

A TARTALOMBÓL:

- Horvai György: Analitikai képzésre bőven van igény
- Többváltozós adatelemzési módszerek a kémiai térképezésben
- Problémamegoldás FTIR-spektroszkópia segítségével



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXV. ÉVFOLYAM • 2010. OKTÓBER • ÁRA: 800 FT



*Kémia
határok
nélkül*



AAS

ICP-OES

ICP-MS

UV

FTIR/Raman

GC

GC/MSⁿ

HPLC

UHPLC

LC/MSⁿ

Thermo Scientific LC/MS/MS készülékek élettudományi és gyógyszerkutatásokhoz

- Hármás kvadrupol és ioncsapda tömegspektrométerek
- UHPLC multiplexelési lehetőséggel
- Turboflow[®] mintaelőkészítés biológiai mátrixokhoz
- Nano-HPLC berendezések
- Kromatográfiai oszlopok és egyéb kiegészítők

Kizárólagos képviselet:

UNICAM Magyarország Kft., 1144 Budapest, Kőszeg u. 27.

Telefon: 1-221-5536 • Fax: 1-221-5543

E-mail: unicam@unicam.hu • Web: www.unicam.hu

Thermo
SCIENTIFIC



Szerkesztőség:

Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE

Szerkesztők:

ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,
CHLADEK ISTVÁN, GÁL MIKLÓS,
JANÁKY CSABA, KOVÁCS LAJOS,
LENTE GÁBOR, ZÉKÁNY ANDRÁS
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

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

Kapják az egyesület tagjai és a megrendelők

A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS

Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.

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

E-mail: mkl@mke.org.hu

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete

Felelős kiadó: ANDROSITS BEÁTA

Nyomdai előkészítés: Planta-2000 Bt.

Nyomás és kötés: Mester Nyomda

Felelős vezető: ANDERLE LAMBERT

Tel./fax: 455-5050

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete

Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank

10700024-24764207-51100005 sz.

számlájára „MKL” megjelöléssel

Előfizetési díj egy évre 9600 Ft

Egy szám ára: 800 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.: 201-6883,

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

Aktuális számaink tartalma,

az összefoglalók és egyesületi híreink,

illetve archivált számaink honlapunkon

(www.mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541

HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)

HU ISSN 1588-1199 (online)

 **Apponyi Albert program**

A projekt a Nemzeti Kutatási
és Technológiai Hivatal támogatásával valósult meg



A szerkesztők választásából e lapszámunk főcikkei sorában három analitikához kapcsolódó közleményt, két Bruckner-termi előadás kivonatát, valamint a hazai felsőoktatás diagnózisát és a javasolt terápiát is tartalmazó dolgozatot olvashatunk.

Kiss Tamás felelős szerkesztő Horvai György akadémikussal, legnépesebb Analitikai Szakosztályunk korábbi elnökével, egyik új Széchenyi-díjasunkkal készített interjúja indítja a lapszám képzeletbeli analitikai blokkját. A közleményben Horvai professzor felvázolja kutatásfinanszírozással kapcsolatos javaslatát is.

Vajna Balázs, Bódis Attila és Marosi György az egyik legdinamikusabban fejlődő analitikai területről, a kémiai térképezésről ír, amelynek alapja a spektrometriai technika és a hozzá tartozó optikai rendszer. A témán belül többváltozós adatelemzési módszereket tárgyalnak, gyógyszerügyi példán bemutatva azok alkalmazását.

Drávcz Imre az FTIR spektroszkópia egyik ipari alkalmazását ismerteti kémiai problémák megoldására. Többek számára örvendetes lehet, hogy az elmúlt számokban megjelent Richter-és Chinoín-témájú közlemények után most újabb ipari témájú, ezúttal a MOL Nyrt. kőolaj- és földgázkutatói és termelési területéről származó írást olvashatunk.

Szerves kémikusainknak bizonyára örömet szerez, hogy a „Bruckner-termi előadások” sorozat keretében ezúttal Tóth Flórián és Tömböly Csaba dolgozatait ismerhetjük meg.

Sipos Pál többéves ausztráliai és néhány évtizedes hazai egyetemi tapasztalattal felvértezve szenvedélyes kritikát oszt meg velünk a hazai (felső)oktatásról, bátor újítási javaslatokkal kiegészítve. Helyzetképe sokkoló, sürgős változtatásért kiált. A szerkesztők várják a témával kapcsolatos újabb hozzászólásokat. Amint a szerző is buzdítja az olvasót, „érdemes minden újabb ötletet tartalmazó véleményt leírni és elolvasni”.

Ezen utóbbi gondolatot támogatva kívánok hasznos időtöltést kedves Olvasóinknak.

Rácz L.

Rácz László
a szerkesztőbizottság tagja

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

- **Aki analitikával foglalkozik, annak szerteágazó érdeklődési köre kell, hogy legyen.**
- Beszélgetés **Horvai György** Széchenyi-díjas akadémikussal **310**
- **Vajna Balázs, Bódis Attila, Marosi György:** Többváltozós adatelemzési módszerek a kémiai térképezésben **313**
- **Drávcz Imre:** Problémamegoldás FTIR-spektroszkópia segítségével a MOL-KTD területén **319**
- **Bruckner-termi előadások**
- **Tóth Flórián:** Ibofilidinn és rokon indolalkaloidok, valamint analogonjaik szintézise **323**
- **Tömböly Csaba:** Peptidek, fehérjék kovalens módosításai **324**
- **FÓRUM A KÖZ- ÉS FELSŐOKTATÁSRÓL**
- **Sipos Pál:** A felsőoktatás Nagy Átalakításáról **326**
- **VEGYÉSZLELETEK**
- Lente Gábor rovata **332**
- **EGYESÜLETI ÉLET** **334**
- **A HÓNAP HÍREI** **335**



Cimlap:

Kémia határok
nélkül
(Lénárd László
felvétele)

Aki analitikával foglalkozik, annak szerteágazó érdeklődési köre kell, hogy legyen

Beszélgetés Horvai György Széchenyi-díjas akadémikussal

A Széchenyi-díj az indoklás szerint az analitikai kémia terén végzett elméleti, statisztikai számításokért, másrészt a kémiai összetétel mérésére alkalmas műszerek kifejlesztéséért járt. Mondana erről valamit bővebben olvasóinknak?

– Az 1970-es évek elején a BME Általános és Analitikai Kémia Tanszékén a kollégák egyik csoportja áramló oldatos elemzéssel (ma ezt angolul Flow Injection Analysisnek, rövidítve FIA-nak hívják) foglalkozott, egy másik csoport pedig ionszelektív elektródokat állított elő és tanulmányozott. Első munkám a két témát ötvözte. Ionszelektív elektródok automatikus kalibrálására és a velük való mérésre építettem egy kis berendezést, amely az áramló oldatos elemzésnél használt keverőcellát alkalmazta. A berendezés érdekessége az volt, hogy a keverőcella exponenciális koncentráció-tranziensét kombinálta az ionszelektív elektródok logaritmikus karakterisztikájával. Érdekes módon ez a berendezés az azóta eltelt évtizedekben több más kutató fantáziáját is megmozgatta és ez különféle alkalmazásokhoz vezetett. Ebből az időből datálódott az automatizált analitikai mérőrendszerek iránti érdeklődésem, amely aztán később több új berendezésben testesült meg, például egy automata, számítógép (az első verzióban még Commodore 64) által vezérelt spektrofotometriás kioldódásvizsgáló berendezésben, amit egy hazai gyógyszeriparban másfél évtizeden át folyamatosan használtak, azután egy automatikus üzemi titrálóberendezésben, amit egy hazai nagyüzem a fémtisztító fürdők folyamatos



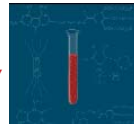
ellenőrzésére használt. Később a tanszéken beszereztünk egy kisebb robotkart, amellyel farmakokinetikai méréssorozatokat automatizáltunk. Terveztem továbbá egy elektrokémiai detektort folyadékkromatográfiás célra, amelynek példányai a hazai gyógyszeriparban sokáig az egyetlen ilyen típusú műszert jelentették.

Ezeknek a berendezéseknek a gyártásába mennyire kapcsolódtak be, a tényleges megvalósításhoz mennyire volt közük?

– Az említett műszereket – az akkori idők hazai szokásainak megfelelően – részben az egyetem belső villamosmérnöki és technikai állományával, részben kisiparosokkal gyártattuk le.

A statisztikai számítások analitikai alkalmazásai iránti érdeklődésem is a már említett exponenciális hígítós berendezés mi-

att ébredt fel. A berendezéssel ugyanis automatizálni lehetett egy akkoriban meglelt új potenciometriás mérési módszert, a többszörös standard addíciót. Úgy tűnt, hogy ezzel a módszerrel a potenciometriás mérések szórása szinte tetszőlegesen csökkenthető, mert az automatikus eszköz nagyon sok mérést tett lehetővé rövid idő alatt. A gyakorlatban ez a várakozás mégsem vált be, és elkezdtem rágódni azon, hogy mi lehet ennek az oka. Ekkor kiderült, hogy a különféle potenciometriás mérési módszerek, például a kalibrációs és a standard addíciós módszer reprodukálhatóságát addig nem vizsgálták meg, úgyhogy először ezt a munkát kellett szisztematikusan elvégezni. Ezután jöttem rá, hogy a többszörös standard addíciónál tapasztalt probléma törvényszerű, és sok más olyan mérésnél is fellép, ahol egy méréssorozatból egyszerre több paramétert akarunk meghatározni. Röviden arról volt szó, hogy a mérési adatokról a paraméterekre történő leképezés közel elfajuló, a szó matematikai értelmében. Az igazi érdekesség azonban ezután jött: kiderült, hogy a potenciometriás titrálások reprodukálhatósági kérdéseit sem vizsgálták meg addig statisztikai szemszögből. Így ennek is nekiálltam és kiderítettem, hogy – szemben az általános vélekedéssel – a titrálások nem azért adnak kisebb szórású eredményeket a direkt potenciometriás méréseknél, mert sok mérési pontból állnak, hanem azért, mert az egyenértékpont közelében is mérünk. Innen jutottam arra a felismerésre, hogy elég lehet a titrálási görbe egyetlen pontját megmérni.



Nem mindegy, hogy melyik pontját mérme a titrálási görbének.

– Természetesen, ez lényeges a meghatározhatóság, és a pontosság szempontjából: az egyértékponttól 1–10%-ra levő pontot kell választani. Ez az egyponos titrálás lett aztán a már említett ipari automata titrálóberendezés alapja.

A potenciometria és a statisztika később újból találkozott szakmai pályámon, de ennek is megvan a maga története. A nyolcvanas években az ún. folyadékmembrán-elektrodok működését szerettük volna megérteni. Ezeket az elektrodokat a világban mindenütt nagy számban használták és használják ma is, elsősorban a kórházi laborokban. A működésüket azonban nem lehetett megérteni, mert úgy tűnt, hogy a membránban nincsenek ionok (szemben a szilárd ionszelektív elektrodokkal). R. P. Buck professzor észak-karolinai laboratóriumában kezdtük el a folyadékmembránok (amelyek tulajdonképpen lágy PVC-ből adalékokkal készült membránok) elektromos viselkedésének tanulmányozását impedanciamérésekkel. Ekkor derült ki, hogy a membránok mégis tartalmaznak ionokat, mégpedig a PVC nyomnyi ionos szennyezéseiből. Arra is rájöttünk azonban, hogy a PVC felületaktív nyomszennyezései a membrán-víz határfelületre vándorolnak és ott egy nagyon labilis, de nagy ellenállású réteget képeznek. Később, már idehaza, sokféle kísérleti módszerrel vizsgáltuk ezt a réteget és a munkát kiegészítettük a határfelület számítógépes modellezésével. Innen csak egy lépés volt a modellezés kiterjesztése tetszőleges folyadék–folyadék, illetve folyadék–gőz határfelületekre. Ez persze olyan téma, amin már előttünk is sokan és eredményesen dolgoztak. Azt vettük azonban észre, hogy a határfelülethez közeli molekulák orientációs statisztikáit mindenki helytelenül számítja. Kidolgoztunk egy olyan módszert, amely statisztikailag helyes eredményeket ad, és így a határfelületekről, például a víz-levegő határfelületről is sokkal árnyaltabb, a kémiai várakozásoknak jobban megfelelő képet kaptunk. A közelmúltban pedig Jedlovsky Pállal és Pártay Líviával olyan módszert dolgoztunk ki, amellyel a határfelülethez közeli, molekuláris méretekben nézve „göröngyös” rétegek összetételét, tulajdonságait tudjuk vizsgálni. Ez jelentős előrelépés a korábbi számítási módszerekhez képest, ahol a rétegeket síkokkal határolták. Az általunk kapott eredmények itt is sokkal jobban illeszkedtek a kémiai intuícióhoz, mint a sík réteges módszer esetén. Matematikai szempontból nézve ebben a témában is a sta-

tisztika helyes alkalmazásáról volt szó: arról, hogy molekulák mely csoportjainak az adatait helyes átlagolni.

Kutatásaiban az alap- és alkalmazott kutatás szerencsésen ötvöződik. Mennyire érzi ezt fontosnak egy kutató tevékenységében? Mennyire érzi problémamentesnek vagy problematikusnak a kutatások e két alapvető területét országos szinten? Gondolok itt azok eredményességére, népszerűségére, finanszírozottságára és nemzetközi összehasonlításban is az arányaik optimális voltára.

– Ez a kérdés értelmezhető a kutató, mint egyén szempontjából, illetve a társadalom szempontjából. A társadalomnak, azt hiszem, több alkalmazott kutatásra van szüksége, mint alapkutatásra, de természetesen alapkutatásra is nagy szükség van. Az egyén szempontjából nézve a dolog szubjektív: van, aki így szereti, van, aki úgy. Ízlés kérdése.

Megjegyzem azonban, hogy a kutatásfinanszírozó szervezetek megkülönböztetik még a kutatói kíváncsiság által vezérelt kutatást a kutatásfinanszírozó által megadott témában történő kutatástól. Az utóbbi esetén könnyen előállhat a kutatók fásultsága, ezért még az ipari kutatóhelyek egy részében is engedni szokták bizonyos határok között a hobbi-kutatást.

A kutatás finanszírozásával kapcsolatban úgy gondolom, hogy ebben az összefüggésnél és a tematikai megoszlás mikéntjénél is fontosabb a hosszú távú, vagy legalábbis középtávú kiszámíthatóság. Ha ez már megvan, akkor az állami kutatásfinanszírozást három párhuzamos vonalon képzelem el. Az egyik a kiugróan tehetséges kutatók finanszírozása. Nekik nemzetközi szinten folyamatosan „csillogni” kell és ezért cserébe jelentős támogatást kapnak, amit legjobb belátásuk szerint használhatnak akár eszközökre, akár munkatársakra, akár sok konferenciára, utazásra. A másik csoport az egyetemi vezető oktatóké. Nekik legalább annyi finanszírozás kell, hogy „kis lángon” tudjanak kutatni, például hogy folyamatosan legyen egy-egy doktorandusz mellettük. Így biztosítani lehet, hogy nemcsak a könyvekből, hanem a gyakorlatból is ismerik a szakmájukat, legalábbis annak egy szeletét. A harmadik finanszírozási ág az alkalmazott kutatás. Itt a legnehezebb az állam szerepe, mert a finanszírozásban már nem tud részt venni az állam. Ezért az állam és a termelő-szolgáltató szféra között kell valamilyen összhang a célok kijelölésében és az eredmények értékelésében. Ha ez megoldott, akkor a finanszírozásnak nagyon szigorúnak kell lenni: amit a kutató egy projekt megpályázásakor

ígért, azt teljesítenie is kell, különben hosszabb ideig nem kaphat újabb támogatást. Végül, a félreértések elkerülése érdekében megjegyzem, hogy a három kategória közül az elsőbe, illetve a harmadikba kerülő kutatók bármilyen nonprofit szervezetben dolgozhatnak, például egyetemen, akadémiai kutatóintézetben, alapítványban stb. A három ág közt a forrásokat közelítően 20–20–60% arányban osztanám el. A kutatási pénzek ilyen rendszerben való elosztásának talán az is a járadéka lenne, hogy a döntéshozók (politikusok, közhivatalnokok) előtt is világosabb lenne, miért is kell a kutatásra pénz tölteni és így talán stabilabbá válna a kutatásfinanszírozás.

Hallhatnánk egy rövid szakmai bemutatkozást pályájáról, életútjáról? (Honlapján sajnán nem találtam semmit.)

– Szakmai munkám több részletét már egy előző kérdés kapcsán bemutattam, így erre most nem térek vissza. Vegyészmérnöki oklevelemet a Műegyetemen szereztem, az alkalmazott matematikusit az ELTE-n. Egyetemi éveim alatt nagyon érdekes TDK-munkát végeztem Oláh Károly professzor mellett, akitől rengeteg dolgot és különösen az elméleti és gyakorlati munka közötti harmóniát lehetett megtanulni. Diplomamunkámat már Tóth Klára és Pungor Ernő mellett készítettem, akik körül hihetetlenül pezsgő, a nemzetközi kutatói társadalomba teljesen beágyazott szakmai tevékenység folyt. Azóta is ugyanezen a tanszéken dolgozom, csupán egy-egy külföldi tanulmányúttal megszakítva. Ezek közül a két leghosszabbat emelném ki, egy-egy évet az ETH-n, Zürichben, illetve az Illinois Egyetemen, az Egyesült Államokban.

A kutatómunka mellett természetesen végig oktattam is, sokáig voltam a tanszék oktatási felelőse. Professzori kinevezésem óta több szép egyetemi vezetői feladatot is kaptam. Mintegy tizenöt éve vagyok tanszékvezető és eközben hét évig a BME tudományos és nemzetközi rektorhelyettese voltam.

A szakmai közéletben is részt vettem. A Magyar Kémikusok Egyesületében az Analtikai Szakosztály titkára, majd később elnöke voltam. Ebben a minőségben több Vegyészkonferencia megszervezésében vettem részt. A 2006-ban Budapesten megrendezett 1st European Chemistry Congress hazai szervezőbizottságának elnöke voltam. Ez a konferenciasorozat azóta szépen fejlődik és az Európai Kémikus Szövetség (EuCheMS) fő rendezvényévé vált. A IUPAC-ban az egyik bizottság titkára voltam és többek közt két vaskos IUPAC-kötet szerkesztésében és részbeni megírásában vettem részt.

Az MTA testületeiben különböző feladatokat láttam el. Sokáig voltam munkabizottsági elnök, jelenleg az Analitikai Bizottság elnöke vagyok. Hat éven át voltam közgyűlési doktorképviselő, ebből három évig az MTA Elnökség tagja. Ebben az időszakban, azt hiszem, sokat sikerült tenni a doktorképviselők szerepének tisztázásáért, elismeréséért.

Közben 2007-ben az MTA levelező tagjává választották. Az analitikai kémia ma reneszánszát éli. A „mit és mennyit tartalmaz a minta” kérdésének megválaszolása az élet minden területén, az iparban, a mezőgazdaságban, az anyagtudományokban, az élelmiszeriparban, a sportban, a toxikológiában, az igazságügyben fontos szerepet tölt be. Hogyan látja ennek tükröződését a tudományos kutatásokban és a kémia oktatásában?

– Az analitika mindig a kémia szolgáltatója volt, de érdekes és szép szolgáltató. Aki analitikával foglalkozik, annak egyrészt szerteágazó érdeklődése kell, hogy legyen, éppen, mert sok alkalmazási területe és sokféle eszköze van az analitikának. Másrészt viszont nagyon fegyelmezettnek is kell lennie, mert különben nem tud precízen dolgozni. Az elmúlt évtizedekben a világon mindenütt sok analitikusra volt szükség, és ez a trend nem változik. Így analitikai képzésre bőven van igény. A kutatás kérdése bonyolultabb. Manapság szinte minden területen a problémaorientált kutatás divatos, ami nem enged meg túlzott specializációt, mondjuk, egyetlen műszeres analitikai technika irányában. Ez jelentős változás a korábbi évtizedekhez képest.

Olyan új vizsgálati módszerek kifejlesztésének vagyunk tanúi, amelyeknél a jel kialakulásának részletes megértése/megismerése már meghaladja az általános kémiai ismeretekkel rendelkező szakember, legyen az akár analitikus, képességeit. Mennyire tudja elfogadni a „fekete doboz” módszert, amikor egy-egy szofisztikált eljárásnál elegendő annak mérési elvét megismerni és sokkal inkább az alkalmazási lehetőségeinek elsajátítására vagy elsajátítására koncentrálni?

– Első közelítésben semennyire. De második közelítésben be kell látni, hogy minden analitikai módszer fekete doboz. Váratlan problémák minden módszernél fel-lehetnek. Jó módszer többnyire az, amit már nagyon sokan, nagyon sokféle mintán, nagyon alaposan kipróbáltak. De ez semmilyen új módszerről nem mondható el. A „fekete doboz” módszerekkel az a baj, hogy nincsenek így kipróbálva és hogy az alkalmazó nem tudja a szakmai tudása alapján megbecsülni se, hogy mekkora hibát és miért fog elkövetni, amikor egy újabb mintatípusra, mátrixra stb. alkalmazza őket.

Évek óta dolgozik a tudományszervezés különböző testületeiben (MTA, OTKA, IUPAC). Milyen tapasztalatokat szerzett ezekben a testületekben? Említene egy-egy pozitív és negatív példát, amikor sikerült, illetve amikor nem sikerült elgondolását keresztülvinnie, kollégáit meggyőznie elgondolása helyességéről?

– A már említett példákon túl, azt hiszem, volt némi szerepem abban, hogy a magyar kutatók számára létfontosságú hozzáférés az elektronikus folyóiratokhoz nem szűnt

meg néhány évvel ezelőtt, továbbá hogy a European Institute of Technology székhelye Budapestre került. Az európai országok alapkutatókat finanszírozó szervezeteinek együttműködése keretében sikerült Horváth Viola kolleganómmal együtt – és az OTKA elnökének és munkatársainak segítségével – kidolgozni egy új, elég sikeres és fenntarthatónak tűnő nemzetközi pályázási rendszert. Több, az innovációt segítő hazai alaptörvényben, úgy érzem, sikerült a kutatók és a kutatás szempontjait jól képviselnem.

Nem említett negatív példát. Nehezen tudom elképzelni, hogy minden elképzelését sikerre tudta vinni.

– A nagyobb kudarcokat, azt hiszem, mindig sikerült elkerülni. Nem azért, mert kizárólag jó elgondolásaim lennének, hanem mert az ötleteim megvalósításába csak fokozatosan szoktam belemenni. Ha látom, hogy az érdekeltek nem lelkesednek értük, akkor nem próbálom meg rájuk erőszakolni a dolgot.

Biztosan nem csak az egyetemi oktatás és tudományos kutatás köti le minden idejét. Hallhatnánk valamit a szabad idejének kellemes eltöltéséről?

– A munka (ami egy kutatónak egyben kedvtelés is) és a családi élet mellett fontos még egy kis kocogás, baráti összejövetelek, zenehallgatás és olvasás.

Kívánjuk, hogy a kémiának ez a szép szolgáltatója még sok érdekes problémával és azok megoldásával gazdagítsa kutatói és egyetemi oktatói pályafutását! Köszönjük a beszélgetést.

Kiss Tamás

DIGITÁLIS TANANYAGFEJLESZTÉS

2010-ben nagyszabású digitális tananyag-fejlesztési munka kezdődött a BME, az ELTE és a Typotex Elektronikus Kiadó Kft. konzorciumi együttműködésével, a releváns vegyipari cégek szakértő közreműködésével. A munka a TÁMOP közép-magyarországi régiót támogató programjának része.

A tananyagfejlesztés célja olyan multidiszciplináris tudástár létrehozása, amely a szakterület legkorszerűbb elméleti ismereteit és azok ipari alkalmazását tartalmazza korszerű, innovatív szemléletű, jól elsajátítható digitális formában. A tananyag lehetőséget teremt arra, hogy a hallgatók a hazai és a határon túli képzésekben tudásukat önállóan bővítsék, ugyanakkor a szakmában dolgozók is felfrissíthetik ismereteiket. A tervek szerint a munka 2011 tavaszán fejeződik be, és a 22 témakörben elkészült tananyag minimum 5 évig ingyenesen hozzáférhető lesz a www.tankonyvtar.hu oldalon, ugyanakkor az alkotók a tananyagot öt éven át folyamatosan fejlesztik majd.

KEDVES KÉMIATANÁR KOLLÉGÁK!

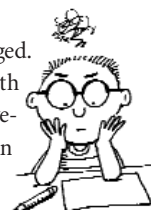
A Szegedi Tudományegyetem Kémiai Tanszékcsoportja **tizenharmadik** alkalommal, a **2010/2011-es tanévre** is meghirdeti a

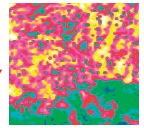


VegyÉSZtorna című országos levelezős kémia feladatmegoldó versenyt. A versenyre az ország középiskoláinak, illetve a határon túli magyar nyelvű középiskoláknak bármely tanulója benevezhet.

A verseny öt fordulóból áll. 2010. szeptember és 2011. január között minden hónap 10-ig postázzuk az iskolákba a megoldandó, fordulónkénti 6–8 feladatot. Minden fordulóban lesznek könnyebb, hétköznapi példák alapuló, gondolkodást igénylő feladatok és bonyolultabb számítási feladatok. A feladatok nemcsak segítenek az egyetemi tanulmányokra való felkészülésben, hanem egyben erőfelmérő jellegűek is. A beérkezett megoldások fordulónkénti javítása után a verseny legjobbait a következőképpen díjazzuk: 1. helyezett: 30 000 Ft, 2. helyezett: 20 000 Ft, 3. helyezett: 15 000 Ft, 4–10. helyezett: 8000 Ft. Azok a résztvevők, akik mind az öt fordulóba küldenek be megoldásokat, emléklapot kapnak.

A részletek a verseny honlapján (www.sci.u-szeged.hu/chem/kkf/v/) olvashatók, vagy beszerezhetők Tóth Ágotától, a **VegyÉSZtorna** szervezőbizottságának vezetőjétől – telefonon (62 544 614), illetve e-mailen (atoth@chem.u-szeged.hu).





Vajna Balázs–Bódis Attila–Marosi György

BME Szerves Kémia
és Technológia Tanszék
balazs.vajna@gmail.com

Richter Gedeon Nyrt.
Készítményfejlesztési
Főosztály

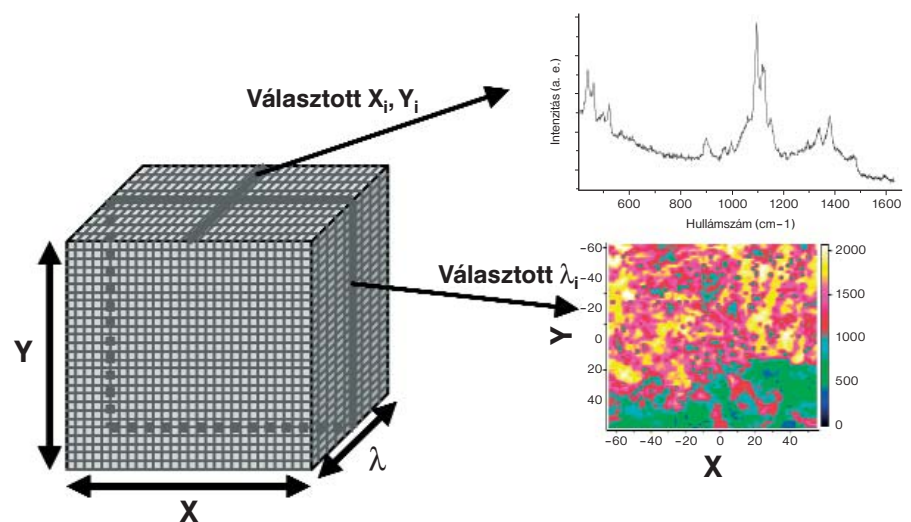
BME Szerves Kémia
és Technológia Tanszék

Többváltozós adatelemzési módszerek a kémiai térképezésben

A kémiai térképezés napjaink legdinamikusabban fejlődő analitikai módszereinek egyike. Alapját valamilyen spektrometriai technika és egy hozzá tartozó megfelelő optikai rendszer képezi. Spektrometriai módszerként elméletileg bármit használhatunk, ami kémiai információt szolgáltat, de a gyakorlatban leginkább rezgési – közeli infravörös (NIR-), közepes infravörös (MIR-) vagy Raman-spektrometriát alkalmaznak, így elsősorban ezekre vonatkozik a „kémiai térképezés” kifejezés is. A hozzá tartozó optikai rendszer alapvetően kétféle lehet attól függően, hogy „végigpásztázni” vagy „fényképezni” szeretnénk a felületet, természetesen mindkét esetben ugyanolyan típusú kémiai térképhez jutunk. A kémiai térkép megfelelő kiértékelés után alkalmas a vizsgált minták térbeli szerkezetének, például az alkotóelemek térbeli koncentrációeloszlásának meghatározására. A metodika fejlődésének motorja az a tény, hogy az alkalmazási lehetőségek száma elképesztően nagy: számos példa található többek között a felvezetőiparban [1], az orvostudományban [2], a papírparban [3], az élelmiszeriparban [4], a műanyagiparban [5], bűnügyi területeken [6], illetve – ami hazánk szempontjából kiemelt jelentőségű – a gyógyszeriparban [7,8].

A kémiai térképezés alapjai

A módszer nevéből adódóan kémiai (illetve anyagszerkezeti) információt tartalmazó térképet alkot a vizsgált mintáról. Ez a „térkép” nyers formában egy háromdimenziós adathalmaz, melyet *hiperspektrális adatkockának* is neveznek. Felépítése az



1. ábra. Kémiai térképek háromdimenziós szerkezete

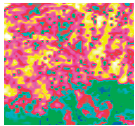
1. ábrán látható. A vizsgált felület minden pontjához hozzárendelhető egy rezgési (MIR-, NIR- vagy Raman-) spektrum, amely anyagszerkezeti és mennyiségi információt is hordoz. Az adatkocka megfelelő irányban fekvő „lapjai” pedig megmutatják egy adott hullámhosszú rezgési sáv intenzitásának térbeli eloszlását.

A hiperspektrális adatkocka felvétele – mint a bevezetőben utaltunk rá – kétféle módon történhet. Egyrészt a térkép létrehozható úgy, hogy a vizsgált felületen eleve sok pontról egyenként veszünk föl spektrumot. Ehhez optikai rendszerként mikroszkópra van szükség (hogy jó, akár 1 μm -es térbeli felbontást érjünk el), illetve egy motorizált tárgyasztalra, mely a minta szabályozott lépésenkénti mozgását teszi lehetővé. Ezt a metodikát nevezzük *pontonkénti térképezésnek (point mapping)*. A

másik lehetőség egy adott felület besugárzása és a visszavert vagy visszaszórt fény közvetlen begyűjtése egy hangolható szűrő segítségével, mely nagyon szűk hullámhossztartományú (tulajdonképpen adott hullámhosszú) fényt enged be a detektorba. Így megadott hullámhosszon készíthetünk „fényképet” a mintáról, ezt *teljes felületi képalkotásnak (global imaging)* nevezzük. Sok különböző hullámhosszon „fényképezve” ugyanazt a felületet hasonló hiperspektrális kocka hozható létre, mint az előző esetben. (A felvételi módszerek részletes ismertetése egy másik közleményünkben megtalálható [9].)

