

A TARTALOMBÓL:

- Európa – történelmünk egy darabja, jelenünk és jövőnk
- Erdey László professzorról
- Verejték a színes ruhán

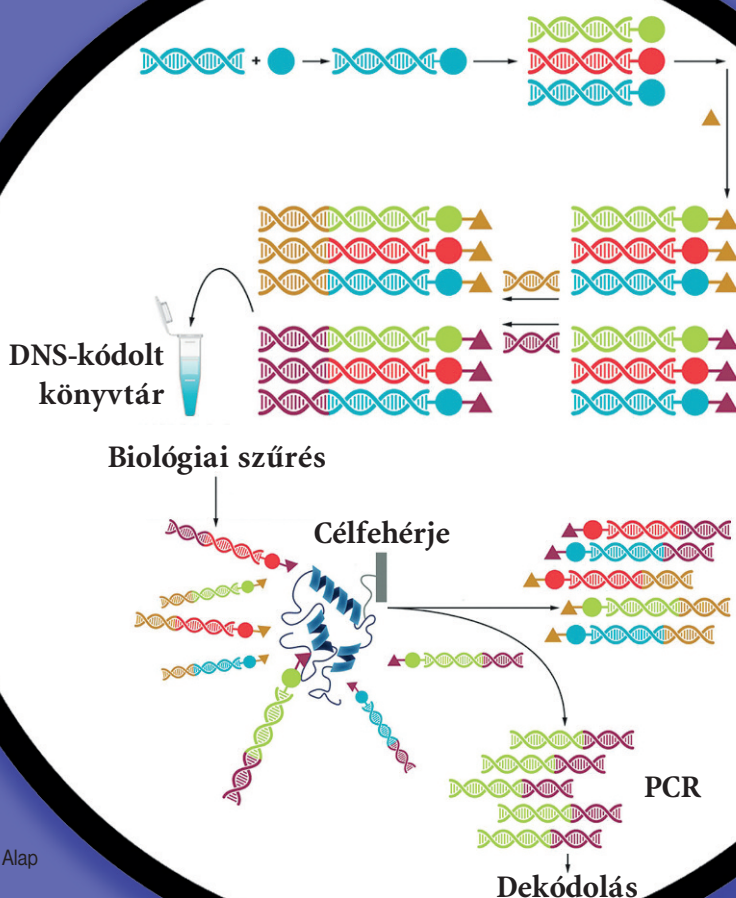


MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXXVI. ÉVFOLYAM • 2021. JÚNIUS • ÁRA: 850 FT

DNS-kódolt molekula- könyvtár

Szintézis és szűrés



Desztilláció, extrakció, termoreakció

behrotest[®] univerzális analitikai rendszer

"NEHÉZ" MÉRÉSEK KÖNNYEDÉN

behr

Labor-Technik

Düsseldorf

AUTOMATA KOI MÉRÉS

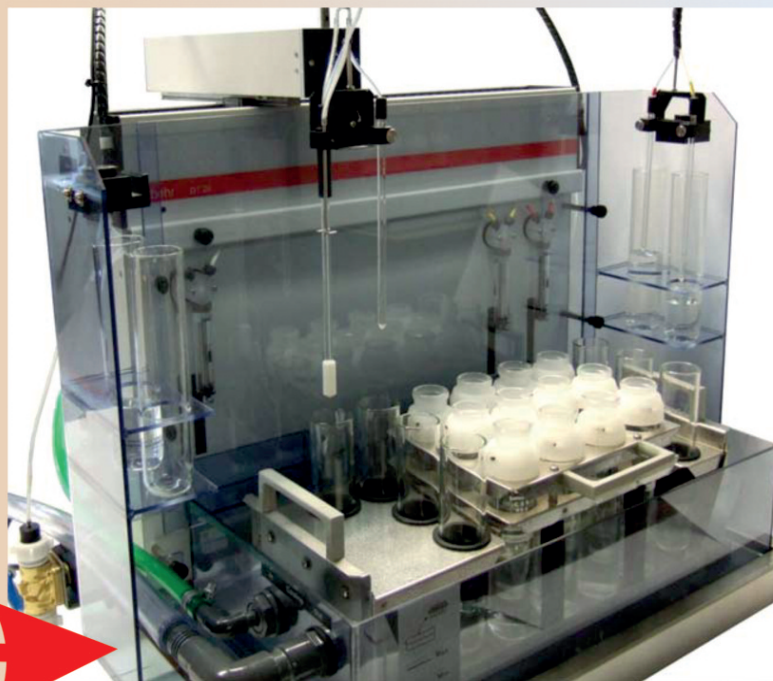
ÓVJA ÖN IS KÖRNYEZETÉT ÉS MUNKATÁRSAI EGÉSZSÉGÉT!

bízza a higany- és krómtartalmú savas oldatokat automatára!

bővítse meglévő roncsolóját!

- növekvő kapacitással, csökkenő élőmunkával
- növekvő pontosság biztosított

DT-20 automata



szabvány szerinti KOI-roncsoló

A KÖRMÉRÉS
TÖBBÉ NEM PROBLÉMA,
A KIMUTATÁSI HATÁR PEDIG
NAGYON LÁTVÁNYOSAN JAVUL!

méréstartomány: 10,1 mg O₂/l-től

kimutatási határ: 2,5 mg O₂/l



AKTIV INSTRUMENT Kft.

ANALITIKAI BERENDEZÉSEK, AUTOMATA ANALIZÁTOROK
1145 Budapest Pétervárad u. 14.
Tel.: (1)-789-2778, Fax: (1)-785-8489
Mail: kozpont@aktivinstrument.hu
web: www.aktivinstrument.hu

AUTOMATA KOI adagoló és titráló

MSZ ISO 6060 szerint, PC-vezérelt



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

Szerkesztőség:

Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS
[SEKERES GÁBOR] örökös főszerkesztő
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE

Szerkesztők:

ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,
LENTE GÁBOR, NAGY GÁBOR,
PAP JÓZSEF SÁNDOR, RITZ FERENC,
ZÉKÁNY ANDRÁS
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
ANTUS SÁNDOR, BIACS PÉTER,
BUZÁS ILONA, HANCSÓK JENŐ,
JANÁKY CSABA, KALÁSZ HUBA,
KEGLEVICH GYÖRGY, KOVÁCS ATTILA,
LIPTAY GYÖRGY, MIZSEY PÉTER,
MÜLLER TIBOR, NEMES ANDRÁS,
ifj. SZÁNTAY CSABA, SZABÓ ILONA,
TÖMPE PÉTER, ZÉKÁNY ANDRÁS

Kapják az Egyesület tagjai és a megrendelőik
A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS

Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.
Tel.: 36-1-225-8777, 36-1-201-6883
Fax: 36-1-201-8056
E-mail: mkl@mke.org.hu

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete
Felelős kiadó: ANDROSITS BEÁTA
Nyomdai előkészítés: Planta-2000 Bt.
Nyomás: Europrinting Kft.
Felelős vezető: ENDZSEL ERNŐ
üggyezető igazgató

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete
Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank
10700024-24764207-51100005 sz.
számlájára „MKL” megjelöléssel
Előfizetési díj egy évre 10200 Ft
Egy szám ára: 850 Ft. Külföldön terjeszti
a Batthyány Kultur-Press Kft.,
H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.
1251 Budapest, Postafiók 30.
Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

Magyar Kémikusok Egyesülete,
1015 Budapest, Hattyú u. 16.
Tel.: 36-1-201-6883, fax: 36-1-201-8056,
e-mail: mkl@mke.org.hu

Aktuális és archivált számaink honlapunkon
(mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541

HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)
HU ISSN 1588-1199 (online)
DOI: 10.24364/MKL.2021.06

A lapot az MTA MTMT indexeli, és a REAL,
továbbá az Országos Széchényi Könyvtár
(OSZK) Elektronikus Periodika Adatbázisa
és Archivuma (EPA) archiválja



„Mi az az optimizmus? kérdé Cacambo. – Ó jaj! mondá Candide, valami olyan örület, mely azt mondatja velünk, hogy minden jól van, midőn minden rosszul van.”

Lehetünk-e optimisták 2021 tavaszán? Mondhatjuk-e azt, hogy minden jól van? A koronavírus-járványtól meggyötört milliók optimistán várják a nyarat, amely remélhetőleg enyhít a vírus nyomásán. Minden szörnyű veszteséggel együtt optimisták lehetünk, már ami a tudományt illeti: a világ különböző részein dolgozó kutatók rekordidő alatt fejlesztették ki azokat a vakcinákat, amelyek tömeggyártása hihetetlennek tűnő gyorsasággal kezdődött meg. E sorok írásakor már több mint egymilliárd védőoltást beadtak egy olyan kórokozó ellen, amelyek létezéséről másfél évvel ezelőtt nem is tudtunk!

De optimisták lehetünk-e akkor, amikor a tudomány csúcsteljesítményei nem elismerést, hanem gyanakvást, zsigeri reakciókat váltanak ki emberek százmillióiból? Egy olyan világban, ahol az interneten keresztül elvileg minden emberi tudás másodpercek alatt hozzáférhető, vannak (és nem is kevesen), akik a vakcinákat nem életmentő eszközöknek, hanem a népiértés eszközeinek gondolják. Vannak, akik a vírus és a pandémia létét is megkérdőjelezzik, egyszerű politikusi manipulációnak tartva a járvánnyal kapcsolatos összes intézkedést. Lehetünk-e optimisták?

Azt hiszem, igen, lehetünk. A tudomány újra bizonyította, hogy képes megoldani, elhárítani az emberiséget érintő komoly problémákat. Nem árt, ha ennek tudata kellő önmérséklettel és visszafogottsággal párosul. Illúzió lenne ugyanis azt hinni, hogy az embereket az áttörést jelentő felismerések, a fantasztikus teljesítmények a tudomány mellé állítják. Épp ellenkezőleg: minél hihetlenebb és érthetlenebb egy tudományos eredmény, annál jobban elidegeníti a közönséget, amelynek tagjai gyakran fogékonyabbak az egyszerű (ám hamis) magyarázatokra.

Ezzel együtt nem érdemes szörnyűlködni a kemofóbiában szenvedőkön, a laposföldhívő vírus-szkeptikusokon. Nem szabad azt gondolnunk, hogy minden rosszul van, de az sem visz előre, ha „optimistán” elefántcsonttoronyba zárkozunk.

A legjobb, ha tesszük a dolgunkat, legjobb tudásunk szerint. Ehhez ez a lap is eszköz, már 76. éve. Objektíven nem mutatható ki, hogy Kiss Tamás gondolatai (Európa, történelmünk egy darabja, jelenünk és jövőnk), Dormán György összefoglalója (A kombinatorikus kémia tündöklése, hanyatlása és újjászületése), Silberer Vera múltba pillantása (Régi üvegek mai szemmel) és a többi kiváló írás hány olvasót gondolkodtat el, ihlet meg vagy ösztönöz. Ha optimisták vagyunk, önbecsapás nélkül hihetjük, hogy mindennek haszna van. Hogy illúzióvesztés, kiábrándulás nélkül tenünk kell, amihez értünk, amit képviselünk. Műveljük kertünket – mint Candide, csak kicsit más lelkülettel.

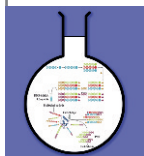
2021. június

Csopor Dezső
elnök

Magyar Gyógyszerésztudományi Társaság,
Gyógynövény Szakosztály

TARTALOM

EURÓPA	
Kiss Tamás, Gilberte Chambaud: Európa – történelmünk egy darabja, jelenünk és jövőnk	166
HAZAI KUTATÓMŰHELYEK BEMUTAKOZÁSA	
Dormán György: A kombinatorikus kémia tündöklése, hanyatlása és újjászületése. Hatása a modern gyógyszerkutatásra. IV.	168
JUBILEUM: 75. ÉVES AZ MKL	
Buzás Ilona: Megemlékezés Erdey László professzorról	174
Erdey László: Titrálások kemilumineszcenciás indikátorok jelenlétében (1958)	176
KITEKINTÉS	
Kutasi Csaba: A verejtékezés hatása a színes ruházatra	182
VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET	
Silberer Vera: Régi üvegek mai szemmel	185
VEGYÉSZLELETEK	
Lente Gábor rovata	188
A HÓNAP HÍREI	190



Címlapunkon:

DNS-kódolt könyvtárak
szintézise, biológiai
szűrése és a találatok
azonosítása
(forrás: <https://cen.acs.org/articles/95/i25/DNA-encoded-libraries-revolutionizing-drug.html>)

Európa – történelmünk egy darabja, jelenünk és jövőnk

A „mai Európa” már 61 éves. Robert Schumann 1950. májusi deklarációja után alakult ki fokozatosan. Az 1951. április 18-as Párizsi Egyezményben az ECSC¹ létrehozására, később, az 1957. március 25-én Rómában aláírt két egyezménnyel az EEC² és az Euratom vagy EAEC³ életre hívására szövetkezett, határozatlan időre. A mai Európa megszületett: ekkor következett egy kis lélegzetvétel, és eljött az ideje, hogy tartalmat kapjon a szövetkezés. Hatról előbb kilencre nőtt a tagok száma 1971-ben, majd tízre 1973-ban és így tovább, végül 2013-ban 28-ra. Magyarország több közép- és kelet-európai volt szocialista országgal együtt 2004-ben lett az EU tagja. A 2008–2009. évi világgazdasági válság, majd az Európa határainál megjelenő menekültválság okozta problémák súlyos gazdasági és politikai zavarokat idéztek elő a tagállamok között 2015-ben. A problémák egyik negatív következményeként 2016-ban a britek népszavazáson úgy döntöttek, hogy kilépnek az EU-ból. Döntésük következményeiről az EU és az UK között évekig tartottak a tárgyalások, amelyek 2020-ban fejeződtek be, és a Brexit 2021. január 1-jével lépett érvénybe. Még nem látható a teljes hatása, de az első események nem tűnnek túlságosan pozitívnak, valószínűleg mindkét fél többet veszít, mint nyer vele.

A tudományos közösség számára fontos lépés volt a Schengeni Egyezmény, melyet 1985. június 14-én írtak alá. Szerte Európában lehetővé tette a polgárok szabad mozgását, de csak tíz évvel később, 1995. március 26-án lépett életbe. Végül az 1992. február 7-én aláírt Maastrichti Szerződés alapította meg az Európai Uniót szélesebb döntési spektrummal és hozta létre az európai állampolgárságot. Az Európán belüli szabad mozgás fokozása érdekében 1999 januárjában létrehozták a közös valutát, az eurót, kezdetben 11 tagállam számára, majd idővel növekvő számú tagállam csatlakozott a használatához.

Európa fiatal, és folyamatos fejlődésben van, felfelé és lefelé tartó szakaszokkal, elkötelezettségekkel és visszalépésekkel, de reméljük, hogy erős lesz, amire nekünk, tudósoknak is nagyon nagy szükségünk van. A kémia Európája valóság volt jóval azelőtt, hogy maga az intézmény létrejött volna. A tudósok évszázadok óta kommunikáltak egymással, és ezek a kapcsolatok kétségkívül megerősödtek, a viták felgyorsultak a tizenkilencedik században, amikor nagyszámú nemzeti kémiai társaságot alapítottak.

Az első a Royal Society of Chemistry (RSC)⁴ volt Nagy-Britanniában 1841-ben, ezt követte a francia társaság, a Société Chimique de France (SCF)⁵ 1857-ben. Sok társaságot alapítottak a következő években, különösen fontos volt a német Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) létrejötte 1867-ben. Ezek a társaságok

¹ European Coal and Steel Community, Európai Szén- és Acélszövetség

² European Economic Community, Európai Gazdasági Közösség

³ European Atomic Energy Community, Európai Atomenergia Közösség

⁴ Kezdetben: Chemical Society of London

⁵ Kezdetben: Société Chimique de Paris

⁶ European Federation of Chemical Societies (FECS)

tudományos üléseket szerveztek, és a kémikusok beutazták a kontinenst, hogy kicseréljék ismereteiket. Elsősorban vasúton közlekedtek, ami megdöbbentő gyorsasággal fejlődött a tizenkilencedik században. A Magyar Kémikusok Egyesülete 1907-ben alakult meg Budapesten, Fabinyi Rudolf vezetésével.

A mai Európa megeremtelése jelentős impulzust adott a nemzeti kémiai társaságoknak, melyek 1970 óta a Kémiai Társaságok Európai Szövetségében⁶ egyesültek, majd ennek utódjaként, a nemzetközi nonprofit szervezetek belga alapegyezménye alapján, 2004 októberében létrehozták a EuCheMS szervezetet. Ma a szervezet 160 000 tagot számlál 37 ország 40 nemzeti társaságából és szervezetéből az EU határain belül és azon túl is.

Ugyanakkor a kontinens kémiai társaságainak az a kívánsága, hogy nemzeti tudományos folyóirataikat fokozatosan egy európai folyóiratokat kiadó konzorcium égisze alá vonják, ezzel adva szélesebb olvasottságot publikációiknak és versenyképesebbé téve folyóirataikat az Amerikai Kémiai Társaság (ACS) és az RCSC folyóirataival. Az első lapot – *Chemistry – A European Journal* (CEJ) – 1995-ben hozta létre a GDCh, és a VCH adta ki Jean-Marie Lehn (Nobel-díjas kémikus), Heinrich Nöth, Tom Dieck (GDCh), valamint Peter Göllitz és Eva E. Wille (VCH) kezdeményezésére. A GDCh hamarosan összefogott a holland (KNCV), majd a francia (SCF) szervezettel: 1998-ban került ki a nyomdából az *EurJIC/EurJOC* első száma. 2000-ben új folyóiratcsalád indult „ChemXChem” címmel: először a *ChemBioChem* és a *ChemPhysChem* jelent meg. Ma kilenc folyóirat tartozik ebbe a családba, utóljára a *ChemSystemsChem* jött létre, 2019-ben.

Az EU taglétszámának növekedésével az egyesületek sorra csatlakoztak a EuCheMS tudományos testületéhez és az új európai tudományos folyóiratok konzorciumához is, apportként hozva saját angol nyelvű tudományos folyóirataikat. Így tette ezt a MKE, illetve az MTA is a *Models in Chemistry*vel 2004-ben. Ugyanakkor megtartották nemzeti nyelvű tudományos folyóiratukat és magazinjukat: az MKE a *Magyar Kémiai Folyóiratot*, illetve a *Magyar Kémikusok Lapját*.

Ennek a periódusnak az elejétől a francia egyesület, az SCF meghatározó szerepet játszott a kiadói konzorcium megalakításában. 2002-ben a European Union of European Chemical Societies (EuChemSoc) lett a társaság minden folyóiratának hivatalos kiadója. 2009-ben a EuCheMS-szel való összetéveszthetőség elkerülése érdekében a EuChemSoc megváltoztatta nevét: ChemPubSoc Europe lett (újabbán: Chemistry Europe), amely így 16 európai kémiai társaság kiadói konzorciuma, 17 tudományos folyóiratot jelent meg. Ezeknek a kiadását a Wiley-VCH végzi. A folyóiratok között szerepel az általános tematikájú *ChemistrySelect*, melyet 2016-ban hoztak létre, illetve a ChemPubSoc Europe (újabbán: Chemistry Europe) magazinjellegű lapja, a *ChemistryViews*.

Ezek a nemzetközi tudományos folyóiratok a társaságunk folyóiratait; széles körben ismertek és elfogadottak, kiemelkedő hatástényezőkként (2018-as adat szerint 5,8 a *Chemistry – A Euro-*



pean Journal esetében, amely évente 2500 publikációval jelentkezik, 7,8 a *ChemSusChem* és 4,7 a *ChemCatChem* esetében).

Ezek az angol nyelven megjelenő európai tudományos folyóiratokon túl, ahogy utaltunk rá, minden nemzeti kémiai egyesület megjelenteti saját magazinjellegű kiadványát. A legtöbb európai országnak különböző kémiai tárgyú folyóiratai is vannak, melyek általában a kémia egy-egy területére fókuszálnak, mint az ipar, az oktatás, a tanulók stb. Ezek a kémikusközösség egy szűkebb részéhez szólnak, és nemzeti nyelven jelennek meg.

A Wiley-VCH kiadó központjában, Weinheimben 2017-ben gyűltek össze a ChemPubSoc Europe-partnerek magazinjainak főszerkesztői baráti eszmecserére. Ezen a beszélgetésen bemutatták egymásnak magazinjaikat, és feltárultak szerkesztési politikájuk hasonlóságai. A magazinok a hazai kémiai közösségek híreivel, szakmai ismeretek széles körével foglalkoznak, tematikus számokkal, évente 4–12 számmal, egyesülettől függően 300–1200 oldal terjedelemben jelennek meg. Majd mindegyik rendszeres elektronikus hírlevéllel, facebook-megjelenéssel és honlappal rendelkezik. Mindegyik nemzeti nyelven jelenik meg, amely iránt az egyesületek mély elkötelezettséget mutatnak. A különböző egyesületek szerkesztői abban állapodtak meg, hogy gyakoribb és mélyebb információcserét folytatnak, kicserélik vezér-

cikkeiket, szerkesztőségi cikkeiket, közös érdeklődésre számot tartó írásait, különös tekintettel a képzésre, az etikai kérdésekre, és a tudománytörténeti, európai programokról szóló cikkekre és az egyesületi hírekre. Időnként már található is ilyeneket a MKL hasábjain. 2019-ben újabb sikeres találkozót tartottunk, az idei találkozó a járvány miatt online formában szerveződött (lásd a 192. oldalt).

Szükségesnek és fontosnak tartjuk a ChemPubSoc Europe (Chemistry Europe) által kiadott nemzetközi tudományos folyóiratokat, erősíteni és fejleszteni kívánjuk azokat. Tudományos eredményeinket ezekben a magasán jegyzett, jórészt nemzetközi folyóiratokban kívánjuk közölni, mivel széles körű olvasottságot akarunk elérni a tudományos közvéleményben.

Ugyanakkor meg kívánjuk jelentetni az anyanyelvünkön kiadott nemzeti magazinjainkat és folyóiratainkat is, mivel felelősséget érzünk nemzetünk, múltunk, történelmünk és kultúránk iránt. „Nyelvében él a nemzet” – ahogy a költő mondja. Továbbá figyelmet fordítunk tudományos szókincsünkre és fejlesztjük. Ennek megfelelően szakmai cikkeket is publikálunk (vagy legalább összefoglalókat) az anyanyelvünkön. Mindazok, akik a fentiekkel ellentétben jelentős tudományos eredményeiket nem nemzetközi folyóiratokban, idegen nyelven szándékoznak publikálni, és nem hisznek az egyesült és együttműködő Európában, bár anyanyelvüket támogatják és fejlesztik, hogy megtartsák és megőrizzeik nemzeti identitásukat, azok véleményünk szerint rossz úton járnak. Mi nem akarjuk őket követni, mi azt javasoljuk, válasszuk inkább az általunk javasolt utat!

Kiss Tamás

professor emeritus, Szegedi Tudományegyetem, az MKE alelnöke

Gilberte Chambaud

professor emerita, Université Paris-Est Marne-la-Vallée, a Francia Kémiai Társaság volt elnöke



Gilberte Chambaud, a cikk társszerzője, 1980-ban Párizsban szerezte meg PhD-fokozatát az École Normale Supérieure (ENS) és az Université Pierre et Marie Curie egyetemen Bernard Levy vezetésével fizikai kémiából. Egy éves vendégkutatói kitérő után (a frankfurti Goethe Egyetemen) az ENS-ben folytatta kutatói pályafutását, majd az Université-Paris-Est Marne-la-Vallée munkatársa lett, 1992-től a profesz-

szora. Kutatási területe a molekuláris fizikai kémia területére esik, többek között fontosak a molekuláris spektroszkópia terén elért tudományos eredményei. 2014-től az intézmény professor emeritája. 2012 és 2015 között a Francia Kémiai Társaság alelnöke, 2015 és 2018 között az elnöke volt. 2016-tól az Academia Europaea tagja. Elnöksége alatt a társaság folyóiratának főszerkesztője is volt. Ilyen minőségében találkoztunk 2017-ben Weinsteinben, az európai kémiai társaságok lapjai főszerkesztőinek Wiley által szervezett találkozóján. Ott vetődött fel – az egyesületi magazinok közötti együttműködési lehetőségeket tárgyalva – az országok közötti tudományos kooperációk egyre növekvő fontossága és a tudományos publikációk döntően világnyelveken való publikálásának igénye mellett az anyanyelv megőrzésének fontossága is. Ott határoztuk el, hogy jó volna erről egy cikkben is értekezni. A közösség hozszan vitázott a kérdéssről, értékes gondolatok születtek, végül kettőnket bízott meg, hogy foglaljuk írásba a beszélgetés lényegét. Született is egy angol nyelvű közlemény 2018-ban. Különböző okok miatt ez végül nem jelent meg a ChemViews-ban. 2020-ban úgy gondoltam, a cikk mondanivalója ma is aktuális, és érdemes volna a Magyar Kémikusok Lapjában közölni. Gilberte Chambaud nagy örömmel vállalta, hogy a magyar változat társszerzője legyen. **KT**





Dormán György

TargetEx Kft., SZTE Gyógyszerésztudományi Kar

A kombinatorikus kémia tündöklése, hanyatlása és újjászületése

Hatása a modern gyógyszerkutatásra | IV. rész

Cikksorozatunkat Furka Árpád professzornak ajánljuk közelgő 90. születésnapjára a kombinatorikus kémia történetében betöltött, nemzetközileg elismert, úttörő szerepéért.

Négyrészes sorozatunkban a gyógyszerkutatás elmúlt 25 évében komoly szerepet játszó kombinatorikus kémia felmerülését, virágzását, hanyatlását, végül újjászületését kívánjuk bemutatni kitekintéssel a hazai szakmai műhelyek hozzájárulására is.

A klasszikus kombinatorikus kémia válsága

1995-ben Ecker és Crooke megfogalmazta a kombinatorikus gyógyszerfeldezés iránti elvárásokat. Idetartozott a gyógyszerjelöltek minőségének és teljesítményének javítása, a gyorsított vezérmolekula-azonosítás, a vezérmolekulák gyorsabb eljuttatása a klinikáig, nagyobb szelektivitás, farmakokinetikai tulajdonságok javítása, alacsonyabb toxicitás.

A hangsúlyt az újdonságra és a megnövelt kémiai térre helyezte, illetve arra, hogy a kombikem olyan vegyületeket eredményezzen, amelyeket a hagyományos szerves kémiai módszerekkel nem sikerülne előállítani. Viszont amennyiben kizárólag a molekulaszám nő, de a kémiai tér ugyanabban a szerkezeti körben marad, mint korábban, akkor nem várható áttörés. Ez a „profétai jóvendülés” beigazolódott. [1]

A kombikem azt a paradigmaváltást is ígérte, hogy az automatizált, robotizált molekulagyárak tehermentesítik a szerves kémikust a rutin kísérleti tevékenységtől. Illúzió volt azt is feltételezni, hogy a nagy tagszámú könyvtárak már közvetlenül tartalmazzák a klinikai jelölt molekulákat, illetve hogy a szintetikus erőfeszítéseket meg lehet spórolni azzal, hogy egyszerűen megnöveljük az olcsón előállítható vegyületek számát (1. ábra).

Évekkel később fel is tették a kérdést, hogy hány gyógyszer kifejlesztéséhez járult hozzá a kombikem. Egyes vélekedések



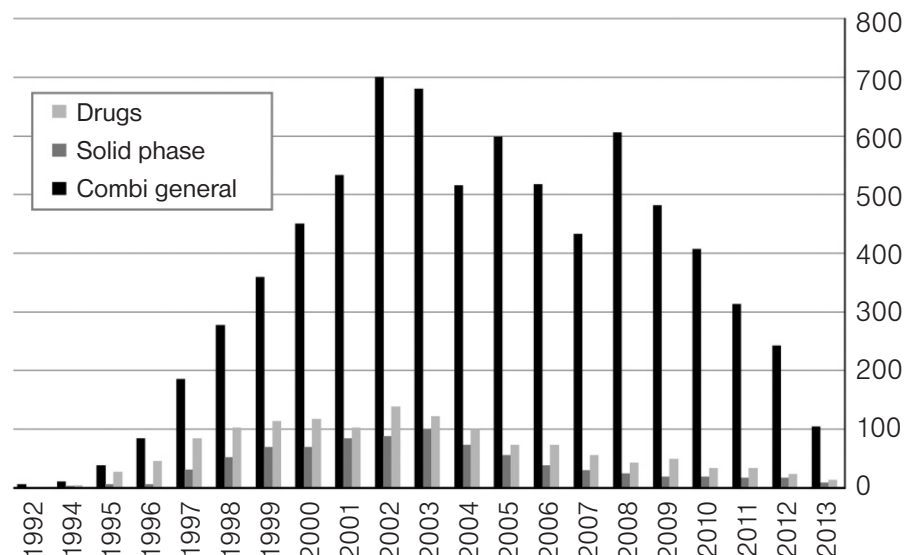
1. ábra. A szintetikus ráfordítások és az előállított molekulák számának, minőségének összefüggése [5]

szerint: a kombikem kitermelt tonnányi haszontalan vegyületet nagyon sok vegyész alkalmazva. [2] Emellett a HTS gyakran gyenge minőségű adatokat szolgáltatott, ill. számos fehérje célpont esetében nem sikerült egyetlen aktív vegyületet sem azonosítani. A nagy molekulaszám nem várt, relatíve alacsony találati arányt (0,01% és 0,14% között) eredményezett, [3,4] ami különösen az első időkben a vegyületek alacsony tisztaságának és a tervezett szintéziságak részbeni sikertelenségének volt betudható.

