklodextrin

<https://hu.wikipedia.org/wiki/Ciklodextrin#/media/F%C3%A1jl:Cyclodextrin.svg>

(Forrás: Wikipedia)

hozzáférhetőségének javítására, szteroid típusú hormonok előállítására és instabil, érzékeny vegyületek formulálására használhatók, pl. képkötő diagnosztikai eljárásokban a kontrasztanyagok komplexálására. Az élelmiszeriparban aromák, illetve illékony vagy könnyen bomló vegyületek stabilizálására használják, mivel a ciklodextrinek képesek megvédeni azokat a külső

hatásokkal szemben. Emellett a nem kívánatos anyagok – például az előállítás során természetesen keletkező, de kellemetlen íz- vagy illatanyagok – kapszulálásával az élelmiszeripari termékek minőségének javítására is alkalmasak. A kozmetikai iparban szintén a fent említett stabilizáló tulajdonságukat használják ki, például a különböző illóolajok eltarthatóságának növelése

érdekében. Ezen felül a ciklodextrineket a vegy-, gép-, textil- és csomagolóiparban, illetve a szennyvíztisztítás során is számos esetben használják toxikus és környezetszennyező adalékanyagok megkötésére.

Berkl Zsófia, Molnár Mónika, Gruiz Katalin, Fenyvesi Éva, Sente Lajos
(Részlet a BME - Élet és Tudomány cikkpályázatra készült írásból)

A kozmokémia fejlődési irányai

A csillagközi por összetételének vizsgálata nagyon fontos eleme a kozmokémiai kutatásoknak, különösen annak felismerése óta, hogy az intersztelláris porszemcsék felülete milyen fontos szerepet tölt be számos prebiotikus összetett molekula képződésében.

Az utóbbi évtizedek felfedezései számos eddig még megválaszolatlan kérdést is felvetettek a komplex szerves molekulák eredetét és asztrobiológiai vonatkozásait illetően. A kérdések vizsgálata erőteljes lökést adhat a jövőben is az ilyen tárgyú kutatások számára. A Naprendszer anyagának vizsgálata segíthet bolygórendszerünk kialakulásának és korai fejlődésének még pontosabb megértésében. Ezért az ilyen irányú kutatások minden bizonnyal fontos területei maradnak a jövőben is a kozmokémiának, s általuk nem csupán a Naprendszer megismerése terén gazdagodhat a tudásunk. Az ősi meteoritokban megtalálható anyagok behatóbb analízise során például részletesebben feltárhatjuk a Tejútrendszer kémiai evolúciójának a Naprendszer keletkezése előtti jellemzőit.

A Tejútrendszerben helyről-helyre változik a csillagközi anyag fémességtartalma (a héliumnál nehezebb kémia elemeket a



csillagászatban hagyományosan fémeknek nevezik). A csillagok belsejében bekövetkező magfizikai átalakulások következtében a kozmikus elemgyakoriság fokozatosan a magasabb rendszámú elemek felé tolódik el. Az intersztelláris anyag fémességtartalma, elemösszetétele kémiai szempontból nagy hatással van a bolygórendszerek keletkezésére, a bennük kialakuló bolygótestek ásványtani összetételére. A C/O arány például azért fontos, mert ez határozza meg, hogy a bolygók alapvetően szilikátos vagy szénben gazdag ásványi összetételűek lesznek-e,

ami pedig többek között a rajtuk esetlegesen megszülető élet fejlődési esélyeit is befolyásolja. A csillaglégkörök és az intersztelláris anyag nagyobb számú mintán végzett analízise révén számos új információval bővíthetnek még ismereteink nem csupán a bolygók keletkezéséről és kémiai összetételéről, de az élet bolygókon való megjelenésének és továbbfejlődésének esélyeiről is.

Futó Péter
(Részlet a Molekulák a világűrben című cikkből, Élet és Tudomány 2020/49. szám)

INZELT GYÖRGY: TERMÉSZETTUDOMÁNY HÁBORÚBAN ÉS BÉKEIDŐBEN

KÉMIKUSOK, TALÁLMÁNYOK, FELFEDEZÉSEK
TYPOTEX, BUDAPEST, 2020

A hosszú cím nem indokolatlan; a könyv sok mindenről szól, hírneves kutatókról a kémia, fizika, érintőlegesen az orvostudomány területéről, időben a 19. század békés

fejlődést hozó utolsó harmadáról, az I. Világháború idejéről és utóhatásairól, végül röviden a transzurán elemekről és ezzel kapcsolatban a II. Világháborúról. A könyv hihetetlen mennyiségű

ismeretanyagát legjobban a 17 oldalon felsorolt névtár közel 700 tétele jellemzi. Az olvasó számos helyen leckét kap történelemből.