Kémiai térképek feldolgozása

A kémiai térkép nyers formájában két ok miatt kezelhető igen nehezen. Egyrészt



óriási méretű: ha minden spektrum 1000 db, különböző hullámszámokhoz tartozó intenzitásértékből áll (ami elég általános eset), akkor egy 30×30 pont méretű térkép – például egy $300 \mu\text{m} \times 300 \mu\text{m}$ -es négyzet alakú felület térképe mindkét irányban $10 \mu\text{m}$ térbeli felbontással – összesen 900 000 adatot tartalmaz. Még ha lehetőségünk van is vizuálisan ábrázolni a spektrumokat vagy az adott hullámhosszakhoz tartozó intenzitás-térképeket, ennyi adat átfogó áttekintése gyakorlatilag kivitelezhetetlen. A másik probléma pedig az, hogy a felület egyes pontjaihoz tartozó nyers spektrumokat ugyanazok a zavaró hatások terhelik, mint amelyek a megfelelő spektrometriai módszernél is előfordulnak (pl. detektorzaj, fluoreszcencia), illetve további zavaró hatások is fellépnek (pl. a minta felületi egyenetlensége miatt).

A második probléma kezelése jóval egyszerűbb, hiszen a spektrometriában már megszokott feldolgozási módszereket kell alkalmazni (alapvonal-korrekciónak, normálás, utólagos zajszűrés stb.). A felvett spektrumok minősége is javítható előzetes kalibrációval, mikroszkópos pontonkénti térképezés esetén automatikus fókuszálással és minél hosszabb mérési idővel. (Nem ritka, hogy egy térképezési program egész éjszakán át, nagyobb vizsgálandó felület esetén akár egész hétvégén fut.)

Az első probléma, azaz a hihetetlen adatmennyiség feldolgozása a kémiai térképezés tudományának máig egyik legizgalmasabb területe. Közleményünkben több matematikai (ún. *kemometriai*) módszer összehasonlítását mutatjuk be egy gyakorlati példán keresztül. Előbb azonban tegyünk egy kis kitérőt a kémiai térképezés gyakorlati alkalmazásai felé.

Kémiai térképek alkalmazási lehetőségei

A bevezetésben már említettük, hogy számtalan tudományos és műszaki területen nyer egyre komolyabb jelentőséget ez az ágazat. Néhány konkrét példával szeretnénk ezt illusztrálni.

A műanyagipar egyik fontos kérdése az újrahasznosítás. Számos kísérletet végeztek műanyag-hulladék-keverékek automatizált azonosítására. E kísérletek célja, hogy egy keverékben egyszerre meghatározzuk az összes benne lévő műanyagot és mennyiségüket. A Raman-térképezéssel elért eredmények biztatók örölt hulladékminták esetén [10]; őrlés nélküli, nagyobb minták esetén pedig a NIR-képpalkotás bizonyult alkalmazhatónak [11].

Bűnügyi területeken is alkalmazható a kémiai térképezés például robbanószerkezetek azonosítására ujjlenyomatokban [5]. A módszer előnye, hogy teljesen roncsolásmentes, tehát utána az ujjlenyomat tovább vizsgálható egyéb módszerekkel. Az okirat-hamisítás területén hazánkban mutattak fel kiemelkedő eredményeket [12]. Az orvostudományban különböző típusú rákos daganatok azonosítására alkalmazzák egyre gyakrabban a módszert [2,13].

A kémiai térképezés legerősebb hűző-ágazata mindazonáltal egyértelműen a gyógyszeripar, azon belül is a készítmény-technológia (azaz a fejlesztés/gyártás azon része, mely során a nyers hatóanyag-molekulából hatásos, bevehető készítményt formálnak). A kémiai térképezés jól alkalmazható már a technológiai lánc legelején, porkeverékek homogenizálásának on-line nyomon követésében, és végigkísérheti a gyártási folyamatot a tabletták csomagolás utáni végellenőrzéséig. A technika megoldást jelenthet a gyógyszerek 100%-os termékellenőrzésére, ami egyelőre még nem megoldott [7,8,14].

A gyártás közti ellenőrzés mellett a kémiai térképezés egyre fontosabb szerepet játszik a készítményfejlesztésben és a szerkezet-hatás összefüggések megértésében. A készítmények szerkezetének felderítése például lehetővé teszi az alkalmazott gyártási technológia és a tapasztalt biológiai hasznosíthatóság között fennálló kapcsolat feltárását [15].

A készítmények szerkezetének felderítése azonban nem csak a gyógyszeripar fejlesztésénél álló termékek esetében fontos. Napjainkban világszerte komoly problémát jelent a hamisított gyógyszerek kereskedelmi forgalomba kerülése, illetve a kábítószer-tabletták elterjedése. A lefoglalt készítmények szerkezeti elemzése nagyban segítheti a hatóságok munkáját. Ugyanakkor jelentősen megnehezíti a vizsgálatokat, hogy ezen illegális termékek esetében sokszor igen kevés információ áll rendelkezésre a mintákról: még az alkotó komponenseket sem ismerjük, és azt sem, hogy hány komponens alkotja a terméket. A következő fejezetben bemutatjuk, hogy a kémiai térképezés ilyen esetekben is alkalmazható.

Raman-térképek elemzése kemometriai módszerekkel – egy gyakorlati példa

A kémiai térképezés igazi erőssége a benne található óriási adatmennyiség, precízebben fogalmazva az adatrendszer túlhatározottsága. Számos sokváltozós adatelem-

zési módszer létezik nagy adathalmazok kezelésére: ezeket összefoglaló néven *kemometriai* módszereknek nevezzük. (Az elnevezés szakterületenként változik, például a *pszichometria* hasonló módszerekre utal a pszichológia területén.) Tanulmányunkban négy ilyen metodikát hasonlítottunk össze az vizsgálgatva, hogy egy gyógyszer-tablettáról készült Raman-térkép segítségével, előzetes ismeretek felhasználása nélkül, milyen hatékonysággal azonosíthatók a komponensek és határozható meg a térbeli koncentrációeloszlásuk.

Felhasznált anyagok és módszerek

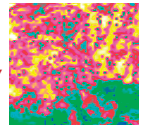
A vizsgálatokhoz modelltablettákat egy kereskedelemben kapható gyógyszerkészítményt választottunk, melyet iparjogvédelmi okok miatt csak „T” betűvel jelöltünk. A kvalitatív összetételt az 1. táblázat tartalmazza, azonban meg kell jegyezni, hogy ezt az információt csak az ellenőrzéshez használtuk fel.

A korpusz alkotói:
hatóanyag
laktóz-monohidrát
kukoricakeményítő
Mg-sztearát

1. táblázat. A „T” tabletták kvalitatív összetétele

A kémiai térképezést a HORIBA Jobin Yvon cég által gyártott LabRam típusú Raman-mikroszkóppal végeztük. Az 532 nm hullámhosszú gerjesztő fényt frekvenciakettőzött Nd-YAG lézerek sugárforrás biztosította. A berendezésben a lézerek sugár – megfelelő optikai tükör- és szűrőrendszeren keresztül – egy (mikrométeres felbontást biztosító) Olympus BXC-40 típusú optikai mikroszkópba jut. A sugár a mikroszkóp cserélhető objektívein keresztül kerül a mintára. Jelen vizsgálatok alkalmával $100\times$ -os nagyítást alkalmaztunk, mellyel a lézer fókuszpontjának átmérője $\sim 1,0 \mu\text{m}$. A visszazórt fényt ugyanez az objektív gyűjti össze, majd egy tükörrendszeren, köztük egy, a Rayleigh-szórás kiszűrő féligáteresztő tükrön keresztül egy optikai rácstra (1800 vonás/mm) bocsátja. A hullámhossz szerint felbontott fényt egy CCD detektorra kerül.

A vizsgálat során a tablettát kettétörtük, majd a törési felület $130 \mu\text{m} \times 130 \mu\text{m}$ -es területén $2 \mu\text{m}$ -es lépésközökkel térkép-felvételt készítettünk. (A felületi érdesség okozta fókuszálási hibák kiküszöbölését automatikus fókuszálórendszer segíti, mely minden térképpont felvétele előtt a min-



tafelületről visszaszórt fény intenzitása alapján korrigálja, jelen esetben a minta lokális felületi síkjára állítja a lézersugár fókuszát.) A felület mindegyik pontjáról 3 db 2 másodperces felvétel átlagolásával készült a spektrum.

Adatelemzés

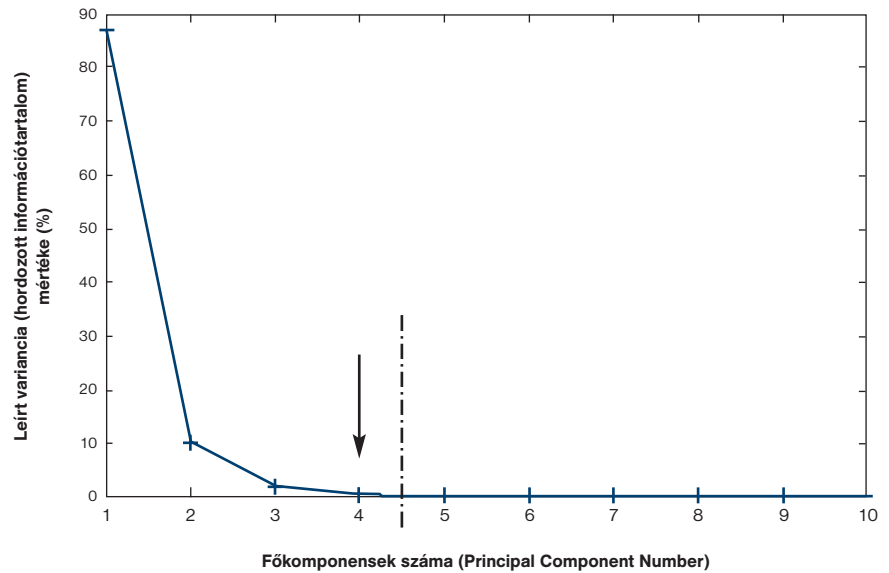
A térkép spektrumait először alapvonal-korrekciónak és normálásnak vetettük alá.

Az elemzés során a mintát teljesen ismeretlennek tekintettük, és nem használtuk fel a betegtájékoztatóban található, az alkotó komponensekre vonatkozó információt. A komponensek spektrumait négy különböző módszerrel kíséreltük meghatározni:

1. főkomponens-analízis (*principal component analysis*, PCA [16]);
2. önmodellező keverékelemzés (*simple-to-use interactive self-modeling mixture analysis*, SIMPLISMA [17]);
3. kétdimenziós spektrum-korrelációs elemzés (*sample-sample 2D correlation spectroscopy*, SS2D [18]);
4. többváltozós görbelfelbontás – alternáló legkisebb négyzetek módszere (*multivariate curve resolution – alternate least squares*, MCR–ALS [19]).

A matematikai részletekre e tanulmányban nem térünk ki, de lényegüket ismertettjük a következő fejezetben. Pontos ismertetésük megtalálható a hivatkozott [16–19] irodalomban, magyar nyelvű, rövid bemutatásuk pedig a Magyar Kémiai Folyóiratban jelent meg [9]. A számításokat MatLab 7.6 szoftverrel (MathWorks, USA) és PLS_Toolbox 5.5 kiegészítővel (Eigenvector Research, USA) végeztük. A tablettáról felvett Raman-térkép spektrumait ezután a klasszikus legkisebb négyzetek módszerével (CLS, [7,9]) modelleztük a fent felsorolt módszerekkel becsült „tisztá” spektrumok felhasználásával. (Ekkor a mért spektrumot a komponensek spektrumainak lineáris kombinációjával próbáljuk meg előállítani, hiszen a valódi keverék spektrum is – ha nincs a komponensek között kémiai kölcsönhatás – a tiszta komponensek spektrumainak koncentrációkkal súlyozott keverékeként áll elő.) Ezáltal tehát a térkép minden pontjában megbecsültük a komponensek koncentrációit. A koncentrációkat a hely függvényében vizuálisan ábráztuk a Labspec 4.02 szoftver segítségével.

Főkomponensek által hordozott információ (leírt variancia)



2. ábra. A „T” tablettáról készült Raman-térkép főkomponensei információ tartalmának ábrázolása (y tengelyen a relatív információ tartalom)

A fentiek után ellenőrzésképpen a tiszta alkotó komponensekről felvett referencia-spektrumok felhasználásával is kiszámítottuk a komponensek koncentrációeloszlását CLS módszert alkalmazva.

Eredmények

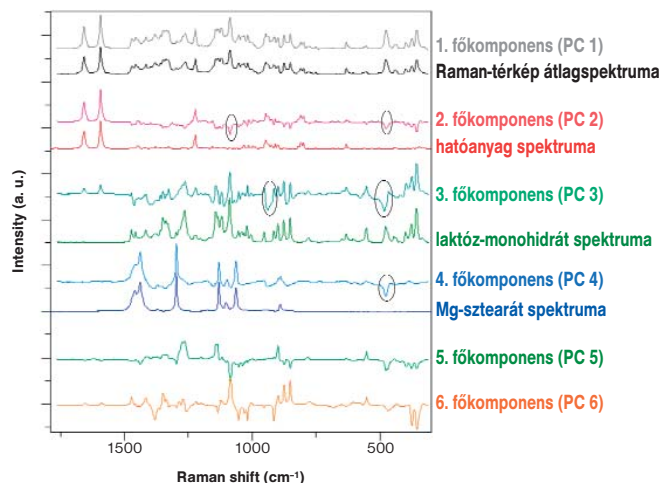
1. Főkomponens-analízis (PCA)

A főkomponens-analízis – az ismeretterjesztés szintjén megfogalmazva – olyan információhordozó változókat hoz létre az adathalmaz eredeti változóinak lineáris kombinálásával, amelyek leginkább magukban hordozzák az egész rendszerben található információt. A módszer továbbá megadja azt is, hogy egy ily módon létrehozott információhordozó (főkomponens v. *prin-*

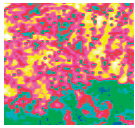
cipal component, PC) az adatrendszer teljes információ tartalmának mekkora részét tartalmazza. Ahogy a vizsgált készítmény alkotóelemei a gyártásához felhasznált komponensek, úgy a róla készült Raman-térkép fő információhordozói elméletileg a kiindulási komponensek Raman-spektrumai.

A módszer elméletileg alkalmas a mintát alkotó komponensek számának becslésére. Ezt azáltal érhetjük el, hogy a főkomponenseket sorba rendezzük az általuk hordozott információ mennyisége alapján. A 2. ábra mutatja, hogy a „T” tablettában a módszer négy főkomponenst becsül, mert az ötödik és a további főkomponensek már elhanyagolhatóan kevés információt hordoznak.

3. ábra. A tablettá Raman-térképéből PCA alapján becsült komponens-spektrumok összehasonlítása a komponensekről felvett referencia-spektrumokkal



A 3. ábrán láthatók a főkomponensek. Az első főkomponens (szürke) leginkább az átlagspektrumra (fekete) hasonlít, ami logikusan következik abból a tényből, hogy a legtöbb információt egy spektrumhalmazból éppen az átlagspektrum hordozza. A tiszta komponensek szempontjából azonban ez nem nyújt hasznos adatot. Ellenben a második, harmadik és negyedik főkomponensek alapján már azonosítható a hatóanyag, a laktóz-monohidrát és a Mg-sztearát jelenléte a tablettában. A matematikai elvből következik (ám a 3. ábrán is látható), hogy a főkomponensek sohasem tisztán tartalmazzák a kiindulási kom-



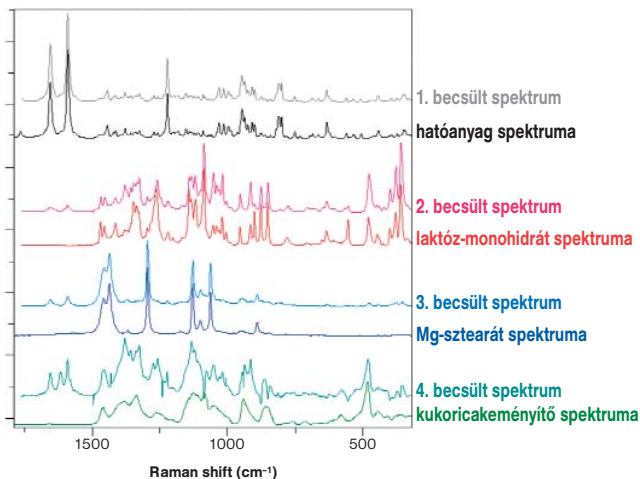
ponensek spektrumait, hanem mindig megjelenik bennük több másik komponensre jellemző sáv, akár pozitív, akár negatív irányban (példaként l. az ellipszissel jelölt területeket a 3. ábrán). Az ötödik főkomponenstől kezdődően a 2. ábrán látottakkal összehangban nem találunk újabb komponenshez tartozó rezgési sávot.

A főkomponens-analízis során kukoricakeményítő jelenlétére utaló jelet nem találtunk. Mindent összevetve megállapítható, hogy a főkomponens-analízissel a nagyobb koncentrációban jelen lévő komponensek spektruma már közelítőleg becsülhető.

2. Önmodellező keverékelemzés (SIMPLISMA)

A módszer azon az elven alapszik, hogy statisztikai jellemzők felhasználásával megkeresi a „legtisztább” Raman-sávokat, azaz azokat, amelyek csak egyetlen komponenshez tartoznak. Utána ezen „tisztá” sávok és a mintáról felvett keverékspektrumok segítségével építi fel a tiszta komponensek spektrumait.

Ez az algoritmus is lehetőséget ad az alkotóelemek számának matematikai becsülésére, azonban ez az irodalom szerint is kevésbé megbízható, így célszerű egy szubjektív módon kiválasztott számmal felülbecsülni a lehetséges komponensek számát, majd vizuális ellenőrzéssel eldönteni, hogy a kapott spektrumok közül hány rendelhető eltérő kiindulási anyagokhoz. Ebben az esetben 10 tiszta komponens jelenlétét feltételeztük (ennél több komponens az esetek



4. ábra. A tablettá Raman-térképéből SIMPLISMA módszerrel becsült komponens-spektrumok összehasonlítása a komponensekről felvett referencia-spektrumokkal

többségében nem tartalmaz egy tablettá korpusza).

A 4. ábrán látható, hogy három komponens (a hatóanyag, a laktóz-monohidrát és a Mg-sztearát) spektruma elegendően jó pontossággal, egy komponens (kukoricakeményítő) spektruma pedig felismerhetően, de igen pontatlanul deríthető fel. Apró pontatlanságok minden esetben tapasztalhatók, ami annak köszönhető, hogy a hatóanyag sávjai – nagy Raman-aktivitása miatt – szinte minden mérési pontban detektálhatók.

Az algoritmus igen gyors, de a felhasználónak kell beállítania, hogy hány tiszta komponens-spektrumot szeretne megbe-csülni. Ez azonban nem jelent problémát, mert az egyes megtalált spektrumok kevésbé függenek attól, hogy hány komponens jelenlétét becsüljük meg. Ebből következően az algoritmus lefutatásakor nyugodtan túl-

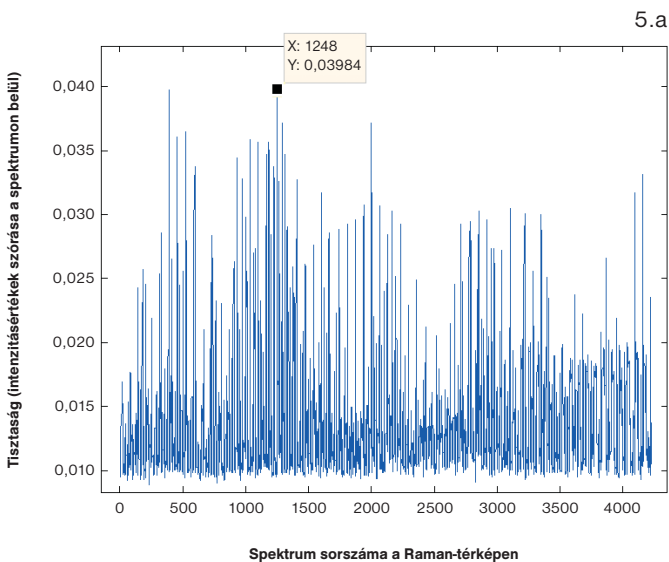
becsülhetjük a komponensek számát, és a megtalált spektrumok vizuális elemzésével a „jó” spektrumok élesen különválnak a többi matematikailag tisztának vélt spektrumtól.

3. Kétdimenziós spektrumkorrelációs elemzés (SS2D)

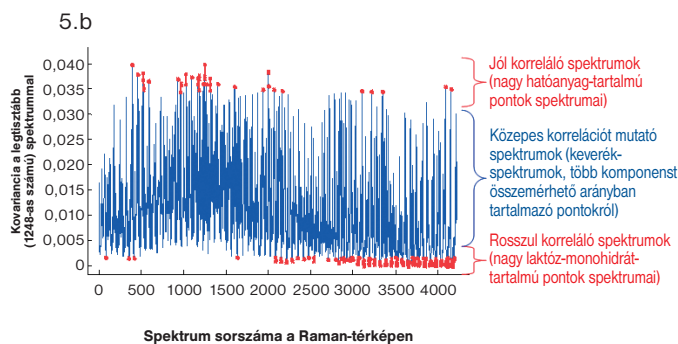
E módszer kevésbé algoritmus jellegű, inkább jelenti egy egyszerű matematikai módszer és jelentős mennyiségű vizuális elemzés együttes alkalmazását. Ebből következően a kiértékelésben az emberi faktor jelentős szerepet játszik. (Ennek előnyei és hátrányai egyaránt vannak.) Lényege, hogy a SIMPLISMA módszerrel

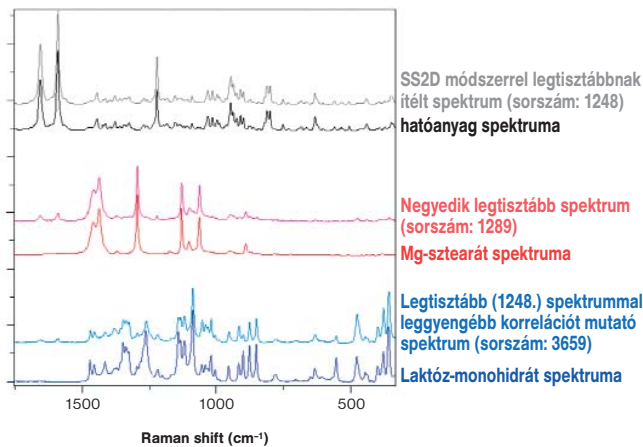
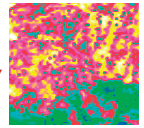
ellentétben nem a legtisztább, egy komponenshez rendelhető sávokat keressük meg, hanem a statisztikai (korrelációs) elemzést egyenesen a kémiai térkép spektrumain végesszük, és közvetlenül ezek közül választjuk ki azokat, melyeket „legtisztábbnak” ítélnünk. Itt tehát nem rekonstruáljuk a tiszta anyagok spektrumait, hanem a térkép spektrumaik közül választjuk ki őket.

A „legtisztább” spektrumok kiválasztása az SS2D módszerrel egyszerűen megvalósítható. Az 5.a ábrán „tisztasággal” arányos mennyiséget (az egy spektrumon belüli intenzitásértékek szórását) láthatunk az y skálán. A legtisztább térkép-spektrumokat egyszerűen az ábra alapján kiválaszthatjuk. Ebben a kontextusban a tisztább spektrumok azok lesznek, melyek kevesebb és intenzívebb sávot tartalmaznak. Ez sok esetben valóban igaz, hiszen a keverékspektrumokban (a több komponens jelen-



5. ábra. a) Raman-térkép spektrumainak relatív tisztasága (intenzitásértékek szórása a spektrumon belül); b) a „T” tablettáról készült Raman-térkép összes spektrumának kovarianciája az SS2D alapján legtisztább (1248. számú) spektrummal





6. ábra. A tablettá Raman-térképéből korrelációs (SS2D) elemzéssel becsült komponens-spektrumok összehasonlítása a komponensekről felvett referencia-spektrumokkal

létéből adódóan) jóval több Raman-sávot találunk, és ezek kevésbé intenzívek, mint a tiszta anyagok esetén – tehát az intenzitásértékek szórása egy spektrumon belül kisebb lesz.

Vizsgálataink során az első 10 legtisztább spektrumot néztük meg. Ezek közül azonban 9 ugyanarra a komponensre, a hatóanyagra vonatkozik (6. ábra). (A „legtisztább” spektrum az 1248. a térképen, l. 5.a ábra.) A másik detektálható komponens a Mg-sztearát (1289. spektrum).

A módszer következő lépése a legtisztább (1248.) spektrum és a térkép többi spektrumai közötti kovarianciák (tulajdonképpen korrelációk) kiszámítása. A tiszta komponensek spektrumai szinte egyáltalán nem korrelálnak egymással, így a legtisztább spektrummal egyáltalán nem korreláló spektrumok között vélhetőleg találunk tisztakomponens-spektrumot. Az 5.b ábrán látható a térkép spektrumainak kovarianciája az első legtisztább spektrummal. A „T” jelű tablettá esetében a legtisztább spektrummal legrosszabbul korreláló spektrumok mindegyike laktóz-monohidrát-spektrumnak adódott (pl. 3659. spektrum, 6. ábra).

Összefoglalva elmondható, hogy a 2D spektrumkorrelációs módszer időigényes, és mindössze három alkotó spektrumát sikerült vele megtalálni. Előnye, hogy – a többihez képest – kevés matematikai háttérrel igényel.

4. Többváltozós görbefulbontás (MCR-ALS)

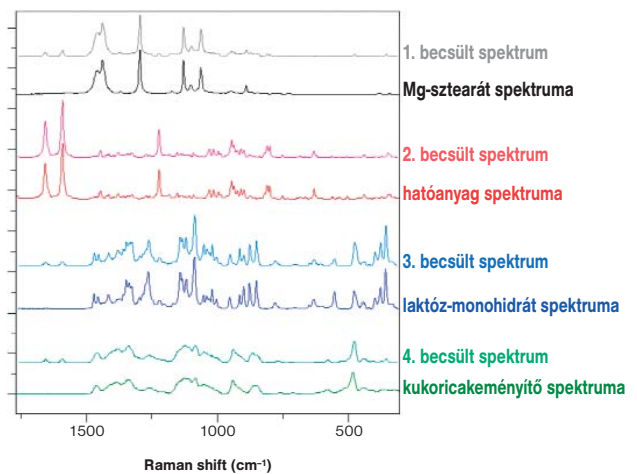
Ez az algoritmus áll matematikailag legközelebb a (fizikailag legkorrektebb) klasztrikus legkisebb négyzetek (CLS) módsze-

réhez. A kiindulási komponensek becslését iteratív módszerrel végzi, tulajdonképpen több egymást követő lépésben a CLS módszert alkalmazva. Egyszer a spektrumok alapján számolja ki az alkotó komponensek koncentrációját, utána pedig a koncentrációkból számolja vissza a spektrumokat. Az egyes lépések között azonban szűrési feltételeket alkalmazunk, például egy komponens koncentrációja csak pozitív szám lehet, illetve a spektrumokban sem engedünk meg negatív intenzitást (legfeljebb a zaj minimális szintjén). Amennyiben valahol negatív szám keletkezik (vagy eleve volt) az adathalmazban, azt az algoritmus 0-val helyettesíti, és folytatja a spektrumok vagy a koncentrációk becslését (attól függően, hogy éppen melyik lépés következik). A pontos leírás a már említett hivatkozásokban megtalálható.

A módszernek bemenő adatként szüksége van a kiindulási komponensek számának megadására, illetve durván becsült spektrumaira is. A módszer tehát önmagában nem alkalmas a jelen tanulmányban kitűzött feladat elvégzésére, csak valamilyen másik módszerrel együtt. Nagyon rosszul becsült bemenő adatok esetén elképzelhető, hogy rossz eredményt fogunk kapni.

Jelen vizsgálatok során a bemenő adatként megadandó komponens-spektrumokat a SIMPLISMA módszerrel becsültük, és e spektrumokra alkalmaztuk az MCR-ALS módszert.

A 7. ábrán látható, hogy az MCR-ALS módszerrel szinte tökéletesen megkaptuk a kiindulási komponensek spektrumait. E módszer további előnye, hogy alkalmazásával – érthető módon – hasonló koncentrációkat kapunk, mint a CLS módszerrel, míg a többi módszer esetén a kapott kon-



7. ábra. A tablettá Raman-térképéből MCR-ALS módszerrel becsült komponens-spektrumok összehasonlítása a komponensekről felvett referencia-spektrumokkal

centrációk alapvetően pontatlanok. Fontos azonban továbbra is szem előtt tartani, hogy a Raman-mikroszkópia esetén a legpontosabb (CLS) módszerrel, referenciaspektrumokat felhasználva is mindig relatív koncentrációkat kapunk, melyeket kizárólag más vizsgálati módszerekkel kombinálva számolhatunk át valódi, tömegszázalékos összetételéllé.

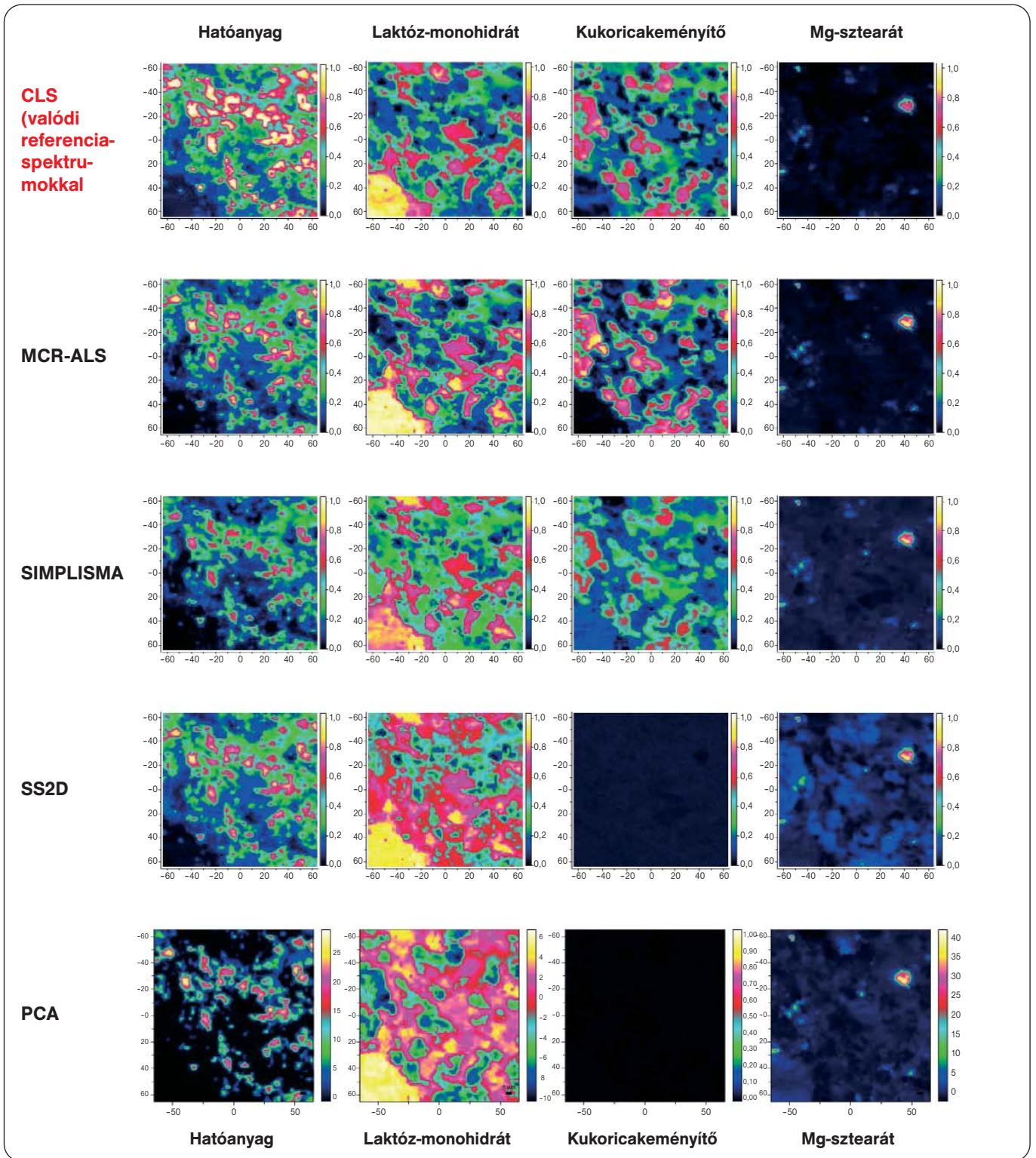
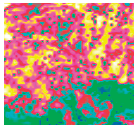
5. Komponensek eloszlástérképének megjelenítése a különböző kemometriai módszerek segítségével

A 8. ábrán látható a tablettá korpusz komponenseinek térbeli eloszlása a különböző kemometriai módszerek által becsült spektrumok segítségével. Megfigyelhető, hogy tulajdonképpen mindegyik módszerrel meghatározható megközelítően a komponensek relatív térbeli eloszlása. A referencia-módszerhez képest legpontosabb eredményt az MCR-ALS szolgáltatja (hiszen ezzel kaphatók vissza legjobban maguk a spektrumok is), a PCA pedig a leggyengébb eredményt adta, azaz csupán durva közelítésre alkalmas.