A vegyületek hasonló vázszerkezete a változatos „dekoráció” ellenére sem hozott több találatot. A szintetikus komplexitás és diverzitás elérésére és a nagyszámú vegyület biológiai szűrésére drága berendezéseket fejlesztettek, de a nyert vegyületek értéke nem volt arányban a ráfordításokkal. Az automatizált technológiák és a kémia könyvtárításának időskálája ugyancsak aránytalanul hosszú volt a kapott vegyületek hasznosságához képest. [5]

Bár új technológiai megoldások szület-

2. ábra. Évenkénti publikációk a kombinatorikus kémia területén (kombinatorikus kémia – általánosságban; szilárd fázisú szintézis és kombinatorikus kémia; kombinatorikus kémia és gyógyszerek)





tek, mint pl. a HTS, az automatizálás, a virtuális könyvtárszűrés és a kombinatorikus/párhuzamos szintézis módszerek, ezek a költségek jelentős emelkedését eredményezték. A várt áttörés nem következett be, az NCE-k száma nem növekedett, a gyógyszer-szektor bevételei tovább csökkentek. A valóság ennél árnyaltabb: 1991 és 2008 között 58 törzskönyvezett gyógyszer közül 19 felfedezéséhez járult hozzá a HTS és a kombikem, a fejlesztés valamelyik fázisában. Idetartozik több rákellenes tirozinkinázgátló (gefitinib, erlotinib, sorafenib, dasatinib), ill. HIV-ellenes (Tiptanivir, Maraviroc) szer felfedezése is. [6] Bár Dolle szerint ez idő alatt több mint 5000 könyvtárat közöltek az irodalomban. [7] A publikációk évenkénti eloszlása szépen mutatja a kombikem felfutását és lecsengését. [8] A publikációs csúcs 2002–2003-ra esik (2. ábra).

A kombikem időközben „tabu” kifejezéssé vált, és fokozatosan felváltotta a nagy áteresztőképességű kémia elnevezés (high-throughput chemistry). [9] Ez magába olvasztott minden területet az analóg tervezéstől, párhuzamos és kombinatorikus szintézisen át a tisztításig és a molekulák automatizált kezeléséig.

Az 1999-ben alapított Journal of Combinatorial Chemistry 2010-ben kiterjesztett szakmai területtel, új névvel (ACS Combinatorial Science) jelent meg. A korábbi QSAR-ról 2003-ban QSAR & Combinatorial Science-ra kiterjesztett Wiley folyóirat pedig 2010-ben megszűnt, szakmai területének informatikai vonatkozásait a Molecular Informatics vette át. Az 1995-ben alapított Molecular Diversity (Springer) több válságot és megszakítást átélve egyes tartalmú szintetikus, informatikai orgánummá vált.

A kombikem sikertelensége miatt a gyógyszeripar nagy nyomás alá került, mert a felfedező kutatás költségeit jelentősen csökkenteniük kellett. Egy mítosz szertefoszlott. A legtöbb kombinatorikus csoport 2008-ra lényegében feloszlott (a „molekulagyárak” ideje lejárt), a vegyészeket más területek szívták fel.

A nagy gyógyszergyárak addigra többmillió, saját kutatási irányukat kiszolgáló molekulabankokat létesítettek. A Bayer és AstraZeneca-könyvtárak esetén < 20%-nyi vegyület mutatott szerkezeti hasonlóságot egymáshoz, amelyek többsége külső könyvtárellátótól származott. [10] A már létrehozott molekulabankokat később is megtartották, időnként szűkítették tisztaság alapján, ill. új molekulák hozzáadásával egészítették ki.

A nagy tagszámú könyvtárak szintézisének ideje végleg lejárt, a figyelem kisebb fókuszált, ill. analógekönnyvtárak felé fordult. A vegyületszám csökkenésével az osztásos-keveréses szintézis háttérbe szorult, a kisebb nemkeverék-könyvtárak klasszikus vagy párhuzamos szintézismódszereket igényeltek. A trendet támogatta a 2D/3D alapú virtuális szűrés intenzív fejlődése, sebességének és pontosságának növekedése.

A kombikem- és kombinatorikus könyvtárak gyenge pontjai

1. Szerkezeti redundancia, a kémiai tér alacsony lefedettsége, alacsony újdonságtartalom

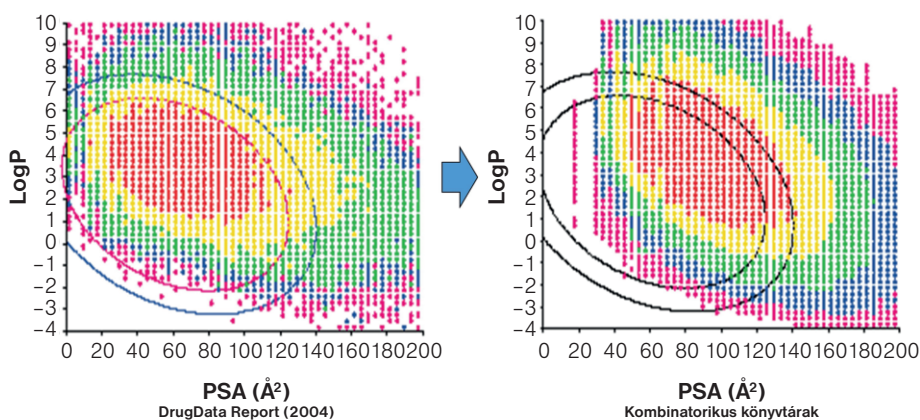
A szerkezeti redundancia (ismétlődés) részben az építőelemek, reagensek korlátozott elérhetőségében, ill. a néhány viszonylag egyszerű kémiai lépés alkalmazásában rejlik. [11] Ez a diverzitás mértékét eleve korlátozta, így a különböző laborokban készült könyvtárak nagyban hasonlítottak egymásra. Shang és munkatársai 11 kereskedelmi könyvtárat hasonlítottak össze vázdiverzitás szempontjából, és nagyszámú gyűrűrendszert azonosítottak, amely mindegyik könyvtárban nagy arányban fordult elő. [12] Ezek közé tartoztak a számos gyógyszerben megtalálható ún. „kiváltságos” váz-szerkezetek is, amelyek számos fehérjecélponton mutattak biológiai aktivitást a helyettesítésektől függően. Kimutatták, hogy 2013-ig az új gyógyszereknek csupán 28%-a tartalmazott új gyűrűrendszereket, és évente átlagosan 6 új gyűrűrendszer került be az új gyógyszerek kémiai terébe. [13] A trendhez hozzájárult a jól bevált „me-too” („én is”) stratégia alkalmazása is, miszerint az új hatóanyag felfedezésekor egy régi gyógyszerből indulunk ki. A UCB kutatói legenerálták a lehetséges 5 és 6 tagú

heterociklusokból képezhető mono- és biciklikus gyűrűrendszereket (24 847); ez alkotja a VEHICLe (virtual exploratory heterocyclic library) virtuális felfedező heterociklusos könyvtárat. [14] Irodalomkutatás szerint csupán 1701-et szintetizáltak a megjelenés időpontjáig. Megállapították, hogy kb. 3000 gyűrűrendszer szintézise megvalósítható. Ez a tanulmány megerősítette a gyógyszerfejlesztés szempontjából releváns kémiai tér alacsony lefedettségét a gyógyszerjelöltek és a kombinatorikus könyvtárak által.

2. A könyvtárak nagy része planáris (síkszerű) gyűrűrendszereket tartalmaz

A különböző könyvtárak molekuláinak alakja, térbeli elrendeződése (topológiája) hasonló volt. Emögött részben az a tényező állt, hogy a molekuláris váz milyen pozícióban és térbeli irányban tartalmazott diverzitás bevezetésére alkalmas funkcióscsoportokat, melyben gyakran az elérhető reagensek és a kémia egyszerű megvalósíthatósága volt korlátozó tényező. A topológikus hasonlóság oka volt az is, hogy a molekulák főleg planáris (síkszerű) gyűrűrendszereket tartalmaztak. [15] Ebben komoly szerepet játszottak a nagy népszerűsége szert tett átmenetifémek által katalizált keresztkapcsolásos reakciók (Suzuki, Heck stb.), amelyek új sp^2-sp^2 kötések létesítettek. [16] A 3 dimenziós térszerkezetű, sp^2-sp^3 vagy sp^3-sp^3 kötések tartalmazó, nem síkszerű, flexibilisebb vegyületek nagyobb valószínűséggel kötődnek célfehérjeikhez, így találati arányuk is magasabb. A természetes anyagokat imitáló, nagy vázdiverzitású, számos aszimmetriacentrumot tartalmazó könyvtárak lennének a legalkalmasabbak, viszont ezek általában soklépéses, nehezen párhuzamosítható szintézist igényelnek.

3. ábra. Törzskönyvezett gyógyszerek (DrugData report, 2004) (balra) és kereskedelmi molekulakönyvtárak LogP- és PSA-eloszlása (D. Reynolds nyomán – nem közölt)





3. A molekulák „elzsírosodása”¹

Leeson elemzése szerint 18 gyógyszeripari cég 2000 és 2011 közötti gyógyszerjelölt-szabadalmaiban a leírt molekulák szignifikánsan nagyobb molekulatömeggel bírtak és lipofilebbek voltak a forgalomban lévő orálisan felszívódó gyógyszereknél. [17] Más elemzések ugyanezt találták a kombinatorikus könyvtárakra is (3. ábra). Ennek egyik oka, hogy a diverzitás növelése érdekében minden funkciós csoport származékoltatva van (elsősorban lipofil csoportokkal), ezáltal a LogP érték folyamatosan nő, és nem illeszkedik a gyógyszerek LogP értékeihez. [18]

Bár a Lipinski-féle 5-ös szabály kritériumait többen komolyan vitatták, [19] mégis azokat figyelembe véve, a törzskönyveztett gyógyszerek kiterjesztett LogP értékeinek eloszlási határvonalán a kereskedelmi könyvtárak nagy arányban kívül esnek. Ez ugyanúgy érvényes a Veber-szabályokban lévő PSA (poláris felület terület) eloszlására is.

Összegezve, kisebb tagszámú könyvtárak, kisebb molekulatömegű, kevésbé lipofil molekulák, új gyűrűrendszerekkel, sp³-dús 3D térszerkezetű, számos aszimmetriacentrumot tartalmazó molekulák várhatóan nagyobb sikerarányt eredményeztek volna. A fenti megállapítások ugyancsak hozzájárultak a fragmentum- és vezérmolekula-jellegű könyvtárak elterjedéséhez, amiről később lesz szó.

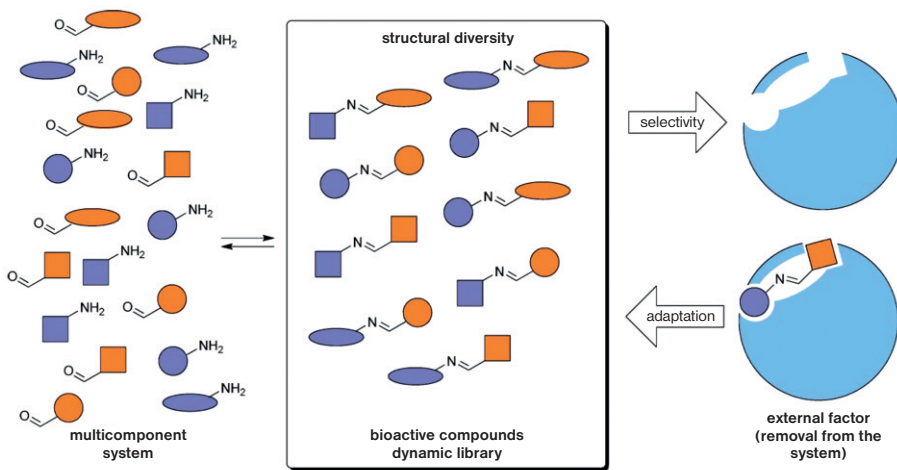
A kombinatorikus kémia reneszánsza

A kombikem újjászületése valójában néhány korábbi koncepció forradalmi megújításának köszönhető. Idetartozik a dinamikus kombinatorikus kémia, a DNS-kódolt könyvtárak (DEL) innovatív alkalmazása, könyvtárszintézis áramlós rendszerekben és az új könyvtártípusok felmerülése.

Dinamikus kombinatorikus kémia

Számos új közlemény született az elmúlt években a dinamikus kombikem korszerű alkalmazásairól. [20,21]

A dinamikus kombikem eredeti koncepciója a Nobel-díjas J. M. Lehn-től származik. [22] Itt a vegyülettár az építőelemek reverzibilis kovalens kapcsolódásával *in situ* képződik, elméletileg az összes lehetséges kombinációt magában foglalja, és a fe-



4. ábra. A dinamikus kombinatorikus kémia elve és megvalósítása [23]

hérjéhez legszorosabban kötődő tagok dúslását eredményezi a könyvtár tagjai között fennálló dinamikus versengés következtében. A dinamikus kémiai könyvtárban az építőelemeknek a szerkezeti diverzitás mellett reverzibilis kapcsolódásra képes funkciós csoportokkal is kell rendelkezniük (pl. amin- és aldehidcsoport), ami egyensúlyi reakcióban Schiff-bázis-könyvtárhoz vezet (4. ábra). A találat validálásaként az azonosított aktív vegyület irreverzibilis kovalens kötést tartalmazó analógját szintetizálják meg és szűrik a célfehérjén.

A koncepció újrafelfedezése az időközben megvalósult technológiai újításoknak is köszönhető. Ezek egyikében áramlós rendszerben valósul meg az építőelemek reverzibilis kombinációja és kölcsönhatása a fehérjecélponttal. A legjobban kötődő molekulát méretkizárásos kromatográfiával, majd fehérjedenaturációt követően tömegspektrometriával azonosítják (5. ábra). [24]

DNS-kódolt könyvtárak (DEL)

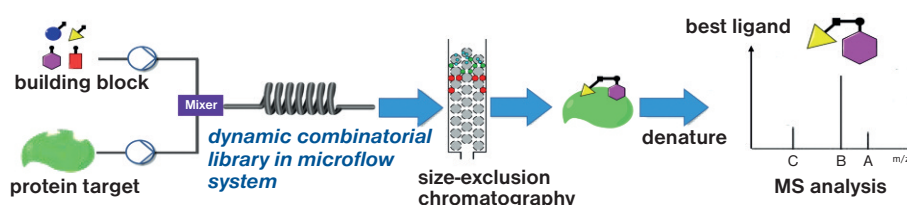
A szilárd fázisú osztásos-keveréses könyvtárszintézis DNS-kódolt (címkézett) változatának újrafelfedezése Lerner korai koncepciójára épül, ami a biológiai szűrést követő PCR- (polimeráz láncreakció) amplifikációs (sokszorozó) és gyors DNS-szekvenálási technológia kiegészítésével gyors,

nagy kapacitású és hatékony módszerre fejlődött az elmúlt években. [25,26] Ily módon rövid idő alatt akár 10⁹ tagszámú keverékkönyvtárat is elő lehet állítani és le lehet szűrni (lásd a címlapon szereplő ábrát).

A többlépéses osztásos-keveréses szintézis mindegyik lépésében egy oligonukleotid-fragmentumot kapcsolunk a keletkező keverék molekuláihoz, ami azonosíthatóvá teszi az adott lépésben beépített építőelemeket. A könyvtárszintézis egy többfunkciós építőelem rövid DNS-szekvenciához való kapcsolásával indul, majd egyesítik a termékeket, és szétosztják különböző reakcióedényzetbe. Ezt edényzetenként új reakció követi, újabb építőelemekkel, majd az oligonukleotid-szálat újabb, a lépésre jellemző DNS-szekvenciával meghosszabbítják ligálás útján. Több lépés után a DNS-kódolt keverékkönyvtárat affinitásalapú biológiai szűrővizsgálatnak vetik alá, amely kötődési képesség alapján megkülönbözteti, szétválasztja a molekulákat. A kötődést mutató molekulák DNS-lánca relatív mennyiségének sokszorosítása polimeráz-láncreakció (PCR), majd azt követő azonosítása nagy áteresztőképességű szekvenálás alkalmazásával történik.

A módszer kétségtelen előnye a relatív kis mennyiség: kis reagensigény, nanomólnyi termékek elegendők több ezer szűrés végrehajtásához, a módszer gyorsasága, nagy könyvtárak generálása stb. A szilárd

5. ábra. Dinamikus kombinatorikus kémia megvalósítása folyamatos áramlós rendszerben



¹ Az „elzsírosodás” kifejezést Keserű György használta számos előadásában



fázisú szintézis és az oligonukleotid-címke azonban korlátozza az alkalmazható kémiai reakciók sorát. A DEL technológia sikerét és növekvő népszerűségét bizonyítja, hogy például a GSK kutatói a DEL-találatok kisebb módosításával rövid idő alatt jutottak klinikai jelölt molekulához RIPI (Receptor Interacting Protein 1) és sEH (soluble epoxide hydrolase) célpontok ellen. [27]

Könyvtárszintézis folyamatos áramlásos rendszerekben

A könyvtárszintézis reneszánszára komoly hatással volt az áramlásos kémia gyors fejlődése és általános elterjedése. [28] Ezt valójában a szilárd (polimer) hordozós reagensok és reagensmegkötő gyanták széles körű elterjedése és többlépcsős reakciókban való alkalmazása alapozta meg.

Damiao és munkatársai [29] egyetlen folyadékáramban elosztott folyadékcseppekben (szegmensekben) állítottak elő szubsztituált triazolkönyvtárat (6. ábra). Itt valójában a párhuzamos szintézis helyett a könyvtár kiépítése rövid reakcióintervallumokkal szekvenciálisan (egymást követően) történik. A különböző reakciót hordozó és a másásra használt folyadékszegmenseket nem elegyedő fluoros oldószerrel szétválaszthatjuk (7. ábra) [30]

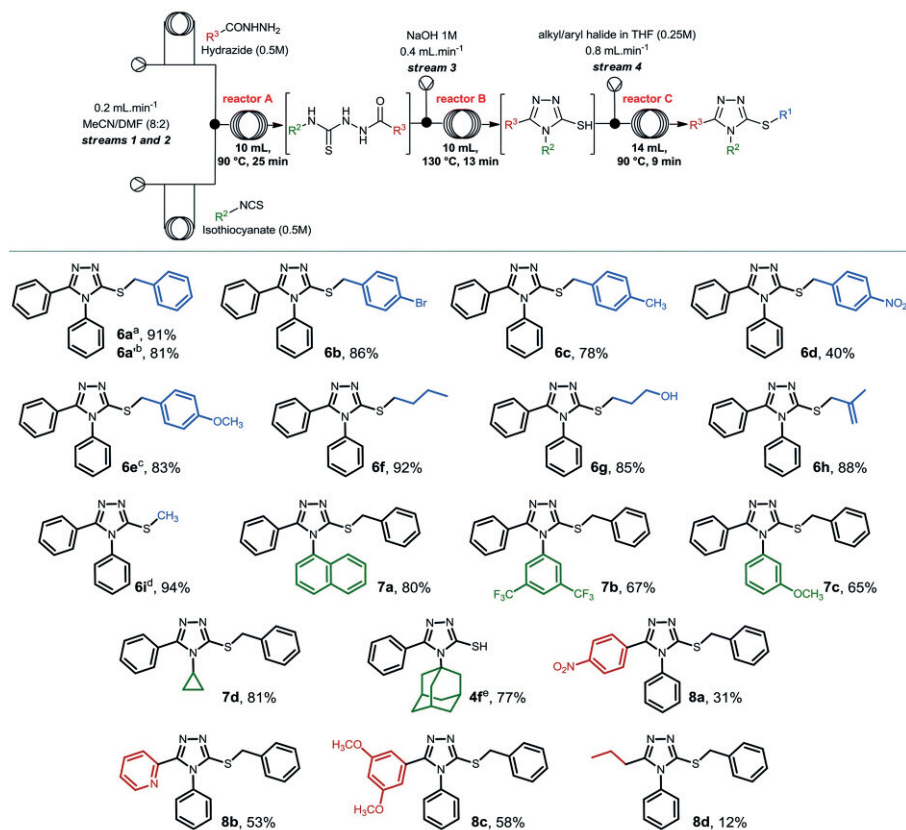
Az áramlásos kémia új lehetőségeket teremtett a kémiai tér új típusú, elsősorban 3 dimenziós (nem síkszerű) gyűrűrendszerekkel való kiterjesztésére is. Ezt az aromás (planáris) gyűrűrendszerek részleges vagy teljes telítésével valósították meg. Ez utóbbit a ThalesNano által kifejlesztett H-Cube® áramlásos hidrogénező reaktorban végezték. A módszer lényegében megfelel a „könyvtárból könyvtárba” stratégiának. Varga és munkatársai a 3 komponensű reakcióval előállított piridínium-pirazolát-könyvtár [31] néhány tagjának részleges telítését hajtották végre áramlásos rendszerben (8. ábra).

Az áramlásos kémia alkalmazásával jött létre az automatizált vagy integrált gyógyszerkémia. [32,33] Itt ciklikus hatás-szerkezet optimalálás által automatikusan generált könyvtártagok szekvenciális *in situ* szintézise és közvetlen biológiai szűrése valósul meg (9. ábra).

Új könyvtártípusok

a) Kovalens kötést létesítő vegyületeket tartalmazó könyvtárak

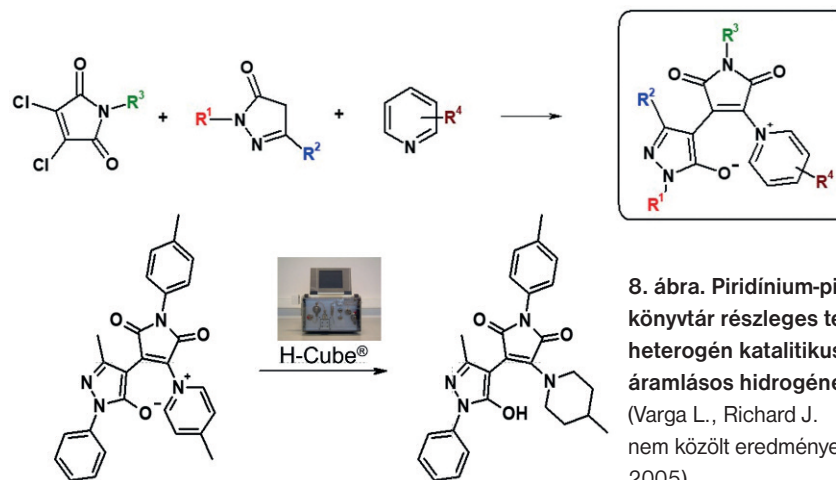
A kovalens kötést létesítő molekulákat korábban eltávolították a könyvtárakból. Évek-



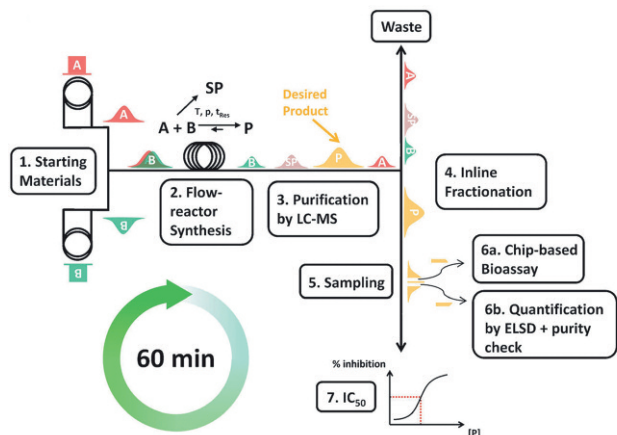
6. ábra. Helyettesített triazolkönyvtár előállítása egyetlen folyadékáramban áramlásos reaktorokban



7. ábra. A fluoros oldószerrel szétválasztott folyadékáramok (cseppek) lehetőséget nyújtanak gyors egymást követő reakcióra és könyvtárszintézisre

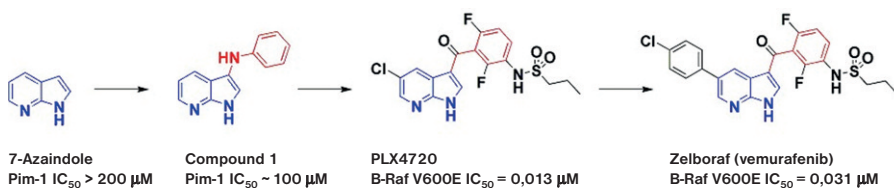


8. ábra. Piridínium-pirazolát-könyvtár részleges telítése heterogén katalitikus áramlásos hidrogénezéssel (Varga L., Richard J. nem közölt eredmények, 2005)



9. ábra. Hatás-szerkezet alapú könyvtárgenerálás, szintézis, tisztítás és biológiai szűrés automatizált optimalizációs ciklusa folyamatos áramlásos rendszerben

10. ábra. Vemurafenib kifejlesztése elsődleges fragmentumtalálattól kiindulva többleléses optimalizáció útján



kel később rájöttek, hogy a kovalens kötés célzott, specifikus kialakítása a célfehérjén a biológiai hatás tartós fennmaradásához vezethet. A kovalensen kötődő ligandumok [34] lehetnek mechanizmusalapú [35] vagy általános elektrofil, [36] ill. Michael-akceptor molekulák, melyek elsősorban a ciszteinek tiolcsoportjaival lépnek kölcsönhatásba. [37]

b) Fragmentumkönyvtárak

Hann és munkatársai már 2001-ben [38] azt találták, hogy a vezérmolekula-felfedezés sikeressége fordított arányban áll a molekulák komplexitásával. Ez teljességgel ellentmond a diverzitásorientált szintézis természetesanyag-szerű vegyületeit megcélzó koncepciójának. A kombinatorikus könyvtárak alacsony sikeraránya és elméleti megfontolások vezettek a fragmentumkönyvtárak elterjedéséhez [39] és az erre épülő fragmentumalapú gyógyszertervezéshez. [40] Itt a Lipinski-féle 5-ös szabály analógiájára egy ún. 3-as szabályt ($\text{LogP} < 3$, molekulatömeg < 300 , max. 3 hidrogénkötés-donor, ill. -akceptor, 3 vagy kevesebb rotálható csoport és a poláris felület területe $< 60 \text{ \AA}^2$) kielégítő vegyületekből, építőelemekből álló könyvtárat létesítenek és mérnek a HTS-ben. A koncepció szerint az ún. vezérmolekula-szerű vegyületekhez hasonlóan ezekből a fragmentumokból a későbbi optimalizációs lépésekben további csoportokkal ellátva vagy éppen más aktív fragmentumokkal összekapcsolva sikeresen lehet gyógyszerjellegű vegyületeket kifejleszteni. A korábbi koncepció szerint a Lipinski-féle 5-ös szabályt kielégítő vegyületek

biológiai szűrésekor kapott találatok optimalizálása során további csoportokat kapcsolnak hozzájuk, ami által a vegyületek molekulatömege és lipofilicitása tovább nőtt, megnehezítve ezzel az orális felszívódást. Számos tanulmány [41,42] szerint a fragmentumokra jellemző az entalpiavezérelt kötődés, amit szubsztituensek bevezetése által entrópiaorientált módon lehet optimalizálni. Elemzésük alapján a fragmentumok révén a kémiai tér lefedettsége is sokkal nagyobb.

A vemurafenib volt az első FDA-engedélyezett gyógyszer, amit fragmentumalapú gyógyszertervezés útján fejlesztettek ki. [43] A kiindulási nagy diverzitású, „vázjellegű” fragmentumokat (150–350 Da) tartalmazó könyvtár (20 000 vegyület) először 200 μM koncentráción tesztelték, majd a kinázgátló aktivitást mutató találatokat szisztematikusan, szelektivitást és biológiai hasznosulást figyelembe véve építették tovább (10. ábra).

Mit kaptunk a kombinatorikus kémiától az elmúlt 25 évben? Mi épült be a modern gyógyszerkutatásba?

Bár a klasszikus kombinatorikus kémia ideje lejárt, mégis komoly hatással volt a korszerű gyógyszerkutatásra. [5] A korai lelkesedést felváltotta a kombikem realisztikus megítélése, és betagozódott a standard technológiák, eszköztárak sorába. Bár már ritkán használjuk a „kombinatorikus” kifejezést, a „könyvtár” (vegyülettár) elne-

vezésben legfontosabb eleme tovább él. A kombikem jelentősen gyarapította a szintetizált molekulák számát, így nagy molekulabankok jöhettek létre. A gyógyszertervezés manapság a kombinatorikus analógtervezés és párhuzamos szintézismódszerek alkalmazásával gyorsabban és kisebb erőfeszítéssel képes diverz analógvagyteret előállítani. Ezek a módszerek és technikák mára a legtöbb gyógyszerfelfedező laboratóriumban rutinszerűvé váltak.

