A TARTALOMBÓL:

A Bolyai-díjas vegyész: Perczel András

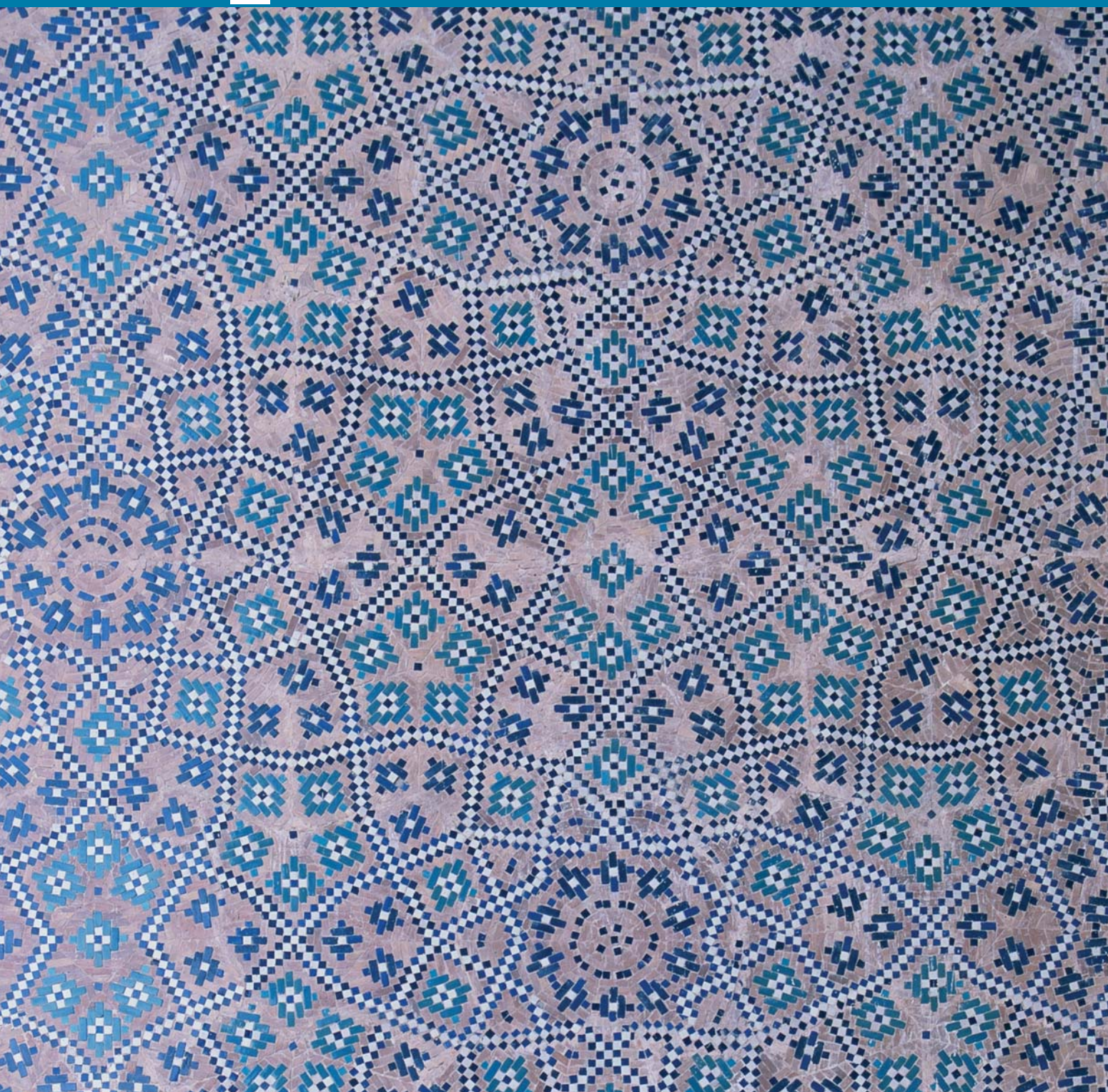
Kémiai Nobel-díj, 2011

Kémiaoktatás az Eötvös József Gimnáziumban és az ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskolában

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXVI. ÉVFOLYAM • 2011. DECEMBER • ÁRA: 850 FT

IYC 2011 2011 A Kémia Nemzetközi Éve



UNICAM
Magyarország Kft.