Fontos kiemelni, hogy Raman-térképezéssel a minor komponensek is jól detektálhatók. Ezt jól példázza a Mg-sztearát jó detektálhatósága: ugyan igen kis mennyiségben van jelen a tablettában, de mivel eloszlása heterogén, a spektruma és koncentrációeloszlása – kis átlagos koncentrációja ellenére – egyaránt igen pontosan becsülhető.

Összefoglalás

A tanulmányban bemutatott példa alapján látható, hogy a kémiai térképezés mint analitikai módszer sokváltozós adatelemzési



8. ábra. A „T” jelű tablettá alkotó komponenseinek becsült eloszlástérképe különböző kemometriai módszerekkel

technikákkal karöltve alkalmas teljesen ismeretlen minták összetételének és komponenseik térbeli koncentrációeloszlásának meghatározására.

Vizsgálataink eredményeként elmondható, hogy a cél elérésére többé-kevésbé mindegyik itt bemutatott kemometriai módszer alkalmazható. A kifejezetten a tiszta komponensek spektrumainak megkeresésére kidolgozott algoritmusok (SIMP-

LISMA, MCR-ALS) képesek mindazon komponensek azonosítására, melyek az adott mérési módszerrel detektálhatók. Amennyiben azonban nem állnak rendelkezésre ilyen specifikus algoritmusok, általános adatelemzési eljárásokkal – pl. PCA, illetve korrelációs analízis (SS2D) – is adható közelítő becslés a jelen lévő komponensek spektrumaira és koncentrációeloszlására. Ez előrevetíti a kémiai térképe-

zés alkalmazását bűnügyi területeken, például kábítószer-készítmények és gyógyszerhamisítványok vizsgálatában. ●●●

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS
A munka a K76 346 számú OTKA, NN 82426 számú ERA Chemistry, 212782 számú W2Plastics (EU7), TECH_08-A4/2-2008-0142 jelű Recytech és IP 026685-2 kódjelzésű Multihybrids (EU6) projektek támogatásával készült.



IRODALOM

- [1] X. M. Yang, D. A. Tryk, K. Hasimoto, A. Fujishima, *Appl. Phys. Lett.* (1996) 69, 4020–4022.
- [2] D. Ferris, R. Lawhead, E. Dickman, N. Holtzapple, J. Miller, S. Grogan, S. Bambot, A. Agrawal, M. Faupel, *J. Low. Genital Tract Dis.* (2001) 5, 65–72.
- [3] P. Tatzert, M. Wolf, T. Panner, *Real-Time Imaging* (2005) 11, 99–107.
- [4] P. Robert, D. Bertrand, M. F. Devaux, A. Sire, *Anal. Chem.* (1992) 64, 664–667.
- [5] L. Markwort, B. Kip, E. Da Silva, B. Roussel, *Appl. Spectrosc.* (1995) 49, 1411–1430.
- [6] E. D. Emmons, A. Tripathi, J. A. Guicheteau, S. D. Christesen, A. W. Fountain, *Appl. Spectrosc.* (2009) 63, 1197–1203.
- [7] A. A. Gowen, C. P. O'Donnell, P. J. Cullen, S. E. J. Bell, *Eur. J. Pharm. Biopharm.* (2008) 69, 10–22.
- [8] C. Gendrin, Y. Roggo, C. Collet, *J. Pharm. Biomed. Anal.* (2008) 48, 533–553.
- [9] B. Vajna, P. Szepesváry, Gy. Keglevich, Gy. Marosi, *Magyar Kémiai Folyóirat* (2010) 116, 77–85.
- [10] B. Vajna, K. Palásti, B. Bodzay, A. Toldy, S. Patachia, R. Buican, C. Catalin, M. Terean, *The Open Waste Management Journal*, 2010 (megjelenés alatt)
- [11] W. H. A. M. van den Broek, D. Wienke, W. J. Melsse, L. M. C. Buydens, *Anal. Chim. Acta* (1998) 361, 161–176.
- [12] T. Gál, J. Kovács, Á. Dombi, *Rendészeti Szemle* (2009) március, 109–115.
- [13] C. Krafft, L. Shapoval, S. B. Sobottka, G. Schackert, R. Salzer, *Biochim. Biophys. Acta (BBA)-Biomembr.* (2006) 1758, 883–891.
- [14] B. Vajna, Zs. Nagy, G. Patyi, I. Antal, Zs. Zsolt, *Gy. Marosi, Acta Pharmaceutica Hungarica* (2009) 79, 104–116.
- [15] B. Vajna, I. Farkas, A. Szabó, Zs. Zsolt, *Gy. Marosi, J. Pharm. Biomed. Anal.* (2010) 51, 30–38.
- [16] Gy. Horvai, *Sokváltozós adatelemzés (kemometria)*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.
- [17] W. Windig, J. Guilment, *Anal. Chem.* (1991) 63, 1425–1432.
- [18] S. Šašić, M. Morimoto, M. Otsuka, Y. Ozaki, *Vib. Spectrosc.* (2005) 37, 217.
- [19] R. Tauler, *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* (1995) 30, 133–146.

ÖSSZEFOGLALÁS

Vajna Balázs–Bódis Attila–Marosi György: **Többváltozós adatelemzési módszerek a kémiai térképezésben**

A kémiai térképezés a spektrometria új területe, mely alkalmas egy minta felületének kémiai, anyagszerkezeti és mennyiségi feltérképezésére. Már számos helyen alkalmazták a félvezető-elektronikában és a gyógyszeriparban, elterjedése azonban egyre több további területen is várható. A kémiai térképek óriási adathalmazt alkotnak, melyek feldolgozása többféle adatelemzési (ún. kemometriai) módszerrel lehetséges. E tanulmányban bemutatjuk, hogy kémiai térképezéssel egy gyógyszer-tabletta szerkezete roncsolásmentes módon, szinte teljes mértékben felderíthető akkor is, ha nem rendelkezünk róla semmilyen előzetes információval. Az eredmények ígéretesnek mutatkoznak kábítószer, illegális készítmények, illetve egyéb ismeretlen minták vizsgálatában.

Drávcz Imre

MOL Nyrt. KTD-IMA-Új Technológiák és K+F

Problémamegoldás FTIR-spektroszkópia segítségével a MOL–KTD területén

A kút- és rétegekárosítás pontos ismerete a gazdaságosságot döntően befolyásoló tényező a szénhidrogének kutatásában, termelésében és tárolásában. Az egyre növekvő követelmények szükségessé teszik a károsítás mértékének, helyének és típusának – vagyis a kút állapotának minél pontosabb meghatározását. A jelenleg alkalmazott kútdiagnosztikai módszerek elsősorban a károsítás mértékének, ritkábban a helyének megállapítására alkalmasak, de nem adnak felvilágosítást arról, hogy a károsítást milyen anyag okozta.

A károsító anyag összetételének ismerete azért nagyon fontos, mert lehetőséget nyújt a károsítási mechanizmus megismerésére és a károsító folyamatba való eredményes beavatkozásra, megtervezhető az az optimális kezelési technológia, amivel a károsítás megszüntethető, és a kívánt produktivitás (vagy injektivitás) minimális költséggel elérhető, illetve hosszú ideig fenntartható.

Egy felmérés szerint az amerikai föld alatti gáztároló kutakban a kitermelhetőség csökkenése 5%, a kutak helyreállításának költsége több 10 millió dollár évente. A kitermelhetőség helyreállításakor gyakran felmerül az a probléma, hogy ennek az összegnek a jelentős részét anélkül költik el, hogy meghatároznák a károsítás típusát, világosan megértenék a károsítás mechanizmusát. Ezzel összefüggésben Blanch és munkatársai [1] az uniformizált helyreállítási technológia alkalmazásának veszélyeire és a kutankénti károsítóanyag-vizsgálatok szükségességére hívják fel a figyelmet. Ha az azonos tárolókőzetben levő kutak mű-

ködésében rendellenességet észlelnek, akkor abból a feltételezésből kiindulva, hogy a károsítás típusa mindegyik kútban azonos, rendszerint egyféle helyreállítási módszert alkalmaznak. Egy minimálisan károsodott kútot ugyanúgy kezelnek, mint egy erősen károsodottat, emiatt a szükségesnél nagyobb összeget fordítanak a kívánt produktivitás elérésére. Hat kútból oldalal-mintákat vettek, amelyek megjelenésüket tekintve teljesen azonosnak látszottak: mindegyiknél barna, kátrányszerű bevonat volt a kőzet felszínén. A szokásos eljárással valamennyit paraffinos lerakódásként diagnosztizáltak és a kutakat azonos technológiával kezelték volna. A részletes vizsgálatok viszont azt mutatták, hogy a lerakódás összetétele még egy tárolón belül is eltérő volt, ezért nem meglepő, ha az uniformizált kútkezelés eredményei különbözőek.

A cikk témája a károsítás típusának meghatározásához, vagyis azokhoz az üzemi esetekhez kapcsolódik, amikor valamilyen anyag a kútban vagy a tárolókőzet lyukfalhoz közeli részében a vártnál kisebb hozamot – a víz- és gázbesajtoló kutakban pedig kisebb besajtolási ütemet vagy kitermelhetőséget eredményez.

Az eddig megismert károsító anyagok összetettsége, kedvezőtlen fizikai jellemzői, a „nem várt” komponensek jelenléte, a korlátozott mintamennyiség és a rövid elemzési idő szükségessé teszik a legkorszerűbb analitikai vizsgálati módszerek alkalmazását.

Céлом a kútállapot meghatározására irányuló módszerek kémiai irányban történő fejlesztése, ezen belül a Fourier-transzformációs infravörös (FTIR) spektroszkó-



piában rejlő lehetőségek feltárása és jobb hasznosítása.

A kút- és rétegekárosító anyagok vizsgálati módszerei

A föllelhető vizsgálati módszerek egy része olyan esetekre vonatkozik, amikor a károsodást egy bizonyos anyag, például a pórustérben elmozdult közterészecskék [2,3] vagy a kivált savgyanta [4] eredményezik. Az egyszerű és gyors, polarizációs mikroszkópos megfigyelés [5] az összetett károsító anyag egészére kiterjed, az így megszerzett információ azonban sok esetben nem elegendő a károsító anyag összetételének pontos megismeréséhez és a kezelőfolyadék kiválasztásához.

A közlemények többségében szereplő módszerek költség- és munkaigényes elválasztásokból és a komponensek nagyműszeres vizsgálatából állnak, a bemutatott röntgendiffrakciós, pásztázó elektronmikroszkópos és pirolízis-gázkromatográfiai módszerek az ún. nagyműszeres vizsgálatok közé tartoznak [3,4,6,7]. Alkalmazásuk költséges, illetve nem lehetséges abban az esetben, ha a károsító anyag amorf fázist tartalmaz.

Bár a kútból visszatermelt, kimerült savak analízisével több publikáció is foglalkozik, az ekkor felszínre került szilárd anyagok vizsgálatát egyik sem érinti [8,9]. A kút körüli zóna szennyezőanyagaina és a savazáskor bekövetkező csapadékkiválásra kizárólag a kútermelvény vízfázisának ionösszetételéből következtetnek. Emiatt felhasználatlan marad az az információ-tartalom, amit a kútermelvényben szinte mindig jelen levő szilárd anyag hordoz.

A károsító anyagok alkotórészeinek azonosítására, összetételének meghatározására nincsenek szabványok, a szakirodalomból megismerhető, reprodukálható elemzési módszerek. A publikációk sok esetben általános megállapításokat tartalmaznak, illetve az alkalmazott technikák felsorolására szorítkoznak, többségükből a metodikai leírás hiányzik, vagy olyan szűkszavú, ami kizárja a vizsgálat megismételhetőségének lehetőségét.

A szakirodalmat tanulmányozva kitűnik az is, hogy az infravörös spektroszkópiát a károsító anyagok vizsgálatában ritkán alkalmazzák, akkor is csak az elkülönített szerves anyagok azonosítására. Ennek valószínűleg az lehet a magyarázata, hogy az FTIR-spektrométerek megjelenéséig a korábban használatos, diszperziós elven működő spektrométerekkel csak a szerves anyagok azonosítását, a tisztaságuk ellenőrzését és

a szerkezetfelderítést tudták megbízhatóan elvégezni [10].

A szakirodalomból megállapítható még, hogy a szénhidrogénipar egyes ágazataiban az FTIR-spektroszkópiát széleskörűen alkalmazzák nemcsak szerves anyagok azonosítására, hanem a következő összetett anyagok minőségi és mennyiségi elemzésére is: kőolaj, motorhajtóanyag, kenőanyag, bitumen [11], olajpala és kerogén [12], kőzetek, furadékok ásványos összetevői [13], fúrású iszap szilárd anyagai, olajbázisú fúrású iszap komponensei [14], korróziótermékek [15]. Mivel a kút- és rétegekárosítás vizsgálatában is az előbb felsoroltakhoz hasonló jellegű és összetettségű anyagok fordulnak elő, és ezek megbízható, gyors és költségkímélő analízisére van szükség, kézenfekvőnek látszik az FTIR-spektroszkópiában rejlő lehetőségek jobb kiaknázása.

Alkalmazási tapasztalatok

Az első FTIR-méréseket a MOL Rt. KTÁ által 1993-ban elindított, kútermelés-intenzifikálás K+F projekt részfeladatainak megoldása során végeztem. A feladatok az alábbiak voltak: 1. vízbesajtoló kutak injektivitási problémáinak elemzése, a diagnosztizálás lehetőségeinek fejlesztése, 2. föld alatti gáztároló kutak működését befolyásoló, hozamcsökkentő tényezők meghatározása, a szűrőt károsító anyagok forrásának felderítése, 3. a részecskemigráció káros hatásának csökkentésére alkalmas eljárás kidolgozása. A vizsgálatok többsége azonban a kútállapot-meghatározás napi, operatív feladatainak megoldásához kapcsolódik. E vizsgálatok célja a kút és a felszíni technológia működését befolyásoló károsító tényezők minél pontosabb és gyorsabb meghatározása, rétegkezelés után pedig a művelet eredményének értékelése a kútermelvény összetétele alapján.

1. táblázat. Föld alatti gáztároló kutakból és távvezetékéből származó porok összetétele

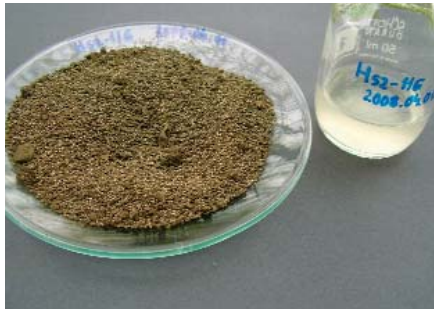
	Psz-41 perforáció	Hsz-121 perforáció	Hsz-113 kútfej	Adony távvezeték	Sz.fehérvár gázsűrű
Kvarc (%)	48	19	26	21	34
Agyagásványok (%)	12	33	7	12	16
Vas-karbonát (%)	24	20	47	38	32
Vas-szulfidok, FeS ₂ (%)	3	3	<1	5	<1
Vas-oxidok, Fe ₂ O ₃ (%)	10	17	16	12	7
Elemi kén (%)	0,4	1	2,2	3,1	4
Szerves anyag* (%)	2,5	7	1,2	0,5	1
Kalcit (%)	<1	<1	<1	8	4
Dolomit (%)	<1	<1	<1	<1	2

* paraffinok + alifás észterek és karbonsavak

Az első lépésben a károsító anyagok tulajdonságainak figyelembevételével kidolgoztam a mintaelőkészítés legfontosabb elemeit, meghatároztam azokat a paramétereket, amelyek figyelembevételével minimálisra csökkenthető a minta-előkészítés, a spektrumfelvétel és a kiértékelés folyamatának idő-, munka- és anyagigénye. Az ismeretlen összetevő azonosításának lerövidítésére spektrumtárat készítettem, amely tartalmazza a hazai fúrású, cement-, kútmunkálati, rétegkezelési és felszíni technológiában használt vegyi anyagok, valamint a termelés során a kutakból, tartályokból, vezetékekből származó károsító anyagok és kőzetanyagok 800 db FTIR-spektrumát, felhasználási területek szerint csoportosítva. A kidolgozott módszer teljesítőképességét a következő két példával szemléltetem.

Föld alatti gáztároló kutakból származó károsító anyagok vizsgálata

A föld alatti gáztároló (FGT) kutak működtetése során arra törekednek, hogy a földgáz besajtolása minimális energiafelhasználással, kitermelése a lehető legkisebb nyomásvesztéssel és az előírt ütemben történjen. Az FGT kutak lefúrása, kiképzése, működtetése során számos károsító hatás éri. Megfelelő kútvizsgálattal meghatározható a károsodás mértéke, de emellett legalább annyira fontos a károsító anyagok összetételének, ezen túlmenően a károsítás mechanizmusának ismerete. A rendellenesen működő kútból kinyert anyag (üledék-, lerakódás-, oldalfal- és kútfolyadék-minta) vizsgálata a kútállapot-meghatározás fontos részét képezi, ám a témában megjelent publikációk egyike sem tartalmazza a károsító anyagok elemzési módszerének pontos leírását.



A Hsz-116 üledékének szilárd és folyadékfázisa

Agyagos üledék a HE-35 gázkútból



A minták hazai föld alatti gáztárolókból, az alábbi helyekről származnak: kúttalpról, kútból kimentett szűrőből, szűrősavazás-kor a visszatermelt savból, a szűrőcsere utáni kúttermelvényből, a kút felbővítések a furadékból, az FGT kúthoz csatlakozó felszíni kútvezetékéből, a homokérzékelő szűkítőeleméből. Néhány minta az FGT kutaktól távoli helyről, távvezetékéből, a fogadó-állomásokon, illetve a gázzűrőkben összegyűlt porból való.

Megállapítottam, hogy az FGT kutak károsodásában a tárolókőzet eredetű részecskék, korróziótermékek, kompresszorolaj, menetkenőcs, elemi kén, a kútmunkálati folyadék elnyelődött komponensei, ritkábban a vízkőképződés játszanak főszerepet. A menetkenőcs és a kompresszorolaj, valamint a vasvegyületek jobb megkülönböztetése céljából az FTIR-méréseket a savas kivonatok elemtartalmának atomabszorpciós spektroszkópiás (AAS) mérésével egészítettem ki. Kitűnt, hogy a károsító anyagban gyakran előfordul vas-karbonát és az elemi kén nemcsak a kúttalpon van jelen, hanem a kúttól jóval messzebb levő vezetékszakaszokban, gázzűrőben is előfordul (1. táblázat).

Az FTIR-vizsgálat számos esetben lehetővé tette a károsítás típusának gyors felismerését és megértését, új információkkal segítette a károsító anyag hatékony eltávolítását.



Eltömődött gázzűrő (Psz-57)

Kútvezeték-üledék (Hsz-190)



Vízbesajtoló kutakból származó károsító anyagok vizsgálata

Az algyői vízbesajtoló kutakban fellépő injektivitáscsökkenés általában több tényező együttes hatásának eredménye. A vízkő-



CaCO₃ vízkő besajtoló szivattyúból (Nagykátai)

Olajos üledék az Alg-915 vízbesajtoló kútból



képződésen kívül szerepet játszhatnak még a besajtoló rétegvízben levő szilárd anyagok, például kőzetanyag, fúrási és kútmunkálati folyadékok vízdoldhatatlan komponensei, valamint a besajtoló rendszerben lezajló korróziós és bakteriális folyamatok termékei is. Ritkán fordul elő, hogy a károsító anyag viszonylag egyszerű formában és összetételben kerüljön felszínre. Gyakoriak a fotókon látható, többkomponensű károsító anyagok. A szakirodalomban két publikáció foglalkozik a vízbesajtoló kutakból kiöblített károsító anyagok vizsgálatával: az egyikben szemrevételezéssel vizsgálták a kútból ki-termelődött szilárd anyagot [16], a másikban többszörös extrakcióval és a fázisos részletes analizisével állapították meg az összetételt [7]. Munkám során legtöbbször az utóbbi közleményben leírtakat követtem, azzal a különbséggel, hogy az FTIR módszer nemcsak a kioldott szerves anyagok, hanem a szervesetlen komponensek (vízkő, korróziótermék, kőzet, műveteli folyadékok szilárd anyagai, tartálytisztáltságok) vizsgálatára is alkalmaztam.

A kloroformextrakciós szétválasztási módszerrel a besajtoló kútból származó, bonyolult összetételű mintáknál a minőségi és a mennyiségi meghatározás pontosságát növeltem. Az FTIR-színképadatok segítségével kimutattam, hogy a vízbesajtoló kútból kiöblített károsító anyagok bakteriális anyagcsereterméket (biomasszát), vasvegyületeket, kőolaj-szénhidrogéneket, kőzet-



Olajos üledék az Alg-318 vízbesajtoló kútból

Károsító anyag az Mcs-Ny-2 kútból





VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

anyagot, karbonát vízkövet, menetkenőcsöt és kút munkálati folyadék eredetű szilárd anyagot tartalmaznak.

A **2. táblázat** azokat a hullámszámértékeket mutatja, ahol az említett összetevők jelenléte, koncentrációja FTIR-módszerrel pontosan meghatározható.

Gyakori feladat a vízbeszajtoló kutakból származó, ún. nem sztöchiometrikus összetételű karbonát vízkövek összetételének meghatározása is. A **3. táblázat** adatai igazolják, hogy az FTIR-színképadatok alap-

Anyag	Hullámszám, cm^{-1}	Anyag	Hullámszám, cm^{-1}
Kalcium-karbonát	876, 712	Na-földpát	648
Vas-karbonát	864, 737	Dolomit	882, 729
Hematit	800, 690	Kőolaj	2960, 722
Biomassza	1580	Menetzsír	1735, 1600
Kvarc	800, 780	Szilikagél	958, 804
Kaolinit	3694	Cement	3644, 1490
Illit+klorit	3620, 3660	Barit	635, 611

2. táblázat. Vízbeszajtoló kútból származó károsító anyagok jellemző IR-abszorpciós sávjai

CaCO_3 vízkő	876, 712 cm^{-1}
CaCO_3 vasas vízkő	874, 718 cm^{-1}
FeCO_3	864, 737 cm^{-1}
CaCO_3 szintetikus ($\text{CaCl}_2 + \text{K}_2\text{CO}_3$)	857 cm^{-1}
$\text{CaMg}(\text{CO}_3)_2$	882, 729 cm^{-1}
ZnCO_3	870, 743 cm^{-1}
SrCO_3	858, 703 cm^{-1}
BaCO_3	859, 691 cm^{-1}

3. táblázat. A szénhidrogén-ipari gyakorlatban előforduló karbonátok jellemző IR-abszorpciós sávjai

ján jól nyomon követhető a karbonátban levő kation tömegének már csekély mértékű változása is: például a kalcium egy részének vassal való helyettesítése.

Ismeretlen anyagok azonosítása

Az üzemi alkalmazás estenként szélsőséges időjárás viszonyai között a felhasznált vegyi anyag csomagolása megsérülhet, az

anyag színe, szaga, homogenitása, oldhatósága megváltozhat, vagyis kétség merül fel a hatóanyag aktivitását illetően. Adóhatnak váratlan események, például gipsz lerakódása egy olyan vízsűrűben, ahol a korábbi vízkémiai adatok nem utaltak gipszkiválásra, vagy a barit megjelenése egy mészkőtárolóból kijövő, eredetileg baritot nem tartalmazó műveleti folyadékban.

A bemutatott alkalmazási példák azt bizonyítják, hogy az FTIR vizsgálati módszer sokoldalúsága, pontossága és gyorsasága révén jól hasznosítható a kútállapot-meghatározás üzemi feladatainak megoldásában.

IRODALOM

- [1] Blauch, M. E., Squire, K., Guoynes, J., Diagnostic process enhances gas storage deliverability – a case study, SPE Prepr. 51039 (1998).
- [2] Schaible, D. E., Akpan, B., Ayoub, J. A., Identification, evaluation and treatment of formation damage, Offshore Louisiana, SPE Tech. Paper 14820 (1986)
- [3] Byrne, M., Patey, I., Formation damage laboratory testing – a discussion of key parameters, pitfalls and potential, SPE Tech. Paper 82250 (2003)
- [4] Wong, T. C., Hwang, R. J., Beaty, D. W., Dolan, J. D., McCarthy, R. A., Franzen, A.L., Acid sludge charac-

terization improve well productivity, SPE Tech. Paper 35193 (1996)

- [5] Dunlap, O. D., Houchin, L. R., Evaluation of acid system and formation damage using polarized microscopy, SPE Tech. Paper 19425 (1990)
- [6] Denniss, E., Patey, I., Byrne, M., Cryogenic Scanning Electron Microscope Analysis: an aid to formation damage assessment, SPE Tech. Paper 107560 (2007)
- [7] Fambrough, J. D., Lane, R. H., Braden, J. C., A comprehensive approach for stimulating produced water injection wells at Prudhoe Bay, Alaska, SPE Tech. Paper 28976 (1995)
- [8] Almond, S. W., Brady, J. L., Underdown, D. R., Return fluid analysis from the Sadlerock formation, SPE Tech. Paper 18223 (1988)
- [9] Carr, M. A., Yang, H. B., Candidate selection for removal treatment based upon improved flowback analysis, SPE Tech. Paper 39217 (1997)
- [10] Mázor L., Szerves kémiai analízis, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976, 224–226.
- [11] Svehla, G., Comprehensive analytical chemistry: analysis of complex hydrocarbon mixtures, Elsevier, Amsterdam, 1981, 765–823.
- [12] Derenne, S., Largeau, C., Hetényi M., Brukner-Wein A., Chemical structure of the organic matter in a Pliocene Maar-type shale, Geochim Cosmochim Acta (1997) 61(9), 1879–1889.
- [13] Herron, M. M., Matteson, A., Gustafson G., Dual-range mineralogy and the analysis of sedimentary formations, Soc. Of Core Analyst, Paper NO 9729 (1997)
- [14] Sanders, M., Chemical monitoring of mud products on drilled cuttings, SPE Tech. Paper 23361 (1991)
- [15] Raman, A., Kuban, B., Razvan A., The application of IR spectroscopy to the study of atmospheric rust systems, Corrosion Sci. (1991) 32(12), 1295–1306.
- [16] Clementz, D. M., Patterson, D. E., Stimulation of water injection well in the Los Angeles Basin, J. Petr. Techn. (1982) 9, 2087–2096.

ÖSSZEFOGLALÁS

Drávucz Imre: Problémamegoldás FTIR-spektroszkópia segítségével a MOL-KTD területén

A szénhidrogén-kutatás és -termelés gyakorlatában sokszor van szükség gyors és megbízható kémiai analízisre a formációkárosítási problémák megoldása, valamint készülék- és eszközmeghibásodások okának felderítése céljából. A Fourier-transzformációs infravörös (FTIR) spektroszkópia segítségével – viszonylag egyszerű módon és gyorsan – értékes információt kaphatunk a károsító anyagok szerves és szervesetlen összetevőiről. A cikk ismerteti az FTIR módszer jellemző vonásait és alkalmazhatóságát földgáz- és rétegvíz-beszajtolással, illetve ismeretlen anyag azonosításával kapcsolatos kémiai problémák megoldásában.



Cink-karbonát-lerakódás



Homok- és barittartalmú károsító anyag

Cement- és műanyagtörmelék



Menetzsíros lerakódás gázkútból





BRUCKNER-TERMI ELŐADÁSOK

Tóth Flórián

BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, MTA-BME Alkaloidkémiai Kutatócsoport, AMRI Hungary Zrt. | florian.toth@amriglobal.com

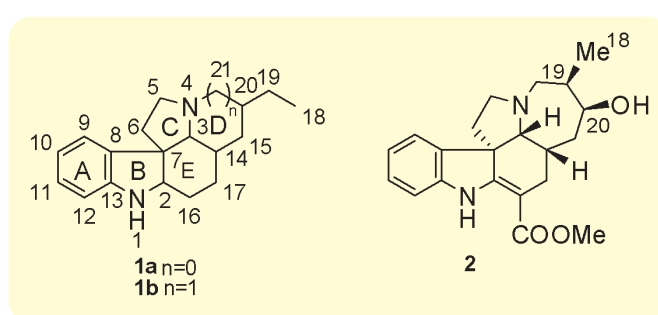
Ibofillidin és rokon indolalkaloidok, valamint analogonjaik szintézise

A modern orvostudományban ma is jelentős helyet foglalnak el a növényi és állati eredetű alkaloidok és azok származékai. Ilyenek például a leukémiában nagy hatékonysággal alkalmazott dimer indolalkaloidok, a vinkrisztin és a vinblasztin, vagy a világszerte alkalmazott eburnánvázás származék, a szelektív agyi értágító (+)-apovinkaminsav-etil-észter, mely a Cavinton márkanévű készítmény alapanyaga.

Az indolalkaloidok vázát a nagyfokú változatosság jellemzi. Az 1980-as évek elején a *Tabernaemontana* fajokból hat új pentaciklusos ibofillidinvázás alkaloidot (**1a**) izoláltak. Ezen alkaloidok biogenetikailag a pseudo (Ψ)-aszpidoszpermánvázás alkaloidok (**1b**) csoportjába tartoznak, de a pen-taciklusos vázból hiányzik a C-21-es szénatom, mely öttagú D gyűrű kialakulásához vezet (**1. ábra**) [1]. A növényi extraktum komponense a Ψ -aszpidoszpermánváz hattagú D-gyűrűjének a bővülésével kialakuló (+)-iboxifillin (**2**) is.