A kombikem hatása 4 csoportba sorolható

1. A kombikem legfontosabb hatása a kombinatorikus gondolkodás elterjesztésében érhető tetten. Ez magában foglalja a produktivitás növelését és a kémiai tér szisztematikusan feltérképezését annak érdekében, hogy maximalizálja az elérhető kémiai, szerkezeti, szintetikus és biológiai hatásra vonatkozó információk kihasználását az adott projekten belül. [44] A kombinatorikus variációkban és a kémiai térben való globális molekuláris gondolkodás kétségtelenül jövőbe mutató új szemléletet hozott a gyógyszerkutatásba. A gyógyszerkémikus már nem egyetlen szintetizálható molekulában, hanem azok analóg sorozatában, „könyvtárban” gondolkodik. Ehhez kapcsolódik a tulajdonságok statisztikus eloszláson alapuló elemzése. A kombinatorikus gondolkodás átterjedt az anyagtudomány és a katalizátorfejlesztés területére is, ahol a szerkezeti sokféleség mellett az alkalmazott paraméterek lehetséges variációi is megjelennek. [45] Ezzel lényegében a kombinatorikus gondolkodás egy új, általános felfedező kutatási paradigmává vált. [46]

2. Az előbbi ponthoz szorosan kapcsolódik a kemoinformatica rohamos fejlődése, aminek egyik fő mozgatója a kombinatorikus kémia és gondolkodás volt. Idetartozik a virtuális könyvtártervezés és generálás, a 2D/3D virtuális szűrés egyre pontosabb végrehajtása, a kémiai tér analízise, a diverzitátszámolás és a szelekció, a fizikokémiai (ADMETox) paraméterek becslése, a szintézistervezés, a párhuzamosítás, a szintetizálhatóság becslése, a nagy adatbázisok kezelése stb.

3. A kombikem hozzájárult a szintézismódszerek megújításához is. Az ismert szerves kémiai reakciókra szilárd és folyadékfázisú párhuzamos szintézisprotokollok születtek. A diverzitás kiépítését célzó új szintetikus módszerek (MCR, DOS) és a diverzitást hordozó funkciók beépítését célzó új reakciók (keresztkapcsolás) jelentősen hozzájárultak a szerves kémia fejlődéséhez. A kombinatorikus kémia meg-



gyorsította az ún. szintézist könnyítő (enabling chemistry) [47] módszerek elterjedését is. Idetartoznak a szilárd-hordozós reagensek, a feleslegmegkötő gyanták, a MAOS (mikrohullámmal gyorsított szintézisek), az áramlásos kémia stb. Új gyűréndszerek szintézise érdekében a hagyományos laboratóriumi paramétertér [48] kiterjesztésére is számos kísérlet történt – pl. az Új Eljárás Ablak (Novel Process Windows) „kiterjesztésével”. [49]

4. A kombinatorikus kémia ugyancsak meggyorsította a technológiai innovációk beépítését a szintetikus, tisztítási, biológiai szűrési és logisztikai folyamatokba. A robotizált mintakezelés, és kiszérelés, az automata tisztítási és analitikai rendszerek, a párhuzamos kémiai mikrosorok, az áramlásos reaktorok, az automatizált nagy átteresztőképességű biológiai szűrés mind-mind hozzájárultak a gyógyszerkutatás megújításához, kapacitásnöveléséhez és a fejlesztési ciklusidők csökkentéséhez.

A 25 évvel ezelőtt kifejlesztett kombinatorikus kémia – bár maga az elnevezés tekintetében „kikapott” a szakmai köztudatból – mégis visszavonhatatlanul nyomot hagyott a korszerű gyógyszerkutatásban és jelenleg tanúi lehetünk az újjászületésének.

Cikkorozatunkat dr. Furka Árpád professzornak ajánlottuk, akinek hozzájárulása elvülhetetlen a kombinatorikus kémia alapjainak lerakásában, és az általa lefektetett elvek köszönnek vissza a DNS-kódolt könyvtárakban is, ami fontos mérföldkő a kombikem újjászületésében, megújításában.

Köszönetnyilvánítás. A szerző köszönettel tartozik dr. Gerencsér Jánosnak a kézirat szakmai lektorálásáért.

IRODALOM

[1] Ecker, D.J. and S.T. Crooke, *Combinatorial drug discovery: which methods will produce the greatest value?* *Bio/Technology*, 1995. 13(4), 351.
 [2] https://blogs.sciencemag.org/pipeline/archives/2014/10/14/combichem_into_drugs_how_many
 [3] Lowe, D.B., (2014). Drug discovery: Combichem all over again. *Nature Chem.* 6(10), 851–2.
 [4] Zhu, T., Cao, S., Su, P. C., Patel, R., Shah, D., Chokshi, H. B., et al. (2013). Hit identification and optimization in virtual screening: practical recommendations based on a critical literature analysis: miniperspective. *J Med Chem.* 56(17), 6560–6572.
 [5] Campbell, I.B., S.J.F. Macdonald, and P.A. Procopiou, (2018). Medicinal chemistry in drug discovery in big pharma: past, present and future. *Drug Discov Today*, 23(2), 219–234.
 [6] Macarron, R., Banks, M. N., Bojanic, D., Burns, D. J., Cirovic, D. A., Garyantes, T., et al. (2011). Impact of high-throughput screening in biomedical research. *Nat Rev Drug Discov* 10(3), 188–195.
 [7] Dolle, R. E., Le Bourdonnec, B., Goodman, A. J., Morales, G. A., Thomas, C. J., Zhang, W. (2009) Comprehensive survey of chemical libraries for drug discovery and chemical biology: *J Comb Chem*, 11, 755–802.
 [8] Czechtizky, W. and P. Hamley, (2015) Small molecule medicinal chemistry: strategies and technologies. *John*

Wiley & Sons. Marcel Patek, Martin Smrcina, Eric Wegrzyniak, Victor Nikolae, and Andres Mariscal, *Solid-Phase Combinatorial Chemistry*, 103.
 [9] Merritt, A., (2011). High throughput chemistry in drug discovery, in *New Synthetic Technologies in Medicinal Chemistry*. 6–41.
 [10] Kogej, T., Blomberg, N., Greasley, P. J., Mundt, S., Vainio, M. J., Schamberger, J., et al. (2013). Big pharma screening collections: more of the same or unique libraries? The AstraZeneca–Bayer Pharma AG case. *Drug Discov. Today*, 18(19–20), 1014–1024.
 [11] Roughley, S. D.; Jordan, A. M. (2011). The Medicinal Chemist's Toolbox: An Analysis of Reactions Used in the Pursuit of Drug Candidates. *J. Med. Chem.* 54, 3451–3479.
 [12] Shang, J., Sun, H., Liu, H., Chen, F., Tian, S., Pan, P., et al. (2017). Comparative analyses of structural features and scaffold diversity for purchasable compound libraries. *J Cheminform* 9(1), 25.
 [13] Taylor, R. D., M. MacCoss, and A. D. Lawson, (2014). Rings in drugs. *J Med Chem*, 57(14), 5845–59.
 [14] Pitt WR, Parry DM, Perry BG, Groom CR (2009). Heteroaromatic rings of the future. *J. Med. Chem.* 52, 2952–2963.
 [15] Kennedy, J. P., Williams, L., Bridges, T. M., Daniels, R. N., Weaver, D., Lindsley, C. W. (2008). Application of combinatorial chemistry science on modern drug discovery. *J. Comb. Chem.*, 10(3), 345–354.
 [16] Gerencsér J, Balázs Á, Dormán G. (2014) Transition-metal catalyzed coupling reactions in high-throughput library synthesis (Topics in Heterocyclic Chemistry, Vol. 45., Synthesis and Modification of Heterocycles by Metal-Catalyzed Cross-coupling Reactions, Editors: T. Patony, K. Kónya, 305–358.
 [17] Leeson, P.D., (2016). Molecular inflation, attrition and the rule of five. *Adv Drug Deliv Rev*, 101, 22–33.
 [18] Keserü, G. M., Makara, G. M. (2009). The influence of lead discovery strategies on the properties of drug candidates. *Nat. Rev. Drug Discov* 8(3), 203–212.
 [19] Zhang, M. Q., Wilkinson, B. (2007). Drug discovery beyond the 'rule-of-five'. *Curr. Opin. Biotechnol.*, 18(6), 478–488.
 [20] Mondal, M. and A. K. Hirsch, (2015). Dynamic combinatorial chemistry: a tool to facilitate the identification of inhibitors for protein targets. *Chem Soc Rev*, 44(8), 2455–88.
 [21] Frei, P. R., Hevey, and B. Ernst, (2019). Dynamic Combinatorial Chemistry: A New Methodology Comes of Age. *Chemistry*, 25(1), 60–73.
 [22] Ramström, O., Lehn, J. M. (2002). Drug discovery by dynamic combinatorial libraries *Nat. Rev. Drug Discov*, 1(1), 26.
 [23] Herrmann, A. (2009). Dynamic mixtures and combinatorial libraries: imines as probes for molecular evolution at the interface between chemistry and biology. *Organic and Biomolecular Chemistry*, 7(16), 3195–3204.
 [24] Qiu, C., Fang, Z., Zhao, L., He, W., Yang, Z., Liu, C., Guo, K. (2019). Microflow-based dynamic combinatorial chemistry: a microscale synthesis and screening platform for the rapid and accurate identification of bioactive molecules. *React. Chem. Eng.* 4(4), 658–662.
 [25] Neri, D., Lerner, R. A. (2018). DNA-encoded chemical libraries: A selection system based on endowing organic compounds with amplifiable information. *Annu Rev Biochem* 87, 479–502.
 [26] Goodnow, R. A., Dumelin, C. E., Keefe, A. D. (2017). DNA-encoded chemistry: enabling the deeper sampling of chemical space. *Nat Rev Drug Discov* 16(2), 131–147.
 [27] Belyanskaya, S. L., Ding, Y., Callahan, J. F., Lazaar, A. L., Israel, D. I. (2017). Discovering Drugs with DNA-Encoded Library Technology: From Concept to Clinic with an Inhibitor of Soluble Epoxide Hydrolase. *Chem BioChem*, 18(9), 837–842.
 [28] Watts, P., Haswell, S. J. (2003). Microfluidic combinatorial chemistry. *Curr Opin Chem Biol*, 7(3), 380–387.
 [29] Damião, M. C., Galaverna, R., Kozikowski, A. P., Eubanks, J., Pastre, J. C. (2017). Telescoped continuous flow generation of a library of highly substituted 3-thio-1, 2, 4-triazoles. *React. Chem. Eng.*, 2(6), 896–907.

[30] Bogdan, A. R., Organ, M. G. (2018). Flow chemistry as a drug discovery tool: a medicinal chemistry perspective. In *Flow Chemistry for the Synthesis of Heterocycles* (319–341). Springer, Cham.
 [31] Varga L, Nagy T, Dormán G, Kálmán F, Ürge L and Darvas F (2006). Solution-Phase Parallel Synthesis of a Pyridinium-pyrazol-3-olate Inner Salt Library Using a Novel Three-Component Reaction *J. Comb. Chem.* 8, 338–343.
 [32] Schneider, G. (2017). Automating drug discovery. *Nat Rev Drug Discov*, 17(2), 97.
 [33] Werner, M., Kuratli, C., Martin, R. E., Hochstrasser, R., Wechsler, D., Enderle, T. et al. (2014). Seamless Integration of Dose-Response Screening and Flow Chemistry: Efficient Generation of Structure–Activity Relationship Data of β -Secretase (BACE1) Inhibitors. *Angew Chem Int Ed Engl*, 53(6), 1704–1708.
 [34] Vasudevan, A., Argiriadi, M. A., Baranczak, A., Friedman, M. M., Gavriluk, J., Hobson, A. D., et al. (2019). Covalent binders in drug discovery. In *Progress in medicinal chemistry* (Vol. 58, 1–62). Elsevier.
 [35] Evans, M. J., Cravatt, B. F. (2006). Mechanism-based profiling of enzyme families. *Chem. Rev.* 106(8), 3279–3301.
 [36] Tolmachova, K. A., Moroz, Y. S., Konovets, A., Platonov, M. O., Vasylenko, O. V., Borysok, P., et al. (2018). (Chlorosulfonyl) benzenesulfonyl Fluorides–Versatile Building Blocks for Combinatorial Chemistry: Design, Synthesis and Evaluation of a Covalent Inhibitor Library. *ACS Comb. Sci.*, 20(11), 672–680.
 [37] Ábrányi-Balogh, P., Petri, L., Imre, T., Szijj, P., Scarpino, A., Hrast, M., Keserü, G. M. (2018). A road map for prioritizing warheads for cysteine targeting covalent inhibitors. *European journal of medicinal chemistry*, 160, 94–107.
 [38] Hann, M. M., Leach, A. R., Harper, G. (2001). Molecular complexity and its impact on the probability of finding leads for drug discovery. *J Chem Inf Comput Sci*, 41(3), 856–864.
 [39] Keserü, G. M., Erlanson, D. A., Ferenczy, G. G., Hann, M. M., Murray, C. W., Pickett, S. D. (2016). Design principles for fragment libraries: maximizing the value of learnings from pharma fragment-based drug discovery (FBDD) programs for use in academia. *J Med Chem*, 59(18), 8189–8206.
 [40] Murray, C. W., Rees, D. C. (2009). The rise of fragment-based drug discovery. *Nat Chem*, 1(3), 187–192.
 [41] Ferenczy, G. G., Keserü, G. M. (2016). On the enthalpic preference of fragment binding. *MedChemComm*, 7(2), 332–337.
 [42] Ferenczy, G. G., Keserü, G. M. (2020). Thermodynamic profiling for fragment-based lead discovery and optimization. *Expert Opin. Drug Discov*, 15(1), 117–129.
 [43] Bollag, G., Tsai, J., Zhang, J., Zhang, C., Ibrahim, P., Nolop, K., Hirth, P. (2012). Vemurafenib: the first drug approved for BRAF-mutant cancer. *Nat Rev Drug Discov* 11(11), 873–886.
 [44] Seneci, P., Fassina, G., Freccer, V., Miertus, S. (2014). The Effects of Combinatorial Chemistry and Technologies on Drug Discovery and Biotechnology – a Mini Review. *Nova Biotechnol. et Chim.* 13(2), 87–108.
 [45] Potyrai, R. A., Maier, W. F. (Eds.). (2006). *Combinatorial and high-throughput discovery and optimization of catalysts and materials*. CRC Press.
 [46] Dormán György (2000): Paradigmaváltás a felfedező kutatásban (BME MBA Mérnököknek, szakdolgozat)
 [47] Kirschning, A., Solodenko, W., Mennecke, K. (2006). Combining enabling techniques in organic synthesis: continuous flow processes with heterogenized catalysts. *Chem. Eur. J.* 12(23), 5972–5990.
 [48] Keserü, G. M., Soós, T., Kappe, C. O. (2014). Anthropogenic reaction parameters – the missing link between chemical intuition and the available chemical space. *Chem. Soc. Rev.* 43(15), 5387–5399.
 [49] Hessel, V. (2009). Novel process windows-gate to maximizing process intensification via flow chemistry. *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology*, 32(11), 1655–1681.

Tisztelt Olvasó!

A Magyar Kémikusok Lapja 75 éve jelent meg először. Ebből az alkalomból retró sorozatot indítottunk, amelyben az Egyesület elnökeinek és a lap főszerkesztőinek egy-egy korábbi írását közöltük kommentár vagy visszaemlékezés kíséretében. A sorozat sikeres volt, több javaslat érkezett, hogy folytassuk a sort néhány olyan híres személy írásával, aki publikált a lapban és valamilyen módon támogatta az Egyesületet. Ezért mostantól a magyar kémiai élet meghatározó személyiségeinek cikkeiből válogatunk. Várhatóan közöljük majd két analitikus (egy klasszikus és egy műszeres) munkáját, két iskolateremtő (szegedi, debreceni) fizikokémikus publikációját, egy legendás szerves kémiai tankönyv történetét, valamint egy világhíres technológus közleményét.

Reméljük, hogy az idősebbek nosztalgiával, a fiatalabbak a korábbi időszak megismerése iránti érdeklődéssel fogják olvasni ezeket a régi írásokat.

Liptay György

* * *

Megemlékezés Erdey László professzorról



Jubileumi sorozatunk e cikkében Erdey László (1910–1970) kétszeres Kossuth-díjas egyetemi tanár, a Magyar Tudományos Akadémia rendes tagjának munkásságát idézzük fel a „Titrlások kemilumineszcenciás indikátorok jelenlétében” című közleménye alapján.

Erdey professzor Egyesületünk legnagyobb szakosztálya, az Analitikai Szakosztály elnöke volt haláláig. Alakjának méltatásakor hivatkozom Szabadváry Ferenc professzornak a Budapesten 1975-ben tartott Euroanalysis II. konferencia megnyitóján elhangzott beszédére, amelyben Erdey professzorra mint az analitikai kémia utolsó polihisztorára emlékezett.

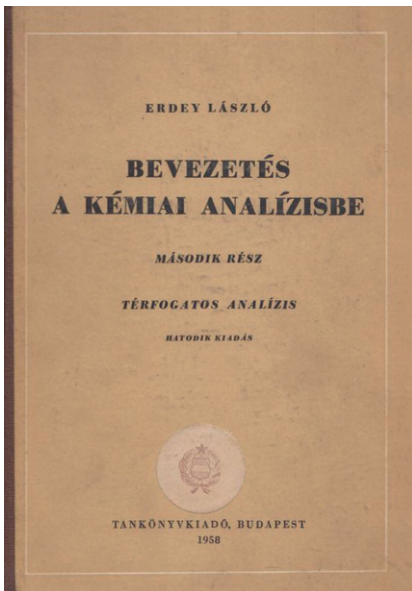
Erdey professzor oktatói és tudományos munkássága a Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Karának Általános Kémia – későbbi nevén Általános és Analitikai Kémiai – Tanszékén teljesedett ki. E tanszék vezetője volt 1949-től haláláig, 1950 és 1952 között a kar dékáni tisztségét is betöltötte. Nagy szerepet vállalt a magyar kémiaoktatás és az analitikai kémiai kutatás korszerűsítésében és megszervezésében, a hazai tudományos köztudatban a modern analitikai kémia megteremtőjeként él. Közel ötszáz publikáció fűződik a nevéhez. Legnagyobb hatású könyvei: a tíz kiadást megélt „Bevezetés a kémiai analízisbe” című, valamint a háromkötetes, német és angol fordításban is megjelent „A kémiai analízis súlyszerinti módszerei I–III.” című művek.

Elkötelezett oktató és kutató volt, műegyetemi eredményei tekintetében megalapozó szerepet játszott többek között a Pázmány Péter Tudományegyetemen – a mai ELTE-n – folytatott korábbi oktatómunkája és a Budapest Székesfővárosi Vegyészeti és Élelmiszer-vizsgáló Intézetben szerzett széles körű tapasztalata. Műegyetemi kutatásai az 1950-es évek első felében – a kor technikai lehetőségeinek megfelelően – a térfogatos analízis, a „nedves analitika” területére irányultak. Nemzetközi mércével mérve is kiemelkedő eredményeket ért el az aszkorbinsavnak redukáló

mérőoldatként való alkalmazásával, az aszkorbinometriával, valamint a kemilumineszcens indikátorok felismerésével és alkalmazásával. Előbbi eredményeiért 1951-ben, utóbbiakért 1958-ban részesült Kossuth-díjban.

A sorozatunkban kiválasztott összefoglaló közlemény lapunk 1958. évi 1. számában jelent meg – ismertette a hazai kémikusokkal egy Kossuth-díjjal elismert terület újabb eredményeit. Az 1950-es évek első felében indultak meg nemzetközi téren is a kemilumineszcenciás jelenségek sav-bázis, illetve redoxreakciók végpontjelzésének alkalmazására irányuló kutatások. Erdey professzor személyes részvételével és irányításával mind tudományos, mind gyakorlati szempontból kiemelkedő eredmények születtek: a kemilumineszcenciás indikátorok kidolgozása és alkalmazása. Amint olvashatjuk, ezen indikátoroknak „nemcsak az az előnyük, hogy az egyébként ismeretes neutralizációs és egyes redox titrlások sötét, át nem látszó, zavaros oldatokban, minden különös műszer alkalmazása nélkül elvégezhető, hanem lehetővé tették olyan új titrlási módszerek kidolgozását is, amelyek indikátorok hiányában, vagy reakciótermékek zavaró hatása miatt nem kerülhettek gyakorlati alkalmazásra”. A közlemény ismerteti azokat a területeket, amelyeken a luminolt, a lucigenint és a lophint sikerrel alkalmazták. Tanulságos olvasmány a mai kollégáknak: láthatják, hogy amikor még nem vagy alig álltak rendelkezésre műszerek, milyen összetett, több lépést, nagy figyelmet igénylő eljárások kidolgozására és felhasználására volt szükség. Megjelenésének idején a közlemény erénye volt az eljárások részletes leírása. Ez az összefoglaló lényegében az Acta Chimica Hungarica, az MTA idegen nyelvű folyóiratában közzétett publikációk alapján készült. A hazai vegyész-társadalom számára abban az időekben indokolt volt egy magyar nyelvű részletes összefoglalás megjelentetése. Az akkori szokások szerint a közlemény végén található köszönetnyilvánításból, valamint az irodalomjegyzékből tudhatja meg az olvasó a kutatásban közreműködők nevét.

Az 1950-es évek második felétől lassan hazánkban is hozzáférhetőkké váltak az analitikusok számára hasznos és fontos műszerek, így Erdey professzor figyelme is a műszeres analitika felé fordult. Az MTA támogatásának köszönhetően a tanszék felszereltsége nagymértékben fejlődött. Elmondhatjuk, hogy munkatársaitól, de önmagától is sokat követelő, a feladatokat, eredményeket kiválóan átlátó tanszékvezető volt. Erről egyetemi hallgatóként közvetlenül, közvetett módon pedig édesanyám – az itt idézett cikk köszönetnyilvánításában említett és irodalomjegyzékében feltüntetett Buzás Lajosné, 1950-től közvetlen munkatársa – által győződhettem meg. Szeretném megemlíteni, akkoriban módomból látni a sötét helyiségben lucigenin jelenlétében keletkezett elbűvölő fényt. Erdey professzor irányításával jelentős eredmények születtek az analitikai kémia számos ágában a térfogatos és súlyszerinti analízisen felül: így említendő többek között a kromatográfia, a spektroszkópia, a fotometria, a radioanalitika és a polarográfia. Az oldatos színképelemzés eljárásának kidolgozása, a lángfotometriás kalciumos titrlás módszere, a Landolt-reakciók analitikai alkalmazásának elmélete, a mikroanalitikai meghatározások kidolgozása szintén Erdey professzor részvételével, irányításával született, a tanszék tekintélyét fémjelző eredmények. Különleges helyet foglalt el a tanszéken folyó kutatásokban a súly szerinti analízisből kifejlődő termikus analízis. A Paulik Ferencsel és Paulik Jenővel közösen kidolgozott derivato-



gráf nemzetközileg is nagy sikert aratott a világon elsőként elégtve ki azt az igényt, hogy azonos mintában szimultán regisztráljuk a mintában hő hatására bekövetkező tömegváltozást, annak deriváltját és minden entalpiaváltozást. A Magyar Optikai Művek több mint 4000 derivatográfot állított elő, a készülékek mintegy 95%-a külföldön nyert alkalmazást mind a kutatásban, mind az iparban. Már Erdey professzor

elhunytá után a Paulik testvérek továbbfejlesztették a berendezést, így született meg a Q-derivatográf, melyet a kutatásban és ipari feladatok megoldásában ma is használnak.

Az analitikai kémia fejlődését jelzi az a körülmény, hogy a Kossuth-díjjal elismert két kutatási eredmény, az aszkorbino-metriás titrálások és a kemilumineszcenciás indikátorok alkalmazása ma már tudományos érdekességnek számít, az új eljárások bevezetése szükségtelenné tette használatukat. Ugyancsak visszaszorult a súly szerinti analízis több alkalmazási területe.

Jelentős kutatásszervezési tevékenysége mellett Erdey professzor szívén viselte a tudományos eredmények bel- és külföldi megismertetését. Munkatársait ösztönözte, hogy az akkori lehetőségek között bekapcsolódjanak a szakmai közéletbe itthon és külföldön. Számos folyóirat szerkesztőbizottságában vett tevékeny részt, támogatásának köszönhetően indult meg 1969-ben a *Journal of Thermal Analysis* – ma már *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* néven ma is nagy sikerű nemzetközi folyóirat.

A Magyar Tudományos Akadémia tagjaként részt vállalt a Kémiai Tudományok Osztályának irányításában is. Két cikluson át volt az osztály titkára, ez ma az osztályelnöki funkciónak felel meg. Számos külföldi szakmai szervezet választotta tagjai közé.

Buzás Ilona

az MKL Szerkesztőbizottságának tagja

„A kémiai analízis súlyszerinti módszerei” és a termoanalitika fejlődése

Erdey professzor 1960-ban megjelent háromkötetes könyve átfogó, elméleti és gyakorlati szempontból nagy hatású mű, ugyanakkor a könyv anyagának korszerű szemléletű gyűjtése és feldolgozása inspirálta és alapozta meg a nagy jelentőségű, nemzetközileg is elismert magyar termoanalitikai kutatás-fejlesztést. Ez a mű az analitikai csapadékokban hevítés hatására bekövetkező változások vizsgálatát és értelmezését is tartalmazza. A vizsgálatokat és értelme-

zésüket – nemzetközileg is úttörő eljárással és berendezéssel – a Paulik testvérek által tervezett termomérlegben folyó mérések tették lehetővé. Ezek a mérések alapozták meg a „Paulik–Paulik–Erdey”-derivatográf megépítését.

A BME Általános és Analitikai Kémiai Tanszékén született meg a világon elsőként az a műszer, amely alkalmas a hevítés hatására egyazon mintában bekövetkező tömegváltozás és entalpiaváltozás szimul-

tán regisztrációjára. Az analitikai csapatok vizsgálatával nyert tapasztalatok további kutatás és fejlesztés alapját képezték a tanszék oktató-kutató munkatársainak és 1970-ig Erdey professzornak a részvételével. Egyrészt bővült a vizsgálatok célja, a vizsgálandó anyagok köre, másrészt új módszerek születtek és nyertek alkalmazást. Ezek az analitikai eljárások és berendezések csakhamar túlléptek a tanszéki kereteken, és mind a hazai, mind a nemzetközi szakmai élet széles körében elterjedtek, mind az elméleti vizsgálatok, mind a gazdasági szempontból is nagy jelentőségű gyakorlati feladatok megoldása terén.

Mindebben meghatározó szerepet játszottak a Paulik fivérek. Eredményeik hazai elismerését jelzi többek között, hogy a Magyar Tudományos Akadémia 1999-ben, 29 évvel Erdey professzor elhunytá után a kiemelkedő tudományos életmű elismerésére alapított Eötvös József-koszorú kitüntetésben részesítette Paulik Ferencet, a kémiai tudomány doktorát. Paulik Jenő ezt a kitüntetést már nem érthette meg 1988-ban bekövetkezett halála miatt.

A kitüntetés alkalmából a *Természet Világában* jelent meg a műegyetemi termoanalitikai kutatásokat bemutató interjú, melyet Szöllősi Melinda készített Paulik Ferencsel, és melyet jó szívvel ajánlunk olvasóink figyelmébe. Az interneten a következő címen találjuk:

<http://www.termeszetvilaga.hu/tv2000/tv0003/eotvos2.html>

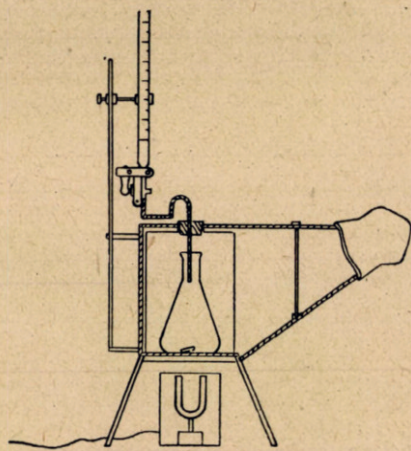
BI



Titrálások kemilumineszcenciás indikátorok jelenlétében

ERDEY LÁSZLÓ

Kenny F. és Kurtz R. B. (1) első dolgozatának megjelenése óta, melyben a „siloxen“-t kemilumineszcenciás redoxindikátornak alkalmazta, számos újabb cikk jelent meg, amelyek a kemilumineszcencia jelenségét térfigatos meghatározások végpontjelzésére ajánlották. Így a luminol, lucigenin és lophin sav-bázis és redox-reakciók végpontjelzésére alkalmazható (10—13, 15—19). A kemilumineszcenciás indikátoroknak nemcsak az az előnyük, hogy az egyébként ismeretes neutralizációs és egyes redox titrálások sötét, át nem látszó, zavaros oldatokban, minden különös műszer alkalmazása nélkül elvégezhetőek, hanem lehetővé tették olyan új titrálási módszerek kidolgozását is, amelyek eddig alkalmas indikátorok hiányában, vagy a reakciótermékek színének zavaró hatása miatt nem kerülhettek gyakorlati alkalmazásra. A kemilumineszcenciás indikátorok olyan redukáló anyagok, amelyek oxidációja során felszabaduló energia az eredeti molekulát, vagy az oxidáció valamelyik termékét gerjeszti és stabilizáció alkalmával az energia egy része fénykvantumok alakjában távozik. A fénykibocsátás, vagyis kemilumineszcencia jelensége akkor következik be, ha egy adott oxidálószer jelenlétében a pH megváltoztatásával, vagy egy adott kedvező pH mellett a redoxpotenciál növelésével az indikátorreakció megindításához szükséges feltételek bekövetkeznek. A fénykibocsátási reakció addig tart, amíg az indikátor, vagy az oxidálószer elhasználódik. Az eddig említett kemilumineszcenciás indikátorok tehát nem tekinthetők reverzibilisnek. A kemilumineszcenciás reakciók katalizátorként ható kiegészítőanyagokra (nehézfémionok) eléggé érzékenyek. Ezek gyakran a fényeffektust igen élénken teszik, tehát előnyösek, sokszor azonban az átmenetileg keletkező peroxidokat bontják és ezzel a lumineszcenciafényt kioltják.