OLYMPUS
Your Vision, Our Future

Innovatív tervezés, minőségi eredmények:

Az Olympus új FLUOVIEW FV10i konfokális mikroszkópja

A FluoView FV10i automatizált konfokális lézerpásztázó mikroszkóp:

- Egyedülállóan kompakt, mobil munkaállomás
- Kiváló konfokális képminőség, egyszerű kezelhetőség
- Automatizált képalkotás teljes motorizációval
- Integrált sötétszoba és rezgéscsillapítás
- Integrált diódalézer platform 4 lézerrel
- Két spektrális és egy átmenőfényű PMT detektor
- Automatikus immerziós folyadék adagolás (víz)

Az Olympus élettudományi, ipari és rutin mikroszkópok kizárólagos képviselete:

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

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA
HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL
LXVI. évf., 12. szám, 2011. december

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

Szerkesztőség:
Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE
Szerkesztők:
ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE, JANÁKY CSABA, KOVÁCS LAJOS, LENTE GÁBOR, NAGY 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, ZÉKÁNY ANDRÁS

Kapják az egyesület tagjai és a megrendelők
A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS
Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.
Tel.: 36-1-225-8777, 36-1-201-6883,
fax: 36-1-201-8056
E-mail: mkl@mke.org.hu
Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete
Felelős kiadó: ANDROSITS BEÁTA
Nyomdai előkészítés: Planta-2000 Bt.
Nyomás és kötés: Mester Nyomda
Felelős vezető: ANDERLE LAMBERT
Tel./fax: 36-1-455-5050
Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete
Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank 10700024-24764207-51100005 sz. számlájára „MKL” megjelöléssel
Előfizetési díj egy évre 10 200 Ft
Egy szám ára: 850 Ft. Külföldön terjeszti a Batthyany Kultur-Press Kft., H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.
1251 Budapest, Postafiók 30.
Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303
Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA
Magyar Kémikusok Egyesülete,
1015 Budapest, Hattyú u. 16. Tel.: 36-1-201-6883,
fax: 36-1-201-8056, e-mail: mkl@mke.org.hu
Aktuális számaink tartalma, az összefoglalók és egyesületi híreink, illetve archivált számaink honlapunkon (www.mkl.mke.org.hu) olvashatók
Index: 25 541
HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)
HU ISSN 1588-1199 (online)
A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap támogatja
Nemzeti Kulturális Alap

KEDVES OLVASÓK!

Nagy örömömre szolgál, hogy én ajánlhatom Önöknek az MKL évzáró számát. A folyóirat idei decemberi száma egyben a kémikus társadalom számára ünnepi évnek, a Kémia Nemzetközi Évének a záró száma. Az év folyamán számos rendezvényen volt alkalmunk bemutatni és népszerűsíteni tudományterületünk eredményeit, mind szakmai, mind szélesebb körben a gyerekektől az érdeklődő felnőtt korosztályig. Decembert különleges hónapnak tartjuk számon nemcsak évzáró volta miatt, hanem családi és baráti ünnepei miatt is.

A Perczel András Bolyai-díjas kémikussal folytatott különleges hangulatú karácsonyi beszélgetésből szakmai életútja mellett megtudhatjuk azt is, hogy milyen híres történelmi család leszármazottja.

Ez az év sem múlt el Nobel-díj nélkül. A 2011-es kémiai Nobel-díjig vezető út bemutatása ezúttal is megerősítheti bennünk, hogy jó elképzelés, kitartás és persze szerencse vezet a legnagyobb elismerésig.

A hétköznapi kutatást segítő informatikai adatrögzítő és tároló fejlesztéséről adnak hírt a Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Nyrt. munkatársai. A Szegedi Tudományegyetem munkatársai közleményéből megtudhatjuk, hogy milyen matematikai problémák merülhetnek fel és milyen lehetőségek adódnak a kémia körébe tartozó paraméterbecslési feladatok megoldására.

A kémiaoktatás két kiváló műhelyében folyó munkát és a nemzetközileg is elismert eredményeket mutatja be a budapesti Eötvös József Gimnáziumról és az ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskoláról szóló összeállítás. Az egyik szerző, Dancsó Éva nemrég vette át a Richter Gedeon Alapítvány Magyar Kémia Oktatásért díját.

A decemberi szám széles kínálatot nyújt a közelgő ünnepi szünetekben való kellemes időtöltéshez, olvasáshoz.

A karácsonyi időszakban szánjunk néhány percet kémikus társadalmunk azon tagjaira való emlékezésre is, akik sajnálatos módon idő előtt távoztak el közülünk a közelmúltban.

Nagy megtiszteltetés számomra, hogy a 104 éves Egyesület első női elnöke lehetek és hogy elnökké választásomra 2011-ben, a Kémia Nemzetközi Évében kerülhetett sor.

A megújult vezetőség tagjaival azon dolgozunk, hogy az MKE öregbítendő értékeinek megőrzése mellett, az új kihívásoknak való megfelelés érdekében, olyan stratégiát valósítsunk meg, amely elősegíti és hosszú távon biztosítja az Egyesület megkerülhetetlen szerepét a kémikus társadalom képviseletében.

A magam és a Magyar Kémikusok Egyesülete vezetősége nevében kívánok valamennyi olvasónknak békés, boldog karácsonyi ünnepeket és egészségben gazdag sikeres új esztendőt!