Az aszpidoszpermánvázás alkaloidok felépítése kapcsán korábban szerzett tapasztalataink reális esélyt adtak arra, hogy új, hatékony, a bioszintetikus utat követő vázfelépítési stratégiát dolgozzunk ki az ibofillidinvázás alkaloidok és a rokon szerkezetű iboxifillin (**2**) előállítására. Konvergens szintéziseink kulcsintermedierjéül a maszkírozott akril-észter-funkciót tartalmazó triptaminszármazékot (**3**) választottuk, amely molekulát a kutatócsoportunkban korábban már sikeresen alkalmaztuk számos alkaloid vagy alkaloidszerű molekula előállításánál [2]. Az indolvázás szubsztrát reakciópartneréül olyan aldehideket (**4** $R_1 = \text{OTBDMS}$, $R_2 = \text{H}$, **5** $R_1 + R_2 = \text{COOEt}$, **6** $R_1 = \text{OTBDMS}$, $R_2 = \text{Et}$, **7** $R_1 = \text{O}$, $R_2 = \text{Et}$, **8** $R_1 = \text{Br}$, $R_2 = \text{CH}(\text{OTBDMS})\text{Me}$, **9** $R_1 = \text{OAc}$, $R_2 = \text{CH}_2\text{COOMe}$, **10** $R_1 = \text{OAc}$,

$R_2 = \text{CH}(\text{CH}_3)\text{COOMe}$) állítottunk elő, melyek felhasználásával, a biomimetikus utat követve, szekodin típusú intermediereken (**11-17**) keresztül, intramolekuláris [4+2] cikloaddíciós reakciókban tetra-ciklusos vegyületeket (**18-24**) szolgáltatottak. A katalitikus debenzilezést követően a D-szeko- Ψ -aszpidoszpermánvázás intermedierekből a várt pentaciklusos alkaloidok, illetve rokon vegyületeik néhány egyszerű lépésben kialakíthatók voltak. Munkánk során többek között megvalósítottuk a dezetilibofillidin (**25**, $R_3 = \text{H}$) [3], az ibofillidin (**26a**, $R_3 = \alpha\text{-Et}$) és a 20-epiibofillidin (**26b**, $R_3 = \beta\text{-Et}$) új szintézisét [4], valamint a 19-hidroxiibofillidin (**27a**, $R_3 = \alpha\text{-CH}(\text{OH})\text{Me}$) és a 19-hidroxi-20-epiibofillidin (**27b**, $R_3 =$

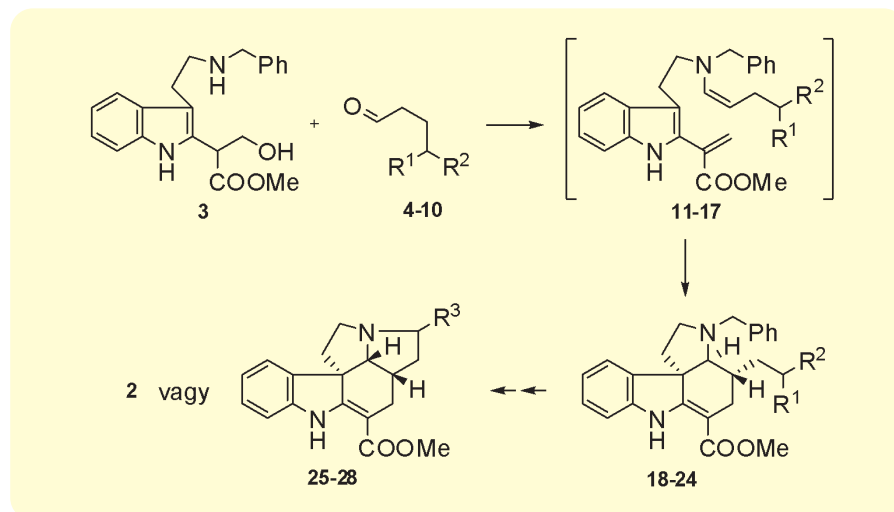


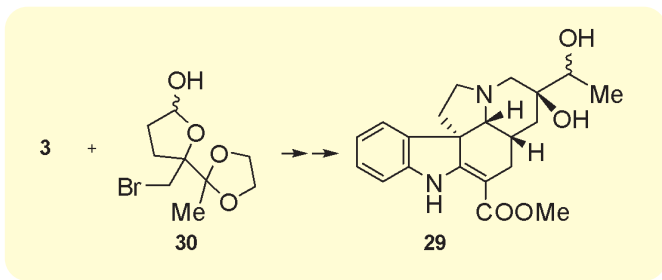
1. ábra. A Ψ -aszpidoszpermánvázás alkaloidok szerkezete

$= \beta\text{-CH}(\text{OH})\text{Me}$) [5], továbbá a 18-hidroxi-20-epiibofillidin (**28**, $R_3 = \beta\text{-CH}_2\text{CH}_2\text{OH}$) első szintézisét [6]. Eljárást dolgoztunk ki az iboxifillin (**2**) előállítására is [7] (**2. ábra**).

A fentiek fényében a pandolinváz figyelemre méltó szerkezete vonzó szintetikus célponttá tette a 19-hidroxi-20-epipandolint (**29**) is (**3. ábra**). Ebben az esetben is a kutatócsoportunkban kidolgozott és jól bevált reakcióutat követve az indolvá-

2. ábra. Az ibofillidinvázás alkaloidok és az iboxifillin szintézise





3. ábra. A 19-hidroxi-20-epipandolin szintézisére irányuló kísérletek

zas szubsztrátot (3) a több lépésben előállított, maszkírozott aldehidfunkciót tartalmazó laktollal (30) reagáltattuk, de meglepésünkre a reakcióban nem a várt D-szeko- Ψ -aszpidoszpermánvázas vegyület, hanem tetrahidrofurángyűrűt tartalmazó izomer molekulák keletkeztek.

A tények ismeretében megvizsgáltuk a cikloaddíciós reakció mechanizmusát, ugyanis az áthidalt gyűrűs molekulák keletkezése nem magyarázható a korábbiakban feltételezett egylépéses, koncertikus

aszpidoszpermánvázas vegyületeket [8]. Bár a 19-hidroxi-20-epipandolin előállítása az alkalmazott szintézisstratégiával meghiúsult, a [4+2] cikloaddíciós reakció részletes kvantumkémiai vizsgálata számos olyan hasznos információval szolgált, mely magyarázatot adhat több korábbi sikertelen cikloaddíciós reakcióra.

IRODALOM

[1] Le Men, J., Taylor, W. J., *Experientia* (1965) 21, 508.
 [2] a) Kalaus, Gy., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Brlik, J., Szabó, L., Szántay, Cs., *J. Org. Chem.* (1993) 58, 1434–

1442. b) Kalaus, Gy., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Brlik, J., Szabó, L., Szántay, Cs., *J. Org. Chem.* (1993) 58, 6076–6082. c) Kalaus, Gy., Juhász, I., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Brlik, J., Szabó, L., Szántay, Cs., *Liebigs Ann. Chem.* (1995) 1245–1251. d) Kalaus, Gy., Vágó, I., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Brlik, J., Szabó, L., Szántay, Cs., *Nat. Prod. Lett.* (1995) 7, 197–204. e) Kalaus, Gy., Juhász, I., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Brlik, J., Szabó, L., Szántay, Cs., *J. Org. Chem.* (1997) 62, 9188–9191. f) Kalaus, Gy., Léder, L., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Vékey, K., Szabó, L., Szántay, Cs., *Tetrahedron* (2003) 59, 5661–5666. g) Kalaus, Gy., Tóth, E., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Gömör, Á., Hazai, L., Szántay, Cs., *Heterocycles* (2006) 68, 257–270.

[3] Tóth, E., Kalaus, Gy., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Gömör, Á., Hazai, L., Szántay, Cs., *Heterocycles* (2006) 68, 2301–2317.
 [4] Tóth, E., Kalaus, Gy., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Gömör, Á., Hazai, L., Szántay, Cs., *Heterocycles* (2007) 71, 865–880.
 [5] Tóth, E., Kalaus, Gy., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Gömör, Á., Hazai, L., Szántay, Cs., *Tetrahedron* (2006) 62, 12011–12016.
 [6] Tóth, E., Kalaus, Gy., Horváth, D. V., Greiner, I., Kajtár-Peredy, M., Gömör, Á., Hazai, L., Szántay, Cs., *Tetrahedron* (2007) 63, 7823–7827.
 [7] Tóth, E., Kalaus, Gy., Pipa, G., Greiner, I., Szöllősy, Á., Rill, A., Gömör, Á., Hazai, L., Szántay, Cs., *Heterocycles* (2008) 75, 65–76.
 [8] Tóth, E., Oláh, J., Kalaus, Gy., Greiner, I., Szöllősy, Á., Gömör, Á., Hazai, L., Szántay, Cs., *Tetrahedron* (2008) 64, 7949–7955.

Tömböly Csaba

MTA Szegedi Biológiai Központ, Biokémiai Intézet

Peptidek, fehérjék kovalens módosításai

Peptidek és fehérjék hatásmechanizmusainak vizsgálata, szerkezetük felderítése, a részvételükkel végbemenő sejtszintű biokémiai folyamatok láthatóvá tétele, peptid és fehérje hatóanyagok fejlesztése mind a vizsgált poliamid kovalens szerkezetének módosítását igényli: így például nem természetes aminosavak, poszttranszlációs módosítások, spektroszkópiai szondák beépítését vagy a természetes izotóposzlás megváltoztatását.

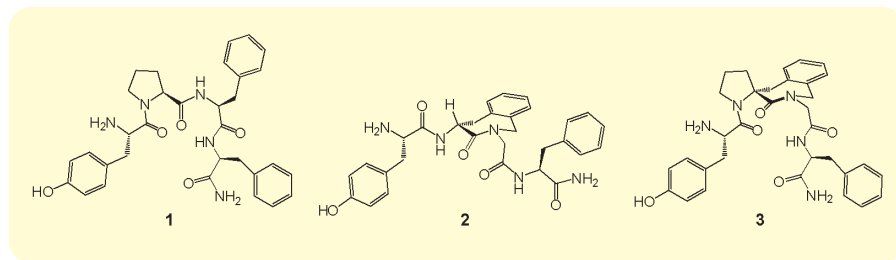
Az endomorfín-2 és a MOP receptor kölcsönhatásának vizsgálata

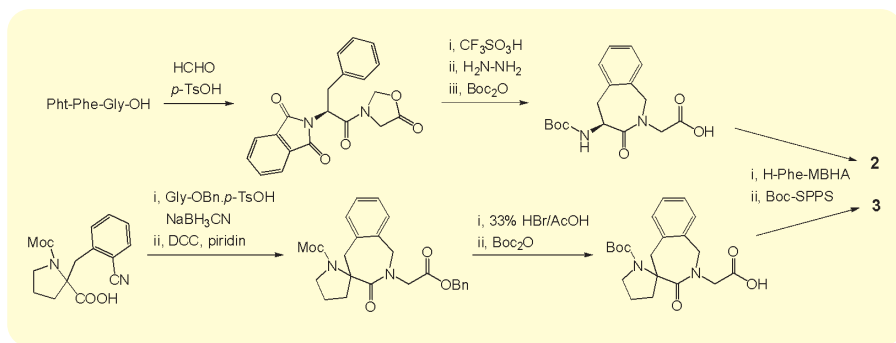
Az opioid receptorok glikozilált transzmembrán fehérjék, genomális szinten négy típusuk kódolt: a μ -, δ -, κ - és nociceptin opioid peptidek receptorai (MOP, DOP, KOP és NOP receptorok). Mivel térszerkezetük nem ismert, szerkezeti információt a mutagenézissel módosított opioid receptorok ligandumkötési, valamint módosított szerkezetű ligandumok receptorkötési tulajdonságainak vizsgálata szolgáltathat. A MOP receptor endogén ligandumai az en-

domorfín-1 és -2 tetrapeptidek [1]. Az endomorfín-2 (H-Tyr-Pro-Phe-Phe-NH₂, 1) elméleti szerkezetvizsgálata jelezte, hogy a tetrapeptid hajlamos hajlított szerkezetek kialakítására [2]. Később 4-amino-1,2,4,5-tetrahidro-2-benzazepin-3-ont tartalmazó dipeptidek konformációanalízise során kiderült, hogy a spirociklussal merevített származék β -kanyar gerinckonformációt vesz fel, ugyanakkor a spirociklust nem tartalmazó származékok nyújtott szerkezettel írhatók le (1. ábra) [3]. Mivel a spirociklusos származék kostitúciója a Pro-Phe szekvenciárészlethez hasonló, ezért ha a benzazepinonszármazék képes a tetrapeptidet kanyarszerkezetbe kényszeríteni, ak-

kor alkalmas ezen másodlagos szerkezeti elem receptorfehérje-ligandum kölcsönhatásban játszott szerepének tisztázására. Ehhez a 2 és 3 származékokat állítottuk elő (2. ábra) [4]. A peptidek konformációanalízise alapján 2 nyújtott, míg 3 kanyarkonformációjú peptidgerinccel jellemezhető. A 3 származék esetén a Tyr-Pro peptidkötés *cis-transz* izomériája nem figyelhető meg, a ROE-intenzitások alapján csak a *transz*-rotamer fordul elő. A Gly³ metilénprotonjainak kémiai eltolódása 1,2 ppm különbséget mutat, ami a kanyarszerkezet következtében gátoltta vált φ és ψ torziós szögek körüli rotáció következménye. A Phe⁴ NH-proton kémiai eltolódá-

1. ábra. Endomorfín-2 és származékai





2. ábra. Benzazepinontartalmú endomorfín-2-származékok előállítása

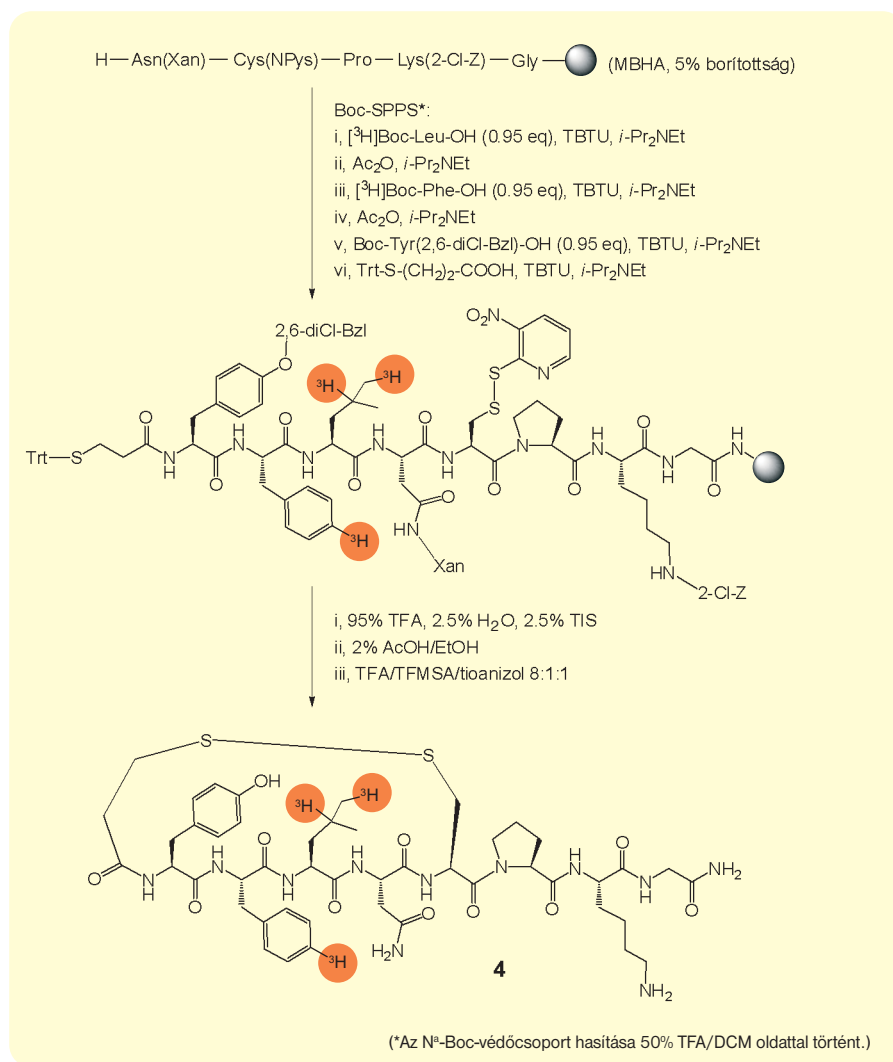
sának $-7,6$ ppb/K hőmérsékleti koeficiens értékéből következik, hogy a tetrapeptid hajlított konformációját intramolekuláris H-híd nem stabilizálja. A hasonló konstitúciójú, eltérő másodlagos szerkezetű 2 és 3 peptid vizsgálatok kiderült, hogy a 2 MOP receptorhoz való affinitása jelentősen csökkent ($K_{iu}(\text{endomorfín-2}) = 9,5$ nM, $K_{iu}(2) = 373$ nM), míg a 3 MOP receptor affinitása magas maradt ($K_{iu}(3) = 29,3$ nM). Vagyis kijelenthetjük, hogy egy dinamikus válogatás eredményeként kialakuló receptor-ligandum kölcsönhatásban a folyamatos konformációs mozgást végző endomorfín-2 peptid ligandum hajlított konformációját preferálja a szintén folyamatos molekuláris mozgásban lévő MOP receptorfehérje.

Dezamino-[Leu⁴, Lys⁸]vazopresszin trícium-jelölése

Az arginin-vazopresszin (AVP) fiziológiás hatásait négy receptorfehérjével (V_{1a} , V_{1b} , V_2 vazopresszin és OT oxitocin receptorok) való kölcsönhatása révén fejti ki. A központi idegrendszerben kifejeződő V_{1b} receptorok aktiválásával ACTH-felszabadulást vált ki, ugyanakkor a V_{1b} receptorok az AVP szorongásos és agresszív viselkedést kiváltó hatásait is közvetítik [5]. Ezen központi idegrendszeri hatások leírásához szükséges a V_{1b} receptorok agyterületenkénti eloszlásának feltérképezése. Ez radioaktívan jelzett, receptorspecifikus ligandum autoradiográfiai vizsgálatával megvalósítható. A humán V_{1b} receptorok szelektív agonistájaként leírt dezamino-[Cha⁴]AVP [6] nem alkalmas patkány agyi V_{1b} receptorok autoradiográfiai vizsgálatára, mivel a receptorfehérje kis szekvenciális eltérése miatt a patkány V_{1b} receptorra nézve már nem szelektív, illetve magas nem specifikus kötődést mutat. Ezért a patkány V_{1b} receptorspecifikus ligandumát, a dezamino-[Leu⁴, Lys⁸]VP-t (4) [7] jeleztük tríciumizotóppal.

Peptidek tríciumos jelölése $^1\text{H}-^3\text{H}$ izotópcserével, tríciumgázzal vagy tritidekkel történő redukcióval vagy jelzett aminosavak peptidszintézisben való alkalmazásával érhető el. Mivel 4 redukcióra érzékeny diszulfidhidat tartalmazó nonapeptid, a hidrogénizotóp beépítését a diszulfidhid kialakítása előtt végeztük el. ^3H -jelzett, N $^\alpha$ -Boc-védett Leu- és Phe-származékokat állítottunk elő Boc-4,5-dehidro-Leu-OH és Boc-Phe(4'-I)-OH tríciumgázzal végzett ka-

3. ábra. [^3H]dezamino[Leu⁴, Lys⁸]vazopresszin előállítása



talitikus hidrogénezésével. A kapott aminosavszármazékokat in situ neutralizációs technikával [8] építettük a 4 szekvenciájába (3. ábra). Miután az N-terminális véghez S-tritil-merkaptopropionsavat kapcsolunk, a Trt-védőcsoportot triizopropil-szilán és víz jelenlétében trifluoecetsavval eltávolítottuk. Az így kialakult tiolfunkció a Cys⁶ nitropiridin-szulfenil funkciójával reagálva intramolekuláris reakcióban a diszulfidhid kialakulását eredményezte. Az intermolekuláris reakciók elkerülése érdekében alacsony borítottaságú MBHA-gyantát alkalmaztunk. Végül a [^3H]4-et TFA-TFMSA-tioanizol elegyével hasítottuk a szilárd hordozóról. A jelzett vazopresszinszármazék moláris aktivitása 4107 GBq (111 Ci)/mmol-nak adódott.

Fehérjék specifikus módosítására alkalmas módszer fejlesztése

A fehérjék szerkezeti és funkcionális vizsgálatát elősegítő specifikus kovalens mó-



dosítások beépítésére sok esetben rekombináns módszerek helyett félszintetikus módszert célszerű alkalmazni. Az expresszált fehérje-ligáció [9] segítségével rekombináns és/vagy szintetikus fehérje-fragmensek kapcsolhatók és így a fehérje jól definiált szekvenciárészlete vagy aminosavegysége módosítható.

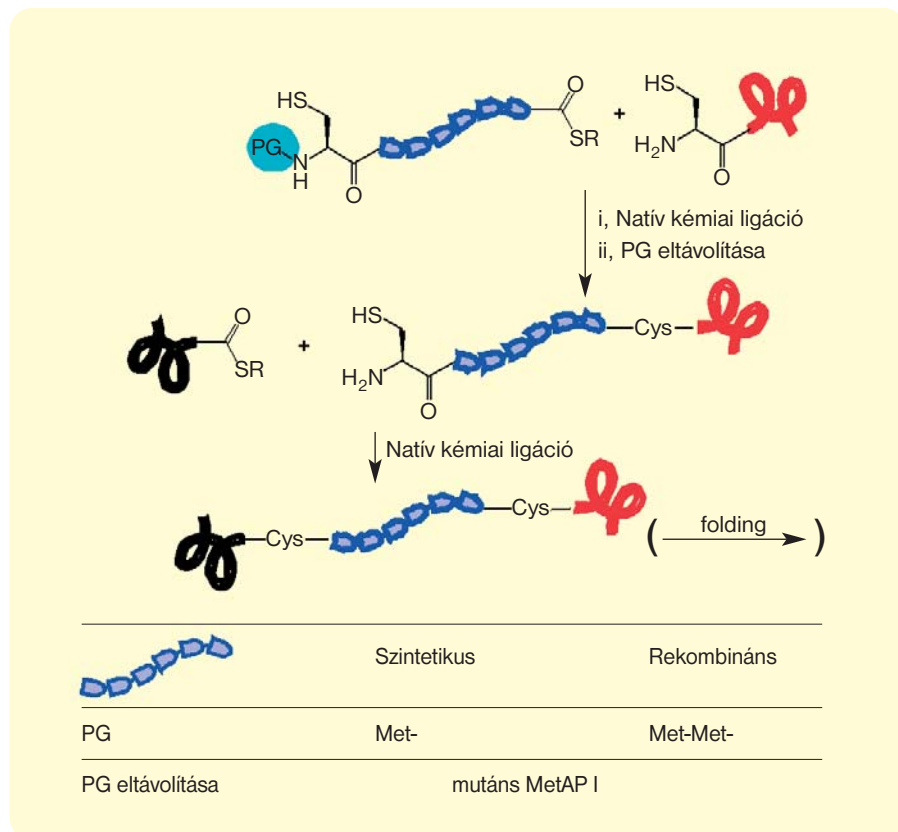
A kémiai ligáció során az N-terminális fragmens tioészterfunkcióját a C-terminális fragmens N-terminális Cys tiol-oldalláncfunkciója reverzibilis módon átésztertesíti, majd ugyanezen Cys α -aminocsoportjának hatására bekövetkező intramolekuláris $S \rightarrow N$ acilvándorlás eredményezi a fragmensek közötti peptidkötés kialakulását [10]. Amennyiben kettőnél több fragmensből alakítjuk ki a célfehérjét, minden köztes fragmens N-terminális Cys amino- és/vagy tiol-funkcióját védeni kell. Erre a célra rekombináns fragmens esetén Met-Met dipeptidet, szintetikus fragmens esetén Met-t alkalmazunk, melyet affinitásmátrixon immobilizált mutáns metionil-aminopeptidáz enzimmel távolítunk el az egyes ligációs ciklusok első lépéseként (4. ábra) [11].

Ismertek más proteázok felismerő szekvenciáján alapuló, proteolitikus úton eltávolítható Cys-védőszekvenciák, azonban a Factor Xa vagy TEV proteázokkal szemben a metionil-aminopeptidáz sokkal specifikusabb, nincs endopeptidáz-aktivitása. Ezért ez az új Cys védelmi stratégia bővíti az expresszált fehérje-ligáció alkalmazhatósági körét.

IRODALOM

- [1] J. E. Zadina, L. Hackler, L. J. Ge, A. J. Kastin, *Nature* (1997) 386, 499.
- [2] B. Leitgeb, F. Ötvös, G. Tóth, *Biopolymers* (2003) 68, 497.
- [3] K. Van Rompaey, S. Ballet, Cs. Tömböly, R. De Wachter, K. Vanommeslaeghe, M. Biesemans, R. Willem, D. Tourwé, *Eur. J. Org. Chem.* (2006) 13, 2899.
- [4] Cs. Tömböly, S. Ballet, D. Feytens, K. E. Kövér, A. Borics, S. Lovas, M. Al-Khrasani, Zs. Fürst, G. Tóth, S. Benyhe, D. Tourwé, *J. Med. Chem.* (2008) 51, 173.
- [5] M. Mannig, S. Stoev, B. Chini, T. Durroux, B. Mouillac, G. Guillon, *Prog. Brain Res.* (2008) 170, 473.
- [6] S. Derick, L. L. Cheng, M. J. Virolo, S. Stoev, M. Giacomini, N. C. Wo, H. H. Szeto, M. M. Ben, M. Andres, R. C. Gaillard, G. Guillon, M. Manning, *Endocrinology* (2002) 143, 4655.
- [7] A. Pena, B. Murat, M. Trueba, H. Szeto, L. L. Cheng, G. Guillon, M. Mannig, *J. Med. Chem.* (2007) 50, 835.
- [8] M. Schnölzer, P. Alewood, A. Jones, D. Alewood, S. B. H. Kent, *J. Peptide Protein Res.* (1992) 40, 180.
- [9] T. W. Muir, D. Sondhi, P. A. Cole, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* (1998) 95, 6705.
- [10] P. E. Dawson, T. W. Muir, I. Clark-Lewis, S. B. H. Kent, *Science* (1994) 266, 776.
- [11] Cs. Tömböly, E. Welker, *Peptides* 2008, Ed.: Lankinen, H., 622, 2009.

4. ábra. Lépésenkénti natív kémiai ligáció enzimátikus Cys-védőcsoport eltávolítással



A mikor elkészültem ezzel a dolgozattal, én magam is megrémültem néhány következtetésemből. Olyannyira, hogy elhátároztam: mielőtt közlésre benyújtom, megmutatom néhány kollégámnak, barátomnak, a kérdésben (a felsőoktatás helyzete és válsága) érintett embereknek. Elvenni senki sem akart belőle semmit, inkább hozzá szerettek volna még adni. Egyetértés volt abban is, hogy erről írni, beszélni kell. Meg hogy nagy a gond. És mindenki úgy gondolja, tenni kell valamit. Az alábbiakban kísérletet teszek arra, hogy azonosítsam azokat a jelenségeket (de legalábbis a legfontosabbakat), amelyek aggodalomra adnak okot, és az elágazásokat, ahol a folyamatok, mint mostanra kiderült, rossz irányt vettek. Konkrét és napi tapasztalatokat főként a Szege-di Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Karán szereztem, és megállapításaim elsősorban azokra a tanszékekre és tanszékcsoportokra vonatkoznak, amelyeken kémiaoktatás folyik. Ezzel együtt a más egyetemeken tanító kollégáimmal folytatott beszélgetések alapján attól tartok, hogy az itt leírtak jelentős része a magyar viszonyokra (kisebb-nagyobb módosításokkal) általánosítható.

1. Láttelel – a hallgatókról

Talán ott illene kezdenem, hogy a civilizált világban a múlt század elején még a középiskolák, második felében már az egyetemek voltak az értelmiségi elitképzés színterei. Ennek folytatásaként, törvényszerűnek tűnő belső mozgásként, a 20. század végére az egyetem tömegképző intézménnyé vált, elitképző szerepét átvette (ill. hazánkban napjainkban veszi át) a PhD-képzés (véleményem szerint egyelőre változó sikerrel). A változás eredményeként az egyetemisták száma 3–6-szorosára növekedett, miközben az egyetemi oktatók száma kb. ugyanilyen arányban csökkent. Nem meglepően, a „diákanyag” az előbbiek egyenes következményeként számos szempontból felhígult, és sok olyan hallgató bekerült a felsőoktatásba (és arányuk, sajnos, az idő előrehaladtával nő a „jók” rovására), akiket a mi időnkben már a portás is elzavart volna az épület kapujából. Akik a „régii” egyetemi struktúrában is bekerültek, azok most is velünk vannak. Ők azok, akik valószínűleg akkor is vegyésznek, kémikusnak jelentkeztek volna, ha büntetés járna érte. Én ezzel a „krémnel” kapcsolatban semmiféle problémát nem látok. A gond a felduzzasztás eredményeként bekerült és valójában nem



Sipos Pál

A felsőoktatás Nagy Átalakításáról



Rovatunk ismét a felsőoktatás megreformálásának lehetőségeivel foglalkozó cikket közöl. Úgy vélem, hogy más egyetemeken oktatókként és/vagy szülőkként, esetleg nagyszülőkként sokan visszaigazolhatnánk az alábbi cikkben megfogalmazott „láttelek” igazságtartalmát. Nyilván egyetérthetünk abban is, hogy ez a diagnózis a felsőoktatás számos bajának olvasmányos és érzelmeikkel átítatott, de objektivitásra törekvő összefoglalója. A cikk írója által tett javaslatok pedig valóban minimum mérésnek nevezhetők. Értékrend, személyes tapasztalat és vérmérséklet függvénye, hogy ki milyen mértékben ért vagy nem ért egyet velük, tartja őket a jelen helyzetben vagy a közelebbi, esetleg a távolabbi jövőben megvalósíthatónak. Ezért nagy örömünkre szolgálna, ha az alábbi írás ismét vitát generálna, ami során újabb gondolatokkal gazdagodhatnánk. Egészen biztos, hogy érdemes minden, újabb ötletet is tartalmazó véleményt leírni és elolvasni. Ugyanis csak így remélhetjük, hogy mindezek eredményeként kialakul végül egy koherens javaslatrendszer, amely az illetékes szakmai testületek többségének egyetértése, illetve a szükségesnek talált módosítások után a döntéshozók elé tárható.