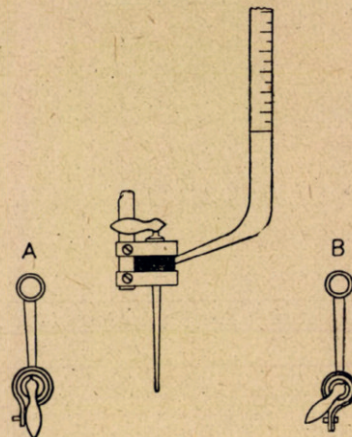


1. ábra

A kemilumineszcenciás titrálásokat sötétben, 5 percig sötétbe szokatott szemmel kell végezni, mert csak ilyen körülmények között keletkezik a szemben kellő mennyiségű látóhő, ami a szükséges érzékenységet biztosítja. A sötétkamra helyettesíthető egy „sötétkamra titriméterrel“ (2, 3), melynek egy igen alkalmas formáját az 1. ábra szemlélteti. A kartonból készült doboz fénymentesen záró oldalajtóján keresztül helyezhetjük be a titráló lombikot, melybe előzőleg üvegesőbe forrasztott vasrudacsát tettünk. A keverőmágnest a doboz alatt helyezük el. A bürettának a titriméterbe érő csövét fekete üvegből készítjük. A sötétben végzett titrálás végpontjának eltalálása cseppnyi pontossággal bizonyos ügyességet kíván. Igen biztonságossá tehető azonban a titrálás, ha a bürettánkat a 2. ábrán látható ütközőlemezzel szereljük

fel. Az ütközőlemezt 1 mm-es vastagságú alumíniumlemezből vágjuk ki és két csavarral erősítjük a bürettacsapra. A lemez alá vékony gumilemez alátétet célszerű helyezni. Az ütközőlemezt úgy állítjuk be, hogy A helyzetben a bürettába töltött mérőoldat folytonosan csurogjon, míg B helyzetben csak lassan csepegjen.

A fényeffektus vizuális észlelését fotomultipliert tartalmazó fotométerrel objektívvé tehetjük és ezzel a szubjektív hibát csökkenthetjük (4).

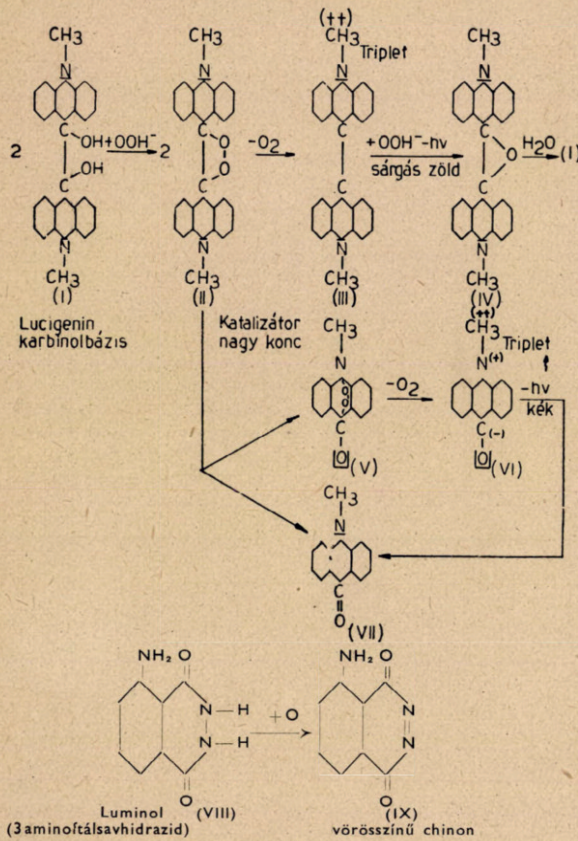


2. ábra

Lucigenin (dimetil diakridiliumnitrát). A kereskedelmi készítmény az I karbinolbázis salétromsavasója, mely vízben jól oldódik, oldata sárgászöld színe intenzíven fluoreszkál. Az oldat éveken át változás nélkül eltartható. Lúgos közegben, hidrogénperoxid hatására tartósan, hígabb oldatban órákig zöld fluoreszcencia fényt bocsát ki. Más oxidálószer nem vált ki fluoreszcencia fényt.* A kemilumineszcencia a koncentrációtól és katalizátoroktól függően pH = 8,6—9,4 fölött észlelhető, azonban pH > 12-nél már rendkívül intenzívvé válik. A kemilumineszcenciának a pH növelésére történő erősödése kapcsolatos a hidrogénperoxid mind nagyobb mértékű disszociációjával: $\text{H}_2\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{H}^+ + \text{OOH}^-$ ($K = \text{kb } 10^{-12}$). A kemilumineszcenciás fény intenzitása arányos a keletkező perhidroxilionok koncentrációjával.** Nagy lucigeninkoncentráció esetében, valamint katalizátorok (etanol, osmiumtetroxid) jelenlétében az eredetileg sárgászöld fény kék színűre változik. A kibocsátott fény spektroszkópos vizsgálata (7, 8, 9) azt mutatta, hogy a sárgászöld fény spektruma megegyezik a lucigenin fluoreszcencia fényének spektrumával, míg a kék lumineszcencia fény spektruma a lucigenin oxidációs terméke, a metilakridon fluoreszcencia fényének spektrumával egyezik. Feltehető tehát, hogy a kétfajta lumineszcencia fényt az említett két molekulafajta emittálja a lefolyó redoxreakció energiájának gerjesztésére. A mellékelt 3. ábrán feltüntetett reakciómechanizmus szerint a reakció a lúgos közegben szabaddá tett I karbinolbázison indul el, amely perhidroxil ionok hatására II lucigeninperoxidá alakul. Ez lassú reakcióban oxigént ad le, miközben a III gerjesztett állapotú molekulává alakul, melyben a

* Egyes redukálószerek (aszkorbinsav, kénessav, nátriumsulfid) autooxidációja során hidrogénperoxid is keletkezik, ami lúgos közegben lucigeninnel kimutatható. Erősen lúgos oldatokban (pH > 12) a lucigenin maga is oxidálódik a levegő oxigénje hatására hidrogénperoxid keletkezéséig, ezért az ilyen oldatok hidrogénperoxid hozzáadása nélkül is igen gyenge kemilumineszcenciát mutatnak.

** Ez a körülmény vezetett rá a hidrogénperoxid lúgos közegben észlelhető önbomlásának, valamint a lucigenin kemilumineszcenciájának helyes értelmezésére (5, 6). A hidrogénperoxid önbomlása ugyanis a H_2O_2 molekula és az OOH^- ion reakciójával magyarázható: $\text{H}_2\text{O}_2 + \text{OOH}^- = \text{H}_2\text{O} + \text{O}_2 + \text{OH}^-$. Ez az oka annak, hogy a hidrogénperoxid önbomlása pH = kb. 12-nél maximumot mutat.



szabaddá váló két magányos elektron triplet állapotban van. Ez a két elektron spinkompenzáció közben singulett állapotba megy át és a molekula sárgászöld színű fluoreszcenciafényt bocsát ki. A keletkező biakridént a perhidroxil ion lucigeninoxiddá oxidálja, mely vízfelvétellel a kiindulási I karbinolbázissá alakul. A reakciósor tehát újból előlről kezdődik és lényegében nem történik más, minthogy a két perhidroxil ion bomlásából keletkezett energia egy része fényvé alakult. A lucigenin tehát a reakció során mint peroxidbontó katalizátor szerepelt és egyidejűleg fényt bocsátott ki. A fénykielbocsátás tehát igen hosszú ideig tart és a fény mennyiség gyakorlatilag a hidrogénperoxid mennyiségétől függ. Ez a körülmény biztosítja a lucigeninnek mint indikátornak reverzibilis működését. Nagy lucigenin-, valamint perhidroxilionkoncentráció esetében, valamint katalizátorok (alkohol, osmiumtetroxid) jelenlétében egy irreverzibilis reakciót is megnyitlik. Ilyen körülmények között nagy a valószínűsége annak, hogy a II lucigeninperoxid molekulák egymással is ütközzenek. Ilyenkor az ütközésben résztvevő molekulák egyike oxigénjét a másiknak adja és maga a III biradikális alakul, az oxigénben dús molekula azonban szétesik az V transzanuláris peroxidá és VII dimetilakridonná. Az V peroxid oxigénleadás közben VI gerjesztett biradikális alakul, melynek elektronrendszere a metilakridonra jellemző kék fluoreszcenciafény kibocsátása közben maga is VII metilakridonná alakul. A metilakridon VII kemilumineszcenciára már nem képes inaktív végtermék. E mellékreakcióval értelmezhető tehát a lumineszcencia színképének eltolódása katalizátorok hatására a kék felé, valamint hogy kellő hidrogénperoxid felesleg jelenlétében végül a lucigenin teljesen metilakridonná alakul. Egyik reakcióban sem szerepelnek a hidrogénperoxidból keletkező szabad gyökök, ezért a gyököket termelő katalizátorok, mint amilyenek az átmeneti termékek komplexei, nem katalizálják lényegesen a lucigenin kemilumineszcenciáját, hanem csak a peroxidbomlást.

a) A lucigenin mint reverzibilis sav-bázis indikátor (10). A lucigenin a többi kemilumineszcenciás sav-bázis

indikátorral szemben a következő előnyökkel rendelkezik: 1. Az indikátorfolyamat reverzibilis, ezért lúg közvetlen titrálását is lehetővé teszi. 2. Katalizátor nélkül is használható. 3. Az indikátorelegy nem fejt ki pufferhatást. 4. A lucigeninből igen keveset (0,5–5 mg) kell egy titráláshoz használni. Az indikátor átcsapási pontja pH = 9,5; 5% etanolt tartalmazó oldatban pH = 8,5. Az indikátor tehát mindazokban az esetekben alkalmazható, ahol a fenoltalein. Szénsavra érzékeny, ezért gyenge savak titrálásánál karbonátszegény lúgot célszerű mérőoldatnak használni. Meleg oldatban a kemilumineszcencia intenzitása sokkal nagyobb. A hidrogénperoxid koncentrációjának növelésével is nő a lumineszcencia fényereje, azonban a peroxid konzerválására használt savat előbb közömbösíteni kell.

Oldatok: Lucigenin 0,5%-os vizes oldata. Egy titráláshoz 0,5–1,0 ml oldatot használunk. Ha a titrálendő oldathoz 5–10 ml etanolt is adunk, elegendő 3–10 csepp indikátort használni.

3%-os hidrogénperoxid. A kereskedésbeli 30%-os oldatból 1+9 arányban való hígítással készítjük. Az oldat szabad savtartalmát nagyobb mennyiség beeméréssel megtitáljuk és a titrálásnál korrekcióba vesszük. Egy titráláshoz 5 ml 3%-os hidrogénperoxidot használunk. Ennek szabad savtartalma által okozott hiba normál oldatokkal való titrálás esetén max. 0,03 ml.

Eljárás. A titrálendő erős vagy gyenge savhoz, illetve erős bázishoz 0,5–1,0 ml 0,5%-os lucigenin indikátort és 5 ml 3%-os hidrogénperoxidot adunk majd ütközőlemezrel ellátott bürettából sötétben megtitáljuk az oldatot. Savak titrálásánál a becsapás helyén felvillanást észlelünk, mely a végponthoz közeledve mind lassabban tűnik el. A végpontban a mérőlúgt tört cseppjétől is az egész oldat egyenesen világít. Bázisok titrálásánál a kiindulási oldat világítása fokozatosan gyengül és a végpontban a mérőlúgt tört cseppjétől eltűnik. Kb. normál töménységű lúgban a lucigenin már a hidrogénperoxid hozzáadása előtt is világít. A titrálást ilyenkor gyorsan kell kezdeni, mert az oldatból sárga csapadék IV lucigeninperoxid kezd kiválni, de ez a titrálás pontosságát nem befolyásolja.

Ha az indikátorral takarékoskodni akarunk, úgy a titrálendő oldathoz csupán 3–10 csepp lucigenin és 5–10 ml etanolt adunk. Az 1–3. táblázatban néhány titrálás eredményét tüntettük fel, összehasonlítva a fenoltalein jelenlétében végzett titrálások eredményével. A lucigenin jelenlétében végzett titrálásokról annyi festéket (krezolvörös, naftolzöld, metililobya, fluorescein) adunk az oldathoz, hogy a titrálás festék-indikátorok jelenlétében már nem volt elvégezhető. Az eredmények igen pontosak. Az aszkorbinsav titrálásánál nem kell az oldathoz hidrogénperoxidot adni, mert az oldat levegő jelenlétében mindig tartalmaz autooxidáció folytán annyi hidrogénperoxidot, amennyi a lumineszcenciafény kiváltásához szükséges.

Igen jó eredmények kaphatók a tej savfokának megállapításánál, ahol az indikátor sokkal érzékenyebb a szokásos festékindikátoroknál. Sikeres alkalmazható az indikátor a következő esetekben: melasz savtartalmának megállapítása, vörösbor és gyümölcslevek, valamint mustár savtartalmának meghatározása, acetilszalícilsav és szalicilsav titrálása alkoholos oldatban, foszfátok és karbonátok kiszorításos titrálása. A vanádium(V)oxid oldat összes savtartalmának meghatározásánál a hidrogénperoxidot főlegesen kell alkalmazni. Nehézfémek [CuSO₄, NiSO₄, Fe₂(SO₄)₃, CoSO₄] oldatának savtartalmát nem sikerült meghatározni, mert ezek oldatában a hidrogénperoxid még a végpont elérése előtt elbomlik.

Zsírok és olajok savszámának meghatározása. A kemilumineszcenciás titrálások különösen sötétzöld zsírok és olajok savszámának meghatározásánál tesznek igen jó szolgálatot. A titrálás azonban teljesen vízmentes oldószerben nem megy, mivel a lucigeninperoxid regenerálásához vízre is szükség van. A titráláshoz tehát olyan oldószerekre van szükség, amelyekben a zsír és olaj, illetve a víz is oldódik.

Növényi olajok és zsírok esetében a bemért anyagot 30 ml amilalkoholban oldottuk, 1–2 csepp 30%-os

hidrogénperoxidot és 1 csepp 0,5%-os lucigeninoldatot adunk hozzá és az oldatot 0,5 n alkoholos káliúggal titráljuk. 20 g napraforgóolajra fogyott 2,45 ml, 10 g repceolajra pedig 8,27 ml 0,5 n KOH. Az alkálilblau 6B indikátor jelenlétében 2,55, illetve 8,72 ml fogyást észleltünk. A fogyások közötti különbség az alkálilblau 6B közismert indikátorhibájával magyarázható.

Ásványolajok esetében benzol + etanol 3 : 2 arányú keverékét használtuk. 20—20 g ásványolajat 40 ml benzol-etanol elegyben oldottunk, 0,2 ml 30%-os H₂O₂-ot, 1 ml hidegen telített alkoholos lucigeninoldatot adtunk hozzá és az elegyet 0,1 n alkoholos káliúggal titráljuk.

Fémzennyeződést tartalmazó használt motorolajokban a hidrogénperoxid erősen bomlik és ezért a titrálás nehézségekre ütközik.

b) *A lucigenin mint reverzibilis redox indikátor.* Ha a lucigenin lúgos oldata valamilyen hidrogénperoxiddal reagáló anyagot tartalmaz, úgy a kemilumineszcencia jelensége csak hidrogénperoxid fölöslegére következik be. A lucigenin tehát hidrogénperoxid mérőoldattal végezhető titrálások végpontjelzésére alkalmas (11). A végpontjelzés teljesen reverzibilis és a titrálás pontossága az eddigi klasszikus redoxtitrálási módszerekével vetekszik.

0,1 n hidrogénperoxid mérőoldat. Az üvegekészülék-ből desztillált vízzel készült és literenként 10 ml n kénsavat tartalmazó 0,1 n hidrogénperoxid oldat hatóértéke naponta legfeljebb 0,1%-ot csökken és még fél év múlva is használható. A mérőoldat arzénessavra kényelmesen beállítható. A beállítást elegendő naponta egyszer elvégezni.

A titrálendő oldat előkészítése. A titrálendő oldatot kb. 100 ml tőrfogatra hígítjuk és annyi n nátronlúgot adunk hozzá, hogy összes szabad lúgtartalma 5—10 ml n nátronlúggal legyen egyenértékű. Az oldatnak ennél több lúgot nem szabad tartalmaznia, mert erősen lúgos közegben a lucigenin hidrogénperoxid nélkül is világít. Ha a titrálendő oldat sav- vagy lúgtartalma ismeretlen, úgy célszerű fenoltalein jelenlétében előzetesen semlegesíteni és 5—10 ml n nátronlúggal meglúgosítani.

Eljárás. 5—50 ml 0,1 n hidrogénperoxidnak megfelelő mennyiségű káliumhexacianoferrat (III), arzénessav, vagy alkálihipohalogenit oldathoz 5—10 ml n nátriumhidroxidot, és 1 ml 0,5%-os lucigenint adunk, 100 ml-re hígítjuk. Az alkálihipobromitokat és hipojoditokat hidegen, a káliumhexacianoferrat (III) és alkáliarzenit oldatokat kb. 80 °C-on titráljuk a kemilumineszcenciafényt tartós megjelenéséig. Az alkáli- és földalkálihipokloritokat hidegen titráljuk addig, míg a kemilumineszcencia állandóvá válik. Ekkor az oldatot kb. 80 °C-ra melegítjük, mire a világítás megszűnik, majd a titrálást a fény tartós megjelenéséig folytatjuk.

Megjegyzés. Ha lúgos hipoklorit oldathoz 2—3 g KBr-ot adunk és néhány percig várunk, a titrálás hidegen is elvégezhető. Az alkáli-hipojoditok nagy sebességgel jódátosodnak a titrálás során, ezért az eredmény csupán pillanatnyi értékeket ad. Halogénátok és halogénitek nem zavarják a titrálásokat. Klórosvíz és brómosvíz szabad halogéntartalma igen pontosan meghatározható a módszerrel. A módszer pontossága a következő adatokból ítélhető meg: 20 ml fogyás esetében 10—10 párhuzamos titrálás pontossága és standard szórása:

$$K_3Fe(CN)_6 = -0,1\%, \pm 0,014 \text{ ml};$$

$$As_2O_3 = +0,05\%, \pm 0,008 \text{ ml};$$

$$NaOCl = -0,04\%, \pm 0,002 \text{ ml};$$

$$NaOBr = -0,04\%, \pm 0,002 \text{ ml}.$$

Króm(III)-ionok meghatározása. Mivel a lucigenin csupán hidrogénperoxidra érzékeny és más oxidáló anyaggal nem ad lumineszcenciafényt, ezért az alkálihipohalogenitek kromátok jelenlétében is megtitrálhatók. Ezt a körülményt króm(III)-ionok meghatározására értékesíthetjük. Alkálihipobromitok ugyanis a króm(III)-ionokat 5—10 perc alatt kromátokká oxidálják és a hipobromit fölöslege 0,1 n hidrogénperoxiddal visszatitrálható. A módszerrel kapott eredmények 10—100 mg Cr meghatározása esetén —0,08 + 0,7% pontossággal közelítik meg a valódi értéket.

Luminol (3-aminophthalsavhidrazid). Az indikátort hidrogénperoxid és katalizátor [hemin, vas(III)cianid] jelenlétében irreverzibilis sav-bázis indikátornak használták (12, 13). Azt tapasztaltuk, hogy a luminol eléggé lúgos közegben redoxindikátornak is használható, mégpedig katalizátor nélkül. A VIII luminol lúgos közegben kék színnel fluoreszkál és minden erős oxidálószer hatására gyors reakcióban kék színű lumineszcenciafényt bocsát ki. A reakció során első lépésben IX vörös színű chinon keletkezik, mely az oxidálószerből keletkező O⁻, vagy O₂⁻ szabad gyökökkel az V-höz hasonló transzannuláris peroxidon keresztül fénykibocsátás közben végül inaktív terméké alakul (14). A luminol tehát egyenértékű oxidálószerrel fogyaszt és ezért például nátriumhipobromit mérőoldattal megtitrálható. Hipokloritokkal a reakció sokkal lassúbb, ezért híg nátriumhipoklorit eléggé tartós világítást idéz elő.

Luminol indikátoroldat készítése: 0,01%-os luminol. 0,1 g luminolt kb. 500 ml vízhez adunk, melyet 5 ml n nátriumhidroxiddal meglúgosítunk. Oldódás után vízzel 1 literre töltjük fel. 0,1 n mérőoldatok alkalmazása esetén az indikátorból 3 ml-t használunk egy titráláshoz. Ez az indikátormennyiség 0,07 ml 0,1 n mérőoldatot fogyaszt, és ezt a túlfogyást pontos mérések-nél korrekcióba vesszük.

A 0,001%-os luminolindikátort az előző oldatból 1 : 10 arányú hígítással készítjük. 0,01 és 0,001 n koncentrációjú mérőoldatokkal való titrálásokról ebből az indikátorból 3 ml-t alkalmazunk. 0,01 n mérőoldatok használata esetén tehát itt is 0,07 ml indikátorhiba észlelhető, amit korrekcióba vehetünk. 0,001 n mérőoldatok használata esetén a nagy hígítás miatt az indikátorreakció oly lassú, hogy egy csepp mérőoldat felesleg hatására tartós világítás lép fel, ezért indikátorhibamentes fogyásokat kapunk. Ilyenkor tehát korrekciót nem alkalmazunk.

Titrálások nátriumhipobromit mérőoldattal (15). 0,1 n NaOBr mérőoldat készítése: 500 ml nehézfémionoktól mentes, üvegekészülék-ből desztillált vizet brómmal rázogatva frissen telítünk. A fel nem oldódott brómról leöntött brómosvizet 500 ml nehézfémionoktól mentes vízzel készített n nátriumhidroxiddal elegyítjük és hatóértékét az alábbiak szerint beállítjuk arzénessavra. Ha az oldat túl tömény, 0,5 n nátriumhidroxiddal hígítjuk. Az oldat sötét hűvös helyen tárolva csak nagyon lassan bromátosodik. Hatóértéke három hónap alatt kb. 17,7%-ot csökken. A bromátosodott régebbi oldat szulfidok és szulfitok meghatározására nem alkalmas.

Bromátmentes 0,1 n hipobromit mérőoldat a sokkal tartósabb alkáli- vagy kalciumhipoklorit oldatból is előállítható, ha literenként kb. 10 g káliumbromidot adunk hozzá.

A hipohalogenitekkel végzett titrálásokat az ammónia és az ammóniumsók zavarják, mert ezek is fogyasztanak mérőoldatot.

Nátriumhipobromit mérőoldattal luminol indikátor mellett a következő anyagok határozhatóak meg lúgos közegben: arzén(III), antimon(III), rodanid, cianid, tioszulfát, szulfid és szulfid ionok. A kéntartalmú anionok esetében különösen előnyös a rendkívül kis egyenértéksúly, mert a hipobromit a ként minden esetben + 6-os oxidációs számúvá oxidálja és ez pl. a szulfid ionok esetében 8 elektronszámváltozást jelent.

Eljárás. A meghatározandó anyag közel semleges oldatát 5—20 ml n nátriumhidroxiddal meglúgosítjuk, 3,0 ml luminol indikátort adunk hozzá, az oldatot vízzel kb. 100 ml-re hígítjuk és sötétben ütközőlemezzel ellátott burettából 0,1 n nátriumhipobromittal megtitráljuk. A mérőoldat beceppenése helyén élénk felvillanások észlelhetők, a lumineszcencia a végpont közelében egyre tartósabb és a végpontot néhány másodpercig tartó, az egész oldatra kiterjedő intenzív fény jelzi. A végpontot akkor találtuk el helyesen, ha további csepp mérőoldat hozzáadására nem észlelhető lumineszcencia. 1 ml 0,1 n NaOBr megfelel 4,9455 mg As₂O₃-nak, 7,288 mg Sb₂O₃-nak, 2,4507 mg NaCN-nak, 1,2146 mg KSCN-nak, 1,9764 mg Na₂S₂O₃-nak, 6,3025 mg Na₂SO₃-nak, illetve 3,0025 mg Na₂S-nak.

Megjegyzés. Antimon(III)-sók titrálása esetén az oldathoz 1 g Seignette-sót kell adni a csapadék kiválás

megakadályozása céljából. Szulfidok és tioszulfátok titrálásakor az oldatot 5 n nátriumhidroxiddal kell meglúgosítani. Szulfidok és szulfidok titrálása csak bromátmentes 0,1 n nátriumhipobromittal végezhető el. Kényelmesebb azonban ezeket ismert mennyiségű hipobromit fölőslégéhez mérni, a hipobromit fölőslégét ismert mennyiségű arzénessavval redukálni és az arzénessav fölőslégét a fentiek szerint megtitrálni.

A módszer még 0,001 n méretben is pontos eredményeket ad, ezért mikroanalitikai célokra is alkalmas. 12 párhuzamos titrálásból 20–20 ml 0,1 n mérőoldat-fogyás esetében a következő pontosságot és standard deviációt határoztuk meg: $As_2O_3 = -0,05\%, \pm 0,04$ ml; $Sb_2O_3 = +0,05\%, \pm 0,01$ ml; $KCN = +0,15\%, \pm 0,018$ ml; $KSCN = +0,75\%, \pm 0,015$ ml; $Na_2S_2O_3 = -0,05\%, \pm 0,023$ ml; $Na_2SO_3 = +0,2\%, \pm 0,020$ ml; $Na_2S = +0,1\%, \pm 0,026$ ml. A titrálások az indikátorfolyamat irreverzibilitása ellenére is pontosan elvégezhetőek, mert a végpont közelsége igen jól észlelhető.

Titrálások NaOCl, vagy klórosmész mérőoldattal (16). A hipokloritok általában lassabban reagálnak az egyes redukálószerrel, mint a hipobromitok, ezért direkt titrálásoknál nem mindig alkalmazhatók. Igen előnyös azonban, hogy a hipokloritok luminállal is lassan reagálnak és így a lumineszcenciafényt tartós megjelenése indikátorhibától mentesen jelzi a végpontot. A lassú indikátorreakció tehát a fordított titrálást is lehetővé teszi.

Tartós 0,1 n nátriumhipoklorit mérőoldat készítése. Nehézfémionoktól mentes, üvegekészülékben desztillált vizet hűtés közben klórgázzal telítünk, majd kevergetés közben annyi 5 n nátriumhidroxidot adunk hozzá, hogy a klór sárga színe eltűnjék, majd még fölőslégen annyi nátronlúgot adagolunk, hogy szabad lúgra nézve kb. 0,5 n koncentrációjú legyen. Tartósítást céljából erős kevergetés közben literenként 20 ml mólos $MgCl_2$ oldatot adunk hozzá és a leülepedett csapadékról a folyadék tisztáját üvegszűrőn leszűrjük. A visszamaradó csapadék a hipokloritok bomlását gyorsító nehézfémionnyomokat magával rántja. Az oldatot 0,5 n nátronlúggal annyira hígítjuk, hogy hipokloritra nézve kb. 0,1 n koncentrációjú legyen.

Az ammónia és az ammóniumsók a meghatározásokat zavarják. A módszer főként arzén(III) titrálásánál ad pontos eredményeket és a végpontjelzés reverzibilitása miatt minden más arzénmeghatározási módszerrel felveszi a versenyt.

Eljárás. A 20–200 mg As_2O_3 -at tartalmazó közel semleges oldatot 10–30 ml n nátriumhidroxiddal meglúgosítjuk, 10 ml 0,01%-os luminolt adunk hozzá és vízzel kb. 100 ml-re hígítjuk. Az oldatot kb. 80 °C-ra melegítjük és sötétben 0,1 n nátriumhipoklorit oldattal addig titráljuk, míg az utolsó csepp mérőoldat hatására az egész oldat tartósan, legalább két percig világítani kezd. 1 ml 0,1 n NaOCl megfelel 4,9455 mg As_2O_3 -nak.

A módszer pontosságára jellemző, hogy hat párhuzamos titrálás középértéke 20 ml fogyás esetében a valódi értéket $\pm 0,05\%$ -nál jobban megközelíti. Standard deviáció: $\pm 0,012$ ml. A módszer még 0,01 n méretben is pontos eredményeket ad.

Hipohalogenitek titrálása 0,1 n nátriumarzenit mérőoldattal (17). Mivel a hipokloritok lúgos oldatához adott luminol már a titrálás elejétől kezdve oxidálódik és titrálás végére esetleg elfogyhat, célszerű a titrálást olyan nátriumarzenit mérőoldattal végezni, melyhez eleve kevés luminolt adunk.