Két fejezet tárgyal 18. századi eseményeket. Igen jelentős a szerző kutatásának eredménye Lomonoszov tudományos pályájáról, ami tabukat dönt le. Hasonlóképpen érdekes a Kitaibel Pálról szóló rész, amiben a tellúr felfedezésével kapcsolatos prioritási vita tárul fel. A leírást számos korhű rajz, szobor, vagy bélyeg képe teszi hitelessé.

Élvezetesek azok a részek, amelyekben felfedezhető a szerző személyes érdeklődése, élménye, ill. etikai normáinak érvényesülése. Eleven a Wilhelm Ostwald életének leírásáról szóló fejezet. A 93-ak manifesztuma – amiben 93 szakmai kiválóság 1914. októberében fenntartás nélkül támogatta Németország háborús céljait – szomorú bizonyítéka annak, hogy még a legkiválóbb elmék is megtagadhatják az emberiességet a vélt hazafiasság köntösében. De felsorolja azokat is, akik a manifesztumot nem voltak hajlandók aláírni. Igazi gyöngyszem a cherokee indiánok története, senki által nem ismert nyelve és írásmódja, amit a szerző a Tennessee Egyetemen tett tanulmányútja alkalmából ismert meg. A II. Világháborúban nagy jelentősége lett az indián nyelveknek. A navajo indián nyelvből lett az USA hadseregének titkos kódja, amit annak feloldásáig, 1968-ig senki nem tudott megfejteni.

Két fejezet magyar vonatkozású. Than Károly története a magyar tudományosság és oktatás kialakulásával kapcsolatos, míg a hazai vegyészeti iparok fejlődésével a kiegyezés utáni időszak leírása foglalkozik.

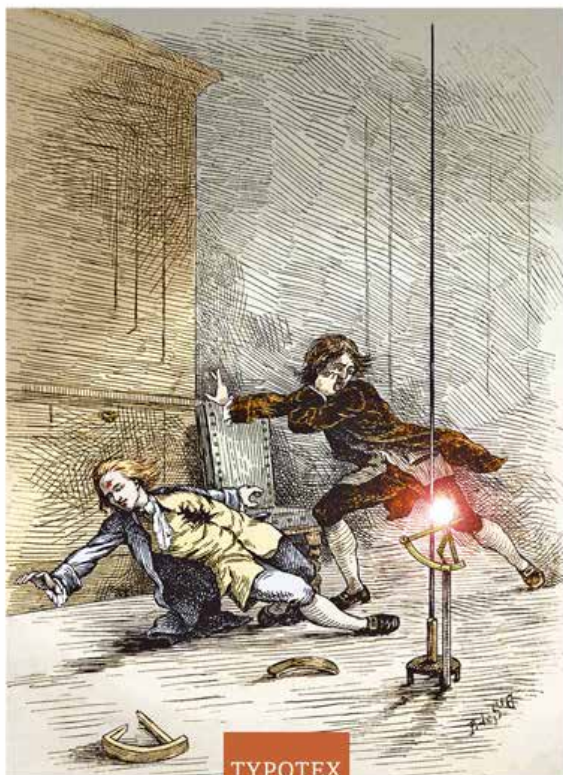
A könyv számos helyen lexikális felsorolásokat közöl, ami a témák iránt érdeklők számára új ismeretek forrásául szolgálhat.

Simonyi Miklós

TERMÉSZETTUDOMÁNY HÁBORÚBAN ÉS BÉKEIDŐBEN

KÉMIKUSOK, TALÁLMÁNYOK, FELFEDEZÉSEK

Inzelt György



TYPOTEX

Munkatársaink

Kémiai Panoráma

Felelős kiadó és főszerkesztő: Pálinkás Gábor
Szerkesztők: Simonyi Miklós, Gózon Ákos,
Tördelés-képszerkesztés: Szarka Bernadett Kiadja:
az ELKH Természettudományi Kutatóközpont
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.
e-mail: panorama@kemiaipanorama.hu
Honlap: www.kemiaipanorama.hu