Szalay Luca

ide való hallgatókkal van. Ők (és velük együtt a felsőoktatás egésze) az elmúlt 20–25 év változásainak vesztesei. A hallgatók e szegmensének szakmai érdeklődése gyakorlatilag nincs, nem értik és nem is érdekli őket, hogy mi folyik körülöttük. A feladataikat nem megoldani, hanem le tudni akarják. Ha kicsit is megterhelő követelményekkel találják magukat szembe, megpróbálják azokat lealkudni ahelyett, hogy ráhajtanának és megpróbálnának felőni a feladathoz. Teszik ezt, sajnos, igen gyakran a hallgatói önkormányzat hathatós támogatásával. Utóbbi akár tankönyvi példája lehetne a tévesen, sőt, károsan értelmezett érdekképviseletnek. Képességeik és készségeik annyira kezdetlegesek, hogy gyakran egyszerű szóbeli utasításokat sem tudnak megérteni, ennek megfelelően azokat végrehajtani sem. Rendszeresen kiderül, hogy az általános iskolai szintű ismeretanyaggal is gondjaik vannak. Nincs meg az a képességük, hogy a fontos és lényeges anyagot a lényegtelen, tájékoztató jellegű adatoktól megkülönböztessék. De nem csak a hozzáállásukkal és az intellektuális képességeikkel van baj. Tanulási technikájuk (ha egyáltalán van)

legfőlegbb alapszintű, gyakorlatilag fogalmuk sincs arról, hogy azt a tekintélyes tananyagot, ami az egyetemen magától értetődő követelmény, hogyan lehetne elsajátítani. Jegyzetelni nem tudnak, ezért értelmetlen dolog előadásokra járniuk (és mivel nem kötelező, nem is járnak). Ha valamit tudnak, és esetleg akarnak is a tanulnivalókkal kezdeni, az (ifj. Marosán György után szabadon) inkább a *szkenelés*, mint a *karakterfelismerés* kategóriájába tartozik. Ez a tanultak alkotó felhasználására és az abból fakadó kreatív gondolkodásra nem teszi őket képessé. A hallgatóknak ettől a rétegétől az ismeretek szervesült megértése nem is várható el. Sokszor tapasztaljuk, hogy a diplomához *időben közeledve*, a középiskolás anyagtól *intellektuálisan egyre távolabb* kerülnek (vagyis még azt is elfelejtik). Annak eredményeként, hogy egy tárgy három alkalommal is felvehető és egy tantárgyfelvételt alkalmával három vizsgát kísérelhet meg a hallgató (amit én személy szerint az egyetemi oktatás megcsúfolásának tartok), azt eredményezi, hogy a vizsgák jelentős hányadában a vizsgázók nulla készüléssel, próba-szerencse alapon jelennek meg. Sok-

szor az is látszik, hogy a hallgató még azal sincs tisztában, hogy mi annak a tárgynak a címe és az előadó neve, amiből éppen vizsgázn próbálkozik. Ha valaki egy vizsgán megbukik, manapság nem szégyen. Az „én időmben” az volt. „Annak idején”, amikor a JATE Természettudományi Karára még összesen 1200 ember járt (ma számuk meghaladja az 5000-et), akkor egy évfolyamon belül még gyakorlatilag mindenki ismert mindenkit, a másik szakokról is(!), és hírértéke volt, ha valakinek UV-ja született. Ma az elszemélytelenedett felsőoktatásban a hallgatók jó szerével még saját csoporttársaikat sem ismerik, sem névről, sem arcról (persze, ez utóbbi kitétel nem része az itt megfogalmazott kritikáknak, inkább csak egy kis nosztalgizálás a régi szép idők iránt).

A puskázásról. Az én időmben például röstellni való dolog volt a puskázás is. Ma bevett gyakorlat. Az internet, a mobiltelefonok és a fénymásolás elterjedésével a hallgatóság komoly arzenálra tett szert. Persze, mióta világ a világ, volt puskázás, ki ne emlékezne ezzel kapcsolatban az *Éretlenek* című francia filmklasszikusra. A gond azzal van, ahogyan a puskázást a rendszer kezeli. Tudomásom szerint hazánkban (de legalábbis egyetemünkön egészen biztosan) semmiféle írott törvény vagy szabályzat nem rendeli büntetni. A miénknél fejlettebb demokráciákban, ha valakit elkapnak, nemcsak fegyelmi úton repül az egyetemről, de bizonyos időre (Ausztráliában pl. 3 évre) akár az ország összes felsőoktatási intézményéből kitilthatják. Persze ott, ahol a hallgatók között kemény verseny folyik, a puskázás szinte elképzelhetetlen. Nálunk viszont a hallgatók között elfogadott, a lebukás következményei pedig teljes mértékben a tanár és a diák belügyének számítanak. Legrosszabb esetben a hallgató elégtelent kap, na bumm, a kilenc lehetőségéből majd csak lesz egy, amikor nem veszik észre.



Aztán olyan is van, hogy a hallgató így szól: „Ez itt úgyis felesleges töltelék tárgy (mert van ilyen), egy csomó még feleslegesebb biflatúrával; a puskázás tehát bocsánatos.” Sőt, az oktató is diszkréten félrenéz inkább, tisztában lévén a helyzettel. Vagyis ahelyett, hogy a hallgatói véleményezés segítségével (ami egyébként a jelenlegi formájában alkalmatlan is lenne erre) vagy a HÖK közbenjárásával (mert őket meg papíron az ilyen érdekvédelemért fizetik) a felesleges töltelék tárgy helyébe valami értelmeset próbálnának találni, mutyi köttetnek oktató és hallgató között. Nemrég keserűen azt írta az egyik kollégám a Szegedi Egyetem hasábjain, hogy „Miközben az egyetemi hallgatók úgy csinálnak, mintha tanulnának, addig mi, az egyetemi oktatók, úgy csinálunk, mint ha oktatnánk”. Hát igen, ilyesmikre is gondolhatott, amikor írta.

A nemtudás társadalma. A hallgatók jelentős hányadának képzetlensége és motiválatlansága miatt nem meglepő, hogy dívik a középszer, és lassan az a „menő” (de legalábbis széles körben elfogadott és tolerált), ha valaki tényleges teljesítés és erőfeszítés nélkül lavirozza végig az egyetemi éveket. Az a néhány ember, aki hajtani és teljesíteni akar és tudna is, kezd a többség által lesajnált lúzer törpe minoritássá válni. Az pedig, hogy mára beköltözött az egyetem falai közé a bunkóság és a közönségesség is, nemcsak a tanárnak foghegyről köszönésként odavetett „Jónapot”-ből látszik (ami a „mi időnkben” súlyos sértésszámba ment volna), hanem abból is, hogy bizony gyakran szotyolahéjat lát az ember szétköpködve az előadóteremben...

A fentieknek megfelelően gyakran az az érzésünk támadhat, hogy az egyetemi oktatás keretein belül az elmélyült műhelymunka helyét a hallgatók intézményszerű szórakoztatása vette át. Ez a megállapítás nyilván elsősorban azokra a szakokra érvényes, ahová az érettségizettek közül be tudtak kerülni a kifejezetten gyenge képességű hallgatók is. Az előadások színvonalát folyamatosan le kell(ene) szállítanunk, ami azt eredményezi, hogy az erős hallgatók helyenként halálra unják magukat, a gyengék meg még így sem értik meg. Ilyen peremfeltételek mellett a „tudás társadalmának” még az említését is blaszfémianak érzem. Az egyetemre jársanak sokak számára nem a választott szakma megismerése és magas szintű elsajátítása (vagyis: a tudás társadalmában való hely megkeresése és kiharcolása) lett a célja, hanem a felelősségektől mentes közép-

iskolás évek öt (vagy esetleg több) évvel való meghosszabbítása. Egy valódi követelményektől és következményektől mentes művilág lehetőségeinek fenékgig való kiélvezése, aminek a végén, szerencsés esetben, még egy diplomával is „megdobják” az embert. Ennek abszurd lényegét a „Hurrá, megbuktam, egy évvel tovább tart az aranyélet!” mondat fogalmazta meg. (Nem urbánus legenda. Saját gyűjtés.)

2. Látélet – az oktatókról

Talán nem túlzás azt állítani, hogy az egyetemi oktatók mára a magyar értelmiség egyik legfrusztráltabb rétegévé váltak, számos okból. Közülük a hallgatói „anyag” színvonalának fentebb leírt romlása lényeges, de csak egy. (A gyenge képességű hallgatók hihetetlen történetei sajnálatos módon kimeríthetetlen beszédtemát szolgáltatnak egyetemi oktatói körök számára.) De hozzájárul a demoralizáltság érzéséhez és a frusztráltsághoz az európai szemmel nézve elképesztő infrastrukturális lepusztultság, a kutatások támogatásának bürokratikus és gyakran igazságtalan rendszere, a teljesítmény ellentételezésének megjósolhatatlansága és így tovább. Meg sem kíséreltem, hogy az összes okot számba vegyem, inkább az alábbiakban megpróbálok néhány, véleményem szerint kulcsfontosságú beteg területet kivesézni.

Az egyetemek normatív finanszírozása. Az Oktatási Minisztériumból ez egyetemre (illetve a legkisebb gazdálkodási egységeibe, vagyis a tanszékekre) érkező „bevétel” rovatban az oktatók és a hallgatók létszámával, valamint a használt területtel arányos tételek jelennek meg. Az egyetem egységeinek ebből a bevételből kell kigazdálkodnia az összes kiadást, amelynek legnagyobb tétele az oktatók bére. A bevétel lényegében kétféle módon növelhető. Az egyik, ha a fajlagos számokat (pl. egy oktató, hallgató után járó „fejpenzt”) megnövelnénk. Ez azonban minisztériumi hatáskör. Ezért várják lélegzet-visszafojtva az egyetem gazdasági szakemberei minden költségvetési év elején a minisztériumból „leérkező”, minden évben megjósolhatatlan irányban és mértékben változó szorzószámokat – azokat azonban befolyásolni nem nagyon (inkább: nagyon nem!) tudják. A másik már olyan paraméter, amin bizonyos keretek között egyetemi hatáskörben valamit tudunk srófolni, a hallgatói létszám. Ám az, hogy egy adott tudományterületre hány hallgató jelentkezik, szintén lutri, divatoktól, konjunkturától, de például olyan paraméterektől is függ,

hogy éppen demográfiai apály vagy dagály van. Ezért ezen a területen a mozgástér minimális.

A kémiaoktatás gondjai. A kémia területén itt nem részletezendő okokból most éppen dekonjunktura van. Évek óta kevesebb hallgatót oktatunk, mint amennyi a kémia oktatásában részt vevő egyetemi oktatót a mostani finanszírozási elvek és irányszámok alapján el tud tartani. Ezen még azzal sem tudunk segíteni, hogy a felvételi pontszámokat jelentősen (én inkább azt mondanám: arcpirítóan) leszállítottuk.

(Hadd tegyek itt egy kis kitérőt. Vegyészből országos szinten évek óta alultermelés folyik. Ezt abból lehet pontosan látni, hogy a nálunk diplomázott vegyész-hallgatók, még a gyengébb eredményt felmutatók is, szinte „lábon elkelnek”: a diploma sikeres védeése után egy hónapon belül a szakmában el tudnak helyezkedni. Legjobb tudomásom szerint a TTIK-n csak az informatikusok kapnak hasonlóan kelendő diplomát. Ezt a középiskolákban nem tudatosítjuk eléggé. A helyzet még kritikusabb a kémiatanárokkal. Az 1948 és 1952 között született „Ratkó-gyerek” közelgő tömeges nyugdíjba vonulásával megjósolhatóan eddig soha nem látott igény fog megjelenni általános és középiskolai kémiatanárok iránt, amit az évente hazánkban végző legfeljebb 10-es nagyságrendű friss diplomás nem tud kielégíteni. Semmi olyan intézkedést nem látok még körvonalazódni sem, ami a közelgő kritikus helyzet kezelésére felkészítené a rendszert. Az viszont a kémiaoktatás amúgy sem fényes pozícióját tovább rontaná, ha megoldásként a tárgy oktatását nem szakos tanárra bíznák vagy az integrált természettudományos oktatást vezetnék be.)

A fentiekből nagyon könnyen levezethető, hogy a hozzánk beiratkozott hallgatóra úgy kell vigyáznunk, mint a szemünk fényére, mert ha keményen bánunk vele, és ne adj isten megbukik, akkor nemcsak a normatíváját veszítjük el, de ráadásul átmeleg a konkurenciához. Másképpen fogalmazva: a normatív finanszírozás jelenlegi formájában az egyetemi oktatás egyszerű fogyasztási cikké vált, ahol a szolgáltató egyetem a kínálati, a szolgáltatást használó hallgató pedig a keresleti oldalon helyezkedik el.

Az egyetemi oktatók fizetése. Az anyagi helyzet további abszurdítása vagy inkább kóros elváltozása, hogy bizonyos tanszék-csoportok (köztük a kémia) számos olyan évet tudhatnak maguk mögött, amikor a



költségvetésből hozzájuk szintén normatív alapon továbbosztott pénz még a bérek fedezetére sem volt elég, az oktatás költségeiről (pl. kréta, géppapír) már nem is beszélve. (Elárulom: utóbbit az eredetileg nem erre a célra megszerzett pályázati pénzekből próbáljuk több-kevesebb sikerrel megoldani.) Persze, mondhatnánk, hogy ez a deficit azért van, mert az egyetemi oktatók túl sokat keresnek. Nos: az országban (de azon sem csodálkoznék, ha az egész világon) egyedülállóan megalázó rendszert vezettek be az egyetemi oktatók bérezésére. A professzori fizetést egységesítették (értsd: az országban mindenütt ugyanannyi), annak 70%-a az egyetemi docens fizetése, 50%-a az adjunktusé, 40%-a a tanársegédé. Az oktatók bére az egyes egyetemi beosztásokon belül alig (gyakorlatilag nem) változik (ez a bértábla alapján akár az internetről is ellenőrizhető). Na és hogy minden adat meglegyen: egy tanársegéd hónap elején nettó kb. 110 ezer forintot visz haza (széles e hazában!). Pótlékok (nyelv-, veszélyességi stb.) régóta nincsenek, alapbéresítették őket. Így könnyen kiszámítható például az egyetemi professzor az ország minden egyetemén gyakorlatilag azonos nettó bére, ami nagyjából megegyezik egy közepesen fizetett műbútorasztalos bérével (és, mint tudjuk, a műbútorasztalosok nincsenek agyonfizetve). Emellett, csak úgy mellékesen megjegyzem: majdnem forintra megegyezik az ausztriai minimálbérral is. Ezzel a rendszerrel két komoly elvi gond is van. Az egyik, hogy ez a bér nivellál, vagyis független a teljesítménytől, a kiváló munkát ugyanannyi pénzzel díjazza, mint a silányt. A másik, hogy gyakorlatilag hosszú távon nem változik, ami, ha meggondoljuk, hogy egy adott rangban az oktató eltölthet akár több évtizedet is, akkor az még az aszkézisre közismerten hajlamos egyetemi oktatógárda számára sem biztató financiaális perspektíva.

Drága vagy olcsó egy egyetemi oktató?
Az, hogy egy egyetemi oktató drága vagy olcsó, nézőpont kérdése, mert amit keres, az bevételnek kevés, kiadásnak viszont (a normatív finanszírozás okán) sok. Azokon a tanszékcsoportokon, ahol sok vezető oktató (professzor, docens) dolgozik, és emiatt magasak a fajlagos bérköltségek (a kémia is ilyen), ott folyamatosan azt olvasnák az oktatók fejére, hogy még a bérüket sem keresik meg. Ezt pedig nem egy népünnepély gazdasági korifeusainktól rendszeresen hallani! Főleg úgy, hogy a „végeken” (az oktatást végző tanszékeken) gyakorlatilag semmilyen eszköz nincs a ke-

zünkben, amivel ezen a helyzeten változtathatnánk. Többet oktatni nem lehet, mert a hallgatók száma adott, azt meg, ha valaki sokat publikál vagy pályázatokat nyer (tehát: szaggatja az istrángot), a normatív finanszírozás sehol nem veszi figyelembe. Tessék észrevenni: a normatív finanszírozás kis hazánkban bevezetett rendszerének lényege, hogy ahol volna lehetőség teljesítményarányos juttatásra (tudományos munkában elért eredmények), ott átalányt fizet, ahol viszont reális esély nincs a teljesítmény fokozására (hallgatói létszám, ill. „megtermelt” kredit), ott darabszám alapján díjaz. Ha valami, akkor ez az igazi kis magyar abszurd! Ehhez még adjuk hozzá, hogy vannak olyan helyzetek, amikor kifejezetten előny a munkáltató számára a sok magasan kvalifikált, esetleg akadémiai doktori címmel rendelkező vagy nemzetközileg is ismert és elismert agy; ilyen például az egyes egyetemek összehasonlító statisztikája, amikor nagyon is jól jön a nagyszámú kiművelt emberfő. Csak fizetni ne kellene nekik...

A rendszernek van néhány olyan sajátossága, amelyben kódolva van számos szerkezeti bajnak nemcsak az ismétlődő felbukkanása, hanem egyenesen a bővített újratermelése is. Az egyetemi oktatók, így a tanársegédek is, közalkalmazottak. Ezért még a pályájuk legelején – megbízható és hosszú távú teljesítményadatok hiányában – kell eldönteni, hogy alkalmazsak-e egyetemi oktatónak. Az elnyert közalkalmazotti státusz egy halom egyirányú utat eredményez. Ha kiderül a közalkalmazottról, hogy rossz vásár volt, vagy magánéleti, egészségi stb. okokból „leáll” és karrierje megfeneklik, nagyon nehéz tőle megszabadulni. Az elbocsátott közalkalmazottnak végkielégítést kellene fizetni, amire igen gyakran nincs pénz. Így ez a legritkább esetben következik be. Ráadásul, ha az elbocsátást követően az illető munkaügyi pert indít, jó eséllyel meg is nyeri. Ha konjunktúra van (és talán még emlékeznek rá, szokott lenni), akkor az egyetemi oktatók száma dokumentálhatóan megnő (jogosan, hiszen a legjobb befektetés a friss munkaerő). Ám ezt a terhet akkor is cipelnie kell a rendszernek, amikor a gazdaság, az ország ilyen vagy olyan okokból bajba kerül. További tényező a mobilitás hiánya, ami Magyarországra különösen jellemző. Az egyetemről esetleg kihulló szakembert sem egy másik felsőoktatási intézmény, sem az ipar nem látja szívesen, előbbi a sajátjait is alig tudja fizetni, utóbbi nem igazán tud szakértelmével, szemléletével mit kezdeni. És ha

van is átjárás az egyetem és az ipar között, az egyirányú: az egyetem vérkeringésébe visszakerülni, miután egyszer valaki elment a versenyszférába, gyakorlatilag lehetetlen.

Akkor most mi legyen?

Az iparosság becsülete. A fentiek alapján meggyőződésem (és ezzel a kollégáim körében nem vagyok egyedül), hogy a magyar felsőoktatásnak komoly szerkezeti átalakításokra lenne szüksége. A spanyolvisaszt nem kell feltalálnunk, számos jól működő külföldi példa áll előttünk, amely a fogyasztói társadalom nem éppen tudomány- és értelmiségbarát légkörében is képes a felsőoktatást a társadalmilag elvárható szinten tartani. A javasolható változtatások egy része szükségszerűen retrógrád (már csak azért is, mert ismét olyasmis lett „megjavítva”, ami előtte egész jól működött), vagyis annak részleges visszaállítását célozza, ami a Nagy Átalakítás előtt volt. Nem gondolom, hogy a rendszerváltás előtti 15–20%-ra kellene csökkenteni az érettségizők közül a felsőoktatásba kerülők arányát, de a közel 100%-ot teljességgel elfogadhatatlannak, feleslegesnek, sőt, károsnak tartom. Ugyanakkor meggyőződésem, hogy az egyetemre nem való hallgatóknak nem is kellene oda járni, de őket legalábbis nem kellene államiilag finanszírozott képzésben részesíteni. Az ország több mint 70 felsőoktatási intézménye közül jó néhányat be lehetne és be is kellene zárni (a szomszédos Ausztria például egészen jól elkettyeg nagyjából egy tucat egyetemmel). A „selejt” (értsd ez alatt: nem megszenvedett és ezért szakmailag megalapozatlan, ráadásul a munkaerőpiacon sem díjazott) diplomák helyett használható szakmákat kellene az egyetemre, főiskolára nem való fiataloknak nyújtani. Persze, ehhez vissza kellene állítani a szakmunkásképzés és az iparosság becsületét (mert ha valamiből, akkor jól képzett szakiparosokból ma nagy hiány van az országban). Pedagógusként elkeseredve nézem a nem egyetemre való hallgatók vergődését, akiket nyilván frusztrál a sok teljesíthetetlen feladat, rossz teljesítményük jelentős részben ennek tudható be. A szintjüknek és képességeiknek megfelelő elvárásokkal viszont visszaadhatnánk önbecsülésüket, a helyükre kerülnének, sőt, akár szárnyakat is kaphatnának.

Az ösztöndíj és a tandíj kérdése. Alapvetően változtatásra szorul a hallgatói ösztöndíjazás rendszere is, ami a jelen formájában nem a versenyt erősíti, hiszen a kö-



zepsenél jóval gyengébb teljesítményért is szép pénzeket lehet tanulmányi ösztöndíjként bekasszírozni. Tudom, nehezen érinthető juttatás, de hozzá kell nyúlni, mert miközben ezeket a kifizetéseket a hallgatók megkapják és felélik vagy egyszerűen elbulizzák, addig az egyetemen vannak olyan tanszéki költségvetések, amelyekben WC-papírra sincs elegendő pénz. (Persze nem is az ösztöndíj megnyirbálásából lesz.) Egyszerűen el kell fogadni, hogy az ösztöndíj letűnt korok lejárt szavatossági idejű intézménye, amit az adófizetők pénzéből nem szabad és nem is lehet finanszírozni. Az egyetemre járást nem kváziingyenes állami juttatásként, hanem hosszú távú gazdasági befektetésként kellene kezelni, amit a későbbi elsődleges haszonélvező kell, hogy finanszírozzon. Azaz, hogy a diplomák megszerzési folyamatát ilyen busásan honorálja, a rendszer közvetve azt is elismeri, hogy piacképtelen diplomákat termel, mert hiszen ha jó üzlet lenne azokat megszerezni, akkor a hallgatók szívesen finanszíroznák maguk a tanulmányaikat. Mítosznak tartom továbbá azt is, hogy a magyar átlagfiatal nincs birtokában akkora pénztermelő kapacitásnak, hogy önállóan, akár szülői segítség nélkül is végig tudja csinálni az egyetemi éveket. Inkább arról van szó, hogy hazánkban ez nem szokás. Pedig lehetne: rész munkaidővel vagy passzív félévemben végzett munkával az oktatás költségeit előteremteni – a nálunk sokkal gazdagabb országokban teljesen hétköznapi *modus operandi*. És bizony, ha a hallgatóim megköveznek érte, akkor is azt kell mondanom: a képzési hozzájárulást (leánykori nevén a tandíjat) sem tartom az ördögtől való praktikának, inkább a piaci viszonyok szükségyszerű megjelenésének a hallgatói oldalon (ha már az oktatói oldalon sikerült megjeleníteni). Bevezetését messzemenően támogatnám, főleg annak ismeretében, hogy számos hallgatóm egy hétfégi bulifolyam során eltapsol annyi pénzt, ami fedezni tudná a képzési hozzájárulást (javasolt, de, mint tudjuk, leszavazott) összegét. (Ausztráliában tanul az egyik fiam, nem azért, mert megengedhetem magamnak, hogy oda járassam, hanem mert neki a családunk Nagy Átrendeződések az a hely jutott. Amikor megkérdeztem tőle, hogy mennyi ösztöndíja van, nem értette a kérdést, pedig jól beszél magyarul. Aztán elmondta, hogy azon az állami(!) egyetemen, ahova jár, a hallgatók 90%-a fizet tandíjat, nem is keveset, míg a legjobban teljesítő 10%-ot jó tanulmányi eredményéért tandíjmentességgel jutalmazták. Ja, és

az évfolyam kétharmada önfinanszírozó, tehát diákhitelből és rész munkaidős foglalkoztatásból tartja fenn magát. Még egy megjegyzés ide: az egy adózóra jutó nettó adóbefizetés az egyik legmagasabb a világon Ausztráliában – de azt, hogy a hallgatók túlnyomó többségének tanulmányait az állam finanszírozza és még ösztöndíjat is fizessenek – nos, ezt a luxust még ők sem engedhetik meg maguknak.)

Meggyőződésem, hogy az ösztöndíjrendszer megreformálása és a tandíj bevezetése egy idő elteltével ismét visszaállítaná az egészséges versenyt a hallgatók között, nem néznék el egymásnak a jogtalanul szerzett előnyöket és megérné ismét jó eredményt elérni. (Erre vonatkozóan egyébként közvetlen tapasztalataim vannak angol nyelvű, kizárólag önköltséges képzésben részt vevő hallgatókkal. Mivel ők fizetnek az órákért, az előadás végén vagy a gyakorlatok során alig lehet tőlük megszabadulni, ki nem fogynak a kérdésekből. A dolog lélektana egyszerű: a saját maguk által befizetett, sőt, az is lehet, megtermelt pénznek kvázi követelik az ellenértékét. Hasonló hozzáállást a zömében államilag finanszírozott magyar hallgatóktól még nem volt szerencsém tapasztalni.)

A hallgatói véleményezési rendszer a most érvényben lévő formájában – meglátásom szerint – nem tölti be a kívánt funkcióját, vagyis az oktatás minőségének biztosítását. Angol, német és amerikai kollégáimtól tudom, hogy náluk az oktatók egyetemi előmenetelének (akár rangban, akár fizetésben) a meghatározó eleme, sőt, az Egyesült Államokban egyes helyeken az előléptetésekor az egyetlen figyelembe vett dolog a hallgatók véleménye. Nálunk az oktatók elismerésére, jutalmazására nem használják, ha valakinek túl sok rossz vélemény jön össze, a tanszékvezető négyszemközt felhívja a figyelmét arra, hogy bizony nem jól mennek a dolgai. Külföldi kollégáimtól kaptam néhány ottani hallgatói kérdőívet. Ezek, szemben a mi 3–6 kérdéses kérdőívünkkel, 12–15 kérdésből állnak, és olyan kérdéseket is firtatnak, hogy az oktató előadásai érthetőek voltak-e, felkészülten ment-e be az órákra, hogy a vizsga korrekt módon volt-e lebonyolítva, vagy, hogy a vizsgára való felkészülést megfelelően segítette-e a rendelkezésre bocsátott anyag. Nyilván ezekből jóval árnyaltabb kép származtatható, mint a mieinkből. Persze mondhatjuk, hogy a mi hallgatóink még ezt a mostani, rövid kérdőívet is vonakodva töltik ki. De vajon miért is? Nekem van ötletem: mert valódi

versenyhelyzet híján a mieinknek nem fűződik hozzá közvetlen érdeke. És amíg ez így marad, addig nem is érdemes a jelenlegi véleményezés formáját módosítani.

Szerkezeti átalakítások az egyetemeken. Az egyetemek finanszírozási rendszerének elveit alapjaiban kellene megváltoztatni, és kétségtelenül ez a legnagyobb falat. Tudomásul kell venni, hogy az egyetemek méretükénél és belső mechanizmusuknál fogva nem képesek a piac rezdüléseit követni. Az egyetemek ez irányú „tehetetlenségét” az állam jól átgondolt tompító mechanizmusaival szükséges ellensúlyozni, különben a legkisebb egységek (jelenleg tanszékek) fizetőképessége újra meg újra veszélybe kerül, lehetetlen helyzetbe hozva a tanszéken folyó oktatást. A mechanizmusnak azonban valóban jól átgondoltnak kell lenni, és nem lesz elegendő például a finanszírozási szorzószámokat megváltoztatni az esetlegesen hátrányosabb helyzetbe került szakok javára (annál is inkább, mert az úgy juttatná forrásokhoz a tanszékeket, hogy közben a bizonyítottan rossz szerkezetüket *nem* változtatná meg). Az viszont mindenképpen megfontolandó, hogy a kísérletes szakok, köztük a kémia hallgatói normatíváit jelentősen meg kellene emelni. Ha ez nem történik meg, akkor a piaci nyomásra való hivatkozással ezeken a szakokon a „jól fizető” előadások részaránya a „rosszul fizető” laboratóriumi gyakorlatok rovására jelentősen nőni fog, amit személy szerint kifejezetten károsnak tartanék.

Az igazi szerkezeti átalakításra a tanszékek, tanszékcsoportok személyi összetételében van szükség, annak fordított piramis szerkezetét kellene a fejéről a talpára állítani. A mostani helyzetben olyan hadseregeket próbál az egyetem fenntartani, amelyekben egy halom generális és ezredes mellett alig van közkatona, és őrmester is csak kevés. A „megfordítást” nyilván csak egy sok évig tartó folyamat eredményezhetné, ezért feltétlenül meg kellene fogalmazni egy kormányzatokon átívelő hosszú távú, betartható koncepciót. Az egészséges és finanszírozható egyetemi oktatói szerkezet az adott fő diszciplína élén legfeljebb egy professzorból, az alatta lévő szinten néhány docensből áll. Ők irányítanak a határozott idejű szerződéses (nem közalkalmazott) posztdoktorok és a posztgraduális szintű, illetve MSc- és BSc-hallgatók munkáját. A posztdoktorokat projekt-alapon véges időtartamú szerződéssel alkalmaznák. Az oktatásban külön óradíjért vennének részt, és közülük azokat lehetne csak véglegesíteni, akik (nyilván éles



versenyben) bizonyították, hogy egyrészt alkalmasak az egyetemek hármaskövetelményének („tanít, kutat, szórakoztat :-”) megfélelni, másrészt posztdoktorális szerződésük lejártával nem kívánnak átmenni az őket egyébként tárt karokkal váró versenyszférába. A piramis csúcsán elhelyezkedő véglegesített emberek fizetéséért az

egyetem lenne a felelős (vagyis a hallgatói létszámtól függetlenül, alanyi jogon járna nekik, még dekonjunkktúra idején is), ők viszont a posztdoktorok pályázati pénzeinek előteremtéséért felelnének. Teljesítményüket (a hallgatói véleményeknek a jelenleginél sokkal komolyabb figyelembevételével) rendszeresen értékelnék, és ha

valaki „leáll”, törvényes mechanizmusok állnának rendelkezésre ahhoz is, hogy az „újraindulást” megkísérelje és ahhoz is, hogy kiszálljon a rendszerből.

Ezt a szerkezetet (vagy lényegét tekintve valami ilyesmit) a világ több helyen is kipróbálták már. Állítólag működik. ●●●

Vakcinát gyárt, árvízkárosultakat segít

„A GlaxoSmithKline Biologicals gödöllői gyárában sikerrel lezárult az Amerikai Élelmiszer- és Gyógyszerügyi Főhatóság (FDA) ellenőrzése. A sikeres audit nyomán az itt gyártott oltóanyagokat az észak-amerikai piacon is forgalmazni tudjuk” – tájékoztató Leitner György ügyvezető igazgató. A 130 millió eurós beruházással létrejött gyárban a meglévők mellett újabb vakcinákat is gyártanának. A világ egyik vezető innovatív gyógyszeripari vállalata a társadalmi felelősségvállalás jegyében az árvízkárosultakat is segítette.

– Miért volt fontos az FDA ellenőrzése?

– Azért vagyunk erre a sikeres auditra nagyon büszkék, mert ez a világon a legmagasabb szintű minőségi elismerést jelenti. A sikeres vizsga arra is lehetőséget teremt, hogy az észak-amerikai piacon is forgalmazzuk a termékeinket. A teljes egészében exportra termelő gödöllői vakcinagyárunkban jelenleg a diftéria- és a tetanuszvakcinák hatóanyagait készítjük. Reményeink szerint a Magyarországon gyártott termékeink nemcsak az említett piacokra, hanem a magyar védőoltási programba is bekerülnek. A sikeres FDA-audit akár kapacitásbővítést is jelenthet a gyár számára.

– Mennyi ideig tart egy vakcina kifejlesztése?