Luminoltartalmú 0,1 n nátriumarzenit mérőoldat. 130 °C-on szárított analitikai tisztaságú As_2O_3 -ból lemerünk 4,9455 g-ot és 5 g NaOH-ot tartalmazó vízben melegítés közben oldjuk. Hígítás után 0,01 g luminolt oldunk benne, majd 1 literre feltöltjük.

Eljárás. A bemért hipoklorit, vagy hipobromit oldathoz 2–10 ml n nátriumhidroxidot adunk, vízzel kb. 100 ml-re hígítjuk és sötétben luminoltartalmú 0,1 n arzénessavval addig titráljuk az oldatot, míg az utolsó csepp hozzáadására már felvillanás nem észlelhető. 1 ml 0,1 n arzénessav 3,7227 mg NaOCl-t, illetve 5,9456 mg NaOBr-ot mér.

Megjegyzés. Hipokloritok esetében célszerű a titrálás elején 2 ml 0,01%-os luminolt is adni az oldathoz, hogy a világítás kezdettől fogva jól észlelhető legyen. Az eredmények hipokloritok esetében 20–50 ml, hipobromitoknál pedig 5–50 ml fogyás intervallumban $\pm 0,1\%$ -ra megközelítik a valódi értéket. Standard szórás: $\pm 0,04$ ml.

A meghatározást klóratok, bromátok és kloritok nagy mennyisége nem zavarja. Klórosvíz, brómosvíz, valamint hipokloritos fehéritők analízisének jobb eredmények kaphatók, mint a jodometriás módszerekkel. Igen előnyös, hogy a titrálást sem a vas(III)-ionok, sem a kloritok nem zavarják.

A hipohalogenitek hidrazinszulfát mérőoldattal is megtitrálható lucigenin indikátor jelenlétében, lúgos közegben. A végpontjelzést az teszi lehetővé, hogy levegő jelenlétében lúgos közegben a hidrazinszulfát hidrogénperoxid keletkezése közben oxidálódik. A hidrogénperoxidot, vagyis a hidrazinszulfát fölőslégét a lucigenin világítással jelzi (18). A módszer hipokloritokra $+0,15\%$ pontos eredményeket ad $\pm 0,05$ ml standard szórás mellett. Hipobromitokra az eredmények valamivel rosszabbak.

A lophin (2-4-5-trifenilimidazol) mint sav-bázis indikátor (19). A lophin lúgos közegben hidrogénperoxid és alkalmas katalizátor jelenlétében sárgásfehér lumineszcenciás fényt bocsát ki. A világítás mechanizmusa analog a luminoléval (20). A lophin az eddigi kemilumineszcenciás indikátorokkal szemben igen egyszerűen szintetizálható (21). A lophin vízben nem, alkoholban azonban jól oldódik, ezért a titrálандó oldathoz 30–40 térf.-% etanolt is kell adnunk. Káliumhexacianoferrát(III) katalizátor jelenlétében a világítás 8,9–9,4 pH felett következik be, tehát az indikátor mindazokban az esetekben alkalmazható, ahol a fenoltalcin, illetve a lucigenin. Az indikátor szénsavra érzékeny. Mivel az indikátorreakció gyors, lúgok közvetlen titrálására az indikátor nem használható. A titrálás 1 n méretben hidegen, 0,1 n méretben azonban meleg, kb. 60 °C-os oldatban végezhető el.

Eljárás. A bemért 5–50 ml erős vagy gyenge sav oldathoz 30 ml etanolt, 5 ml 3%-os hidrogénperoxidot és 3 ml 5%-os káliumhexacianoferrát(III) oldatot adunk. Ha a meghatározandó sav híg (kb. 0,1 n), akkor az oldatot kb. 60 °C-ra melegítjük, majd 1 ml 1%-os acetonos vagy 0,45%-os alkoholos lophinoldatot adunk hozzá és sötétben 0,1 n karbonátmentes nátriumhidroxiddal titráljuk mindaddig, míg az egész oldatra kiterjedő és néhány percig tartó kemilumineszcenciás jelenség észlelhető. Töményebb (kb. 1 n) savakat hidegen titráljuk 1 n nátriumhidroxiddal. A megtitrált oldatból néha fehér csapadék válik ki.

20,0–20,0 ml n sósav 12 párhuzamos titrálásának a középértéke $\pm 0,05\%$ pontossággal egyezett a valódi értékkel. Standard eltérés: $\pm 0,021$ ml. 0,1 n sósav titrálásánál a valódi értéktől való eltérés $+0,25\%$, a standard eltérés $\pm 0,057$ ml. Hasonló pontosság érhető el normál méretben kénsav, salétromsav, ecetsav, citromsav, oxálsav, borkősav, foszforsav (mint kétértékű sav) és bórsav-invertékorkomplex titrálása alkalmával is.

A siloxén, mint redoxindikátor. A siloxén savban nem oldódó szilárd anyag, mely erősen oxidáló anyagok hatására vörös színnel lumineszkál. Ez volt az első kemilumineszcenciás indikátor, melyet vas(II)-ionok cerimetriás (1) és ólomionok kromatometriás titrálásánál indikátornak ajánlottak (22). Az indikátor átcspási redoxpotenciálja erősen savas oldatban $+1,17$ volt normál hidrogénelektrodra vonatkoztatva. Egy titrálásához kb. 100 mg siloxént használtunk. Az indikátor cerimetriás és permanganometriás titrálásoknál 0,04 ml 0,1 n mérőoldatot fogyaszt. Ezt az indikátorhibát pontos titrálásoknál tekintetbe vehetjük. Jodidok titrálásánál az indikátorhiba 0,07 ml 0,1 n mérőoldatnak felel meg. Az indikátor csak határozottan savanyú pH $< 3,5$ oldatban használható.

Az indikátort a Kenny és Kurtz által kidolgozott meghatározásokon kívül a következő redoxtitrálásoknál találtuk alkalmazhatónak: titán(III), ón(II), molibidén(III), jodid, arzén(III), oxalát ionok és hidro-

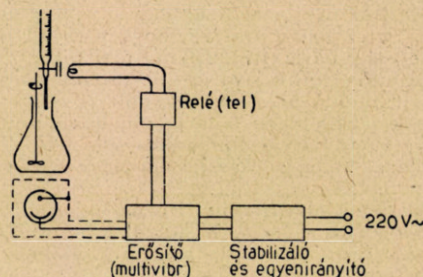
génperoxid *permanganometriás* meghatározásánál; hid-rochinon, jodid, hidrogénperoxid, arzén(III) és oxálsav *cerimetriás* titrálásánál, valamint hidrochinon *kromato-metriás* meghatározásánál. Ezek közül ki kell emelnünk a jodidok közvetlen permanganometriás és cerimetriás meghatározását, mert ez a titrálás eddig a kiváltott jód színének zavaró hatása miatt nem volt elvégezhető.

Eljárás. Az 50–500 mg jodid-iont tartalmazó oldatot 15 ml 2 n kénsavval megsavanyítjuk, kb. 100 ml-re hígítjuk, kb. 60 mg siloxént adunk hozzá és sötétben 0,1 n káliumpermanganát vagy cérium(IV)szul-fát mérőoldattal az egész oldatra kiterjedő tartós vörö-színű lumineszcencia fény megjelenéséig titráljuk. A mérőoldatfogyásból 0,07 ml indikátorkorrekciót le-vonunk.

A módszerrel a valódi értéket $\pm 0,06\%$ pontossá-gal meg lehet közelíteni. A meghatározás lehetővé teszi, hogy egy káliumjodidos jódoldat jodid-ion tartalmát közvetlenül megtitrálhassuk. Fém cinkkel való redukció után egy oldat jód vagy jodát tartalma is megtitrál-ható. A módszer ezüstionok közvetett meghatározására is alkalmas. Ha ugyanis egy ezüstionokat tartalmazó oldathoz ismert mennyiségű káliumjodidot adunk fölös-legben, a csapadékos folyadékban a jodidionok fölös-lege megtitrálható. A módszer lehetővé teszi azt is, hogy a jodidionokat más, ezüstionokkal csapadékot nem adó redukálószer mellett szelektíven megtitrálhassuk. Ha ugyanis az oldat egyik aliquot részét ezüstnitrát nél-

kül, másik részét fölös ezüstnitrát jelenlétében kálium-permanganáttal megtitráljuk, a két fogyás közötti kü-lönbőség a jodidionokat méri.

Automatikus kemilumineszcenciás titrálások. A ke-milumineszcenciás indikátorok lehetővé teszik olyan automatikus titrálóberendezések elkészítését, melyek-nél a titrálendő oldatba semmiféle vezető- vagy indi-



4. ábra

kátorelektrodot nem kell bemártani. A titrálás vég-pontjában keletkező lumineszcenciafényvel egy meg-felelő érzékenyséű fotocellát megvilágítva és a kapott fotoáramot felerősítve, azzal egy relé működtethetünk, mely a buretta csappját elzárja. Egy ilyen készülék diagramja látható a 4. ábrán. A készüléket lucigenines titrálások végzésére szerkesztettük. Egy zöldeskék

1. táblázat

20,00 ml nátriumhidroxid titrálása sósavval

Kon-centráció	Fenolftalein		Lucigenin		Eltérés %
	indikátor mellett				
	mérőol-dat ml	középér-ték ml	mérőol-dat ml	középér-ték ml	
1,0 n	20,35	20,38	20,36	20,35	0,15
	20,40		20,34		
	20,38		20,35		
0,1 n	20,38	20,40	20,38	20,39	0,05
	20,43		20,40		
	20,40		20,38		
0,01 n	20,32	20,35	20,40	20,35	0,00
	20,43		20,30		
	20,30		20,36		

50,00 ml telített kalciumhidroxidoldat titrálása 0,1 n sósavval

Kon-centráció	Fenolftalein		Lucigenin		Eltérés %
	indikátor jelenlétében				
	NaOH ml	középér-ték ml	NaOH ml	középér-ték ml	
1,0 n	19,32	19,34	19,31	19,32	0,10
	19,35		19,33		
	19,35		19,31		
0,1 n	19,38	19,37	19,32	19,31	0,30
	19,35		19,30		
	19,38		19,32		
0,01 n	18,95	19,00	19,10	19,05	0,25
	19,00		19,00		
	19,07		19,04		

2. táblázat

20,00 ml sósav titrálása nátriumhidroxiddal

Kon-centráció	Fenolftalein		Lucigenin		Eltérés %
	indikátor jelenlétében				
	NaOH ml	középér-ték ml	NaOH ml	középér-ték ml	
1,0 n	19,32	19,34	19,31	19,32	0,10
	19,35		19,33		
	19,35		19,31		
0,1 n	19,38	19,37	19,32	19,31	0,30
	19,35		19,30		
	19,38		19,32		
0,01 n	18,95	19,00	19,10	19,05	0,25
	19,00		19,00		
	19,07		19,04		

3. táblázat

Különböző savak titrálása

20 ml kb. 0,1 n sav	Fenolftalein		Lucigenin		Eltérés %
	jelenlétében				
	NaOH ml	középérték ml	NaOH ml	középérték ml	
Kénsav	21,86	21,88	21,80	21,83	0,25
	21,90		21,85		
	21,90		21,85		
Salétromsav	23,30	23,31	23,30	23,29	0,09
	23,30		23,30		
	23,34		23,28		
Foszforsav mint két-bázisú sav	19,00	19,03	19,26	19,26	1,1
	19,07		19,26		
	19,03		19,25		
Citromsav	20,70	20,73	20,65	20,69	0,2
	20,73		20,70		
	20,75		20,73		
Borkósav	20,20	20,23	20,28	20,25	0,1
	20,22		20,25		
	20,26		20,23		
Bórsav invert cukor-al komplexszé alakítva	20,12	20,10	20,08	20,06	0,2
	20,10		20,06		
	20,10		20,05		
Ecetsav	20,84	20,82	20,80	20,80	0,1
	20,80		20,78		
	20,82		20,80		
Oxálsav	19,40	19,39	19,45	19,45	0,3
	19,36		19,46		
	19,42		19,43		
Aszkorbinsav (hidro-génperoxid hozzá-adása nélkül)	20,18	20,18	20,30	20,32	0,7
	20,20		20,35		
	20,16		20,30		

fényre érzékeny antimonréteges fotocellát alkalmaztunk, melynek fotoáramát multivibrációs (billenőkörös) kapcsolással váltóárammá alakítottuk és egy három-fokozatú erősítő segítségével telefonrelére vittük. Ez utóbbi működteti a bűretta zárását és nyitását végző erősáramú relét. A készülék érzékenysége potencióméterrel szabályozható, amelynek segítségével a készülék beállítható arra a legkisebb fényintenzitásra, amely az alapzörejttől még megbízhatóan elválasztható jelet ad. A kísérletek azt mutatták, hogy n és $0,1 n$ méretben végzett sav-bázis titrálásoknál a titrálás végpontja $+0,09$ ml indikátorhibával megbízhatóan meghatározható. A titrálendő oldathoz alkoholt is célszerű adni, mert ennek jelenlétében a lucigenin kemilumineszcenciás fénye a rövidebb hullámhosszak felé eltolódik. A fotocella az ilyen spektrális eloszlású fényre sokkal érzékenyebb.

A kísérletek elvégzésénél Buzás Lajosné, dr. Vigh Katalin és Pólos László, a készülék szerkesztésében pedig Gegus Ernő voltak segítségemre, akiknek ezúton is köszönetemet fejezem ki.

IRODALOM

- (1) *Kenny F. és Kurtz R. B.*: Anal. Chem. 1950. 22, 693.
- (2) *Kenny F. és Kurtz R. B.*: Anal. Chem. 1951. 23, 382.
- (3) *Erdey L. és Buzás I.*: Acta Chim. Hung. 1955. 6, 77.
- (4) *Kenny F. és Kurtz R. B.*: Anal. Chem. 1952. 24, 1218.
- (5) *Erdey L.*: Acta Chim. Hung. 1953. 3, 95.
- (6) *Erdey L.*: Acta Chim. Hung. 1953. 3, 105.
- (7) *Kautsky H. és Kaiser K. H.*: Naturwiss. 1953. 31, 506.
- (8) *Van der Burg A.*: Recueil. 1950. 69, 1525.
- (9) *Kroh I.*: Roczniki Chemii. 28 (1954) 70.
- (10) *Erdey L.*: Acta Chim. Hung. 1953. 3, 81.
- (11) *Erdey L. és Buzás I.*: Acta Chim. Hung. 1955. 6, 77.
- (12) *Kenny F. és Kurtz R. B.*: Anal. Chem. 1951. 23, 339.
- (13) *Ponomarenko A. A., Markarjan N. A. és Korulew A. J.*: Dokl. Akad. Nauk S. S. S. R. (N. S.) 1952. 86, 115.
- (14) *Kurtz R. B.*: Trans. N. J. Acad. Sci. 1954. 16, 339.
- (15) *Erdey L. és Buzás I.*: Acta Chim. Hung. 1955. 6, 93.
- (16) *Erdey L. és Buzás I.*: Acta Chim. Hung. 1955. 6, 115.
- (17) *Erdey L. és Buzás I.*: Acta Chim. Hung. 1955. 6, 123.
- (18) *Erdey L. és Buzás I.*: Acta Chim. Hung. 1955. 6, 127.
- (19) *Erdey L. és Buzás I.*: Anal. Chim. Acta. 1956. 15, 322.
- (20) *Gleu K. és Pfannsteil K.*: J. prakt. Chem. (N. F.) 1936. 146, 149.
- (21) *Cottman E. W.*: J. Chem. Ed. 1937. 14, 236.
- (22) *Kenny F. és Kurtz R. B.*: Anal. Chem. 1953. 25, 1550.

Műszaki lapszemle

A gyapjú savfelvétele. — *Péter Ferenc, Mihalik Béla.* — Magyar Textiltechnika. 3. sz. 1957. aug. 128—132. old. 2. áb. 4 gr. 11 tábl. 9 bibl.

A gyapjú kénsavfelvételét vizsgálták $n/10$ és $n/100$ kénsavoldatokban a léarány és hőmérséklet függvényében. A felvett sav mennyiségét elsősorban nem az oldat töménysége, hanem a sav abszolút mennyisége szabja meg. A hőmérséklet növelésével a gyapjú hidrolízist szenved és károsodik. A gyapjún megkötött sav egy része a hidrolizátummal ismét oldatba megy, és ezért a sav koncentrációja idővel megnő. Célszerű a kötött sav mennyiségét a mért gyapjú súlyára számítani. A savmentesítés elektrodialízissel végezhető.

A nemrozsdásodó saválló acélok gyártása. — *Weigl Ernő.* — Kohászati Lapok. 12. évf. 7. sz. 1957. júl. 275—286. old. 2. áb. 14. gr.

A krómalapú, króm-mangánalapú, a nitrogénnel is ötvözött nemrozsdásodó saválló acélok általános ismertetése után magáról az acélgártásról, melegalakításról, lágyításról, pácolásról, mélyhúzásról és hideghengerlésről ad áttekintést, majd a hazai gyártás jelenlegi állását mutatja be.

Salakbázicitás gyors meghatározása közömbösítési hő mérése alapján. — *Sajó István.* — Kohászati Lapok. 12. évf. 7. sz. 1957. júl. 287—289. old. 2 gr. 1 tábl. 8 bibl.

Szerzők módszerével a salak bázicitása és FeO tartalma egy bemérésből egymás után 5—6 perc alatt meghatározható. A salakminta sósavban való oldásakor megméri a hőmérséklet emelkedést és ezt összehasonlítva görbe segítségével értékeli ki. A bázicitás pontossága 0,2-en belül megegyezik a vegyi elemzésből számított értékekkel, a FeO-tartalom $\pm 1\%$ abszolút hibahatáron belül van, az SiO_2 meghatározás hibája 2,5 abszolút hibaszázalék.

Műanyagok alkalmazásának lehetőségei a magyar hajóiparban. — *Schmelcz Mihály.* — Járművek Mezőgazdasági Gépek. 4. évf. 4. sz. 1957. szept. 169—180. old. 24. áb. 1 gr. 7 tábl. 25 bibl.

Sorra veszi a hőkeményedő és hőlágyuló műanyagokat és ezek egyes fajtáival kapcsolatban felsorolja az alkalmazási lehetőségeket, amelyeket a megfelelő

műszaki jellemzők táblázatos közlésével támogat. Az alkalmazásokkal kapcsolatban a feldolgozás módjait is ismerteti.

Műanyagfelhasználás a varrógépiparban. — *Keresztes Ervin.* — Ruhaipar. 3. évf. 3. sz. 4—9. old. 15. áb.

A vulkánfibre, gumi, aminoplasztok, poliamidok poliuretán, polietilén, PVC, plexiglas és polisztirol tulajdonságainak és jellemzőinek ismertetése után a megfelelő ruhaipari alkalmazást taglalja a műszaki előnyök megemlékezésével.

Műanyagok alkalmazása az építőiparban és a hazai kutatás ezzel kapcsolatos feladatai. — *Thurzó György.* — Magyar Építőipar. 6. évf. 5—6. sz. 1957. szept. 189—193. old. 10. áb. 7. bibl.

Az építőipari segédanyagok, a belső építéssel és a műanyagból készített házak gyakorlati kérdéseivel kapcsolatban ismerteti a műanyagok szerepét a hazai nyersanyag források tekintetében.

Gamma abszorpciós mérések különféle építési anyagokon és talajfajtákon. — *Vessey Ede.* — Magyar Építőipar. 6. évf. 5—6. sz. 218—228. old. 4. áb. 10 gr. 2 tábl. 14 bibl.

A különféle építési anyagokon és talajokon Co^{60} izotóppal végzett abszorpciós mérései tájékoztatást nyújtanak ezeknek az anyagoknak gammaugár elnyeléséről. Mérései kiterjedtek néhány olyan nehézbetonra is, melyeket hazai származású különleges adalékokkal készítettek. Kiderült, hogy a szarvaskői wehrli közel egyenrangúan használható baritadagolással. Ismerteti a telítési felület kiértékelésével kapcsolatos méréseit is.

Kollagénrostok mikrostrukturájának vizsgálata elektronmikroszkóppal. — *Guba Ferenc, Vachter János.* — Bőr- és Cipőtechnika. 7. évf. 4. sz. 1957. aug. 80—82. old. 6. áb. 10 bibl.

Vizsgálataik alapján megállapítják, hogy a cserzőanyagoktól és a cserzési technológiától függően a fibrillák elektronmikroszkópos képe változik. A rostok szerkezetében a legkevesebb változást a tiszta króm-cserzés okozza. Ez azt jelenti, hogy morfológiailag a króm-cserzésű rostok közel állanak a natív kollagénrostok szerkezetéhez.



Kutasi Csaba

A verejtékezés hatása a színes ruházatra

A kánikula térségünkben a nyári időszakban napokon vagy heteken át tartósan magas nappali maximum- és éjszakai minimum-hőmérséklettel járó időszak. A kifejezés latin eredetű, a Nagy Kutya (Canis Maioris) csillagkép és az égbolt legfényesebb csillaga, a Szíriusz latin nevéből (Canicula: kiskutya) származik. Nyelvünkben a kánikula szó először a 16. században fordul elő. Az ilyen időszakban hőháztartásunk beveti a fokozott hőleadást segítő verejtékezést is. A hőség hatása nemcsak egészségügyi és gazdasági szempontból lehet meghatározó, hanem így a színes textiltermékekre is befolyással lehet.

Az emberi szervezet fizikai hőszabályozása vezetési hőleadással (kondukciónal), áramlós hővesztéssel (konvekciónal), elektromágneses hőszugárzással (radiációnal) és párologtatással (evaporációnal) valósul meg. Utóbbi fokozott módja az izzadás, erre akkor kerül sor, ha az általános hőleadási folyamatok már nem biztosítanak hatékony védelmet a túlzott felmelegedés ellen.

A verejtékezéssel járó folyadékvesztés nemcsak a szervezet hőleadásában vesz részt, fontos szerepe van méregtelenítésben és a salakanyagok eltávolításban is. Az izzadás a verejtékmirigyek által továbbított, a bőr felszínére kijutó fehérjementes folyadék. A verejték elválasztása jól elkülöníthető folyamatokban megy végbe. Az első részfolyamatban a vér ozmózisnyomásával megegyező, ún. elsődleges váladék keletkezik, majd a másodikban a mirigyvezeték törekszik az életfontosságú sókat visszanyerni a szervezetnek. Így részlegesen „sómentesített” folyadék kerül a bőrfelületre. Az elektrolitok „visszaszívása” nélkül a szervezet homeosztázisa a sóvesztés miatt összeomlana.

Az izzadmányt két mirigy termeli. Az ekrin verejtékmirigyek a vérplazmából választják ki a savas kémhatású verejtéket, ame-

lyek nyílásai a bőrön mindenütt jelen vannak. Például a tenyéren mintegy 370/cm² verejtékmirigy található, a kézfejen 200/cm², a homlokon 175/cm², a mellkason, hason, alkaron 155/cm², a háton és a lábakon 60–80/cm². Az apokrin verejtékmirigyek lúgos kémhatású váladéka csak a test egyes részein képződik (a hónaljterületeken és az intim területeken).

Az intenzív testmozgás, erőfeszítés során hirtelen megnő a szervezet energiateljesítménye. A tejsav koncentrációja megnövekszik a szövetekben, miután nagyobb mértékben termelődik lebomlási sebességénél. A túlzottan megnövekedett tejsavkoncentráció csökkentésére viszont szükség van. Ennek érdekében a jó oxigénellátással rendelkező izomrostokban a tejsav piroszőlősavvá oxidálódik, amely majd hasznosul.

Az izzadás összetétele és hatása, vizsgálata a színes textíliakon

Az izzadás – az emberi testet érő igénybevétel intenzitásától függően eltérő mennyiségben – tartalmaz vizet, laktátot, karbamidot, aminosavat és ásványi anyagokat. Ezeket felül nyomelemek is előfordulnak, pl. cink (0,4 mg/l), réz (0,3–0,8 mg/l), vas (1 mg/l), króm (0,1 mg/l), nikkel (0,05 mg/l) és ólom (0,05 mg/l). Az izzadmányban jelen levő ionok reakcióba léphetnek a színezék és a szálanyag közötti kötésekkel, hatásuk – általában foltos fakulással járó – színezetváltozást, illetve más, érintkező textilanyagokra lefogást (köznyelvben: befogást) idézhet elő (1. ábra).

A színes textilanyagok izzadással szembeni színtartósság-vizsgálatához az Európában használatos ISO szabvány szerint kétféle oldatot készítenek, az egyik savas, a másik lúgos kémhatású (tekintettel az ekrin és apokrin verejtékmirigyek váladékára). A savas (ecetsavval pH = 5,5-re beállítva) mesterséges verejtékek desztillált vízben feloldott 1-hisztidin-monohidroklorid-monohidráttal (C₆H₉O₂N₃ · HCl · H₂O), nátrium-kloridot (NaCl) és nátrium-dihidrogén-foszfát-hidráttal (Na₂HPO₄ · H₂O) tartalmaznak. A lúgos (nátrium-hidroxiddal pH = 8-ra beállítva) desztillált vízben feloldott 1-hisztidin-monohidroklorid-monohidráttól (C₆H₉O₂N₃ · HCl · H₂O), nátrium-kloridból (NaCl), dinátrium-hidrogén-foszfát-dodekahidráttól (Na₂HPO₄ · 12 H₂O) és dinátrium-hidrogén-foszfát-dihidráttól (Na₂HPO₄ · 2 H₂O) áll (2. ábra).

A tesztelés során a viselendő ruházat anyagának (és egyéb kapcsolatos színes textilterméknek) az emberi verejtékre bekövetkező színváltozását és más textilanyaggal való érintkezésére gyakorolt hatását vizsgálják. Az előzőleg külön-külön megfelelő lúgos és savas kémhatású mesterséges verejtékkoldattal átitatott, majd az összetett (vizsgálandó kelmeminta és a vele szorosan érintkező ún. multifiber szövet) próbadarabot két plexilemez közé szorítva pihentetik 37 °C-on. Célszerű, hogy a vizsgáló laboratórium két készülékkel rendelkezzen, hogy mindig az egyikben a lú-

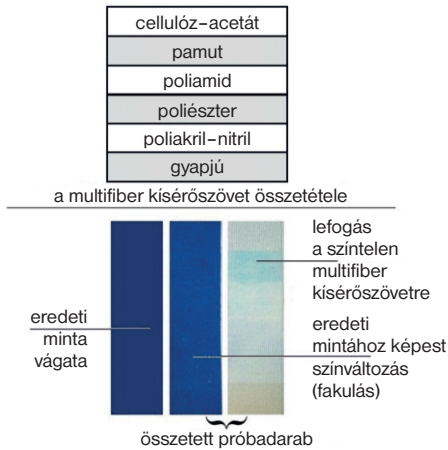
1. ábra. A távozó verejték főbb összetevőinek alakulása különböző testmozgásoknál



összetevő	4,4 nl/mirigy/perc
Na ⁺	27
K ⁺	7,5
Cl ⁻	24
HCO ₃ ⁻	0,4
tejsav	7



összetevő	10,6 nl/mirigy/perc
Na ⁺	65
K ⁺	8,4
Cl ⁻	36
HCO ₃ ⁻	16
tejsav	16



2. ábra.
Az izzadsággal szembeni szintartósság vizsgálata

gos, a másikon a savas minták meghatározását végezze. A színváltozás és lefogás fokozatát [1-től 5-ig a szürke skála alapján (1-es a legrosszabb, 5-ös a kifogástalan)] külön kell megadni a lúgos, ill. savas vizsgálat összetett próbadarabjai alapján.

Pár évtizede megfigyelték, hogy az egyébként jó izzadságállóságú színezékekkel színezett textíliák elváltoznak, ha az izzadsággal átitatott terméket napfény éri. A szabadban dolgozó személyek által hordott, az edzés és sportolás, ill. túrázás közben viselt színes ruházatok csak akkor lesznek szintartóak, ha a mesterséges verítékkal nedvesített textíliák fényvel szembeni szintartóssága kedvező eredményt mutat. Egyértelműen bizonyított, hogy a külön-külön elvégzett izzadsággal, ill. fényvel szembeni szintartóssági vizsgálat kifogástalan eredménye nem jelent garanciát. Ezért fontos a kombinált – egyidőben izzadság- és fényállóság- – tesztelés, ennek jó eredménye esetén lesz ellenálló a verejtéssel nedvesedett és napfénynek kitért színes ruházat. Ennél a meghatározásnál előzőleg az izzadságállóság vizsgálatnál megismert lúgos, ill. savas kémhatású oldattal telítik és kipréselik az anyagtartóba behelyezett vágatot (textildarabot). A vizsgálati mintát kb. 40 °C-os anyaghőmérsékleten éri megfelelő összetételű és idejű mesterséges fénybesugárzás. A vizsgálat folyamán a – megfelelő szűrőképeségű üveghengerekkel határolt – csőszerű „múnapfény” (a Napból érkező és az égbolti sugárzás eredője a 315–800 nm-es hullámsáv) fényforrás körüli pályán körbemozgó és fordulatoként 180°-kal elforduló mintatartóban elhelyezett próbadarab részleges takarásával végzik a meghatározást (az elfordulás a fény- és árnyékhatás váltakozását imitálja).