– Ma átlagosan 8–10 év és mintegy egymilliárd dollár kell ahhoz, hogy egy molekulából gyógyszer legyen. A kutatás-fejlesztés területén a vakcinák esetében jóval hosszabb ciklusokkal kell számolni – átlagosan 8–14 évig tart egy vakcina kifejlesztése. Vannak egyes vakcinák, például a malária elleni oltás, ahol már 25 éve keresik a hatékony megoldást, vagy a HIV vírus elleni védőoltás, ahol még mindig nincs siker. Gyártási szempontból is nagy különbségek vannak: a vakcinák esetében jóval hosszabb idő gyártóhely létrehozása és beüzemelése, mint egy gyógyszer-tablettázó üzemé. Ennek oka, hogy a mi esetünkben biológiai, élő hatóanyagot kell megfelelő minőségben előállítani, míg a gyógyszer-gyártók döntően stabil vegyületekkel dolgoznak. A GSK 2003-ban kezdte építeni zöldmezős beruházással gödöllői üzemét, amely 2009-ben kezdett exportra termelni. A 130 millió eurós beruházásnak köszönhetően 240 szakember dolgozik jelenleg a városban, kilencven százalékuk magasan kvalifikált.

– Miként alakult az elmúlt időszakban ez a piac?

– A védőoltások globális piacán hihetetlen bővülést láthatunk. Igaz ugyan, hogy napjainkban mindössze két százalékot képviselnek a gyógyszerpiac összforgalmából a védőoltások, ám a forgalom az elmúlt években megduplázódott, 2020-ra pedig várhatóan megháromszorozódik. Nagyon fontos, hogy cégünknek mintegy húsz védőoltása van klinikai fej-

lesztési fázisban. Megfelelő jogszabályi környezet és támogatási rendszer esetén elképzelhető, hogy a következő egy-másfél évben három újabb vakcina gyártása kezdődhet meg Gödöllőn. Ha minden a terveink szerint alakul, akkor néhány éven belül Gödöllőnek köszönhetően hazánk a világ vakcinagyártásának egyik központja lehet. Terveink megvalósítását segítené, ha új alapokra helyeződne a technikusképzés, illetve az egyetemeken is jobban figyelnének a gyógyszeripar szakmai igényeire.

– Milyen egyéb kutatások folynak a GSK-nál?

– Már nem csak a csecsemők és a kisgyerekek a fő célcsoport, ma már a felnőttekről – és azon belül az idős lakosságról – is egyre többet beszélünk, mint a védőoltások célcsoportjairól. Újabb fejlesztési irány a kombinációké: ma már hét-nyolc különböző védőoltás beadható akár egyetlen injekcióban is, ami különösen a csecsemők oltásánál lehet fontos, hogy ne kelljen őket külön hétszer-nyolcszor szúrni. A malária elleni védőoltásunkkal kapcsolatban mindenképpen el kell mondanunk, hogy a Melinda és Bill Gates Alapítvány nemrég jelentette be, újabb tízmilliárd dollárt ad a malária elleni védőoltás fejlesztésére. Ez az alapítvány hihetetlen mértékben járul hozzá, hogy a védőoltások főleg a fejlődő világban eljussanak a rászorulókhhoz. Újabb izgalmas területet jelentenek a terápiás védőoltások, hiszen ezek kialakult betegségeknel alkalmazhatók.

– A társadalmi felelősségvállalásra volt követendő példa, hogy a GSK többféle módon is segítette az árvízkárosultakat.

– A világ egyik vezető innovatív gyógyszeripari vállalataként fontos szerepet szánunk a társadalmi felelősségvállalásnak, ezért 2010 májusában két éves együttműködési megállapodást kötöttünk a Magyar Ökumenikus Segélyszervezettel. A megállapodás aláírásakor nem sejtettük, hogy milyen hamar szükség lesz a segítségre. A GSK évente kétszer megrendezésre kerülő önkéntes napja, az Orange Day keretein belül a vállalat dolgozói június 11-én az árvízkárosult térségek megsegítésére ajánlották fel idejüket és kétkezi munkájukat. A cég magyarországi munkatársainak összefogásával 2,3 millió forintot gyűjtött össze az árvízkárosultak megsegítésére. Nagyon fontosnak tartom, hogy a dolgozók személy szerint is segítették a bajbajutottakat. Június közepén több mint 50 millió forint értékben 12 ezer adag kombinált, hepatitis A és B elleni védőoltást is felajánlottunk az árvíz sújtotta térségben élők számára. A vakcina négyezer, 1 és 12 év közötti gyermek beoltását teszi lehetővé. Reméljük, hogy ez az adomány is a lehető legjobban hasznosult. (A Népszabadság Online nyomán)

Zékány András

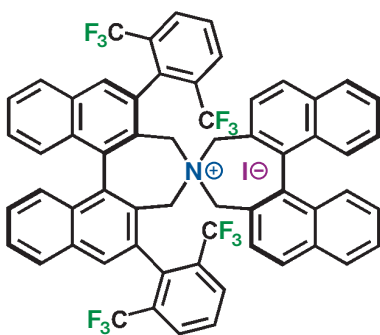


TÚL A KÉMIAÁN

A sólyom leszállt

A Hayabusa (japánul sólyom) nevű automata űrszondát 2003. május 9-én indította útjára a JAXA japán űrügynökség. Célja a 25143 Itokawa aszteroida mintagyűjtéssel egybekötött vizsgálata volt, azonban útja a tervezettnél kissé kalandosabbra sikerült: a szonda napelemei a napkitörések miatt még a kisbolygó elérése előtt súlyosan károsodtak, a négy xenonhajtómű egyike felmondta a szolgálatot, a három giroszkópszerű pozicionáló eszköz közül pedig kettő működésképtelenné vált. Mindezek ellenére a Hayabusa sikerrel leszállt az aszteroidán, bár a felszínre kirakott, kisméretű MINERVA egységgel már nem sikerült kapcsolatot teremtenie a küldetést irányító kutatóknak. A visszatérésre való felkészülés közben, egy újabb üzemzavar eredményeként, a hajtóanyagként használt hidrazin jelentős része elszökött, ami miatt egy időre elvesztették a kapcsolatot a Hayabusával. Végül is sikerült újra beindítani a szondát, így a visszatérő egység az eredetileg tervezettnél három évvel később, 2010. június 13-án landolt ejtőernyőjével Dél-Ausztrália területén. A mintagyűjtő részben a várakozásoknak megfelelően találtak port, de lapzártáig még nem sikerült igazolni, hogy ez valóban az Itokawáról származik.

Science 328, 565. (2010), *Planetary Report* 30(4), 12. (2010)



Ígéretes jódkatalizátor

Japán kutatók új típusú, környezetbarát, ráadásul királis katalizátort állítottak elő oxidatív csatolási reakciókhoz. A korábban ismert, ezzel összehasonlítható hatékonyságú katalizátorok általában mérgező

fémeket tartalmaztak. Az új katalizátor alapformájában egy királis kvaterner ammóniumion jodidionnal alkotott sója, amelyet hidrogén-peroxiddal *in situ* könnyen hipojoditonná vagy joditonná lehet oxidálni. A királis szerves rész sok esetben jelentős enantioszelektivitást is biztosít a katalizátornak, ennek a mechanizmusát azonban még nem sikerült tisztázni.

Science 328, 1376. (2010)



CENTENÁRIUM

L. B. Mendel: The Simple Carbohydrates and the Glucosides *Science*, Vol. 32, p. 558. (1910. október 21.)

Lafayette Benedict Mendel (1872–1935) amerikai biokémikus volt. Élelmiszertudománnyal kapcsolatos munkája során felismerte az A- és B-vitamin, a lizin és a triptofán fontos szerepét.

Zseb-NMR

Az NMR-készülékeket a közeljövőben jelentős fogyókúrára lehet majd fogni. Eddig viszonylag nagy térrészben homogen mágneses teret csak szupravezető mágnesekkel sikerült létrehozni, amelyek folyamatos hűtést (folyékony héliumot és folyékony nitrogént), valamint nagyméretű hőszigetelő köpenyt igényelnek.



Német tudósok nemrégiben szamárium-kobalt ötvözetből készítettek állandó, erős mágneseket. Ha ezeknek a mágneseknek változtatják az egymáshoz viszonyított helyzetét, az NMR-készülékek „shim”-meléséhez hasonló módon javítani lehet a tér homogenitását. A prototípusként készített,

Halbach-elrendezésű mágnes mindössze 500 g tömegű, 35 mm külső átmérőjű és 80 mm hosszú. Segítségével 0,7 T erősségű teret lehet előállítani, s furatába normál 5 mm-es NMR-cső helyezhető. A technológia további finomításával és a méret csekély növelésével 75 mm átmérőjű, 1,5 T erősségű mágnes is készíthető, amely már egy 60 MHz-es, nagy NMR-készülékkel azonos felbontású spektrumokat képes felvenni.

Angew. Chem. Int. Ed. 49, 4133. (2010)



APRÓSÁG

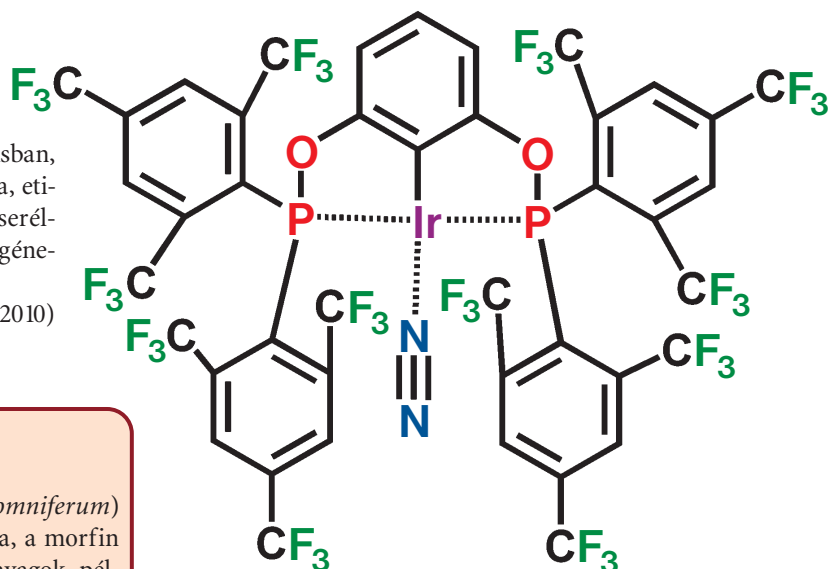
A 2009-es Shell Eco-marathon versenyen a Microjoule csapat belső égésű motorral hajtott autója egyetlen liter üzemanyaggal 3771 kilométert tett meg.



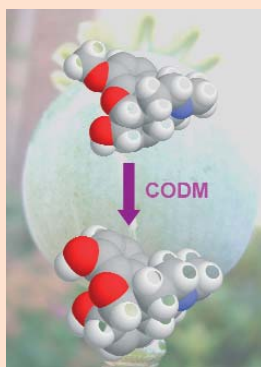
A HÓNAP MOLEKULÁJA

A vörös színű egykristály formájában előállítható irídiumkomplex ($C_{42}H_{11}F_{36}IrN_2O_2P_2$) irídiumcentrumához kapcsolódó nitrogénmolekula szilárd fázisban, megfelelő körülmények között oxigénre, ammóniára, etilénre, szén-monoxidra vagy akár hidrogénre is lecserélhető. Gázkeverékekben pedig az etilén etánná hidrogénezését katalizálják a komplex kristályai.

Nature 465, 598. (2010)



Mák kodeinkúrán



A mákban (*Papaver somniferum*) legfontosabb alkaloidja, a morfin mellett más értékes anyagok, például kodein és tebain is keletkeznek. Nemrégiben sikerült azonosítani a morfin növényi bioszintézisének utolsó lépését katalizáló enzimet, a kodein O-demetilázt (CODM), amely a kodeinből egy metilcsoportot távolít el. Az enzimhez tartozó gént is sikerült azonosítani, így egy vírus segítségével genetikailag módosított mákot állítottak elő, amelyben a CODM-gén kifejeződését csökkentették. Az ilyen növényekben a kodeintartalom a teljes alkaloidmennyiség 20%-áról 65%-ra növekedett, a morfiné pedig 15%-ra csökkent az eredeti 70%-ról. A gén és az enzim alkalmazásával akár a gyógyszeripari méretű inzulin-előállításához hasonló, bakteriális alapokon működő újabb módszer is kidolgozhatóvá válik.

Nature Chem. Biol. 6, 273. (2010)

Ólommentes hurrikán

Az ólom nehézfém ugyan, a hurrikánoknak azonban nem elég nehéz. A 2005-ös Katrina és Rita hurrikánok New Orleans városában nagy károkat okoztak, s ezzel együtt az ólom környezetbeli eloszlását is jelentősen megváltoztatták – mégpedig pozitív irányba. A viharok után a mérgező fém koncentrációja a felszínhez közeli talajrétegekben a város sok helyén a korábban szokásos érték nagyjából felére esett vissza. A Louisiana Childhood Lead Poisoning Prevention Program (azaz a gyermekek környezeti ártalmak miatti ólommérgezésének a megelőzését célzó, Louisiana állambeli program) 13 306 gyermeknél elvégzett mérései szerint ez a csökkenés már a vérben mérhető ólomszintben is egyértelműen megmutatkozik: azoknak a gyermekeknek a vérében, akik a csökkent talaj-ólomtartalmú városrészekben élnek, átlagosan 53%-kal kisebb volt az ólomkoncentráció. Így a talaj és az emberi vér ólomtartalma között szoros korrelációt sikerült kimutatni.

Environ. Sci. Technol. 44, 4433. (2010)

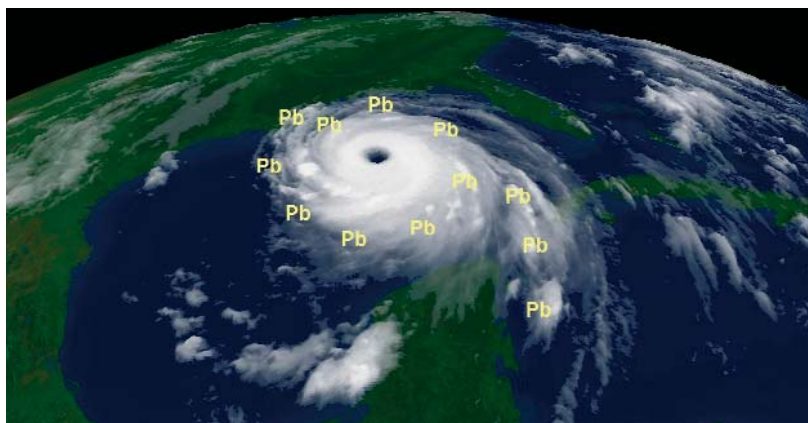
Mirakulinária

A mirakulin nevű glikoproteinnek, melyet először a *Synsepalum dulcificum* nevű nyugat-afrikai bogyószerűséből izoláltak 1968-ban, egészen különleges tulajdonsága van: emberi fogyasztáskor az édes ízre érzékeny receptorokhoz kötődik, s ennek hatására jó fél órán át a savanyú ételek is édesnek érződnek. Az anyag forgalmazásának eddig igen jelentős gátja volt, hogy a növényből való kinyerése, valamint a tisztítása is igen magas költséges. Ezen a problémán segíthet az a közelmúltbeli felfedezés, miszerint génmódosított paradicsomokból, szigorúan szabályozott körülmények között



90 mg/g hatóanyagot tartalmazó zöldséget sikerült termesztetni. És ez nem pusztán ízlés szempontjából fontos felfedezés: a cukorbetegség és a kemoterápiában részt vevők életében igen fontos lehet az anyag elterjedése.

J. Agric. Food. Chem. 58, 6096. (2010)



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



MEGEMLEKEZÉS

Szabadváry Ferenc

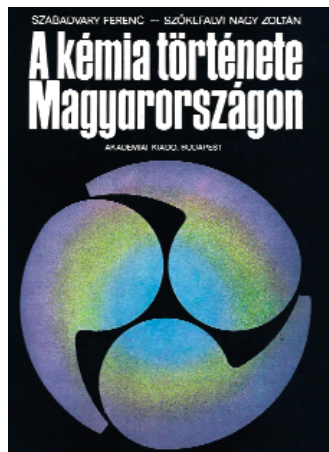
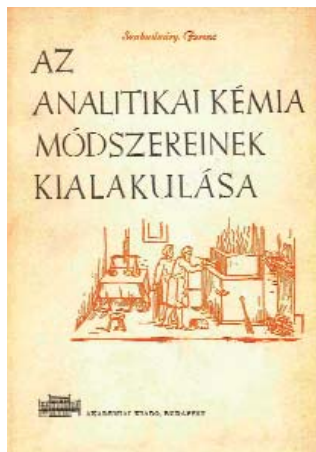
A négy évvel ezelőtt elhunyt tudós kémítörténésznek, Szabadváry Ferencnek a professzor szellemi örökségére méltó unokái, gyermekei és a XII. kerület polgárai állítottak emléktáblát. A június 18-i, esős délelőttön sok tisztelője jelent meg a Tartsay Vilmos utca 19. előtt, ahol a kerület polgármester-helyettese emlékezett a ház híres lakójára, az Országos Műszaki Múzeum alapítójára, majd Inczedy János akadémikus mondott ünnepi beszédet. Inczedy professzor úr – aki tizenkét évig a Magyar Kémikusok Egyesülete elnöke is volt – mint műegyetemi évfolyam- és pályatárs, mint tanszéki munkatárs és jó barát emlékezett Szabadváry Ferenc életútjára:

„A nagy türelemmel viselt, hosszan tartó betegségben 2006. május 21-én elhunyt Szabadváry Ferenc a Magyar Tudományos Akadémia rendes tagja, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem professzor emeritusa, az Országos Műszaki Múzeum nyugalmazott főigazgatója volt. Mint számos hazai és nemzetközi tudományos szervezet alapítója, tisztségviselője és tagja, valamint a Széchenyi-díj, a Dexter-díj és az Európai Kémikus Egyesületek Szövetsége (FECS) Különdíjának kitüntetettje, legnagyobb kémiatörténészünk volt.

Személyében olyan honfitársunkra emlékezünk, akinek neve és tudományos alkotó munkásságának korai terméke, *Az analitikai kémia módszereinek kialakulása* című könyve eljutott a világ valamennyi olyan országába, ahol a kémiai tudományt művelik és egyetemen tanítják.

A modern természettudományok közül a kémia alaptörvényei viszonylag későn, az újkori fizika eredményeinek megjelenése után, a 18. század végén váltak ismeretessé. A kémiai tudomány fejlődésének kezdeti szakaszát pedig elsősorban a – ma már hagyományosnak, de a fejlődés szempontjából nagyon fontosnak tartott – analitikai kémiai módszerek kifejlesztése jellemezte. Szabadváry Ferenc tollából 1960-ban magyar nyelven megjelent, *Az analitikai kémia módszereinek kialakulása* című könyv ezért nemcsak a kémia történetének, de az általános tudománytörténetnek is jelentős állomása volt. A könyv – rövid idő alatt – német, angol, japán, orosz stb. nyelveken jelent meg, és híre mindenfelé eljutott, ahol kémiai kutatásokat végeztek, vagy tudománytörténettel foglalkoztak. Az eltelt sok év után a könyvet még napjainkban is az analitikai kémia tudománytörténetének

Szabadváry Ferenc két leghíresebb könyvének ábrái
Inczy János készítette



Márvány emléktábla és az emlékezés koszorúja a Tartsay Vilmos utca 19. számú ház falán

egyik leghitelesebb forrásaként tartják számon. Az eredeti angol nyelvű kiadás után, közel harminc év elteltével, 1992-ben reprintként kiadta a Gordon and Beach Kiadó a *Tudománytörténet és filozófia klasszikusai* című sorozatában. Nem véletlen tehát, hogy az Amerikai Kémikusok Egyesülete Szabadváry Ferencet könyvéért, hasonlóképpen, mint az angol James Riddick Partingtont *A kémia története* című könyvéért, 1970-ben Dexter-díjban részesítette.

A különböző korok történetéről, kiemelkedő tudósok életéről, felfedezéseikről számos nyelven megjelent további monográfiái és tanulmányai szerte a világon ugyancsak sok könyvtárban megtalálhatóak.

Nemzetközi hírnevét mutatja, hogy az angol Analitikai Kémiai Egyesület felkérésére 1974-ben az egyesület százéves jubileumi konferenciájának megnyitó ülésén ő tartott plenáris előadást az angol analitikai kémiai tudomány történetéről.

Kiváló írói adottságaira jellemző, hogy dolgozatainak és sikeres, több száz oldalas könyveinek kéziratát is saját kezével, tollal írta, bámulatos lendülettel, jól olvasható írással. A folyamatosan áradó gondolatait rögzítő kézirat utólagos javítására, módosítására rendszerint nem volt szükség. Megjelent könyveinek száma húsz körül jár, tudományos közleményeinek száma pedig közel 400.

Nemcsak mint alkotó tudós és mint aktív közéleti ember, de mint egyetemi oktató, mint kolléga, mint barát, mint család szerető ember is kiváló volt. Ezért nagyon sokan tisztelték, szerették.

Egyéniségére jellemző finom intellektuális humorával tűzdelt, soha nem bántó, magával ragadó, sziporkázóan szellemes előadásai mindig nagy sikert arattak.

Hazai szempontból fontos, kiemelkedő műve a Székelyi Nagy Zoltánnal közösen írt *A kémia története Magyarországon* című könyv (1972) és legutolsó műve, *A magyar kémia művelődéstörténete* (1998).

Az utókor, őrizze Szabadváry Ferenc emlékét, méltán lehet hálas életművéért, a múlt emlékeinek feltárásáért és mindazért, amit az emlékek, a hazai és nemzetközi viszonylat szempontjából egyaránt fontos értékek fennmaradásáért tett és alkotott.”

Inczy János megemlékezését követően a helyettes polgármesterrel közösen leleplezte az emléktáblát. Az Országos Műszaki Múzeum koszorúját Vámos Éva, Szabadváry professzor úr legkedvesebb tanítványa és hivatali utóda helyezte el, majd Tömpe Péter, az MTA Tudomány- és Technikatörténeti Komplex Bizottsága, valamint a Magyar Kémikusok Egyesülete Intézőbizottsága nevében az emlékezés és megbecsülés koszorújával tiszteltgette az emléktáblánál.

Tömpe Péter



HÍREK AZ IPARBÓL

Megaberuházás a Teva Gyógyszergyárban

A Teva Gyógyszergyár Zrt. debreceni telephelyén 2010. július 13-án avatták fel azt a MegaPack üzemot, mellyel a világ egyik legnagyobb csomagolóegysége jött létre.

A világ vezető generikus készítményeket gyártó gyógyszeripari vállalatoként számon tartott Teva vállalatcsoport több mint hatvan országban mintegy 38 ezer főt foglalkoztat. A gyógyszeripari cég hazánkban 1995 óta van jelen, Debrecenben, Gödöllőn és Sajóbáonyban több mint kétezer főnek ad munkát.

A Teva-csoport szilárdgyógyszer-gyártó, valamint csomagolási kapacitásának növelésére mintegy 100 millió USD értékben ruház be Magyarországon. A MegaPlant projekt keretében megvalósult fejlesztéseknek köszönhetően a Debreceni telephely tabletgyártó kapacitása a duplájára, azaz 15 milliárd egységre, csomagolási volumene pedig 10 milliárd egységre nő.



Szalagátvágás

Egyedi kormánydöntés értelmében a projekt 2 milliárd HUF támogatásban részesül.

A projekt munkahelyteremtő hatása is jelentős, hiszen közvetlenül 300 új munkahelyet generál, valamint jelentős a régióban a közvetetten létrejött munkahelyek száma is.

A beruházás keretében avatták fel 2010. július 13-án azt a 4 szintes, összesen 13 000 m² alapterületű üzemot, melynek köszönhetően a debreceni gyár a világ egyik legnagyobb csomagolókapacitásával fog rendelkezni.

A MegaPlant üzem



Az üzem felépítése nem csupán kapacitásbővítést eredményez, hanem egyben technológiai újítást is jelent. A létesítményt a legmodernebb technológiákkal és berendezésekkel szerelték fel, ilyen például a központi robotizált raklapozó rendszer, a teljesen automatizált raktár, a kódolvasó azonosítórendszer az egész csomagolási folyamat során.

Az üzemot Navracsics Tibor miniszterelnök-helyettes, közigazgatási és igazságügyi miniszter, Aliza Bin-Noun, Izrael állam nagykövete, Kósa Lajos, Debrecen város polgármestere, Shlomo Yanai, a Teva Pharmaceutical Industries Ltd. elnök-vezérigazgatója, valamint Hegedűs Lajos, a Teva Gyógyszergyár Zrt. vezérigazgatója adta át.

Navracsics Tibor hangsúlyozta: a Magyarországon 17 éve jelen lévő Teva különösen jó partnere a magyar kormányának, mert itt fejleszt, beruház, és nyeresége egy részét is itt hasznosítja. Azzal pedig, hogy például Sajóbáonyban is működtet gyárat a Teva, hozzájárul a regionális különbségek csökkentéséhez, az elmaradottabb térségekben az infrastruktúra fejlesztéséhez is. A Teva cégre utalva Navracsics Tibor kijelentette: szükség van az ilyen befektetőkre, amelyek hosszú távon tudnak együttműködni, együtt gondolkodni a nemzettel, az országgal.

Shlomo Yanai, a Teva Pharmaceutical Industries Ltd. elnök-vezérigazgatója elmondta: cégük már csaknem háromezer dolgozót foglalkoztat Magyarországon. A most átadott debreceni üzem háromszáz új munkahelyet jelent. Elmondta azt is, hogy hasonló nagyságrendű beruházás folyik Gödöllőn, ahol steril eszköket gyártó üzemot épít a Teva.

Zékány András

In vivo adatok támasztják alá a NanoActive™ technológia eredményességét

Piacvezető gyógyszerek nanoformulázott változatát tesztelte sikeresen állatokon az egyedülálló áramlásos NanoActive™ technológiájáról ismert NanGenex Zrt.

Számos gyógyszer esetében – beleértve néhány magas vérnyomás kezelésére használt angiotenzin II receptorantagonistát is – az alacsony vízoldhatóság és/vagy oldódási sebesség határozza meg a szájon át történő felszívódás és a biohasznosulás mértékét. A NanoActive™ technológia alkalmazásával a NanGenex három, széles körben használt vérnyomáscsökkentő gyógyszer vízoldhatóságát növelte meg. Laboratóriumi tesztek a vizsgált vegyületeknél 10–1000-szeres oldhatóságnövekedést igazoltak, és az anyagok biológiailag releváns közegben gyakorlatilag azonnal rediszpergálódtak és oldódtak.

Annak bizonyítására, hogy a megnövelt oldhatóság és oldódási sebesség valóban javítja az abszorpciót és biohasznosulást, állatokon végeztek in vivo farmakokinetikai kísérleteket. Szájon át történő adagolás esetén mindhárom gyógyszer-molekula NanoActive™ formulája jelentős biohasznosulásnövekedést (2–7-szeres) mutatott a referenciaanyagokkal szemben. Az elvégzett vizsgálatok a NanoActive™ formula gyorsabb felszívódását is igazolták, hiszen a maximális plazmakoncentráció a NanoActive™ formula esetében már 30–45 perc elteltével kialakult, míg a referenciaanyagnál ehhez 120 perc kellett.

Az in vivo eredmények egyértelműen igazolták, hogy a NanoActive™ technológia sikeresen növeli az alacsony vízoldhatóságú gyógyszerek biohasznosulását. Az új nanohatóanyagok alkalma-



zásával sokkal kisebb dózis beadása mellett érhető el ugyanaz a terápiás vérszint. Ugyanakkor az új formulák esetében az aktív hatóanyag azonnali kioldódása csökkentheti a gyógyszer hatásának kifejtéséhez szükséges időt. Ennek különös jelentősége van azoknál a gyógyszereknél, amelyeknél a felszívódás mértékét elsősorban a hatóanyag oldódási sebessége határozza meg.

További információ található a www.nangenex.com weboldalon. Kapcsolatfelvétel: Heltovics Gábor, vezérigazgató, e-mail: info@nangenex.com, telefon: 8808 472, fax: 8808 455.

Garay Tóth János

A Novartis 19 százalékkal növelte nyereségét

A várakozásokat meghaladva az egy évvel ezelőtti adatokhoz képest 19 százalékkal nőtt a második negyedévben a Novartis svájci gyógyszergyártó cég nyeresége.

A bázeli székhelyű vállalat 2010. július 15-i tájékoztatása szerint az április elejétől június végéig tartó időszakban a nyereség az egy évvel ezelőtti 2,04 milliárd dollárról 2,42 milliárd dollárra nőtt, ami meghaladja az előzetesen várt 2,35 milliárd dollárt.

A Novartis vezérigazgatója, Joe Jimenez szerint a nyereség megedése részben a közelmúltban piacra dobott gyógyszerösszetevők szárnyaló sikerének köszönhető, és annak ellenére születtek jó eredmények, hogy az európai piacon csökkentek az árak. A gazdasági válság miatt több európai uniós országban – többek között Görögországban és Spanyolországban – jelentősen csökkentették az egészségügyi kiadásokat.

A beszámolóból kiderült: az új termékek a Novartis eladásainak 20 százalékát tették ki.

A cég gyógyszerészeti eladásai 8 százalékkal, az egy évvel ezelőtti 7,12 milliárd dollárról 7,62 milliárdra nőttek. Jelentősen emelkedett például a cukorbetegség kezelésére szolgáló, valamint a magas vérnyomás ellen használt gyógyszerek iránti kereslet.

Összességében az eladások – az influenza elleni szerek sikerének köszönhetően is – a piaci elvárásokat meghaladva elérték a 11,72 milliárd dollárt. Ez 11 százalékkal több a tavalyi év ugyanazon időszakában jelzett 10,55 milliárd dollárnál.

Az első féléves adatokat tekintve a Novartis a nyereség egy évvel ezelőtti mértékét 34 százalékkal meghaladva 5,385 milliárd dolláros eredményt ért el, a növekedés üteme azonban lassult. (*eBroker.hu*)

Zékány András

Egis – három év alatt 30 új termék

Az Egis Gyógyszergyár Nyrt. a forintban számolt forgalmának 2 százalékos bővülésére számít az idén, jövőre viszont már 10–11 százalékkal nőhet az árbevétel a forintárfolyam alakulásának függvényében.

Jövőre minden piacon, beleértve a nyugati késztermék- és hatóanyagexportot is, növekedésre számít a vállalat, míg a jelenlegi, szeptember végén záródó üzleti évében az utóbbi relációban jelentős visszaesés várható. A belföldi piacon az idén és jövőre is 5 százalékos növekedést prognosztizált a cégvezető.

Oroszországban és a többi FÁK-államban dollárban számítva az idén 10 százalékkal, míg jövőre 8–10 százalékkal bővül a for-

galom. A kelet-európai piacon euróban 8 százalékos növekedést vár a vállalat az idén és jövőre is. A késztermékek nyugati kivitele euróban számolva az idén várhatóan 35 százalékkal, a hatóanyag-kivitel 25 százalékkal esik vissza.

A következő üzleti évtől viszont már növekedést vár ezen a területen is az Egis, a jövő évre vonatkozó előrejelzés a késztermékekben nulla és 5 százalék közötti, a hatóanyagban 15 százalékos a növekedés. A gyógyszergyár üzleti évének első kilenc hónapjában belföldön 3 százalékkal növelte forgalmát. Oroszországban 8 százalékkal, Ukrajnában és a többi FÁK-országban együttesen 19 százalékkal nőttek a szállítások, a kelet-európai kivitel 5 százalékkal bővült.