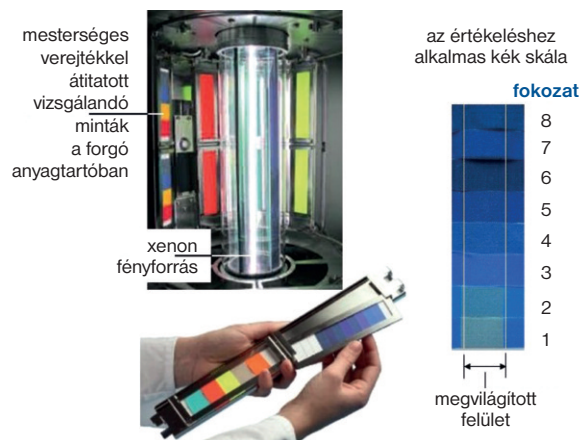
A kedvezőtlen fakulást a nedvesített mintán lévő színezék fény hatására kialakuló, fotokémiai folyamatok miatt bekövetkező ma-

3. ábra. A normál finomságú és a mikroszálalapú multifilamentekből készült, azonos szerkezetű szövetek összehasonlítása



radandó szerkezetváltozása idézi elő. A színezetigénynek megfelelő alacsony színezékkoncentráció fényállóságromláshoz vezet, ugyanakkor a több színezékekkel színezett mikroszál (1 dtex-nél finomabb szálanyagok, amelyekből 10 000 m 1 g-nál kisebb tömegű) termékek esetében (a jóval nagyobb fajlagos felületet érő besugárzás miatt) is kedvezőtlenebb fényállósággal kell számolni (3. ábra).

A fényvel szembeni szintartósságot 1–8 fokozatig terjedő kék skálával határozzák meg. Az európai kék skála különböző fényállóságú (1-es rossz, 8-as kiváló) színezékekkel színezett vágatokból készül, ezért az egyes fokozatoknál különböző színezetek fordulnak elő. Az amerikai kék skála különböző fényállóságú (L2-es rossz, L9-es kiváló) színezékekkel színezett szálanyagokból, ezek arányos keverésével (fonás, majd szövés) készül, így egységes színezetek jellemzik (4–5. ábra).



4. ábra. Izzadságállósággal kombinált fényállóság-vizsgálat



5. ábra. Az izzadság és fényállóság együttes vizsgálati hiányának következménye

A fehér termékeken megjelenő sárgás tónusú izzadságfoltok proteáz enzimet tartalmazó mosószerekkel távolíthatók el.

A színezékek és a kikészítés kiválasztása

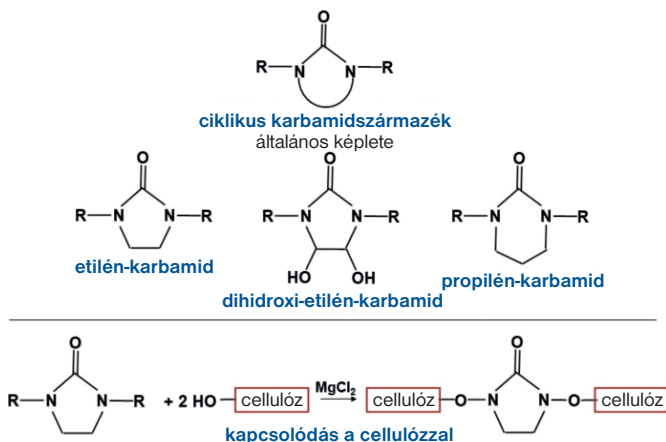
A színezékkiválasztás alapvetően hat a színezés tartósságára. Fő szempont a rendeltetési cél, azaz milyen szintartóssági követelményeknek kell megfelelni a használati igénybevételek során. A gyakorlatban jellemző kombinációk (amikor több színezék egyidejű alkalmazásával alakítható az elvárt színezet) csak akkor járnak kielégítő eredménnyel, ha az alkalmazott egyedekre vonatkozó színezési tulajdonságok egyezősége mellett a szintartóssági képességek is azonosak. Például az izzadsággal, ill. fényvel szembeni ellenálló képesség egységességének hiányakor a színezékek-



KITEKINTÉS

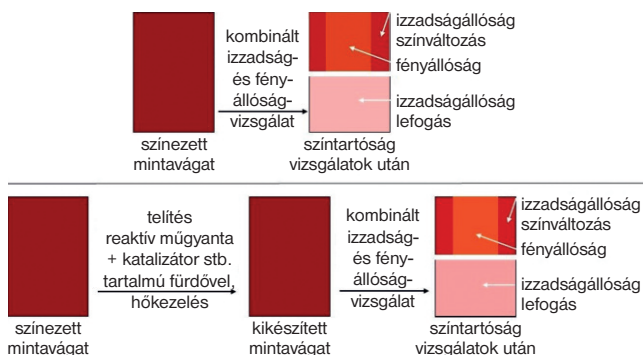
verék erre érzékeny egyede fokozottan elváltozik, emiatt jelentős árnyalatváltozás is bekövetkezik.

Néhány kikészítőszert is negatívan befolyásolhatja az egyes szintartósági tulajdonságokat. A fénnel szembeni szintartóságot ronthatják a különböző műgyantás végkikészítések, főleg direkt és reaktív azoszínezékek esetében, ugyanakkor a csávaszínezékek (kivéve néhány vörös egyedet) alkalmazásakor nem következik be észlelhető fényállóság-csökkenés (6. ábra).



6. ábra. Példák reaktív műgyanta monomerekre

A színváltozás és a fényállóság-csökkenés hatásmechanizmusa a reaktív műgyantás kikészítések esetében még nem kellően ismert. Feltételezhető, hogy az egyes térhálósítók savas hidrolízisük során rontják a fénnel szembeni szintartóságot, ha az N-C kötések könnyebben hidrolizálhatók. Ebben a helyzetben a bomlás következtében visszamaradó NH-csoportot tartalmazó vegyület a felelős a fényállóság romlásért. Egyes – főként direkt színezékeknel alkalmazott – kationos utánkezelő szerek is gyengítik többek között a fénnel szembeni ellenállást. Ezért fontosak a laboratóriumi körülmények között végzett modellkísérletek, ill. az ezeket követő fényállóság-meghatározások is (7. ábra).



7. ábra. Adott reaktív műgyantával végzett kikészítés hatása egyes szintartósági tulajdonságokra

A termékbe bevarrt szalagcímkén előforduló, fogyasztói tájékoztatást nyújtó kezelési jelképek egyike is „árulkodhat”. Amennyiben pl. egy színes pamutpólón az ábra szerinti piktogram (árnyékban szárítandó) szerepel a kezelési jelképsorban, akkor a rendeltetési célra alkalmatlan a termék (8. ábra).

A bőr montírozása speciális textilszínezékekkel

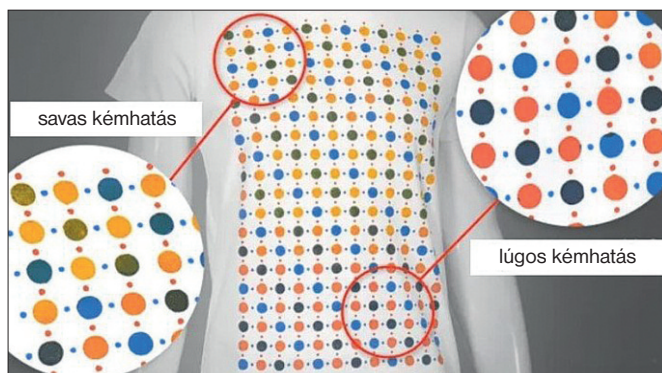
Közismert, hogy a bőr gyengén savas pH-értéke biztosítja a megfelelő klímát és életteret a védőfunkciós mikrobiomnak (a bőr fel-



8. ábra. Árulkodó piktogram a kezelési jelképsorban

színén élő nagyszámú baktérium, vírus, élesztőgomba stb.). Lényeges, hogy a bőrön jelen lévő különböző mikroorganizmusok megfelelő arányban és optimális egyensúlyban legyenek.

A kutatók kifejlesztettek olyan, biológiai anyagokon alapuló színezékeket, amelyek színük megváltoztatásával reagálnak a testből távozó izzadság és más biofolyadékok egyes összetevőinek jelenlétére vagy az ennek következtében a környezetben felszabaduló vegyi anyagokra. A hordható érzékelés lehetőséget ad arra, hogy a ruházat és az egyenruhák segítségével kimutassa és akár mennyiségileg meghatározza a test felszínén található biológiai körülményeket. Így az emberi teljesítmény állapota, az egészség nyomon követhető hordható elektronika nélkül (9. ábra).



9. ábra. Érzékelő póló pH-érzékeny színezékekkel mintázva

Az érzékelő ruházatra például kézi filmnyomással vihető fel a pH-érzékeny indikátorokat, enzimeket, akár laktát-oxidázt tartalmazó nyomópép (selyemfehérjébe – fibroinba – ágyazott színezék, alginát sűrítő és lágyító). Előbbiek a bőr egészséges vagy kiszáradt állapotát jelzik, utóbbi a ruházatot viselő személy fáradtsági szintjét mutatja. A speciális bioaktív színezékekkel preparált ruházatok a színek megváltoztatásával jelezhetik a baktériumok szennyeződését.

IRODALOM

- [1] Bálint P., Orvosi élettan. Budapest, Medicina, 1972.
- [2] Rusznák István és szerzőtársai, Textilkémia II. Budapest, Tankönyvkiadó, 1988.
- [3] Péter Ferenc és szerzőtársai, Színezékek kézikönyv. Budapest, Műszaki Könyvkiadó, 1968.
- [4] Kutasi Csaba, Szintartósági hiányosságok és megelőzésük, Magyar Textiltechnika, 2015/4.
- [5] <https://www.wearabletechnologyinsights.com/articles/20873/smart-fabrics-from-bioactive-inks>



Régi üvegek mai szemmel

Az üveg különleges tulajdonságait a fizika legnagyobb rejtélyei között tartják számon. De nemcsak ezek a tulajdonságok különlegesek, hanem sok olyan tárgy is, amely üvegből vagy üvegszerű anyagból készül.

Az első üveget sziksó-kereskedők állították elő, meséli idősebb Plinius, aki leírja, hogy i. e. 3500 táján föníciai kereskedők járták a Földközi-tenger körüli vidéket, és sziksót árultak. A mumifikálás nem csak Egyiptomban volt virágzó iparág, az eljárás pedig vízelvonó szert is használtak, sziksót: „A monda szerint egyszer sziksó-kereskedők hajója kötött ki itt, és amikor a parton szétszóródva hozzáfogtak az ebédkészítéshez, nem találtak megfelelő követ az edények alátámasztásához, ezért a hajóból előhozott sziksórögöket tették alájuk. Amikor ezek tüzet fogtak, és a part homokjával összekeveredtek, egy új folyadék áttetsző patakja folyt ki belőlük, és ez lett volna az üveg eredete.” [1]

Kutatók is „modellezték” a történetet – és kiderült, hogy amikor fával az edényük alá gyújtottak, valóban keletkezett üveg, mert megolvadt a szilícium-dioxid, a homok fő komponense. Sziksó (szóda, nátrium-karbonát) nélkül ez csak nagyon magas hőmérsékleten (1600 °C fölött) játszódik le, ami nehezen érhető el hagyományos kemencékben: sok ezer évvel ezelőtt elsősorban ez hátráltathatta az üvegekészítést. A sziksó több száz fokkal csökkenti az olvadási hőmérsékletet, tehát olvasztóanyagként (folyósítóanyagként) működik. [2]

Üvegszerű anyagok még az üvegnél is korábban készültek: a mázat körülbelül 7000 éve fedezték fel. A mázkészítési technológiák egyszerre és egymástól függetlenül jelentek meg az Indus völgyében, Egyiptomban és a Közel-Keleten. Az ásatásokon az i. e. 5. évezred végéről származó apró tárgyakat, gyöngyöket találtak, amelyek zsírkből készültek, és már homokból, olvasztóanyagból készültek, színezett máz volt rajtuk. [3]

Valószínű, hogy a mázkészítés felfedezése együtt járt a rézalapú ötvözetek előállításának kezdetével. A tárgyak jellegzetes kék, kékeszöld színével – amely eleinte rézvegyületektől származott – talán fél-drágaköveket akartak utánozni, például a türkizt és a lapis lazulit. Körülbelül 6000

éve Egyiptomban a fajansz vette át a főszerepet a zsírktől (1. ábra).



1. ábra. Színes fajansztégla I. Széthi (i. e. 1323–1279) qantiri palotájának díszítéséből (Louvre)

Az ókori vagy egyiptomi fajansz volt az első „high-tech” kerámia, de nem agyagból készült, hanem szilícium-dioxid, szóda és mész keverékéből (az üveghez hasonlóan). [4] Ennek a fajansznak semmi köze a modern fajanszhoz, amely az itáliai Faenza városáról kapta a nevét. A híres reneszánsz itáliai majolika is fajansz, de ez ónmázzal átlátszatlaná tett, ólommázás cserépedény.

Laboratóriumi kísérletek szerint 800–900 °C már elég ahhoz, hogy az égetés során a szilícium-dioxid egy része megolvadjon, és azokat a szemcséket is „összera-gassza”, amelyek nem olvadtak meg. Ége-

tés közben a fajanszra felvitt máz is elkészült. Az üvegben viszont az összes szilícium-dioxid megolvad a hevítéskor, és ehhez a kemence hőmérsékletének meg kell haladnia az 1000 °C-ot.

Az i. e. 4. évezredtől kialakult egy különleges eljárás, a fritt-készítés. A fritt-homok és durvára aprított olvasztóanyagok „összesütött” keveréke volt. Gyakran olyan fémvegyületet adtak hozzá, amellyel hevítés után teljes anyagában színezett rögöket kaptak. A rögöket porították: a port vagy pigmentként használták, vagy formába öntötték és újrahevítették: ezzel a módszerrel kis tárgyakat állítottak elő. A híres „egyiptomi kék” elsősorban kvarcból és kalcium-réz-tetraszilikátból (kuprorivait, $\text{CaCuSi}_4\text{O}_{10}$) álló fritt – és nem csak Egyiptomban készült. Friss elemzések szerint az alapanyagok keverékét 870 és 1100 °C között hevíthették több órán át. A kék szín a sötétkéktől a halványképig változott a hevítés körülményeitől és a későbbi porítástól függően. Az „egyiptomi zöld” ugyanazokból az anyagokból készülhetett, mint a kék, de például több nátrium és kevesebb réz volt benne, és a keveréket 900–1150 °C-on hevíthették. [3] (A laborokban használt porózus frittet már üvegszemcsekből gyártják.)

2. ábra. Mázás téglák I. Dareiosz szüzei palotájának (kb. i. e. 510) díszítésén (Louvre)





Az üvegszerű anyagokat látványos módon használták fel a monumentális épületeken (1. és 2. ábra).

Egy pigment újra előkerül

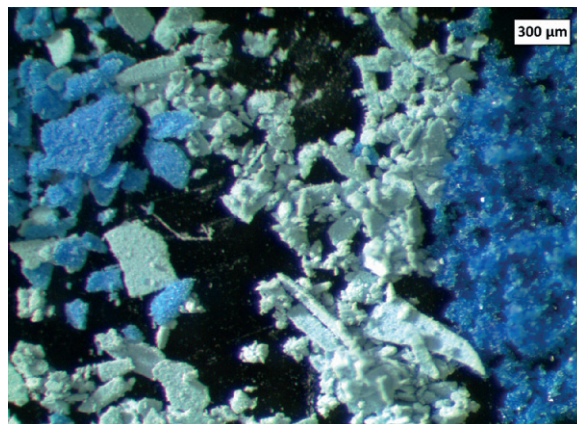
Alig tíz éve állapították meg, hogy a kuprorivait (egyiptomi kék) erős fluoreszcenciát mutat a közeli infravörös tartományban. Ha látható fénnel megvilágítanak egy ókori tárgyat, megtalálhatják rajta a pigmentet – akkor is, ha az szabad szemmel nem látható. Így bizonyították be a British Museumban, hogy az athéni Parthenónról származó szobrok régen színesek voltak.

Azóta kiderült, hogy az egyiptomi kék másra is jó. Mivel az IR-fény mélyebben hatol az élő szövetekbe, mint az UV- vagy a látható fény, és a vegyület fluoreszcenciája elég tartós, felvetődött, hogy a kuprorivaittal a mostaninál részletgazdagabb felvételeket lehetne készíteni a szövetekről.

Van, aki úgy gondolja, hogy a drága lanthanidvegyületeket egyiptomi késsel helyettesíthetnék a biztonsági tintákban, de láthatatlan ujjlenyomatok „kinyomozására” is jó lehet. [5] Az alkalmazások szempontjából újabb biztató jel, hogy amikor a pigmentet napokig keverték meleg vízben, apró méretű lapkára esett ugyan szét, de a fluoreszcenciája megmaradt (3. ábra).

Talán az építészeti alkalmazásokok inspirálták a Berkeley Lab kísérleteit, amelyekben egyiptomi késsel bevont felületek hőmérsékletét mérték. Kiderült, hogy az egyiptomi kék majdnem ugyanannyi fotont bocsát ki, mint amennyit kap. Ez nyilván felveti a napenergia hasznosításának lehetőségét. De nem csak azt: igaz ugyan, hogy

4. ábra. A kétféle színben megjelenő Lükurgosz-serleg (British Museum). A mitológia szerint Lükurgosz a trákiai edonok királya volt. Történetének egyik változatában megtámadta Dionüszoszt és egyik kíséretjét, Ambrosziát. Az ábrán az a jelenet látható, amikor a szőlőindává változott Ambroszia rátekeredik a királyra, hogy fogva tartsa, és Dionüszosz bosszút állhasson rajta



3. ábra. Kuprorivait. Balra és középen: különböző módon szárított, hevített pigmentlapkák. Jobbra: kereskedelemben kapható egyiptomi kék [6]

elsősorban fehér festékekkel igyekeznek hűteni az épületeket, sokan viszont nem szeretik a fehéret. A Berkeley Lab kutatói más fluoreszcens festékekkel is kísérleteznek, és a sorban előkelő helyet foglalhatnak el az egyiptomi kék és rokon vegyületei. A szerencsések Dareiosz palotájában érezhetik magukat. [7]

Fém nanoszemcsék az üvegben

A fajansz nyomán születő ókori üvegek és a modern üvegek összetétele hasonló. A tulajdonságok azonban sokat változhattak: például a szennyezések miatt a korai üvegek nem voltak átlátszók, és még a 17. században is csak Muranóban tudtak elég átlátszó üveget készíteni a jó minőségű tükrökhöz.

A színek széles skáláját teremtette meg egy ma is használt módszer: átmenetifémionok beágyazása az üvegmátrixba. A réz- és a kobalttal rendszerint kék, a titánnal lila, a vanádiummal zöld, a krómmal zöld vagy sárga, a nikkellel barna színt értek el.

Az átlátszatlan vörös üveggel nagyon megdolgoztak az üvegművesek. A vörös a Cu_2O -tól származott. Amikor egy részvegyület semleges vagy oxidáló körülmények között visznek be az üvegbe, „feloldódik”, és a rézionok átlátszó kékké színezik a mátrixot. Redukáló környezetben a réz kicsapódhat, és apró Cu_2O -kristályokat alkothat: ezek pedig vörösek, így az üveg is az lesz. Ha sok kristály van az üvegben, nem engedi át a fényt. A képződő szín azonban érzékeny a környezetre, és redukáló körülmények között nem könnyű „kézben tartani” az olvasztást. A forró vörös üveg is visszaoxidálódhat kékre a levegőn. [8] Az eddigi vizsgálatok szerint a középkori katedrálisok ablakainak vörös lapocskái is a réztől kapták a színüket. [9]

A nanoméretű aggregátumokkal „színezett” üvegek klasszikus példája a Lükurgosz-serleg, amely az i. sz. 4. századból származik (4. ábra). Ha kívülről világítják meg, zöldnek látszik. Ha belülről, a fény zöld komponense befelé verődik vissza, ezért a serleget vörösnek látjuk. Mindössze néhány ókori lelet mutat ilyen hatást, és csak hatvan éve igazolták röntgendiffrakcióval, hogy a serleg valóban üvegből van (a színváltás miatt kételkedtek ebben, de a British Museum is csak 1958-ban vásárolta meg a serleget, és ezután kezdték a szisztematikus vizsgálatokat). A General Electricben (Wembley) mutatták ki, hogy anyaga a jól ismert „szóda, mész, szilícium-dioxid” típusú üveg, amely 0,5% mangánt és 1% nyomelemet, például aranyat és ezüstöt tartalmaz. Felvetődött, hogy a különleges színhatást a hőkezeléskor keletkező, kolloid méretű arany- és ezüstszemcsék fényszórása okozza (a vörös színű aranykolloidokat már száz éve ismerték), de akkoriban még nem tudták kimutatni a kis fémaggregátumokat. Csak az 1980-as évek végén állapították meg elektronmikroszkópos méréssel, hogy a fémrészecskék átmérője többnyire 50–100 nm, röntgenspektroszkópiával pedig azt, hogy



5. ábra. Balra: 18. századi rubinüveg (Corning Museum of Glass). Jobbra: 19. századi áfonyaüveg

kb. 7:3 arányú ezüst-arany ötvözetek, amelyek kevés réz is tartamaznak. [9] A mangán használata nem volt véletlen. A középkori párizsi Saint-Chapelle kápolna ablakainak néhány évvel ezelőtti restaurálásakor kémiai elemzésekre is mód nyílt, és kiderült például, hogy a mangánkoncentrációt minden szín esetében gondosan beállították a redoxfolyamatok szabályozása érdekében(!) – így például a vizsgált vörös színű mintában nem volt oxidáló hatású mangán, ezért redukálódhatott a réz fém nanorészecskékké. [10]

Egy régi-új módszer

Jóval később jelentek meg a rubinüvegek, amelyeknek ugyanaz a titkuk, mint a Lükurgosz-serlegnek, csakhogy a 4. és a 17. század között „elfelejtették” a receptet. Arról, hogy ki fedezte fel újra, megoszlanak a vélemények; több orvost, üvegművest, alkimistát is említenek. A rubinüveg 19. századi változata az Angliában, Amerikában népszerű „cranberry glass”, áfonyaüveg (5. ábra).

A rubinüveg előállításakor aranyot és redukáló sót (például ónsót) adtak a kiindulási anyaghoz. Királyvizes kezelés után 1300 °C-on megolvastották a keveréket, hogy a fém eloszlása egyenletes legyen. A folyékony masszát ezután lassan lehűtötték. Az üveg 600–800 °C körül viszkózusává válik. Ezt az állapotot egy ideig fenntartották, hogy csökkentsék a belső feszültséget. Az aranyatomok ilyenkor még könnyedén mozoghattak az üvegben, és ha né-

hány összetapadt, megindult a kristálynövekedés: több száz vagy akár néhány ezer fématomból álló aggregátumok alakulhattak ki. (Amiről az üvegművesek nyilván nem tudtak. Az utóbbi időben más eljárásokkal, például ionimplantációval vagy ioncserével is létrehozhatnak fémaggregátumokat az üvegben.) [2]

Hogyan befolyásolják a fémaggregátumok a színt? Egyrészt természetesen fényelnyeléssel, amely a fém vegyérték- és vezetési sávja közötti energiakülönbségen múlik, és rendszerint ultraibolya hullámhosszon következik be. Másrészt, amikor az aggregátumok kicsik, nem mindegy, hogy hány atom van a felületen a fémszemcse belsejében levő atomokhoz képest. A felü-



6. ábra. A Fahrenheit férfi parfüm üvege nanométeres rézaggregátumokat tartalmaz

leti atomok szabad elektronjainak mozgásával együtt járó elektronsűrűség-hullámok, a felületi plazmonok is abszorbeálhatnak fotonokat.¹ Az elektronsávok között lejátszódó abszorpcióval együtt ez hozza létre a rubinüveg színét is. [2]

A fémaggregátumok méretének és az üveg színének kapcsolatára szép példa a Fahrenheit férfi parfüm üvege, amelynek tónusa föntről lefelé változik (6. ábra). Az első üvegeket még olyan kemencében hőkezelték, ahol fent és lent eltérő hőmérséklet alakult ki. Ezért az aggregátumok fent nagyobbak, lent kisebbek lettek. A váratlan eredmény láttán a Dior cég a „prototípus” mintájára készítette el a Fahrenheit-üvegeket.

A szín vagy az átlátszóság és az aggregátumok kapcsolatát a mai fotokróm lencsék is illusztrálják. Ezek a lencsék (napszemüvegek) erős fényben sötétek (szokásos fényben világosak). A fotokróm üveglencsékben nanométeres ezüst-halogenid-kristályok vannak. UV-fény hatására az ezüstionok fémzüstté redukálódnak, és „elsötétítik” a szemüveget. Ha nem süt a nap, megfordul a folyamat (a fémzüstöt rézionok oxidálják). A kristályok méretét nagyon gondos hőkezeléssel szabályozzák. A fotokróm műanyag lencsékben inkább szerves molekulákat használnak. s.v.

IRODALOM

- [1] Idősebb Plinius, Természettörténet. Az ásványokról és a művészetekről. XXXVI. könyv, LXV. (Ford.: Darab Ágnes.) Enciklopédia Kiadó, Budapest, 2001.
- [2] J.-C. Lehmann: Az üvegműves mestersége: nanotechnológiák az ókortól! In: La chimie et l'art, EDP Sciences, Les Ulis, 2010; Bulletin de la SFP (2005) 150, 4.
- [3] J.-P. Mohen et al.: Fajansz és üveg az ókortól az ókorig. In: La chimie et l'art, EDP Sciences, Les Ulis, 2010.
- [4] P. T. Nicholson: Faience Technology. UEE, 2009. (digital2.library.ucla.edu/viewItem.do?ark=21198/zz0017 tts, letöltés: 2019. 11. 15.)
- [5] P. Brack: <https://www.chemistryworld.com/features/egyptian-blue-more-than-just-a-colour/9001.article> (letöltés: 2019. 11. 15.)
- [6] D. Johnson-McDaniel et al.: J. Am. Chem. Soc. (2013) 135, 5, 1677.
- [7] <https://heatland.lbl.gov/news/article/egyptian-blue-energy-efficiency> (letöltés: 2019. 11. 15.)
- [8] R. H. Brill: The Chemical Interpretation of the Texts. (<https://www.cmog.org/sites/default/files/collections/EE/EECF0FB5-8390-48EA-8B17-0050D4AADB3F.pdf>, letöltés: 2019. 11. 15.)
- [9] I. Freestone et al.: Gold Bull (2007) 40, 270.
- [10] M. O. J. Y. Hunault et al.: Anal. Chem. (2017) 89, 6277.

¹ Egy friss kutatásban szintén felületi plazmonrezonanciával magyarázzák az első színes fénykép színeinek kialakulását. Ezt a „fotokromatikus kép”-et 1848-ban készítette Edmond Becquerel (a Nobel-díjas Henri Becquerel édesapja): a napfényrel megvilágított, fényérzékenyített ezüstlemezlemezzen szivárványszínű sávok jelentek meg. A színeket egyesek pigmenteknek, mások interferenciának tulajdonították és vagy a fényérzékeny rétegben képződő vegyület oxidációs állapotának változását, vagy fotolitikusan képződő, periodikus ezüstcsíkokat tételeztek fel. A színes rétegek ezüst nanorészecské-diszperzióinak analitikai-morfológiai vizsgálata most azt mutatta ki, hogy minden szín esetében másképp helyezkednek el a nanorészecskék és más a méreteloszlásuk: a kutatók erre alapozzák a plazmonos hipotézist (V. de Saue et al.: Angewandte Chemie (2020) 132.).



TÚL A KÉMIÁN

Az eredeti Stonehenge

Az angliai Salisbury közelében lévő Stonehenge építésével kapcsolatos, már hosszabb ideje ismert tudományos rejtélyek egyike az, hogy a benne lévő kövek jelentős része nem az építési hely közeléből származik, hanem egy több mint 200 kilométerre, Wales-ben lévő kőbányából. A radiokarbon kormeghatározási adatokban viszont érdekes lyuk tátongott: abban a kőfejtőben minden jel szerint több száz évvel a Stonehenge megépülése előtt felhagytak a bányászattal. Bő három évvel ezelőtt a bányához közeli, Waun Mawn nevű lelőhelyen végzett ásások egy Stonehenge-hez meglehetősen hasonló, bő százméteres átmérőjű kő kör nyomait találták meg, de magukból a kövekből mindössze négy maradt mutatóban. A különböző műszerekkel végzett mérések szerint ezeket a köveket i. e. 3200 és 3400 között állíthatták fel, majd nagyjából 400 év elteltével lebontották őket, vagyis éppen akkor, amikor a Stonehenge építése kezdődhetett. Az ebből a korból Salisbury közeléből származó emberi és állati maradványok kémiai analízise megerősítette, hogy szoros lehetett a kapcsolat, a két, viszonylag távoli hely között. A jelek szerint a Waun Mawn környékén lakók arrébb költözhettek pár száz kilométerrel, és magukkal vitték kedvenc kőkörüket is.

Antiquity 95, 85. (2021)



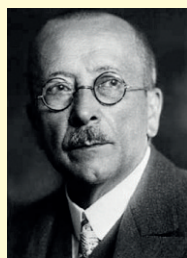
Antarktisi meteorit a múltból

Mintegy 430 000 évvel ezelőtt egy hatalmas meteorit robbant fel a levegőben az Antarktisz felett úgy, hogy nem maradt utána kráter. Az ilyen esemény nagyon kevés nyomot hagy: ebben az esetben egy antarktisi hegységben talált, sok nikkelt tartalmazó, jellegzetes alakú szemcsék léte és elsősorban a



bennük lévő oxigén izotópeloszlása volt a döntő bizonyíték. Az eredmények szerint a félmillió éves meteorit nagyjából tízszer akkora lehetett, mint emlékezetes, 17 méter átmérőjű társa, amely 2013-ban robbant fel Cseljabinszk közelében.