A nyugati késztermékexport 40 százalékkal, a hatóanyag-kivittel 32 százalékkal volt alacsonyabb, mint az előző üzleti évben. Az üzleti év harmadik negyedévében – április–június – az általános költségek jelentősen, 12 százalékkal nőttek a bázishoz képest. Ez azzal van összefüggésben, hogy a társaság kiemelt stratégiai céljának tekinti a termékválaszték bővítését, és ez rövid távon nagyobb befektetéssel jár.

Az Egis három év alatt 30 új termék bevezetését tervezi, amelyek a vezérigazgató-helyettes szavai szerint megalapozzák a társaság jövőre vonatkozó növekedési terveit. A mostani üzleti évben a társaság belföldön 6, a külföldön 7 új terméket vezetett be. Az Egis árbevétele a harmadik negyedévben 3 százalékkal nőtt a bázishoz képest, 30,4 milliárd forintot tett ki.

Az üzemi eredménye 9 százalékkal 3,8 milliárd forintra csökkent. A kedvező árfolyamhatásoknak köszönhetően a pénzügyi eredmény jelentősen javította az adó előtti nyereséget, ami több mint kétszeres növekedéssel 5,37 milliárd forintot ért el. Az Egis beruházásokra mintegy 13,5 milliárd forintot költ az idén, és a jövő évi tervben is nagyjából ekkora összeg szerepel. (*Profit-Line.hu*)

Zékány András

Vegyipari mozaik

Továbbra is kétszámjegyű bővülés a magyar ipari termelésben. Éves szinten 12,6%-kal emelkedett a magyar ipari termelés idén júniusban (munkanaphatással korrigálva), de az előzetesen jelzett 0,9% helyett „csak” 0,8%-os havi bővülést mért a Központi Statisztikai Hivatal. Közben a hivatal közzétette a második negyedévi GDP-adat gyorsbecslését, amely meglepően gyenge lett: negyedéves alapon nem tudott nőni a magyar gazdaság.





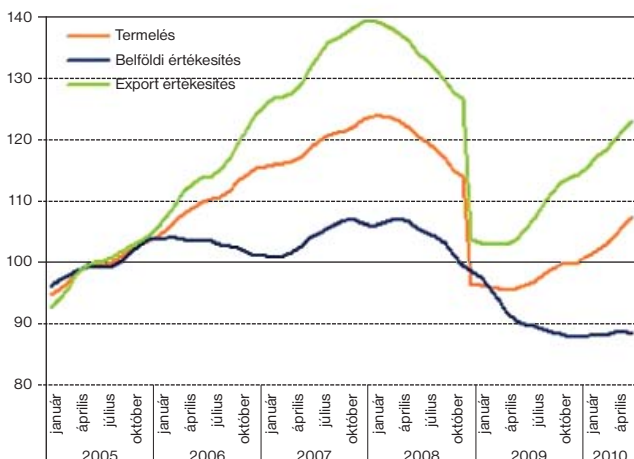
A KSH összefoglalója szerint az ipar 2010. júniusi termelésének és exportértékesítésének idei legkedvezőbb alakulásában elsősorban az előző hónapokhoz képest megnövekedett kereslet és a munkanaphatás érvényesül. Tavaly júniusban a termelésben még 18,8, az exportban 21,3%-os volumencsökkenést mért a hivatal. Az ipari termelés motorja változatlanul az exportorientált vállalatok teljesítménye, a hazai eladások nem érték el a 2009. év szintjét.

Az ipari export 2010 első hat hónapjában 16,6, júniusban 21,8%-kal emelkedett 2009 azonos időszakához viszonyítva. Júniusban az exportértékesítés több mint felét a feldolgozóipar két alága adta. Az év hatodik hónapjában a feldolgozóipari kivitel közel háromtizedét képviselő számítógép, elektronikai, optikai termék gyártásának exportvolumene jelentősen, 29,1%-kal emelkedett. A másik meghatározó ág, a feldolgozóipari export majdnem egynegyedét adó járműgyártás kivitele is számottevően, 22,2%-kal bővült.

Az ipar január-júniusi belföldi értékesítése 5,1, a júniusi 1,5%-kal csökkent 2009 azonos időszakához képest.

Az ipar nemzetgazdasági ágai közül 2010 júniusában a feldolgozóipar termelése az előző év azonos hónapjához viszonyítva 16,9%-kal nőtt. A csekély súlyú bányászat volumene 14%-kal alacsonyabb volt a 2009. júniusinál. Az energiaipar (villamosenergia-, gáz-, gőzellátás, légkondicionálás) kibocsátása 2%-kal haladta meg a tavalyi bázis szintjét.

Az ipari termelés alakulása (trendadatok, 2005 = 100)



Forrás: KSH, Portfolió.hu

2010 júniusában a feldolgozóipar tizenhárom alága közül kilencben volumenbővülés figyelhető meg. A jelentősebb súlyú alágaik közül a feldolgozóipari termelés több mint egyötödét képviselő számítógép, elektronikai, optikai termék gyártása kiugróan – még az előző havi dinamikát is felülmúlva – 35,7%-kal nőtt. Az alágon belüli növekedés hajtóerejét a híradás-technikai berendezések, továbbá az elektronikus fogyasztási cikkek iránti tartós keresletlénkülés jelenti. A hasonló súlyú járműgyártás 23,2%-kal volt magasabb az előző év azonos időszakánál; a számottevő bővülés kizárólag a külpiazi eladások eredménye. A harmadik legnagyobb alága, a feldolgozóipari termelés egytizedét kitevő élelmiszer, ital és dohánytermék gyártása 5,6%-kal visszaesett, ami a nagyobb arányú hazai kereslet csökkenésének és a kisebb súlyú kivitel stagnálásának eredője. A már második hónapja kiemelkedő dinamikát mutató vegyi anyag, termék gyártása júniusban 31,4%-kal haladta meg az előző év júniusit; a közel 5% súlyt adó alág teljesítményéhez elsősorban a műanyag-alapanyag gyártása szakágazat járult hozzá. Kéthavi visszaesés után júniusban

12,5%-kal nőtt a gyógyszergyártás volumene, nagyrészt az exportértékesítés kedvező alakulásának köszönhetően.

2010 júniusában a megfigyelt feldolgozóipari ágazatok összes új rendelése jelentősen, 25,3%-kal emelkedett 2009 azonos hónapjához viszonyítva. Az új exportrendelések 26,5, az új belföldi rendelések 17,6%-kal nőttek; azonban az új rendelések bővülése nem volt elegendő a válság miatt lecsökkent rendelésállomány feltöltésére, így a június végi összes rendelésállomány 9,7%-kal maradt el az egy évvel korábbitól. (portfólió)



Létrejött a megállapodás a Wanhua és a BorsodChem jelenlegi tulajdonosai között

BorsodChem. A Wanhua 140 millió euró új forrást bocsát a BorsodChem rendelkezésére, amit a vállalat új gyári felépítésére, valamint általános vállalati célokra használ majd fel.

A BorsodChem (BC) Zrt. hitelezői jóváhagyták a vállalat pénzügyi átstrukturálásának tervét. Az ügyletről a Permira Alapok meghatározó és a VCP Capital Partners kisebbségi tulajdonában lévő First Chemical (FCL), valamint a stratégiai befektető Wanhua Industrial Group (Wanhua) még ez év februárjában állapodtak meg.

Az átstrukturálási ügyletet lezárták, a lezárást követően a Wanhua 140 millió euró (mintegy 39 milliárd forint) új forrást bocsát a BorsodChem rendelkezésére, amit a vállalat az új TDI 2 (toluol-diizocianát) üzemének és salétromsavgyárájának felépítésére, valamint általános vállalati célokra használ majd fel.

A hitelezők által most jóváhagyott pénzügyi átstrukturálás nagyfokú pénzügyi rugalmasságot és szilárd alapokat biztosít a vállalat hosszú távú növekedéséhez – írta a BC Zrt. az MTI-hez eljuttatott közleményében. „A friss forrásért cserében a Wanhua mintegy 38 százalékos részesedést kap a BorsodChem részvényeit birtokló First Chemical Holding Kft.-ben (FCH), amely az FCL tulajdonában van és a BorsodChem holdingvállalata. A Wanhua vételi opciós jogot is szerez a jelenlegi tulajdonosok FCH-ban fennmaradó részvényeire” – olvasható a dokumentumban. (MTI)



A hidrogén lehet a jövő egyik üzemanyaga. A jelenlegi fosztilis üzemanyagok kiváltására a hidrogén az egyik legígéretesebb és legalkalmasabb anyag – hangzott el azon a nemzetközi nyári iskolán, amelyet szegedi kutatók rendeztek az MTA Szegedi Biológiai Központ Növénybiológiai Intézete és a Szegedi Tudományegyetem Biotechnológiai Tanszékének szervezésében.

– Napjaink energiaproblémáinak hosszú távú megoldása elképzelhetetlen a megújuló energiaforrások jelenleginél lényegesen nagyobb mértékű felhasználása nélkül.



A globális energiaigény 25–30 százaléka a közlekedésben jelenik meg, ezért keresik a kutatók azt az anyagot, amely tárolható és környezetbarát üzemanyagként szolgálhat a jövőben. Az egyik legígéretesebb jelölt a hidrogén – mondta az mta.hu-nak nyilatkozva a Szegedi Biológiai Központ Növénybiológiai Intézetének igazgatója, Vass Imre. A hidro-



gén azért tűnik az egyik legalkalmasabb anyagnak a jelenlegi fosszilis üzemanyagok kiváltására, mert esetében a természet már „megoldotta” azt a problémát, hogy miként lehet a napfény energiáját felhasználva a vízmolekulát összetevőire, azaz protonokra, elektronokra és oxigénre felbontani, és a protonokat hidrogenáz enzimekkel hidrogénné redukálni.

A tudósokat azonban az a probléma is foglalkoztatja, hogy miként lehetséges a természetben működő fotoszintetikus szervezetek működését mesterséges módszerekkel leutánozni. Ennek a kérdésnek a vizsgálatára jött létre az uniós 7-es kutatási keretprogram részeként a SOLAR-H2 elnevezésű kutatási konzorcium. A kutatók célja, hogy a gyakorlatilag korlátlanul rendelkezésre álló napenergiából, és a szintén könnyen hozzáférhető vízből, mesterséges úton megújuló energiahordozókat, alternatív üzemanyagokat állítsanak elő. A hidrogén mellett szénalapú üzemanyagként a bioetanol, illetve a biodízel is alternatívája lehet a jelenlegi hagyományos üzemanyagoknak. A legtöbb kutatás a hidrogén vízből történő előállítására irányul. Az SZBK kutatója ugyanakkor hangsúlyozta, hogy a mesterséges úton történő vízbontás egyelőre nagy kihívást jelent a kutatók számára, mivel a jelenleg rendelkezésre álló megoldások – például az elektromossággal történő vízbontás – drágák és nem hatékonyak.

Természetes úton, például földgázból, már most is lehetséges hidrogént előállítani. Ennek köszönhetően hidrogénmeghajtású járművek kis számban már ma is közlekednek. A hosszú távú cél viszont az, hogy a természetes módon keletkező hidrogén felhasználását mesterséges szintézissel váltsák ki, hiszen a fosszilis energiahordozók korlátozott mennyiségben állnak az emberiség rendelkezésére. (MTA)



A MOL-csoport kutatás-termelési tevékenységét Románia irányába bővíti. A MOL és partnere, az Expert Petroleum (EP) sikeres pályázaton vett részt, amelyben mindhárom megpályázott blokkra kutatási engedélyt nyert el a Román Nemzeti Ásványi Nyersanyag Ügynökség (ANRM) által meghirdetett 10. Kutatási Pályázaton.

A 2009 decemberében aláírt tanulmányozási és együttműködési megállapodást követően a MOL és az Expert Petroleum (MOL 70%, EP 30% részesedéssel) közösen pályáztak az ANRM által meghirdetett tenderen. A 10. Kutatási Pályázaton meghirdetett blokkok 1000 km² és 30 000 km² közötti kiterjedésűek. Ebből 12 az ország nyugati részén, a Pannon-medencében helyezkedik el, 7 Dobrogeában, 11 pedig, mintegy 11 000 km² összterülettel, a Fekete-tenger kontinentális (sekélyebb) vizein.

A blokkok kiértékelését követően a MOL és az Expert úgy döntött, hogy a Pannon-medencében található 3 legígéretesebb blokkra ad be pályázatot. A megpályázott és egyben odaítélt 3 kutatási blokk Románia nyugati részén, a magyar határ mellett található, összterületük 3434 km². A kutatás első munkafázisa várhatóan 2011-ben kezdődik, és az előzetes becslések szerint a blokkok ígéretes olaj- és gázpotenciállal rendelkeznek.

Holoda Attila, a MOL-csoport Eurázsiai Kutatás-Termelés igazgatója elmondta: Ezzel a lehetőséggel a MOL-csoport nemcsak a szomszédos országban régóta működő, jelentős kiskereskedelmi pozícióját egészíti ki új tevékenységgel, de egyúttal kutatás-termelési portfólióját is kiszélesíti a kelet-közép-európai régióban. Biztosak vagyunk abban, hogy a MOL ismét sikeresen tudja hasznosítani a régióban megszerzett kutatás-termelési tapasztalatait, és bízunk abban, hogy az új blokkokban is megtartjuk a MOL

Pannon-medencében elért, egyedülállóan sikeres kutatási találati arányát.

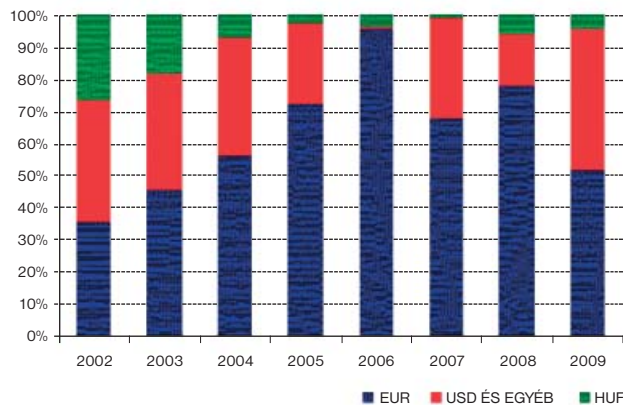
Michel Louboutin, az Expert Petroleum ügyvezető igazgatója azt nyilatkozta: Az Expert Petroleum nagyon elégedett az eredménnyel, amely jól mutatja az értékét a két vállalatcsoport közti szinergiának és egyúttal az együttműködésünk sikerességét is, amelyhez egyrészt az EP romániai működési tapasztalataival és termelésfejlesztési szakértelmével járult hozzá, míg a MOL a Pannon-medencében elért kutatás-termelési sikereivel. Bizakodva várjuk a további sikereket a határ mindkét oldalán. (MOL)



Várt feletti a profit a MOL-nál. A várakozásoknál kedvezőbb számokat tartalmazó második negyedéves gyorsjelentést tett közzé a MOL, mely minden divízióban a konszenzus feletti számokat produkált. A gyorsjelentés legfontosabb pontjai az alábbiak:

- 35,8 mrd Ft-os céltartalékképzés az upstream divízióban;
- kedvező folyamatok az összes üzletágban a javuló külső környezetnek köszönhetően;
- 76 mrd Ft árfolyamvesztés a hitelállomány átértékelése miatt;
- csökkenő eladósodottság.

A MOL adósságállományának devizánkénti megoszlása



Forrás: MOL, Portfolio.hu

A MOL a második negyedévben jelentős, 35,8 mrd Ft-os céltartalékot képzett az upstream divízióban, mivel az Európai Bizottság megállapította, hogy a magyar kormány által a MOL-lal kötött 2005. évi megállapodás, a magyar bányászati törvény 2008. évi módosításával együtt, olyan pénzügyi előnyt jelentett a MOL számára, amely az uniós állami támogatási szabályok értelmében nem élvezhet mentességet.

A pénzügyi tételek ismét jelentősek voltak, hiszen a forint mind az euróval, mind a dollárral szemben jelentősen gyengült, a záró érték pedig kiugró volt. Az első negyedévi 17 mrd után a társaság további 76 mrd Ft árfolyamvesztéssel volt kénytelen elkönyvelni a hitelállomány átértékelése miatt.

A MOL nettó hiteláll/EBITDA mutatója és eladósodottsága egyaránt csökkent, utóbbi 2 éves mélypontra, mind az INA nélkül, mind azzal együtt nézve. (portfolio.hu)



Megjelentek az Európai Unió 7. Kutatási, Technológiafejlesztési és Demonstrációs Keretprogramjának új pályázati felhívásai. Az Európai Unió nagy jelentőséget tulajdonít a vál-



ság idején is a kutatás-fejlesztésre, innovációra fordított pályázati források növelésének. Az Európai Bizottság a válságból való kilábalás és a fejlődés egyik fontos eszközének tekinti a kutatás-fejlesztést és innovációt. Ezt alátámasztandó 6,4 milliárd euró értékben kíván kutatási és innovációs projekteket támogatni. A Nemzeti Kutatási és Technológiai Hivatal (NKTH) segítséget nyújt a magyar pályázóknak az Unió 7. Kutatás-fejlesztési Keretprogramja pályázatainak megismerésében.

Az Európai Bizottság 2010. július 20-án jelentette meg a 7. Kutatás-fejlesztési Keretprogram új pályázati felhívásait. Az Unió 6,4 milliárd eurót fordít 2011-ben kutatás-fejlesztési és innovációs projektek támogatására, amely összeg rekordértéknek számít, mivel 12%-kal magasabb a 2010-es, 30%-kal magasabb a 2009-es pályázati csomaghoz képest. A pályázati források megemelésével az Európai Bizottság a versenyképességet javító fejlesztések mellett olyan társadalmi kihívásokra is választ vár, mint az éghajlatváltozás, az energia- és az élelmiszer-ellátás biztonsága, az egészség és a népességőregedés. Körülbelül 16 ezer pályázó – kutatóintézetek, egyetemek és ipari szereplők, köztük 3000 kis- és középvállalkozás – részesülhet támogatásban. Az Európai Bizottság 165 000 új munkahely megteremtését várja ezen kutatás-fejlesztési projektektől.

Különösen nagy figyelmet szentel az Európai Bizottság a kis- és közepes vállalkozások részvételének az erősítésére. Ennek érdekében mintegy 800 millió eurót fordít a KKV-k támogatására. Az egészség, tudásalapú biogazdaság, környezetvédelem és a nanotechnológia területén a projekttámogatások akár 30–50%-át KKV-k kell, hogy kapják.

Az olyan fontos prioritások, mint az egészség számára csaknem 700 millió euró, az információs és kommunikációs technológiák kutatására 1,2 milliárd euró áll rendelkezésre. Több mint 1,3 milliárd eurót irányozott elő az Európai Bizottság a legkreatívabb és legkiválóbb kutatók számára, kutatócsoportjaik felépítésére vagy megerősítésére. A kutatók Európán belüli mobilitására, valamint Európába történő visszavonzására 772 millió eurót allokáltak a Marie Curie-ösztöndíjprogram keretében.

A keretprogramban való részvétel számos előnnyel jár, ilyen a nemzetközi szinten való megmérettetés és megjelenés, új tudás és technológia megszerzése, új kutatási kapcsolatok kialakítása, rendkívül magasan képzett szakemberek bevonása a hazai kutatási tevékenységbe. A pályázatokat nemzetközi konzorciumoknak kell benyújtaniuk közvetlenül az Európai Bizottsághoz, melyeket az Európai Bizottság által felkért független szakértők bírálhatnak el.

Az NKTH-ban dolgozó nemzeti kapcsolattartók tudnak segítséget nyújtani a magyar kutatóknak, vállalkozásoknak a sikeres pályázás érdekében. Elérhetőségük megtalálható az NKTH honlapján: <http://www.nkth.gov.hu/tanacsadas/fp7-kapcsolattarto/nemzeti-kapcsolattarto-080519>. A pályázók tájékoztatására az NKTH az egyes programokról szeptembertől kezdődően információs napokat szervez.

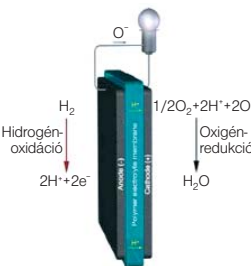
Az EU 7. Kutatás-fejlesztési Keretprogramjának új pályázati felhívásai letölthetőek a következő oldalról: <http://cordis.europa.eu/fp7/dc/index.cfm>. (NKTH)



Új típusú mobiltelefon-cellák magyar kémikusoktól. A jelenlegi mobiltelefonokban használt akkumulátoroknál jóval hosszabb élettartamú és környezetbarátabb tüzelőanyag-cella kifejlesztésével kísérleteznek az MTA Kémiai Kutatóközpont Nanokémiai és Katalízis Intézetének kutatói. Bár a jelenlegi akku-

mulátoroktól eltérő elven működő elemeket még jó ideig nem használhatjuk mobiltelefonjainkban, a kémikusok azt remélik, hogy a metanol elektrooxidációján alapuló új, „direkt metanol” tüzelőanyag-cella első működő prototípusa akár egy éven belül elkészülhet.

A jelenlegi mobiltelefonok akkumulátorait lassan lehet feltölteni. Még a gyors töltésű akkumulátorok esetében is viszonylag sok időre van szükség ehhez. Az általuk fejlesztett cellák töltése viszont pillanatok alatt megoldható lenne egy metanolt tartalmazó, kisméretű patron készülékbe helyezésével. Mint azt Tompos András elmondta, ha a cella elkészül, a mobiltelefonok akkumulátorainak feltöltése tulajdonképpen egyetlen apró alkatrész gyors cseréjével történik majd, nem lesz szükség hálózati áramforrásra. A kutató szerint az újfajta metanol tüzelőanyag-cella másik óriási előnye, hogy jóval hosszabb ideig működik, mint a hagyományos, lítium-ion-alapú mobil-akkumulátor. A metanol-alapú elemmel ellátott mobiltelefonokat akár hónapokig is használhatnánk újratöltés nélkül.



A PEM tüzelőanyag-cella működési elve

Ismert a tüzelőanyag-cellák környezetre gyakorolt káros hatása. A kutatók azonban a fejlesztés során erre is figyelmet fordítanak. A hagyományos cellák veszélyes hulladéknak számítanak, mert gyakran olyan átmenetifémeket tartalmaznak, amelyek a környezetbe kerülve mérgező hatásúak az élő szervezetekre. A kutatócsoport által fejlesztett tüzelőanyag-cellákban katalizátorként olyan új anyagokat próbálnak ki, amelyek környezeti terhelése is jóval kisebb.

A tüzelőanyag-cella tulajdonképpen egyfajta elem, ami elektromosságot termel. Működési elve a hagyományos galvánelemekhez hasonló, csak esetükben más anyagok vesznek részt a kémiai reakciókban, jellemzően hidrogén vagy a metanol (metilalkohol). A lényeg azonban ugyanaz: a kémiai energiát elektromos energiává alakítják. Sok különböző típusú tüzelőanyag-cella létezik, de Tompos András kutatócsoportja a polimer elektrolyt membrán (PEM) tüzelőanyag-cellákkal kísérletezik. A PEM tüzelőanyag-cellák működéséhez a negatív, illetve pozitív töltésű anód- és katódoldal között membránra van szükség. Ez a protonok számára átjárható, feladata pedig az, hogy az elektrolízis közben az anódon képződő hidrogénionokat átvigye a katódoldalra. Az anódon a metanol oxidációja során a protonok mellett elektronok is felszabadulnak, amelyek egy vezetőkön keresztül áramolva működtetik azt az elektromos fogyasztót, amelynek ellátása a cella fő funkciója. Ilyen fogyasztó lehet a mobiltelefon is. A folyamat végén az elektron a fogyasztón áthaladva átkerül a cella katódoldalára, ahol az ott lévő oxigénnel, illetve a membránon keresztül átvándorló protonokkal egyesülve vízmolekulát képez. Az így képződő víz jó esetben gőz formájában távozik a rendszerből. A keletkező víz megfelelő elvezetése a rendszerből szintén komoly mérnöki probléma még.

Mint Tompos András elmondta: egy tavajni céggel kötött megbízási szerződés keretében, kutatócsoportja a teljes tüzelőanyag-cellából csak a katalizátorok fejlesztésére, tesztelésére koncentrált. A kutatás jelenlegi fázisában a kémikusok különféle platinakatalizátorokkal kísérleteznek, vizsgálva azok hatékonyságát. Azon dolgoznak, hogy minél vékonyabb katalizátorrétegre legyen szükség az elem működéséhez, hiszen a Föld platinakészletei meglehetősen szűkösek, és a platina igen drága nemesfém. Az optimális teljesítményt különféle platinaötvözetekkel próbálják



elérni, de hosszú távú céljuk, hogy egy teljesen nemesfémmentes katalizátort dolgozzanak ki. (MTA)



Richter: optimistább kilátások. Bogsch Erik, a Richter vezérigazgatója a társaság gyorsjelentését követő sajtótájékoztatóján a megelőző negyedévinél optimistább bevételi kilátásokat fogalmazott meg az idei évre vonatkozóan.

Az orosz piaci számokat a társaság vezetése pozitívan értékeli. Szeptember 1-jétől új előírások vonatkoznak majd a dobozokra az orosz piacon, így augusztusban előszállítások várhatóak, aminek a hatása a harmadik negyedévre egyelőre még nem pontosítható, de az év egészére nem lesz hatással.

Az Egyesült Államokban a drospirenone-bevételek jelentősen emelkedtek, a Teva és a Bayer közötti per azonban folyik az új termék bevezetése kapcsán, melynek kimenetéről egyelőre nincsen semmilyen információ.

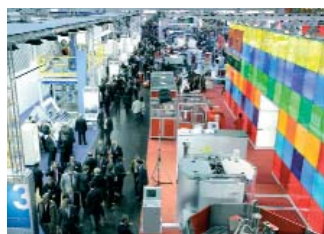
A hazai piac bővülésének oka egyrészt az új termékbevezetések, másrészt pedig az árcsökkenések megállása.

A FÁK országokban az értékesítési hálózatot tovább növelte a Richter, míg a régióban csökkent, a hazai piacon pedig stagnált az alkalmazottak száma ezen a területen.

Bogsch Erik elmondta, hogy az eredmények nem mondhatók rossznak, figyelembe kell azonban venni a Forest mérőldkő-fizetést, a román kintlevőség bizonytalanságait, illetve azt a tényt, hogy a pénzügyi profit egy része nem realizált.

Az idei évre a cég nem vár újabb mérőldkő-fizetést, az esetleges jövő évi kifizetésről azonban egyelőre korai beszélni a vezérigazgató szerint.

Az RGH-188 eddig felmerült költségeit a társaság mindig költségként számolta el, ezek azonban eddig nem voltak kiugróak, az igazán jelentős kiadások a jelenlegi kutatási III fázisban jelentkeznek majd. (portfólió)



K 2010 – A műanyag- és gumipar szíve. 2010-ben ismét eljön a „K” ideje – október 27. és november 3. között ad találkozót egymásnak a világ műanyag- és gumipara a világviszonylatban is legnagyobb szakmai seregszemlén. A Düsseldorf

fi Vásár városban a legjelentősebb gyártók mutatják be termékeiket és megoldásaikat az alap- és segédanyagok, félkész termékek, mérnöki alkatrészek és megerősített műanyagtermékek, műanyag- és gumipari gépek és berendezések kínálati csoportokban. A K-Düsseldorf ma már több mint fél évszázados sikertörténetre tekinthet vissza, és napjainkban vitathatatlanul az iparág vezető szakvására.

A K 2010 átfogó képet biztosít a műanyag- és gumipar világának teljes kínálatáról. Ezt idén is garantálja egyrészt a kiállító sokasága a világméretű óriáskonszertől az inkubátor cé-

gig, másrészt pedig a rendkívül magas nemzetközi részvétel. Valamennyi földrésztől jelentkezték vállalatok, hogy bemutassák a szakmai látogatóknak a legmagasabb szintű innovációt. Az ágazatban uralkodó nehéz gazdasági környezet ellenére mind a 19 rendelkezésre álló vásárcsarnok megtelt, és a K 2010 szakvásáron mintegy 3000 kiállító vesz részt.

Idén is kiemelkedően magas a részvétel Németországból, Olaszországból, Ausztriából, Svájcban és az Egyesült Államokból, valamint az ázsiai: kínai, tajvani és indiai gyártók részéről.

A K-Düsseldorf nem csupán a műanyag- és gumipar egészének világviszonylatban is legnagyobb kapcsolatteremtő és kapcsolatépítő rendezvénye, hanem a legfontosabb felvevő iparágak számára is az. A járműgyártás, a csomagolás- és elektrotechnika, az elektronika és a távközlés, az építőipar, az orvostechika, valamint a repülőgép- és űripar szakértői a Rajna-parti szakvásáron sehol másutt nem tapasztalható lehetőséget kapnak arra, hogy tájékozódjanak a műanyagok és gumiféleségek legújabb alkalmazási lehetőségeiről, és hogy megtapasztalják a dinamikusan fejlődő ágazat műszaki innovációját. (www.messe-duesseldorf.de, www.bdexpo.hu)

Banai Andre összeállítása



OKTATÁS

Kémia határok nélkül – Chemistry without borders avagy

Valódi riport egy angol–magyar pop test fesztiválról

Aki szereti sok értelmes, kedves, fiatal arcon a csodálkozás, a megdöbbenés, az intenzív összpontosítás és a megértés jeleit figyelni, miközben kémiáról van szó, az jól járt, ha eljött 2010. május 26-án délután az ELTE Kémiai Intézetébe a Magyar Kémikusok Egyesületével közösen szervezett, kétnyelvű *Pollutant's tale* (azaz Mese a légszennyezőkről) című előadásra. A Bristol-i Egyetemről érkezett vendégelőadónk, *Tim Harrison* ugyanis kitűnő arányérzékkel vegyítette (hogy stílusosak legyünk) a megkapó és látványos kísérleteket az éppen elegendő és sok szellemes megjegyzéssel tarkított elméleti magyarázattal. Úgy, hogy közben azért néhány közbeszúrt mondattal, képpel és diagrammal érzelmi húrokat is megpendített. Nem fölényesen és nem erőszakosan, csak röviden és tényszerűen emlékeztette az addigra teljesen elbűvölt diákokat: az, hogy milyen lesz a Föld, mire nekik unokáik lesznek, azon is múlik, hogy ők az addig leélt évtizedekben milyen életmódot folytatnak. Ezért fontosak az ő napról napra meghozott személyes döntéseik és választásaik.