Sci. Adv. 7, eabc1008. (2021)



CENTENÁRIUM

Fritz Pregl: Über eine in der praktischen Medizin verwendbare Jodlösung *Wiener Klinische Wochenschrift* Vol. 34, 288–289. (1921. június 16.)

Fritz Pregl (1869–1930) osztrák–szlovén kémikus volt. Ljubljanában született, egyetemre Grazba járt. 1923-ban kapott Nobel-díjat munkájáért, amely alapvetően hozzájárult a szerves vegyületek kvantitatív mikroanalízisének kifejlesztéséhez, ennek része volt az égetésen alapuló elemanalízis teljesítőképességének növelése. Az itt idézett cikk tanúsága szerint Pregl hozzájárult a 20. század elejétől rutinszerűen használt jódtinktúra összetételének finomításához is.



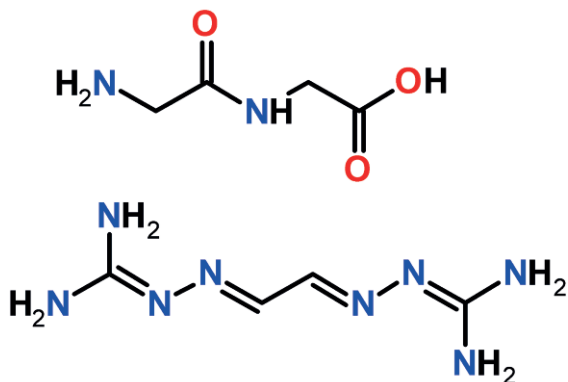
APRÓSÁG

A világ hét legnagyobb gyógyszeripari cégének éves árbevétele külön-külön is meghaladja Magyarország éves költségvetésének a felét.

Energiahatékony CO₂-megkötés

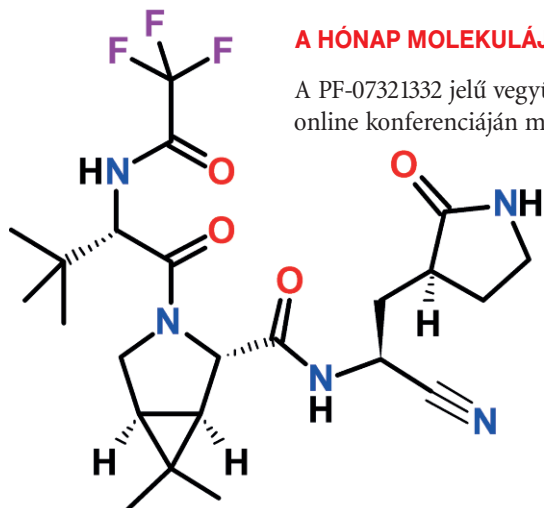
Az éghajlatváltozás ütemének lassításához nagy szükség lenne a Föld légkörében a szén-dioxid-koncentráció növekedésének megállítására. Ennek egy újfajta lehetőségére mutatták rá az Oak Ridge National Laboratory munkatársai. A jelenlegi technológiák leginkább hidroxidok vizes oldatában próbálják megkötni a gázt, ezek regenerálása igen energiaigényes. A javasolt új megoldás diglicin oldatát használja. Az aminocsoport jelenléte miatt a CO₂ hidrogén-karbonátként ebben is megkötődik, majd egy guanidin típusú vegyület hozzáadása után karbonátként szilárdan kiválik. A kristályok csekély melegítés hatására szén-dioxidot vesztenek, s minden kezdődhet előlről. Az új módszer energiaigénye mintegy 3,5 GJ a megkötött CO₂ egy tonnjára vonatkoztatva, a korábbi eljárásoknál ez a szám általában lényegesen nagyobb 5-nél.

Cell Rep. Phys. Sci. 2, 100385. (2021)



Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg1206@gmail.com.

A rovatszerkesztő korábbi írásait is tartalmazó blog elérhető a következő internet-oldalon: http://lenteg.ttk.ptc.hu/ScienceBits/index_magyar.html



A HÓNAP MOLEKULÁJA

A PF-07321332 jelű vegyületet (C₂₃H₃₂F₃N₅O₅) a Pfizer cég az Amerikai Kémiai Társaság 2021-es tavaszi, online konferenciáján mutatta be. Az eddigi eredmények szerint szájon át szedve gátolja a SARS-CoV-2 vírus leglényegesebb proteáz enzimét, így ígéretes jelölt a ma terjedő koronavírus által okozott betegség gyógyítására.

Chem. Eng. News 99(13), 7. (2021)

Elektronegativitás újratöltve

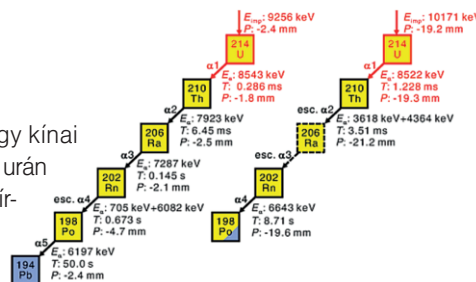
A Linus Pauling által 1932-ben bevezetett elektronegativitás a kémianitásban gyakran használt fogalom, de a modern kémiai kutatásokban általában már nem túl gyakran hasznos iránymutatóként. Két moszkvai kutató ezen próbált változtatni úgy, hogy az azóta részletesebben megismert kémiai tulajdonságok se-

gítségével újradefiniálták a skálát. A fluor elektronegativitása a rögzített pont, ez az új skálán is 4,00, de más elemeké már jelentősen eltér az eddigi szokásostól: a széné például 3,15, a hidrogéné 3,04, a jódé 3,20. Az új számolási módszert kidolgozó tudósok rámutattak arra, hogy a Pauling által definiált skálán időnként súlyos ellentmondások is voltak: némely fém elektronegativitása például nagyobb a hidrogénénél, noha egyértelműen fém-hidridet képez. Az új skálán a nemesgázok is kaptak elektronegativitást, így a legnagyobb érték a neoné lett 4,44-gyel.

Nat. Commun. 12, 2087. (2021)

Könnyűsúlyú uránizotóp

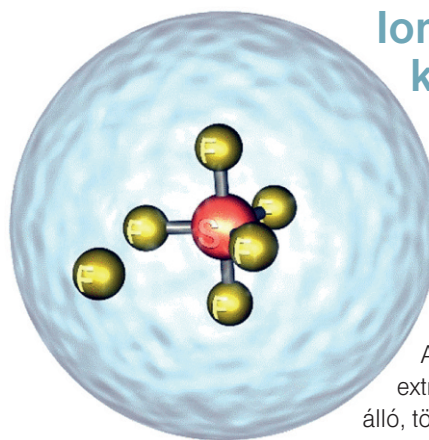
Magfizikai kísérletekkel egy kínai kutatóintézetben nemrég az urán eddig ismeretlen izotópját írták le: volfrám-182 és argon-36 magreakciójában négy neutron kibocsátásával



mellett az urán 214-es tömegszámú izotópjának keletkezését tapasztalták. Ugyanezzel a technikával az urán-216-ról és az urán-218-ról is a korábban pontosabb adatokat nyertek. Ezekben az izotópokban szokatlanul kevés neutron van. Érdekesség viszont, hogy az urán-218 esetében a neutronszám 126, amely éppen a különleges stabilitást eredményező mágikus számok egyike. Az urán-214 kétféle energiájú (8543 és 8522 keV) alfa-részecske kibocsátásával bomlik tórium-210 izotóppá, a felezési idő 0,3 ms.

Phys. Rev. Lett. 126, 152502. (2021)

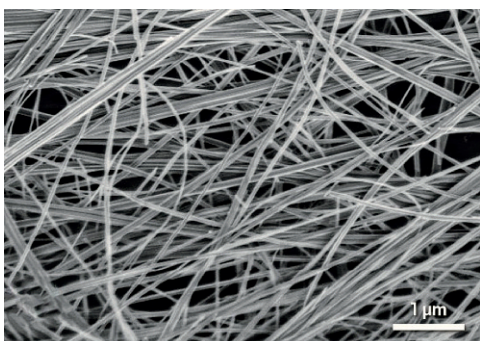
Ionizált kén-hexafluorid



A kén-hexafluorid közismerten nagyon stabil molekula. A belőle egyelektronos oxidációval képződő SF₆⁺-kationról már az 1980-as években azt jósolták az elméleti számítások, hogy létezik, de kimutatni csak a közelmúltban sikerült. A szükséges kísérleti technika elég extrém volt: SF₆-molekulákat héliumból álló, töltött nanocseppek mátrixába vittek be, és ebben tömegspektrométerrel sikerült a várva várt ion jelét kimutatni. Az adatok szerint az SF₆⁺ szerkezete leginkább úgy írható le, mint egy SF₅⁺-ion és a fluoratom által képzett, van der Waals-erőkkel összetartott komplex.

J. Phys. Chem. Lett. 12, 4112. (2021)

Lítium napelem



A napelemek használatának egyik hátránya, hogy az elektromos energiára többnyire nem akkor van szükség, amikor süt a nap. Ezért napsütéses időben gyakran akkumulátorokat töltenek a napcellák, a bennük tárolt energiát pedig csak később használják fel. Ezt a folyamatot teszi egyszerűbbé az a cambridge-i fejlesztés, amelyben egybeépítettek egy lítium-akkumulátort egy napelemmel. A kulcsfelismerés a V₂O₅-ből készített nanoszálak használata volt a katódban. Az elem fontos anyagai a lítiumon kívül még a poli(3-hexiltiofén-2,5-diil) és a grafén-oxid. Tesztkísérletekben a rendszer élettartama meghaladta a 200 feltöltés-kisütési ciklust, de a napenergia felhasználásában elért 2,6%-os hatékonyság még biztosan nem lesz versenyképes a gyakorlati alkalmazásokban.

In memoriam Pálinkó István (1959–2021)

Életének 63. évében rövid, súlyos betegséget követően elhunyt Prof. Dr. Pálinkó István, a Szegedi Tudományegyetem kémiai professzora.



Pálinkó István a szegedi József Attila Tudományegyetemen végzett okleveles vegyészként 1983-ban kitüntetéses diplomával. A kezdetektől fogva a Szerves Kémiai Tanszéken folytatta oktató- és kutatómunkáját. A Kémiai Intézet vezetője, a Kémia Doktori Iskola helyettes vezetője, a Szerves Kémiai Tanszék tanszékvezető-helyettese, valamint a kémiai habilitációs bizottság tagja volt.

Pistiről mindenki, aki ismerte, tudta, hogy hihetetlen munkabírással rendelkezik, napi 12–14 órát dolgozik, sokszor hétfvégén is. Pályája során szinte megszámlálhatatlan közösségi funkciót vállalt el, s ezek mindegyikét maximális erőbedobással végezte. A Természettudományi Kar gazdasági dékánhelyettese volt az 1999–2002-es ciklusban, az egyetem Informatikai Bizottságának tagja a TTK képviselőjeként a 1997–1998-as és a 2003–2010-es időszakokban. A JATE Közalkalmazotti Tanácsának választott tagja 1995-től, majd elnöke 1998–99 végéig (a JATE megszűnéséig), illetve 2011 és 2014 között az SZTE Közalkalmazotti Tanácsának póttagja. A tehetséges fiatalok támogatója volt az SZTE Eötvös Loránd Kollégium egyik védnökeként 2002 óta, valamint az Eötvös Kollégistákért Alapítvány egyik kurátora 2010 és 2016 között. A Kémiai Tanszékcsoport/Intézet helyettes vezetője és az intézet Oktatási Bizottságának vezetője 2013–2018 között. A TTIK Kari Tanácsának póttagja, illetve tagja volt 1990 óta, a Szenátus póttagja 2013–2016 között, az Egyetemi Doktori Tanács póttagja 2016–2019 között. Az angol szakfordítóképzés, majd a természettudományi szakfordítóképzés tantárgyi felelőse volt 2003 óta. A kémia alapszak Eurobachelor pályázatának és a cím megújításához kapcsolódó pályázat készítője. 2017 óta az EOES (European Olympiad of Experimental Science) rendezvényre készülő magyar csapatok kémiamentora, melynek eredményeként az EOES-t 2021-ben Szegeden rendezik meg. Sajnos, ennek lebonyolítását már nem érthette meg. A Szegeden zajlott 2019. évi Biológiai Diákolimpia Tudományos Bizottságának tagjaként is segítette egyetemünk hírnevének öregbítését. Fontosnak tartotta a szomszédos országokbeli egyetemek közti kapcsolatokat, ezért évek óta tartott kurzusokat a Babeş-Bolyai Egyetem vendégprofesszoraként, illetve számos alkalommal vett részt a kolozsvári Vegyészkonferencián, a szovátai Bolyai és a szabadkai Nyári Akadémiákon.

Szenvedélye volt a kémia, a kutatás, a kémiai problémák felismerése és megoldása. Fő kutatási érdeklődése a szerves kémiai katalízis volt, de emellett számos szerves kémiai reakcióhoz kapcsolódó kutatás kísérleti megvalósításában és a folyamatok elméleti modellezésében is részt vett. Pálinkó István a szerves kémia számos tárgyköréből tartott alapozó és haladó előadásokat, valamint szemináriumokat, laboratóriumi gyakorlatokat vegyész, biológus, gyógyszerész, kémiatanár, környezettudományi, kémia, biológia, környezetmérnök és környezettan szakos, továbbá doktoranduszhallgatók számára. Rendkívül népszerű volt a hallgatók körében. Témavezetőként 61 diplomamunkát, 56 szakdolgozatot és 24 tudományos diákköri munkát irányított. Témavezetésével, ill. társ-témavezetésével 14 fő védte meg PhD-fokozatát. Számos helyi, valamint hazai egyetemi doktori fokozat, illetve MTA Doktora cím megszerzésére irányuló eljárás során tevékenykedett bizottsági elnökként, bírálóként és doktori szigorlatok vizsgáztatójaként.

Nemzetközi ismertségű kutató volt; a kémiai tudomány kandidátusa, illetve az MTA doktora címet 1990-ben és 2007-ben érdemelte ki. Pályája során olyan világhírességekkel dolgozott együtt, mint Oláh György, Somorjai Gábor vagy Kenneth Seddon (és a lista korántsem teljes). Kiemelkedő kutatói képességeit jelzi a több mint 280 referált nemzetközi közlemény 569 összesített hatástényezővel és az azokra kapott több mint 3200 független hivatkozás. Kutatásaira mind a hagyományos értelemben vett alaputatásokat (OTKA, NKFIH, OMFB), mind az irányított ipari alaputatásokat (pl. Billiton Aluminium Australia Pty. Ltd., Lhoist Inc., Emirates Global Alumina) támogató szervezetek finanszírozását sikerült elnyernie, és ezeknek a forrásoknak a birtokában több százmillió forintot tudott fordítani az egyetemen folyó kutatások és PhD-projektek lebonyolítására.

Egyéb szakmai szervezetekben is több területen töltött be fontos szerepet: többek között a Magyar Kémikusok Egyesületének főtítkára volt 2015-től, több évig az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny szervezőbizottságának elnöke volt, MTA Doktori képviselő 2016-tól, az MTA Doktori Tanács tagja 2020-tól, továbbá az MTA Katalízis Munkabizottságának titkára a 2010–2017-es időszakban és elnöke volt 2017 óta. Elismerésül Széchenyi István és Széchenyi Professzori Ösztöndíjakban részesült, valamint 2004-ben Oláh György-díjat vehetett át. Több évtizedes egyetemi szolgálatának elismeréseképpen a Szegedi Tudományegyetem Szenátusa a Pro Universitate-díjat adományozta részére 2020-ban.

Pálinkó István jelen írás egyik szerzőjével közösen 2008-ban alapította meg az Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoportot (Material and Solution Structure Research Group, MASOST). A MASOST-ban eddig 14 PhD-hallgató végzett és további 10 hallgató cselekménye van folyamatban. Stike, aki nem érzélgősségéről volt híres, egyszer azt találta mondani, hogy „ez a mi tudományos családunk”. Valamiért úgy alakult (és ennek a titkát már nem fogom tudni megfejtetni), hogy a MASOST-ba került fiatalok pillanatok alatt megtanulták egymástól, hogy hogyan kell egy tudományos közösségben élni, alkotni és viselkedni. Nekünk, a két vezetőnek (Stike beceneve „Főni” volt) ebben nem volt szándékolt, előre eltervezett, aktív szerepünk; sokszor úgy tűnt, hogy elegendő a háttérből figyelni az eseményeket és rendelkezésre állni, amikor szükség volt ránk, akár szakmai, akár emberi dolgokban. Nagyon sok olyan fiatal megfordult a kezeink között,



akik eleve sziporkázóan tehetségesek voltak, de akadtak olyanok is, nem is egy, akik nálunk „nőtték ki” magukat. Nagy örömmünkre a volt MASOST-osok mind a mai napig visszajárnak, évente legalább két olyan alkalom is van, amikor az „aktívak” és a már végzetek összejönnek, férjestől-feleségestől-gyerekestől. Ilyenkor Stike mindig felolvasott egy leltárt az elmúlt időszak „terméséről”, ami miatt soha nem kellett szégyenkezniünk, hiszen az elmúlt 12 évben 113 referált publikáció került ki a csoportból. Mindkettőnk tudományos pályafutásának ez volt a legtermékenyebb időszaka.

Pisti váratlan halálával lezárult egy szakasz, nemcsak a csoport, hanem az egész Kémiai Intézet történetében. Meghatározó karakter volt, igazodási pont, elképesztő enciklopédikus tudással, utánozhatatlan humorérzékkel és kivételes emberséggel. Még szokjuk a hiányát, de ahhoz sok idő kell, hogy megszokjuk.

Az SZTE Kémiai Intézetének munkatársai nevében
Sipos Pál és Tóth Ágota

Orbán Ádám

Amikor halk kopogás után, harsány üdvözléssel kinyitotta a laboratórium ajtaját, szinte kisütött a nap, és mindenki mosolygott. Nem lehetett nem rá figyelni, amikor bárhol megjelent, mert vidámságot és végtelen energiát sugárzott.



Az Orbán Ádám iránti fokozott figyelmet gyermekien örömteli lényével, szorgalmával, tudásával és azzal vívta ki, hogy tudták: szülei a vegyésztársadalom kiválóságai. De azt is érezték, hogy egészségét egy alattomos kór 30 évvel ezelőtt megtámadta, s habár teljesen meggyógyult, a következmények miatt éveinek száma bizonytalan. Ezt ő sem titkolta soha. Csak optimistán nevetett rajta. Most, az évek múltával, életének 55. évében, az alapbetegségtől függetlenül, egy műtéti beavatkozás szövődménye folytán, közel egy év után elhunyt. Mivel a Covid-19 miatt személyesen nem volt lehetőség kommunikációra, a benne lejátszódó gondolatokat már nem tudta elmondani senkinek.

Természetes, hogy szülei egyetlen boldogsága volt, amikor 55 évvel ezelőtt megszületett. Édesanyja, Piskó Ágota okleveles vegyészmérnök, a BME Szerves Kémia és Technológia Tanszékének címzetes egyetemi docense, aki igen sikeres, dinamikus vezetői pályát futott be a textiliparban főmérnöki beosztásban (majd a

textilkémia egyetemi oktatásában). Édesapja, Orbán István szinte az egész vegyésztársadalom által ismert gyógyszervegyész, címzetes egyetemi tanár volt a Műegyetemen, főállásban pedig az Egis Gyógyszergyár vezérigazgatója (aki a WANDER, majd EGYT gyárnevet követően az új név névadója is volt). Világlátására, baloldali világnézetére mindig büszke volt. Ági és István egyetemi évfolyamtársak voltak, ott szövődött az életre szóló és síríg tartó szerelem közöttük. (A Gábor Dénes-díjas Orbán István 2006-ban, 66 évesen, tragikus hirtelenséggel hunyt el.)

A rendkívüli szorgalmú és dinamikus Orbán házaspárnak szintén erős akaratú és tehetséges fia született 1965. február 17-én, aki az Ádám nevet kapta. Adottsága sokoldalú volt, mert a természettudományok mellett a művészetek, a szellemi tudományok és a zene egyformán érdekelt. Sokan megérezték, majd tapasztalták a benne szunnyadó színészi és zenei tehetséget (7 évig hegedült és jazz-zongorázott). De döntenie kellett. Számára is elfogadható volt az apai jó tanács, hogy először egy biztonságos megélhetést adó műszaki képeztést szerezzen, és azt követően élvezze az élet adta művészi lehetőségeket.

Ádám a kísérletes természettudományt és az oktatást választotta a művészetek helyett.

Ezért a Műegyetemen folytatta tanulmányait, és okleveles vegyészmérnöki képeztést szerzett. A diploma és a gondoskodó szülői háttér alapján Ádám ragyogóan sikeres fiatalembernek tűnt, és elkezdte önálló, csillogó életét. A sors azonban közbeszólt. Az aggasztó központi idegrendszeri tünetek erősödését csak műtéti beavatkozással gyógyíthatták, és a sikeres operáció helyreállította egészségét. Így évhalasztás nélkül befejezte egyetemi tanulmányait, és *summa cum laude* minősítéssel diplomázott. Először évekig a Richterben, majd az Egisben vállalt fejlesztőmérnöki állást. Szakterülete a gyógyszer technológia, ezen belül a szilárd gyógyszerformák technológiája volt. A hatóanyagok kioldódását és felszívódását befolyásoló polimer rétegek kémiájával és előállításával foglalkozott a SOTE Gyógyszertudományi Karának támogatásával. Itt készítette el doktori értekezését Zelkó Romána professzor asszony, egyetemi tanár vezetésével. A kiváló munka elismeréseként a SOTE gyógyszeranyagok doktora képeztését nyerte el, majd a kar társult oktatója lett.

Orbán Ádám is élete első nagy szerelmét vette feleségül, amikor megházasodott: a Könnyűipari Műszaki Főiskolát végzett Debreceni Anikó mérnöknővel kötött házasságot, 1990-ben. Családi életükben fontos szerepet kapott a hit, ezért természetes volt, hogy három gyermekük született: 1992-ben Áron, 1996-ban Gábor nevű fiuk és 1998-ban Noémi kislányuk. A boldog családi élet termékenyen hatott Ádám szakmai teljesítményére is. Elismert gyógyszer technológus lett az Egisben, ahol sok előadást is tartott és több szabadalom társszerzőjévé vált a polimer bevonatú tabletták témakörében.

A boldog családi élet idilljét először édesapja, Orbán István vezérigazgató hirtelen halála dúlta fel, de a még nagyobb megrázkódtatás első unokája születésének idejére esett. Ekkor váratlanul egy neurológiai operáció vált szükségessé. Ádám másodszori operációja már nem volt sikeres, és állapota miatt a Szeretőkórház belgyógyászati osztályára került, ahol a gondos ápolás ellenére 2020. november 22-én csendesen elhunyt.

Egy, az életet és családját nagyon szerető és nagyon szerethető, tervekkel és vágyakkal teli kedves munkatársunktól kell búcsút vennünk.

Nyugodjék békében.

Tömpe Péter

az MKL Szerkesztőbizottságának tagja

Az MTA 194. közgyűlése

Az MTA 194. közgyűlésére hazánkba látogatott Karikó Katalin Széchenyi-díjas kutató, a University of Pennsylvania professzora és a BioNTech alelnöke, a koronavírus elleni mRNS-alapú vakcina kidolgozásában elvülhetetlen érdemeket szerzett magyar tudós, aki nyitólőadást tartott „A mRNS fejlesztése terápiára” címmel. A Magyarországon kezdődő kutatópályát bemutató nagy sikerű előadás után az MTA elnöke, Freund Tamás, megköszönve az előadást, átnyújtotta Karikó Katalinnak az MTA emlékérmét.



Az előadást követően átadták az MTA Elnökségének 2021. évi díjait. Többek között

Akadémiai Díjat kapott

Tóth Imre, az MTA doktora, a Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar Fizikai Kémiai Tanszékének professor emeritusa a mágneses magrezonancián alapuló képalakító módszerekben nélkülözhetetlen fémkomplex kontrasztanyagok szintézisében és fizikai kémiai jellemzésében elért kimagasló eredményeiért, a multinukleáris NMR-módszerek széles körű koordinációs kémiai alkalmazásáért és fejlesztéséért; a magyar kémiai kutatások nemzetközi elismertségének öregbítéséért; valamint kiemelkedő kutatói, egyetemi oktatói munkájáért, iskola-teremtő tevékenységéért és példamutató szakmai közéleti aktivitásáért.

Wahrmann Mór-érmét kapott

Zettwitz Sándor, a 77 Elektronika Kft. ügyvezető igazgatója több évtizedes innovatív tevékenységéért, az első magyar ásványgyapotgyártó technológia és gépsor kifejlesztéséért és megvalósításáért, a vércukor-önellenőrzés lehetőségét megteremtő első magyar egyéni vércukormérő készülék kifejlesztéséért, gyártástechnológiájának kidolgozásáért, a projekt irányításáért, az automata vizeletanalizáló rendszer kifejlesztése terén elért eredményeiért, továbbá az innovációs kultúra kialakításáért és kivételesen eredményes vezetői munkásságáért.

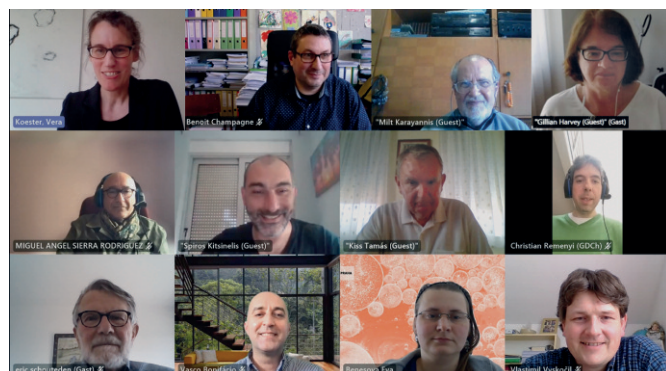
Karikó Katalinnak és a kitüntetetteknek jó egészséget és további sikereket kívánunk!

A közgyűléshez kapcsolódóan, a szokásoknak megfelelően, a tudományos osztályok tudományos üléseket tartanak. A Kémiai Osztály „Szunnyadó affinitások felfedezése: Közérthetően a homogén, heterogén, organo-, bio- és elektrokatalízisről” címmel szervezett tudományos ülést.

KT

A Chemistry Europe-tagszervezetekhez tartozó magazinok szerkesztőinek ülésén készült jegyzőkönyv

2021. március 30.



Résztevők

Professor Eric Schouteden, *Mens & Molecule* and Vice President of the Royal Flemish Chemical Society, Belgium

Professor Benoît Champagne, *Chimie Nouvelle*, Belgium

Professor Vlastimil Vyskočil, *Chemické listy*, Csehország

Professor Eva Benešová, *Chemické listy*, Csehország

Professor Milt Karayannis, *Χημικά Χρονικά*, CHIMICA CHRONIKA, Görögország

Professor Spiros Kitsinelis, *Χημικά Χρονικά*, CHIMICA CHRONIKA, Görögország

Dr. Christian Remenyi, *Nachrichten aus der Chemie*, Németország

Professor Tamás Kiss, *Magyar Kémikusok Lapja*, Magyarország

Professor Vasco Bonifácio, *Química*, Portugália

Professor Miguel A. Sierra, *Anales de Química*, Spanyolország

Dr. Gillian Harvey, *Chimia*, Svájc

Dr. Vera Koester, *ChemistryViews.org* (elnök)

Diszkusszió, eredmények és feladatok

A kétórás online ülésen a magazinok szerkesztői arra helyezték a hangsúlyt, hogy tovább erősítsék a szerkesztőségek hálózatát, megosszák elképzeléseiket és megtárgyalják közös dolgaikat.

A szerkesztőségek egyik legnagyobb kihívása, hogy növeljék olvasói táborukat, így szerzőket is könnyebb lesz találniuk. Sokak szerint nagy előnnyel járhat, ha a magazinok cikkei az országhatárokon túl is olvashatók. Ehhez már megkezdődtek a lépések a közösségi média révén, illetve az ugyanazon nyelvet beszélő országok magazinjai között. Sok szerkesztő felvetette, hogy angolul is publikálhatnának. Többféle javaslat született, melyek a teljes cikkektől az angol nyelvű összefoglalóig terjedtek.

Tennivalók mindenki számára: *Indulásként, a láthatóság növelése érdekében, a ChemistryViews felajánlja, hogy megjeleneti a magazinok válogatott cikkeinek rövid összefoglalóját.*

Európai platform a nemzeti magazinok cikkei számára

A résztvevők közös igénye, hogy a ChemistryViews szolgáltatson olyan fórumot/platformot, ahol a nemzeti magazinok tartalomjegyzéke rendszeresen megjelenhet. Ennek célja:



a) Megkönnyíti a szerkesztőségek számára az együttműködést. Az információ csak az együttműködő szerkesztőségek számára lenne hozzáférhető. Ezek az oldalak informálnának a többiek publikációiról. A cikkek fordítása lehetséges, cikkek más országokból közölhetők rövid összefoglalók formájában, közös témák együtt feldolgozhatók stb. A gondolat azt célozza, hogy elosztási pont jöjjön létre az információk megosztása és az együttműködés érdekében.

Évente egyszer minden szerkesztőség küldene egy angol nyelvű cikket a társmagazinoknak publikálásra vagy közös cikként/projektként való kimunkálásra.

b) Áttekintést ad a kémikusközösségnek arról, hogy mi történik Európában. Ez olyan, könnyen kereshető tartalomjegyzék lehet, amely a ChemistryViewson át érhető el és rendszeresen frissül, mindenki számára gyorsan és világosan összegzi az egyes országok magazinjainak legfrissebb tartalmát. Ez szintén fokozza a részt vevő magazinok láthatóságát.

Tennivalók: A ChemistryViews tervezett átszervezésével kapcsolatban ehhez az elgondoláshoz a Chemistry Europe Council egyetértése szükséges, velük kell a kereteket kidolgozni és együttműködni. Vera Koester eljár ebben az ügyben.

A magazinok információs oldala

A résztvevők egyetértettek abban, hogy a Chemistry Europe-tag-szervezetek magazinjainak legyen információs oldala, mely tartalmazza a magazinok fedőlapját és a magazinok elérhetőségét (link), hogy azonnal látható legyen, melyik európai társaság magazinjáról van szó. Ehhez a következő linket hozzuk létre:

<https://www.chemistryviews.org/membermagazines>

A Chemistry Europe információs oldala:

https://www.chemistryviews.org/details/society/134d1eb2456/Chemistry_Europe.html

További elképzelések: Ehhez a magazinbemutató oldalhoz kapcsolódva, a láthatóság növelése érdekében, a ChemistryViews indíthat egy sorozatot, hogy röviden bemutassa az egyes magazinokat. A szerkesztőséget a főszerkesztő vagy a szerkesztőség egy tagja mutathatná be rövid interjúban, amit néhány adat követhet, majd linkek egy-két új, válogatott közleményhez.

Tennivaló mindenkinek: Lépjenek kapcsolatba Vera Koesterrel, ha vannak ötleteik ezekről a cikkekről, illetve ha az első között szeretnének lenni.

Egyéb egyéni indítványok, melyekről szó esett:

- A ChemistryViewsnak az a része, amely az egyes országok magazinjainak tartalmával foglalkozik, közölhetne híreket arról, hogy mi történik a különböző kémiai tanszékeken – pl. ha egy hallgató posztdok-állást keres egy másik országban, segíthetne az álláskeresésben.
- Kérdés: Tud a Wiley/ChemistryViews anyagilag segíteni a lefordított cikkek nyelvi lektorálásában? Ez a legnagyobb akadály a lapok közötti cikkek megosztásának.
- Az ehhez hasonló megbeszélések két évente túl ritkák. Javaslatt volt a résztvevőktől, hogy fél évente lehetnének online találkozók, személyes találkozások pedig két évente. Vera Koester 2021. szeptemberre megszervezi a következő online találkozót.

A 2020. év legjobb cikke a Magyar Kémikusok Lapjában

A szokásoknak megfelelően tartottuk meg az MKL-ben 2020-ban megjelent legjobb közlemény kiválasztására irányuló internetes szavazást. A szavazásra rendelkezésre álló 3 hét alatt összesen 254-en nyilvánítottak véleményt. Ez a korábbiakhoz képest csökkent résztvevőt jelent, mert a résztvevők száma a korábbi években mindig meghaladta a 350-et, a legjobb évben a 450-et is.

Az 5% fölötti szavazatot kapott cikkek listája az alábbi:

47 szavazat (18,50%)	Lente Gábor: Vegyészletek
41 szavazat (16,14%)	Csupor Dezső: Ködpszikáló-sorozat (Oxigén víz, Levegőt! Élelmiszer-e a kender? Betiltották a homeopátiát?)
37 szavazat (14,57%)	Villányi Attila: In memoriam kémia
27 szavazat (10,63%)	Lente Gábor: Tudomány-e az ismeretterjesztés? Merengések a Természet-tudományi Közöny alapításának 150. évfordulóján
21 szavazat (8,27%)	Ujváry István: A dizájn drogok kémiaja napjainkban
20 szavazat (7,87%)	Braun Tibor: A szerelem molekulái. Válogatott szemelvények a személyi érzelmek kémijából
20 szavazat (7,87%)	Lente Gábor: A szokások hatalma: a 2019-es IgNobel-díjak
15 szavazat (5,91%)	Bárány Zsolt Béla: Az új NAT és a kémia – avagy talán semmi sem tisztán fehér vagy fekete
15 szavazat (5,91%)	Keglevich György: Trendek és lehetőségek az ipari szerves kémia környezetbarátabbá tételére
14 szavazat (5,51%)	Lente Gábor: Téalapó vitathatatlanul itt van, és algoritmusokat hozott
13 szavazat (5,12%)	Keglevich Kristóf: Tanár úr kéri

Gratulálunk a legjobb cikket író szerzőinknek, és várjuk továbbra is olvasóink közérdeklődésre számot tartó írásait. Szokásunknak megfelelően az 1–3. helyezetteket MKE Nívódíjjal jutalmazzuk, melyeket küldöttközgyűlésünkön adunk át.

A szavazási érdeklődés csökkenése miatt gondolkodnunk kell azon, hogyan újítsunk a legjobb cikk kiválasztásának módszerén. Ebben szeretnénk olvasóink véleményét is kikérni. Akinek van ötlete, hogyan tudnánk olvasóink érdeklődését jobban felkelteni erre a szerintünk fontos véleményalkotási lehetőségre, írjon Szerkesztőségünknek (mkl@mke.org.hu). A tárgyavatba írják be, hogy *legjobb cikk szavazás*. Véleményüket ez év végéig várjuk.

KT





LIII. Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny – 2021



Az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny idei évét sajnos – sok más versenyéhez hasonlóan – ismét a járványhelyzet alakította, csonkította. Egy évvel ezelőtt még bíztunk abban, hogy idén visszatérhetünk a hagyományos versenyrendezéshez, melynek nagyon fontos része szokott lenni a laboratóriumi gyakorlat, és az, hogy a

középdöntőn, majd a döntőn találkozzanak a versenyzők, tanárok. Ez nem sikerült az idén sem.

A vírus hatását már a kezdet kezdetén érezni lehetett: az idei évben kb. 700-zal kevesebb versenyző regisztrált, mint ahányan szoktak. Szemben a 2019-es 170 jelentkező iskolával, 2020-ban mindössze 128 iskola nevezett diákokat a versenyre.

A legfőbb veszteségünk mégsem ez, hanem hogy *Prof. Pálinkó István* – aki 2011-2018-ig volt az Irinyi OKK versenybizottságának az elnöke, majd a bizottság meghatározó tagja, feladatok szerzője, a Csongrád megyei második forduló szervezője még az idei évben is – már nem élhette meg az idei verseny lezárását. Szakmai hozzáértése és vidám, tréfálkozó személyisége nagyon fog hiányozni a versenyek előkészítése, a megyei és országos fordulók lebonyolítása során.

Az első, iskolai forduló az évtizedes szokásokat követve zajlott január 23-án, de a február 27-i megyei forduló újraszervezése már nagyobb feladatot jelentett – bár a tavalyi év tapasztalatai segítettek ebben. Köszönjük minden iskola igazgatójának és tanárainak, valamint az egyetemeknek, akik csupán a kémiaoktatás iránti elkötelezettségükből otthont adtak a második fordulónak és vállalták a javítás nem kis feladatát. A második forduló lebonyolításában a következő iskolák vettek részt: *Kecskeméti Katona József Gimnázium; Pécsi Szakképzési Centrum Pollack Mihály Szakgimnáziuma, Szakközépiskolája és Kollégiuma; Földes Ferenc Gimnázium – Miskolc; Budapesti Műszaki Szakképzési Centrum Petrik Lajos Vegyipari, Környezetvédelmi és Informatikai Szakgimnáziuma; Székesfehérvári Szakképzési Centrum Bugát Pál Középiskolája; Révai Miklós Gimnázium és Kollégium – Győr; Szolnoki Széchenyi István Gimnázium; Hamvas Béla Gimnázium és Szakközépiskola – Oroszlány; Mikszáth Kálmán Gimnázium és Kollégium – Pásztó; Dabasi Táncsics Mihály Gimnázium; Kaposvári Táncsics Mihály Gimnázium; Szekszárdi Garay János Gimnázium; ELTE Bolyai János Gyakorló Általános Iskola és Gimnázium – Szombathely; Batthyány Lajos Gimnázium – Nagykanizsa; Szegedi Tudományegyetem, Szerves Kémia Tanszék; Debreceni Egyetem Kémiai Intézet; Eszterházy Károly Egyetem – Eger; Pannon Egyetem – Veszprém; Nyíregyházi Egyetem.*

A járványügyi helyzet további romlása és a középiskolák bezárása miatt először a döntő későbbi időpontra való halasztása, majd az eltörlése mellett kellett döntenünk. Így az idei verseny lezárása még inkább csonkára sikerült, mint előző évben, mert írásbeli fordulót sem lehetett tartani: a versenyt idén a II. forduló írásbeli eredményei alapján zártuk le, azaz labor nélkül, mivel a laborgyakorlatok megszervezésére már februárban sem volt lehetőség. Ezért a feladatsor egy-egy feladata mindkét kategóriában olyan jellegű elmélet vagy számolás volt, amely máskor a laborgyakorlat része szokott lenni, bár ez nem pótolta a tényleges laboratóriumi munka hangulatát, izgalmát.

Ez az idei verseny az összes, diákokat delegáló iskolára is pluszterhelhet rótt. Köszönjük azoknak a tanároknak, iskoláknak a támogatását és munkáját, akik ebben a nehéz, online oktatásban is vállalták, hogy a gyerekeket felkészítik a versenyre, biztosították számukra a biztonságos versenyzés feltételeit, tartották bennük a lelket, biztatták őket.

Az eredményhirdetést online szerveztük meg 2021. május 8-án, részben a Debreceni Egyetemről, részben a Magyar Kémikusok Egyesületének a székházából közvetítve az eseményeket. Az eseményt Simonné Sarkadi Livia, a Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke nyitotta meg. Ezt a Pécsi Tudományegyetem oktatóiból és hallgatóiból álló ChemHacker csoport által készített, és a YouTube-csatornán is megtekinthető (<https://www.youtube.com/channel/UCh-4icNycXluMrs5GHLFEbw/videos>) kisfilmek követtek a lángfestésről, az acetilén előállításáról és égéséről. A program a diákok és tanáraik által talán leginkább várt részzel, az online eredményhirdetéssel folytatódott *Hajnissné Anda Éva* vezetésével, amelynek keretében a díjazott diákok fényképét és nevét, valamint a felkészítő tanárt és az iskolát mutattuk be. Ezt újabb kisfilm követte az ammónium-nitrát különböző körülmények közötti viselkedéséről, szemléltetve azt, hogy mi vezethetett a 2020. augusztusi bejrúti óriási robbanáshoz. A verseny *Ősz Katalinnak*, az Irinyi versenybizottság elnökének a zárszavával zárult, és a hagyományoknak megfelelően a diákok és tanáraik nevét tartalmazó szalagokat *Várnagy Katalin* kötötte fel idén is az Irinyi-zászlóra.

Az egyes kategóriák helyezettjei és a különdíjasok az alábbiak lettek:

I.A kategória

1.	Csonka Illés , Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnáziuma és Kollégiuma, Pécs (felkészítő tanár: <i>Mostbacher Éva</i>)
2.	Simon László Bence , Budapesti Fazekas Mihály Gyakorló Általános Iskola és Gimnázium (felkészítő tanár: <i>Keglevich Kristóf</i>)
3.	Visontai Barnabás , ELTE Radnóti Miklós Gyakorló Általános Iskola és Gyakorló Gimnázium, Budapest (felkészítő tanár: <i>Albert Viktor</i>)

I.B (max. 4 órás) kategória

1.	Perényi Attila , Budapest I. kerületi Szilágyi Erzsébet Gimnázium (felkészítő tanár: <i>Tóth Katalin</i>)
2.	Váradi Csanád , Budapesti Fazekas Mihály Gyakorló Általános Iskola és Gimnázium (felkészítő tanár: <i>Keglevich Kristóf</i>)
3.	Péntek Domonkos , Budapesti Eötvös József Gimnázium (felkészítő tanár: <i>Tóthné Tarsoly Zita</i>)

I.B (több mint 4 órás) kategória

1.	Bíró Gergő , Jedlik Ányos Gimnázium, Budapest (felkészítő tanár: <i>Elekne Becz Beatrix</i>)
2.	Gerendás Roland , ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium és Kollégium, Budapest (felkészítő tanár: <i>Villányi Attila</i>)
3.	Hegedűs Márton , Kecskeméti Református Gimnázium (felkészítő tanárok: <i>Sápi Anikó, Tóth Imre</i>)



I.C kategória

1.	Schvirján Balázs , Irinyi János Református Oktatási Központ, Kazincbarcika (felkészítő tanár: <i>Kopcsik Erika</i>)
2.	Pátzay Botond , Váci Szakképzési Centrum Boronkay György Műszaki Technikum és Gimnázium (felkészítő tanár: <i>Fábiánné Kőszegi Erzsébet</i>)
3.	Pál Bence , Budapesti Műszaki Szakképzési Centrum Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Technikum (felkészítő tanár: <i>Barabás Gergő</i>)

Az I. kategóriában a legeredményesebb elméleti feladatmegoldó **Csonka Illés** és **Perényi Attila**, a legeredményesebb számítási-feladat-megoldó **Bíró Gergő** volt.

II.A kategória

1.	Szabó Márton , Péter András Gimnázium és Kollégium, Szeghalom (felkészítő tanár: <i>dr. Tabiné Lehotai Klára</i>)
2.	Horváth Emese , Váci Szakképzési Centrum Boronkay György Műszaki Technikum és Gimnázium (felkészítő tanár: <i>Berek László</i>)
3.	Varga Szilárd , Orosházi Tánics Mihály Gimnázium, Szakgimnázium és Kollégium (felkészítő tanár: <i>Francziszti László</i>)

II.B kategória

1.	Nemeskéri Dániel , ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium és Kollégium, Budapest (felkészítő tanárok: <i>Sebő Péter, Villányi Attila</i>)
2.	Papp Marcell Imre , ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium és Kollégium, Budapest (felkészítő tanárok: <i>Sebő Péter, Villányi Attila</i>)
3.	Fenyvesi Bence , Földes Ferenc Gimnázium, Miskolc (felkészítő tanár: <i>Nyeki Attila</i>)

II.C kategória

1.	Láng Levente , Váci Szakképzési Centrum Boronkay György Műszaki Technikum és Gimnázium (felkészítő tanár: <i>Kutasi Zsuzsanna</i>)
2.	Bittó Marcell , Budapesti Műszaki Szakképzési Centrum Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Technikum (felkészítő tanár: <i>Tóth Krisztina</i>)
3.	Ujvári Viktor , Budapesti Műszaki Szakképzési Centrum Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Technikum (felkészítő tanár: <i>Tóth Krisztina</i>)

A II. kategóriában a legeredményesebb elméleti feladatmegoldó, valamint a legeredményesebb számítási-feladat-megoldó is **Szabó Márton** volt.

Kiemelkedő tehetséggondozó munkájukért a következő felkészítő tanárok kaptak elismerést:

Dr. Miklós Endréne (Kaposvári Tánics Mihály Gimnázium)
Csúri Péter (Szegedi Radnóti Miklós Kísérleti Gimnázium)

Kiemelkedő tehetséggondozó munkájukért az alábbi iskolák kaptak különdíjat:

Kecskeméti Bányai Júlia Gimnázium
Verseghy Ferenc Gimnázium, Szolnok

Bízunk benne, hogy 2022-ben végre ismét lehetőségünk lesz a hagyományos formában megszervezni az 54. Irinyi János Középiskolai Kémiaversenyt.

A versenyről további információkat talál az alábbi oldalakon: <http://www.irinyiverseny.mke.org.hu/>: a MKE Irinyi-oldala (innen letölthető a verseny története, a versenykiírás, az egyes fordulók feladatsorai és megoldókulcsaik, valamint fényképek)

<http://lenteg.ttk.pte.hu/ScienceBits/IrinyiForum.html>: Irinyi-fórum (ide várjuk a részt vevő tanárok és diákok véleményét – melyeket természetesen a jövő évi verseny szervezésénél igyekszünk figyelembe venni)

A program részben a Miniszterelnökség Családokért Felelős Tárcá Nélküli Miniszter megbízásából a Nemzeti Tehetség Program és az Emberi Erőforrás Támogatáskezelő által meghirdetett NTP-TMV-M-20-B-0039 azonosító számú pályázati támogatásból valósult meg.

A rendezvény kiemelt támogatói: a Richter Gedeon Nyrt. a Sano-fi-Aventis Zrt. és a Szerencsejáték Zrt. További támogatóink az Aktív Instrument Kft, a Reanal Laborvegyszer Kft. és a UNICAM Magyarország Kft.

Ósz Katalin, Várnagy Katalin

TÁMOGATÓK



MINISZTERELNÖKSÉG
CSALÁDOKÉRT FELELŐS TÁRCA NÉLKÜLI MINISZTER



RICHTER GEDEON



SZERENCSEJÁTÉK ZRT.



Vegyipari mozaik

Richter-osztalék. A 2020-as üzleti év eredménye után fizetendő osztalék mértékét az anyavállalat tulajdonosaira jutó konszolidált adózott eredmény 40 százalékában állapították meg, amely részvényenként 225 forint. Ebből a mostani 8 635 forintos árfolyammal számolva 2,6 százalékos osztalékhozam adódik.

Az igazgatóság a törzsrészvényekre összesen 41,9 milliárd forint osztalék (a névérték 225 százalékának megfelelő, 100 forint névértékű törzsrészvényenként 225 forint) megállapítását és kifizetését jóváhagyta. A törzsrészvényekre járó osztalék kifizetése 2021. június 14-én kezdődik.

Az igazgatóság döntött arról, hogy a társaság a 2022. évi rendes közgyűlés időpontjáig bezárólag a Richter saját 100 forintos névértékű törzsrészvényt vásároljon tőzsdei, illetve tőzsdén kívüli forgalomban, legfeljebb a társaság mindenkor jegyzett tőkéjének 10 százalékáig (azaz maximum 18 637 486 darab névre szóló törzsrészvényt) terjedő mértékben, a tőzsdei ártól felfelé legfeljebb +10 százalékos, lefelé legfeljebb -10 százalékos eltérésű vételi áron. (portfolio.hu)



Immunizációs világhét, 2021. A tudomány és az orvosbiológia zsenialitásának köszönhetően rekordidő alatt sikerült egy teljesen új kórokozó ellen több hatékony vakcinát is előállítani és forgalomba hozni.



Az első védőoltás óta – amelyet 1796-ban vetettek be a fekete himlő ellen – a vakcinák több életet mentettek meg, mint bármely más orvosi beavatkozás. Az 1970-es években végrehajtott, fekete himlő elleni globális védőoltási programokkal sikerült a betegséget teljes mértékben felszámolni. A vakcina alkalmazása előtt évente csaknem 4 millióan – köztük főként gyermekek – hunytak el fekete himlőben. Jelenleg világszerte a gyermekek 86%-a kap rutinszerű gyermekkori védőoltásokat bizonyos betegségek, illetve számos kórokozó, például az agyhártyagyulladásért felelős baktérium ellen. Ugyanez az arány 1980-ban még csak 20% volt.

Thomas Triomphe, a Sanofi Vakcina üzletágát képviselve tengerentúli megbízatásai során személyesen is megtapasztalhatta a védőoltások hatásait: „Néhány év alatt is látványos változást hoz, ha egy adott régió vagy ország összefog, hogy az immunizálást mint közegészségügyi prioritást, jelentős mértékben előmozdítsa. Amellett, hogy a vakcinák nemcsak egyéni szinten, hanem teljes családok számára nyújtanak védelmet a betegségek ellen, a védőoltási programok a szélesebb körű megelőzéshez, az egészséges élet megtartásához is hozzájárulnak.”

A kutatók folyamatosan újabb és újabb összefüggéseket találnak a fertőzések és az azoktól eltérő háttérű betegségek között, ami új távlatokat nyithat a megelőzésben. (Sanofi)



A szén-dioxid hasznosítására dolgoztak ki skalázható megoldást az SZTE kutatói. Felfedezésüket szabadalmaztatták, eredményeikről pedig a Nature Energy című lapban számoltak be.

A rangos tudományos folyóiratban megjelent publikációt Janáky Csaba és munkatársai írták. A légkörben emelkedő szintje miatt globális környezeti problémát okozó szén-dioxid megkötéséhez és energetikai, illetve vegyipari alapanyagként hasznosítható szén-monoxiddá alakításához az SZTE egyetemi docense



már több fejlesztéssel is hozzájárult. Kutatócsoportja ipari partnerekkel korábban energiahatékony, kizárólag vizet és szén-dioxidot felhasználó elektrolizáló technológiát dolgozott ki.

Mint a szakember kifejtette, alapvetően két típusú elektrolizáló cella létezik. Mindegyik ilyen berendezésben egy anód és egy katód található, az egyik típusú cellában a két elektród között szabadon folyik az elektrolitoldat, a másikban viszont membrán választja el az anódteret a katódtértől. A cellák méretnövelésére a membrános típus jobb lehetőségeket nyújt, az elmúlt néhány év tapasztalatai azonban azt mutatják, membrán nélküli változatokkal jobb teljesítményt lehet elérni. Azt is megfigyelték, hogy hosszabb működés során nagyon hamar csökken az elektrolizáló berendezések teljesítménye, mivel szilárd csapadék képződik a cellában.

A szegedi kutatók felismerték, hogy a két probléma nem független egymástól. A membránon átjutó kationok okozzák a csapadékképződést, ugyanakkor segítik a cella működését, javítva a berendezés teljesítményét. Az SZTE munkatársai a lúg helyett vizet áramoltatnak az anódoldalra, és kialakítottak egy eljárást, amellyel működés közben injekciózhatnak kationt tartalmazó oldatot magára a katódrészre. A megoldásnak szerteágazó gyakorlati haszna van: az elektrolizáló készülékek hosszabb távon működtethetők, és a módszer a berendezések méretnövelésére is alkalmas.

Az SZTE kutatóinak célja a közeljövőben az elektrolizáló berendezések működését az ipari alkalmazásokhoz és a valódi élet paramétereikhez igazítani. (inportal.hu)



A MOL-csoport a PRS-szel kötött új partnerséggel megteszi az első lépéseket, hogy a körforgásos gazdaság kulcsfontosságú szereplőjévé váljon Közép-Kelet-Európában. A partnerség biztosítja, hogy a MOL Petrolkémia tiszaujvárosi és a SLOVNAFT pozsonyi telephelyeiről származó csomagolt polietilén- (PE) és polipropilén- (PP) szállítások közös, újrafelhasználható raklapokon történjenek, ami zökkenőmentes és környezetbarátabb logisztikai folyamatot teremt: ez magában foglalja a



raklapok visszavételét, javítását és újrahasznosítását – több száz ezer fenntartható fa raklap körforgásos mozgását. A korábbi egyirányú raklapos modellhez képest az új modell évente akár 54 000 fát menthet meg a kivágástól.

A MOL-csoport számára a körforgás a komplex ellátási láncban az egyetlen előre vezető út, mivel segít csökkenteni a környezeti hatásunkat egy olyan időszakban, amikor számos multinacionális szervezet a fenntarthatóbb megoldások mellett kötelezi el magát. A PRS többéves komoly múlttal rendelkezik a pán-európai körforgásos gazdaságban való együttműködés és költ-



séghatékony munka terén – ez az a tapasztalat, mely megbízható üzleti partnerré teszi őket.



MOL-osztalék. Az igazgatóság 75 875 000 000 forint osztalékfizetéséről döntött.

A MOL-csoport 2020-ban 2,05 milliárd dollár (630 milliárd forint) tiszta EBITDA-t termelt, és bár a vállalatcsoport eredménye a járványhelyzet és a gazdasági válság miatt 2019-hez képest 16%-kal csökkent, még így is meghaladta utolsó, a Covid megjelenése után frissített célkitűzést (1,9 milliárd dollár). A vállalatcsoport működése a legnagyobb válság közepette is zavartalanul folyt, stratégiai beruházásait a járványügyi korlátozások ellenére is ugyan lassabban, de folytathatta. A Feldolgozás és kereskedelem (Downstream) szegmens kiemelt beruházása, a poliolprojekt meghaladta a 75%-os készültséget az év végére. A Kutatás-Termelés (Upstream) szegmens szénhidrogén-termelése, köszönhetően az ACG mező hozzájárulásának, 8%-kal nőtt 2020-ban, elérve a napi 120 ezer hordót. A Fogyasztói Szolgáltatások üzletág tavaly 510 millió dolláros (156 milliárd forintos) EBITDA-jával új-fent rekorderedményt produkált, és 8%-kal jobban teljesített, mint 2019-ben.



Átadták Magyarország első mobil hidrogén-töltőállomását a Linde Gáz Magyarország Zrt. telephelyén. A hidrogén a karbonsemlegesség egyik alapvető eleme, így jelentősége egy sor területen kiemelt, például ipari hajtó-tüzelőanyagként vagy a közlekedésben, de a mobilitásban betöltött szerepe miatt is. Világszinten is csak alig 370 hidrogén-töltőállomás működik, Európában pedig összesen 152.



A Linde Gáz Magyarország Zrt. Magyarországon 1992-óta van jelen, az elmúlt 25 évben közel 300 millió euró értékben hajtottak végre fejlesztéseket Vas, Tolna, és Borsod-Abaúj-Zemplén megyében, jelenleg közel 50 millió forint értékben építenek új levegőszétválasztó üzemeltetést Kazincbarcikán. Dunaújvárosban pedig az ország egyik legnagyobb és legmodernebb ipari gázpalackozóját építik.

2020-tól már Magyarországon is forgalmaznak úgynevezett zöld oxigént és zöld nitrogént, amelyek előállításához megújuló energiaforrásokat használnak. 2021-ben Európa egyik legnagyobb, 100 megawatt teljesítményű elektrolízis-technológiával megvalósuló zöldhidrogén-gyártóegységének telepítését és üzemeltetését jelentették be Németországban. (NRGreport)

Ritz Ferenc összeállítása

Az MKE rendezvénynaptára – 2021

	Közgyűlés	Budapest
	„Varázslatos kémia” nyári tábor	
augusztus	Kémia tanárok Nyári Továbbképzése	
	MKE Vegyészkonferencia, 2021	
szeptember	17. Magyar Magnézium Szimpózium	
október	Őszi Radiokémiai Napok	



A Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar Kémia Intézete 2021 szeptemberében elindítja a **MŰSZERES SZAKANALITIKUS** posztgraduális levelező, másoddiplomás szakirányú továbbképzést.

A felvétel feltétele: ötéves egyetemi képzésben vagy mesterképzésben megfelelő szakokon szerzett oklevél

Képzési idő: 4 félév

A képzés formája: levelező (az előadások távoktatás keretében, illetve a Debrecenben szervezett gyakorlatok és konzultáció félévente 4–5 alkalommal (péntek–szombat))

Jelentkezési határidő: 2021. augusztus 19.

Költség: önköltséges, 350 eFt/félév

További információk: inorg.unideb.hu/muszeres

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXVI. No. 6. June

CONTENTS

<i>Europe – a piece of our history, our present and future</i>	166
TAMÁS KISS and GILBERTE CHAMBAUD	
<i>The glory, decline and revival of combinatorial chemistry, and its impact on modern pharmaceutical research. Part IV</i>	168
GYÖRGY DORMÁN	
Celebrating the 75th volume of the Journal	
<i>An original article by László Erdey and a comment by</i>	
ILONA BUZÁS	174
<i>Effects of perspiration on coloured textiles</i>	182
CSABA KUTASI	
<i>Old glasses</i>	185
VERA SILBERER	
<i>Chembits</i>	188
GÁBOR LENTE	
<i>News of the Month</i>	190

Megbízható Mennyiségi Meghatározás

Minden komponens, mátrix és felhasználó esetében

A tudományos és üzleti célok elérése csak megbízható eredmények birtokában lehetséges. A felhasználási területtől függetlenül a Thermo Scientific™ TSQ hármaskvadrupol tömegspektrometriás rendszerei kiemelkedő precizitást biztosítanak a mennyiségi meghatározási feladatokra. Nagy felbontású SRM üzemmód, robusztusság, megbízhatóság és érzékenység egy készülékben, mely segítségével minden felhasználó a mérendő komponenstől vagy a mátrixtól függetlenül megbízható mérési eredményekhez juthat.



Thermo Scientific™ TSQ Altis™
hármaskvadrupol tömegspektrométer



Thermo Scientific™ TSQ Quantis™
hármaskvadrupol tömegspektrométer



Thermo Scientific™ TSQ Fortis™
hármaskvadrupol tömegspektrométer

További információk:

thermofisher.com/confidentquantitation

Kizárólagos képviselő:

UNICAM Magyarország Kft.
1144 Budapest, Kőszeg utca 25.
Telefon: +36 1 221 5536
E-mail: unicam@unicam.hu
Web: www.unicam.hu

UNICAM