Az előadás „látványelemeiként” az idősebb generáció (tanárok és oktatók) által jól ismert, csak esetenként újszerű köntösben és megfelelő „körítéssel”, néhány jó ábrával együtt bemutatott kísérletek szolgáltak. Az ezeket összefűző közös gondolati vezérfonal az volt, hogy mindegyik kapcsolódott valami módon a Föld atmoszférájának összetevőihöz vagy szennyezőanyagaihoz. Például összehasonlítva a Naprendszer bolygóinak légkörét, kiderült, hogy egyes bolygók esetében az főként hidrogénből és héliumból áll (a Földétől eltérően). E tény szolgáltatott apropót arra, hogy a sokak által kicsiben már ismert durranógáz-próbát (an-



gólul *pop test*) mintegy 5 liternyi hidrogént vagy héliumot tartalmazó léggömbökön is be lehessen mutatni. A közönség persze roppant hálás volt a dobhártyaszagató hangért és a méretes lángért... A nitrogénnel pedig, ami alapvetően rémesen unalmas (szintelen, szagtalan és inert) gáz, azért szintén lehet érdekes dolgokat művelni, csak le kell hűteni -196 °C alá... Oxigént fejleszteni viszont úgy is lehet a hidrogén-peroxid katalizált bomlásával, hogy az (a hozzáadott színezékkel és mosogatószerrel együtt) iszonyatos mennyiségű, mindent elborító színes habot képezzen. Újfént bizonyítást nyert továbbá, hogy a megfagyott szén-dioxid jóval szórakoztatóbb, mint a gáz halmazállapotú. Az illékony szerves anyagok közül is lehet ügyesen válogatni, hogy melyiket szagolgassuk: például a cibetmacska mirigyéből származó egyik vegyület a híres *Chanel 5* parfüm egyik komponense... Kiderült, hogy a szerves anyagok túlnyomó többsége a légkörből nem égéssel (pl. erdőtüzek során) tűnik el (illusztrációk: az acetilén világító lángja és egy 18 literes műanyag tartályban meggyújtott metanalgáz-levegő elegy tökéletes égése által produkált hatalmas kék lángcsóva), hanem gyökös mechanizmusú fotokémiai reakciókkal (illusztráció: néhány elemi lépést leíró egyszerűsített reakcióegyenlet, rövid magyarázattal). És így tovább... Ha valaki szeretné látni, hogyan reagált a hallgatóság a bemutatóra, akkor javaslom, látogasson el az ELTE Kémiai Intézet honlapjára, ahol megtekinthető néhány válogatott fotó (http://nepszerukemia.elte.hu/Pollutants_2010_05/). Végül még egy megjegyzés: jó volt látni, hogy a jelen lévő fiatalok többsége már a magyar fordítás elhangzása előtt megértette a magyarázatokat és nevetett a szövegeken is. Óhatatlanul az jutott az ember eszébe: de jó lenne, ha közülük kerülnének ki az utódaink...

A hallgatóság idősebb részét az aznap délutáni második előadásra is marasztaltuk. Ennek során arról hallhattunk, milyen kiterjedt és intenzív munkát végeznek a Bristol Egyetemen dolgozó kollégák a kémia népszerűsítése érdekében. Tevékenységük nem korlátozódik az egyetem épületeire, sem a helyben vagy közeli városokban lévő iskolákra. A Tim Harrison által irányított, BSc-fokozattal már rendelkező, illetve a doktori képzésben részt vevő hallgatókból és fiatal kollégákból álló lelkes csapat az országot, sőt (nyugodtan mondhatjuk) az egész világot járja. Az utóbbi három évben évente átlagosan mintegy 25 ezer embernek mutatták meg, mitől olyan könnyű szeretni a kémiát. Egyedül 2010 márciusában pedig a hallgatóság számát tekintve 11 ezres csúcst ért el! Több európai országon kívül például Kínában, Ausztráliában, Dél-Afrikában is láthatták már a „Mese a légszennyezőkről” előadást. Felkérésre külföldön szívesen segítenek a kémiatanítás színvonalának emelésében is, például afrikai és ázsiai or-

szágokban a helybeli tanárok számára tartott tanfolyamokkal. Bár az elsődleges célcsoport természetesen a pályaválasztás előtt lévő fiatalok (általános és középiskolás diákok), szerveznek előadásokat, bemutatókat, interaktív kísérletezési lehetőséget biztosító gyakorlati foglalkozásokat a felnőttek számára is. A kicsikhez általában „helybe mennek”, például részt vesznek az iskolai „Tudomány Napja” rendezvényeken. A végzős hallgatók pedig az utolsó évi projektjük témájául választhatnak kémiát népszerűsítő iskolai tevékenységet. Tartanak persze előadásokat bent az egyetemen is. Sok szempontból közelítik a kémiát, amire jó példa a *Chem@rt* projekt, ami a kémia és a művészetek összekapcsolására ad lehetőséget. A nagyobb diákok pedig a komolyabb témájú (de persze lebilincselően érdekes) elméleti előadásokon, tanfolyamokon, versenyeken kívül „rendes” laborgyakorlatokon is részt vehetnek (pl. természetes anyagokat extrahálva vagy spektroszkópiai méréseket végezve). Azért a felnőtteket sem hanyagolják el, sőt egészen extrém példák is hozhatók a velük kapcsolatos PR tevékenységre. Az egyik fotón például azt láthattuk, amint egy idősebb, teljesen vak hölgy titráltni tanul...

Minden valószínűség szerint komoly szerepet játszik a fenti tudomány-népszerűsítő tevékenység is abban, hogy a Bristol Egyetem kémia alapszakára igyekvő diákok középiskolai teljesítménye nagyjából megegyezik az orvosi fakultásokra jelentkezőkével. Mintegy 1400–1500 ilyen felvételizőből válogatnak ki minden évben kb. kétszáz szerencsését. (Hiszen kémia szempontjából Oxford és Cambridge után a harmadik legjobbnak tartják a Bristol Egyetemen lévő *School of Chemistry*.) Az öt év alatt



mintegy 22,5 millió angol fontból (a jelenlegi árfolyamon mintegy 7 milliárd magyar forintból) felújított laboratóriumaikban ugyanis egyszerre összesen 216 diák tud kísérletezni, mégpedig a legmodernebb, kutatásra is alkalmas színvonalú műszerparkot használva. Még néhány szám: kb. 250 PhD-hallgatójuk, 100 poszt-doktori és 65 oktatói-kutatói státuszban lévő kollégájuk van, s további 50 fő segíti egyéb beosztásban a gördülékenyen folyó munkát. Elnyerték a *Center of Excellence in Teaching and Learning Chemistry* címet is. A laborokat nyugodtan tele lehetett pakolni érzékeny műszerekkel, számítógépekkel és mindenféle számítástechnikai eszközzel (csak projektorból 8 darab működhet egyszerre), mert a levegő 10 percenként teljesen kicserélődik és állandóan 21 °C van. Egyáltalán nincs viszont gázégő, minden melegítés elektromosan történik. A legcsekélyebb veszélyt jelentő kísérleteket is a mindenféle kíváncsalmnak megfelelő elszívófülkékben végzik. (A *risk assesment*, azaz kockázatbecslés pedig mindenféle gyakorlati munka megkezdése előtt kötelező penzum. Igaz, ez így van náluk a közoktatásban is.) Számunkra szokatlan, hogy a laboratóriumi gyakorlatok ott egyáltalán nem kötődnek az elméleti előadásokhoz, sőt nem válnak szét a klasszi-



kus megközelítés szerint a fizikai kémiához, valamint szervetlen, szerves és analitikai kémiához kapcsolódó laborokra sem. Álljon itt néhány példa (angol eredetiben) arra, hogy akkor miket is csinálnak: *Using carrots as catalysts, Analysis of caffeine in soft drinks, The application of liquefied gases as solvents, Preparation of a luminescent Cu(I) complex, Using tannins from tea to stabilise colloids, An electrochemical glucose sensor, IR spectroscopy of cigarette smoke, Hydrocarbons in plant waxes.*

Rendkívül fontosnak tartják, hogy a diákok számára ne a laboratóriumi munka közben (esetleg után) derüljön ki pontosan, hogy milyen feladatot kaptak, hanem hogy felkészülten érkezve a laborba, céltudatosan és hatékonyan tudjanak dolgozni. Ezért mintegy félmillió fontból olyan interaktív szoftvert fejlesztettek ki (a neve *Dynamic Lab Manual*, és bárki, Magyarországról is megvásárolhatja korlátlan felhasználásra 5000 fontért), ami *e-learning*-es eszközként alkalmazva nagyban segíti a diákok otthoni felkészülését. Videókat, szimulációkat, virtuális műszereket, sok linket és interaktív háttéranyagot tartalmaz. Az igazi trükk persze az, hogy *e-assessment* funkciója is van, amivel a labort megelőző napon kiszűrhető, hogy ki az, akinek nem sikerült elegendő ismeretet elsajátítania az adott gyakorlat biztonságos elvégzéséhez (vagyis a kérdések min. 80%-ára helyesen válszolnia). Ezeket a hallgatókat be se engedik a laborba, és pótlásra nincs lehetőség, mert minden labor folyton tele van. Így aztán elérik, hogy a hallgatók tényleg jobban hasznosítják a laboridőt és kevesebb üvegeszköz törik... Szerencsére a bukási, lemorzsolódási arány ilyen szigorú feltételek mellett is igen csekély (mintegy 2%). Ezen a ponton mi pedig csak elgondolkozhattunk, hogy a magyar kifejezésnek megfelelően „sárguljunk”, vagy inkább az angol megfelelője szerint „zöldülünk” az irigységtől...

Van azonban egy dolog, amit határozottan nem irigyelek az angol kollégáktól, sőt nagyon nem szeretném, ha valaha is bekövetkezne Magyarországon. Nevezetesen az, hogy a tanári diplomát valamely alapszak (tehát a természettudományokban egy BSc) megszerzése után mindössze egy év alatt meg lehet szerezni. Ebből az következik, hogy (mivel a biológia ott is népszerűbb a kémiánál és a fizikánál) a 16 éves kor alatti diákoknak természettudományt (s ezen belül fizikai és kémiai ismereteket) tanító tanárok mintegy kétharmada biológia BSc-vel rendelkezik és ezért egyetemi szinten csak egészen minimális mennyiségű kémiát, illetve fizikát tanult. Arra a kérdésemre, hogy akkor mégis, hogyan tesznek szert ezek a fiatal tanárok a kémiából és fizikából szükséges tudásra, Tim azt válaszolta, hogy „diffúzióval”... Komolyra fordítva a szót elmesélte, hogy ők számos gyakorlati kurzust tartanak tanároknak, ahol ezeket a kollégákat arra tanítják, hogyan kell kísérletezni, illetve a tanítványaikkal kísérleteket végeztetni. Nyilván nagy szükség van Angliában a tanártovábbképzés gerincét adó, kiterjedt és bőkezűen finanszírozott *Science Learning Center* hálózat tanfolyamaira is (minderről korábban személyesen is volt alkalmam meggyőződni a londoni tagintézményben). Sajnos hazánkban a konvergenciaprogram megvalósítása (a kezdő tanárok tárgyi tudását tekintve) ebben a számunkra egyáltalán nem kívánatos irányban is folyik. Talán ha összefogunk, még sikerül útját állni, hogy mi is hasonló helyzetbe jussunk...

Az oktatási segédanyagok választéka és színvonala tekintetében viszont megint csak sok a tanulnivalónk. A nyomtatásban megjelenőktől a legmodernebb infokommunikációs technikai eszközök felhasználására épülőkhig hihetetlen skálát vonultat fel minden évben az *Annual Conference of Association for Science Education*, ami egész Európa legnagyobb természettudomány-

oktatási konferenciája és vására (évente mintegy 3000 résztvevővel). A standokat körbejárva rengeteg invenciózus, kreatív és *high-tech* megoldással is találkozhatunk. Ez a tény nyilván kapcsolatba hozható az oktatási ágazatba áramoltatott pénz mennyiségével. Mindezzel együtt az ottani természettudomány-oktatásban érdekelt szakemberek sem elégedettek. A legégetőbbnek ítélt problémákat az idei választási kampányban saját politikusaikhoz intézett kérdések formájában foglalták össze, aminek magyar fordítása „Nyolc kérdés a parlamenti képviselőjelölteknek” címmel lapunk júniusi számában is olvasható volt.

Tehát a három előadásból és az angol vendégelőadókkal való beszélgetésekből ismét leszűrhetjük, hogy (bár az utóbbi időkben nálunk is igen komoly erőfeszítések történnek a magyar kémia-oktatás helyzetének javítása érdekében) még bőven van mit tanulnunk tőlük. Elsősorban pozitív hozzáállást, vitalitást, küzdeni tudást, összefogást, empátiát, és igen: elegáns stílust, fiatalos lendületet, könnyedséget és humorérzékletet is. Ugyanakkor ügyelnünk kell arra, hogy (jobb híján ezzel az elcsépelet szöfordulattal élve) a fürdővízzel azért ne öntsük ki a gyereket is. Józanul kell mérlegelni, hogy mik a mi szükségleteink és lehetőségeink, milyen ésszerű kompromisszumok megkötése vállalható. A szakma érdekérvényesítő képességét csakis úgy lehet maximálni, ha legalább a legfontosabbnak ítélt kitörési pontokban konszenzus alakul ki. Ezzel lehet csak odahatni, hogy már a közeljövőben ésszerű és előremutató döntések szülessenek a legnagyobb súlyú oktatáspolitikai kérdésekben.

Szalay Luca

Nyári iskolák

Doki-suli – tizenharmadszor. Minden okuk megvan az aggodalomra a természettudomány valamely ágát művelő kutatóknak, ha az egyetem fizika, kémia szakára jelentkező diákok gyér létszámáról értesülnek. Merthogy nem kisebb a tét, mint az, hogy lesz-e utánpótlás, lesz-e, aki átveszi tőlük a stafétabotot a mai tudós nemzedéktől. Az MTA Kémiai Kutatóközpontjában nem nézik tétlenül a kutatópálya népszerűségvesztését: Kálmán Erika egyetemi tanár 1997-ben határozta el, hogy évente dokisulit szervez – kedvcsinálóként – fiatal, mégiscsak ezt a pályát választó kémikusok számára. A professzor asszony hagyományteremtő rendezvényeinek sora azóta sem szakadt meg: az idén Balatonkenesén gyűltek össze a fiatal kutatók, hogy beszámoljanak eddigi munkájukról.

A kutatóközpont laboratóriumaiban dolgozó 220 kutatónak jelenleg csaknem a fele 35 éven aluli fiatal, s évente még 45–50 PhD-hallgató is ott készíti disszertációját. Az idei, kötetlen programokkal, borkóstolóval is színesített továbbképzést Maksay Gábor nagy érdeklődéssel kísért, *Janus-arcú alkohol és az élet kémiája* című előadása nyitotta meg. Ezután a doki-suli diákjai 25 előadásban adtak számot kutatási eredményeikről. A doktoranduszok számára kiváló gyakorlóterepet kínálnak ezek a minikonferenciák, hiszen itt oldott légkörben méretetnek meg szakmabeliek előtt mint kutatók, s egyúttal rutint szerezhetnek előadóként is.

Aki kíváncsi kémikus... és középiskolába jár, az idén is jelentkezhetett az MTA Kémiai Kutatóközpont Anyag-és Környezetkémiai Intézete (AKI) által másodízben megszervezett nyári kutatótáborba. A június 27. és július 3. között megrendezett foglalkozásokon 35 diákot fogadott a tudományos intézmény.



Az első napot nem munkával kezdték a fiatalok: részt vettek a Hősök terén a Budapesti Fesztiválzenekar hangversenyén. Hétfőn már a kémikusoké volt a főszerep: Pálinkás Gábor főigazgató megnyitó szavai után Soós Tibor tartott előadást *Molekulák, amelyek megváltoztatták a világot* címmel. A későbbiekben a labormunkát, a tűzvédelmi és balesetmegelőzést szolgáló oktatás, a csapatépítő tréning feszelesebb programját társasjátékokkal, focimeccsel, budai kirándulással enyhítették a tanulók.

A kémia iránt érdeklődő fiatalok hétfőtől péntekig kedvükre dolgozhattak a laboratóriumokban: egy-egy kutató irányítása alatt kísérletezhettek, de saját ötletükkel is előállhattak. Az iskolai tananyagnál többet megtudhattak a víz szerkezetéről, az aranytartalmú óriásmolekulákról, a kristályosítás varázsáról, arról, miként lehet vérből gyógyszereket vizsgálni, s megismerhették a füstgázok nitrogén-oxid-tartalma ártalmatlanításának módszerét éppúgy, mint a borok élettanilag fontos alkotórészeit. Az utolsó napon a diákok miniszimpóziumon mutatták be, ők mit tudnak a kémiáról. A nyári kutatótábor minden résztvevő számára ingyenes: a szállás, a napi háromszori étkezés mellett szabadidős programokról is gondoskodtak a vendéglátók.

– A hagyományteremtőnek szánt nyári kutatótáborok célja, hogy a központ jó előre gondoskodjék a kémikus utánpótlásról. Noha egyelőre nem sújtja szakemberhiány az Akadémiának ezt az intézményét, a jelenleg aktív kutatógeneráció kötelességének érzi, hogy bekapcsolódva a tehetséggondozásba, megkedveltesse a fiatalokkal a kémiát, segítve őket a pályaválasztásban, szakterületük számára pedig biztosítsák a kísérletező kedvű, kíváncsi vegyészeket a jövőben is – mondotta a szervezők nevében Lendvaine Győrik Gabriella.

Élettudományi kutatótábor – középiskolásoknak. Hetedik alkalommal rendezett élettudományi kutatótábor a Straub-örökség Alapítvány az MTA Szegedi Biológiai Központjában (SZBK) középiskolás diákok részére. A korábbi összejövetelek sikerét mi sem bizonyítja jobban, mint hogy az idén a korábbiaknál csaknem kétszer annyi, 121 jelentkezőből kellett kiválogatniuk a szervezőknek a továbbképzésre legalkalmasabb, a biológia és kémia iránt leginkább érdeklődő, az iskolában, tanulmányi versenyeken már bizonyított 40 tanulót, aki részt vehetett a csaknem kéthetes, kötetlen programokkal színesített fejtágítón.

A tanáraik által ajánlott, az ország minden részéről érkező 10., 11. osztályos diákok az SZBK, a Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Általános Orvostudományi Kara, valamint a SOTE és a POTE egyetemi tanárai, kutatói által tartott 30 előadást hallgattak meg, köztük nem egynek témáját maguk a diákok javasolták. A tábor alkalmat kínál arra, hogy a tanulók megismerkedjenek a biológia egyes területeivel, a legújabb kutatási eredményekkel, a laboratóriumi látogatások alkalmával a kutatómunka eszközeivel, módszereivel s magával a kutatói életformával. Képet alkothatnak a modern tudományos gondolkodás mikéntjéről, megtudhatják például, mi a különbség az orvos, a kutatóorvos és a kutató tevékenysége között. Ismereteket szerezhetnek egyebek között a genetikai kutatások legaktuálisabb kérdéseiről, a női és a férfi agy különbözőségéről, az immunrendszer működéséről, az alvás titkairól, a biotechnológia lényegéről, a megújuló energiák hasznáról csakúgy, mint az értelmiségiválás feltételeiről.

A résztvevők számára teljes ellátást biztosító, ingyenes kutatótábor nem véletlenül népszerű az élettudományok iránt ér-

deklődő diákok körében. Az SZBK pályázaton nyert pénzből, a Straub-örökség Alapítvány támogatásával és a Biocenter Kft. szponzorálásával finanszírozott képzésen zömmel egyetemi városoktól távol tanuló, hátrányos szociális körülmények között élő, tehetséges fiatalok vesznek részt, akik megismerkedhetnek Szeged nevezetességeivel, ellátogatnak az Ópusztaszeri Nemzeti Történelmi Emlékparkba, az állatkertbe és az egyetem fűvészkertjébe is. Az sem mellékes azonban, hogy a közös foglalkozások, programok, kötetlen beszélgetések során az azonos érdeklődésű gyerekek között talán életre szóló ismeretségek, barátságok szövődnek.

Karcagi Ildikó, a Biokémiai Intézet kutatója, a tábor főszervezője reméli, hogy a már hagyományos élettudományi tábor jó hírét tovább viszik az idej táborlakók is, és a fiatalok közül többen a természettudományok iránti érdeklődésük erősödésével távozva hivatásuként választják a biológiát és a kutatást.

Vígh László akadémikus, a Straub-örökség Alapítvány kuratóriumi elnöke elmondta: örömeire szolgál, hogy az idén minden eddiginél nagyobb volt az érdeklődés a tábor iránt. A jelentkezők nagy száma arra enged következtetni, hogy a korábbi évek táborlakói jó hírét vitték az itteni tapasztalatoknak, a szegedi élményeknek. Mindez annak is köszönhető, hogy a város – mint a hazai élettudományok központja – az egyetem tanárai, az SZBK kutatói által igyekeznek olyan ismereteket, élményeket nyújtani a diákoknak, amelyek meghatározzák majd pályaválasztásukat is. A Straub-alapítvány következetesen munkálkodik azon, hogy az általa szervezett kutatótáborokban képezze, fölkarolja a tehetséges fiatalokat, akiket reményeik szerint majd viszontlátnak a szegedi egyetem biológiai, kémiai előadásain, az SZBK laboratóriumaiban.

Chikán Ágnes

A jövő vegyipara, a vegyipar jövője

„A jövő vegyipara, a vegyipar jövője” című programsorozat keretében kiírt rajzpályázatra beérkezett alkotásokat a Kodály Zoltán Alapfokú Művészetoktatási Intézmény szakemberei zsűrizték, akiknek nem volt könnyű dolguk a rengeteg kiváló pályamunka közül kiválasztani a legjobbakat. Éppen ezért a kategóriánkénti első három helyezéssel kívül – az előző évhez hasonlóan – mindhárom korcsoportnál egy-egy különdíjat is átadtunk a gyerekeknek.

A rajzpályázat kategóriák szerinti nyertesei: Radnai Bence, Serfőző Patrícia, Birinyi Rajmund, Kovács Boglárka (óvodások), Szűcsová Fanni, Berta Gábor, Harsányi Panna, Sáfrány Luca (1–2. osztály), Sipos Miriam Anna, Horváth József, Kozma Luca, Demjén Fanni (3–4. osztály).

Az idej programsorozat zárásaként az általános iskola felsős diákjaiból és a középiskolás tanulókból álló csapatok színpadi előadásokkal készültek, ahol a vegyipart a művészettel párosították. A kicsit furcsának hangzó pályázati kiírás komoly fejtörést okozott a felkészítő tanárok körében, de végül nagyon igényes, ötletes alkotások születtek.

Minden jutalmazottnak és versenyzőnek, valamint felkészítő nevelőiknek, pedagógusaiknak gratulálunk, további munkájukhoz sok sikert és kiváló eredményeket kívánunk!

Vécsey Renáta

BorsodChem Zrt.

A rajzpályázat néhány munkája a belső borítón látható.



MKE-HÍREK

Konferenciák

Őszi Radiokémiai Napok

2010. október 20–22.

Hotel Helikon (8360 Keszthely, Balatonpart 5.)

Online jelentkezési lehetőség az Egyesület honlapján

keresztül: <http://www.radiokemia.mke.org.hu/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika,

monika.bondar@mke.org.hu



A „Somos Alapítvány a védelmi oktatásért és kutatásért” az MTA Radiokémiai Bizottságával és a Magyar Kémikusok Egyesületével a 35 évnél fiatalabb kutatók kiemelkedő kutatási eredményeinek elismerésére **ösztöndíjat** alapított

Hevesy György Ifjúsági Nívódíj

elnevezéssel.

Az ösztöndíjat tudományos cikk írásával és az Őszi Radiokémiai Napokon tartott előadással lehet elnyerni. Az első díj összege 75 000 Ft. További részletek az MTA Radiokémiai Bizottság és a Magyar Kémikusok Egyesülete honlapján az Őszi Radiokémiai Napokra kattintva. A „Hevesy György Ifjúsági Nívódíj” pályázaton induló diákok az Őszi Radiokémiai Napokon a diák részvételei díjból 50% kedvezményt kapnak.



Women Chemists and Innovation in the Visegrad Countries

2010. október 20–22.

Hotel Helikon (8360 Keszthely, Balatonpart 5.)

Online jelentkezési lehetőség az Egyesület honlapján

keresztül: www.women-in-chemistry-mke.org.hu

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kőröspataky Panna,

korispataky@mke.org.hu



Az MKE Kozmetikai és Háztartásvegyipari Társasága idei tudományos szimpóziumát „**Új utak a kozmetikai kémiai és klinikai kutatásokban**” címmel 2010. november 18-án rendezi a Bara Hotelben (1118 Budapest, Hegyalja út 34–36.).

INFORMÁCIÓ: Előadás-bejelentés, szponzorálás: Dr. Hangay György, tel.: 209 64 01; Szervezési kérdések: Kőröspataky Panna, Magyar Kémikusok Egyesülete, tel.: 201 68 83, fax: 201 80 56; További elérhetőség: korispataky@mke.org.hu, www.mke.org.hu.



7. Kémikus Diákszimpózium

2011. április 1–3.

Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnázium (Pécs, Széchenyi tér 11.)

A Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kara Kémia Intézete, a Ciszterci Rend Pécsi Nagy Lajos Gimnáziuma és a Pollack Mihály Műszaki Szakközépiskola 2011-ben, a Kémia Évében a Magyar Kémikusok Egyesületével együttműködve rendezti meg a kémia iránt érdeklődő diákok és tanáraik számára a 7. Pécsi Kémikus Diákszimpóziumot

JELENTKEZÉS, ÉS MINDEN FONTOS INFORMÁCIÓ A HONLAPON: <http://www.ttk.pte.hu/analitika/kemia/7szimp/index.shtml?meghivo>

12. Magyar Magnézium Szimpózium

2011. április 15.

Budapesti Corvinus Egyetem Tudásközpont

(Budapest, Villányi út 29–31. G. épület, alagsor)

Részletes információ és online jelentkezés hamarosan

a www.mke.org.hu honlapon a rendezvények menüpont alatt.

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kőröspataky Panna,

korispataky@mke.org.hu

MKE 1. Nemzeti Konferencia

2011. május 22–25.

Liszt Ferenc Konferenciaközpont, Sopron

Online jelentkezés: <http://www.mkenk2011.mke.org.hu>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kőröspataky Panna és Bondár Mónika,

mkenk2011@mke.org.hu

4.th European Conference on Chemistry for Life Science

2011. augusztus 31. – szeptember 3.

ELTE, Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A

Online regisztráció hamarosan: <http://www.4eccls.mke.org.hu/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika, 4eccls@mke.org.hu

AZ MKE TITKÁRSÁG ÚJ CÍME

A Magyar Kémikusok Egyesülete és a Titkárság 2010. szeptember 1-jétől a következő címen található:

1015 Budapest, I. kerület, Hattyú utca 16. II. emelet 8.

A www.mke.org.hu honlapcímen található egyesületi telefonszám-, telefax- és e-mail-cím-elérhetőségek változatlanok.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

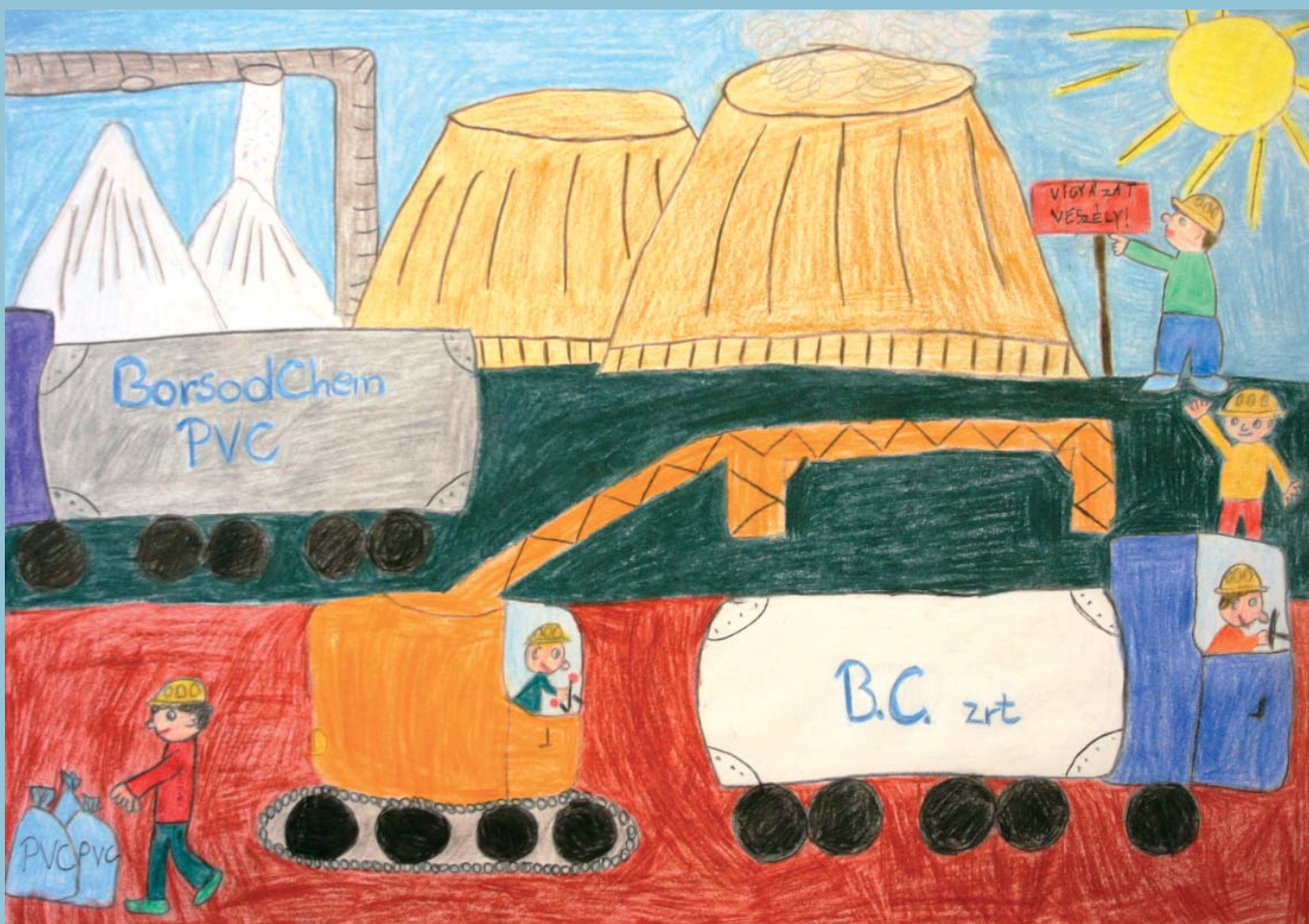
LXV. No. 10. October 2010

CONTENTS

A chemical analyst must be interested in diverse fields. An interview with Széchenyi laureate George Horvai	310
Balázs Vajna, Attila Bódis, György Marosi: Multivariate data analysis in hyperspectral chemical imaging	313
Imre Drávucz: Problem solving using FTIR spectroscopy in hydrocarbon exploration and production	319
Bruckner Room Lectures	
Flórián Tóth: Synthesis of ibophyllidine, related indole alkaloids, and their analogues	323
Csaba Tömböly: Covalent modifications of peptides and proteins	324
Pál Sipos: On the Great Transformation of higher education	326
Chembits (Edited by Gábor Lente)	332
The Society's Life	334
News of the Month	335

A jövő vegyipara, a vegyipar jövője

A program képeiből



SIPOS MIRIAM, 3. OSZT.

DEMJÉN FANNI, 4. OSZT.



RADNAI BENCE, 5. OSZT.

vario TOC cube

az ideális megoldás több, mint **110 év**

tapasztalatának ereje a gyakorlatban !

PÁRATLAN TELJESÍTMÉNY

Egyszerű kezelhetőség

0,003 – 60 000 mg/l TOC

0,020 – 50 000 mg/l TN

égetés 900 - 2 000 °C

zajmentes digitális detektálás

szelektív só és hamu leválasztó

lépcsőzetes kiépíthetőség

internetes távfelügyelet

automata kalibráció



10 év kemence-garancia

automata mintaváltás folyadék és szilárd mintákhoz



AKTIVIT Kft.

1145 Budapest, Pétervárad u. 14.

Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865.

Levél: 1581 Budapest 146, PF.: 104.

Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web: www.aktivit.hu

Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök

örömmel vennénk

érdeklődését !