Simonné Dr. Sarkadi Livia
az MKE elnöke

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY
Karácsonyi beszélgetés **Perczel András** Bolyai-díjas kémikussal 374
Hargittai István: A kvázikristály többé már nem kvázi... A 2011-es kémiai Nobel-díj 376
Balogh György Tibor, Könczöl Árpád, Sándor Márk: Új megoldások az eredeti gyógyszerkutatás szintézistámogató analitikájában 378
Barna Dóra, Gyevi-Nagy László, Tasi Gyula: Linearizálni vagy nem linearizálni: paraméterek hibaterjedésének analitikus és numerikus számítása 383
A KÉMIA KIVÁLÓSÁGAI
Dancsó Éva: Kémiaoktatás a Reáltanoda utcában 389
Kutrovácz László, Schróth Ágnes: ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskola 392
VEGYÉSZLELETEK
Lente Gábor rovata 396
MEGEMLÉKEZÉS (Hermecz Istvánra, József Gáborra, Nyitrai Józsefre, Gorondy Novák Zsuzsára, Eötvös-kollégista kémikusokra emlékezünk) 398
A HÓNAP HÍREI 401

Peter J. Lu szívességéből
© Peter J. Lu

Címlap: Ötös, tízes szimmetria Abdullah kán buharai medreszéjének falán

Lásd még: Peter J. Lu, Paul J. Steinhardt, Decagonal and Quasi-Crystalline Tilings in Medieval Islamic Architecture, Science (2007) 315, 1106.

Karácsonyi beszélgetés Perczel András Bolyai-díjas kémikussal

Perczel András akadémikussal beszélgetünk, a Bolyai-díj ez évi kitüntetettjével, aki a fehérjék és építőköveik dinamikáját, kölcsönhatásait kutatja. Az ország legnagyobb tudományegyetemének professzora, fiatal ember (52), de már sok lelkes tanítvánnyal keresi, hogy mi készteti kedvenc molekuláit a körülményektől függően hol kölcsönhatásra, hol szétválásra.

– Meséljél nekünk erről a szerelemről, ami a fehérjék rejtelmes világába vonzott.

– Két nevet – Kajtár Mártonét és Hollósi Miklósét –, valamint két könyvet – Szerves kémia I–2 (Bruckner Győző) és A gén molekuláris biológiája (James D. Watson) – említenék elsőként. A tőlük hallottak és a bennük olvasottak azonnal megragadták képzelőerőmet. Szerettem volna például megérteni, hogy egyes kémiai reakciók hogyan kivitelezhetők biológiai környezetben ekkora hatékonysággal, ilyen szelektivitással és lenyűgöző sebességgel. Az enzimek működésének rejtelmeit firtatva aztán hamarosan megértettem, hogy mindebben a fehérjék térszerkezetének roppant nagy szerep jut, és valahogy azóta sem jutottam túl ezek csodálatán. Évtizedek óta kutatjuk, de igazán senki sem érti, hogyan alakul ki pontosan ezeknek a lineáris polimereknek a háromdimenziós téralkata. Gyakran csak úgy kedvtelésből nézegetem a ProteinDataBank honlapján a fehérjék konformációit, gyönyörködöm szerkezeti sokszínűségükben. Mára világossá vált, hogy a sokféle téralkat mellett ezen poliamidok szerkezetének egyes részletei különböző időskálán olyan mozgásokat végeznek, amelyek a molekulák biológiai szerepével, hatékonyságával közvetlen kapcsolatba hozhatók.

– Mi irányítja, vezérli ezt az állandó nyüzsgést?

– Kémikusként szemlélve a molekulák reakcióit és kölcsönhatásait ösztönösen egyszerű és viszonylag kicsi szerves vagy szervetlen molekulákra gondolunk. Az interakciókat kvalitatív magyarázatokkal (pl. elektrosztatika) láthatjuk el, vagy egzaktabb megoldásra törekedve a megfelelő molekulapályák kölcsönhatásait vizsgálhatjuk. Nagyobb és flexibilis molekulák esetében, s ilyenek a fehérjék és nukleinsavak, nemcsak a folyamatok kinetikai és termodinamikai jellemzőinek megadása nehézkes, hanem gyakran már a modellépítés is kétségessé válik. Ezért a nagy és komplex rendszerek megértésére, egyes tulajdonságaik szimulációjára ma még nem vagyunk képesek kellő pontossággal. Így az igazán őszinte válasz: nem tudjuk. A kérdésben említett „nyüzsgés” egyik aspektusa például a fehérjék fel- vagy letekeredésese. Ez a folyamat legalább 10^2–10^3 ns-ot vagy még ennél is hosszabb időt vehet igénybe. Ilyen hosszú folyamatok szimulációját sok száz aminosavas fehérjék esetében ma még erőtereken alapuló molekuladinamikai szimulációkkal sem tudjuk rutinszerűen elvégezni. Ám ha mégis sikerrel megvalósítunk egy ilyen fehérje-fel(le)tekeredési szimulációt, akkor az eredmények értékelésénél figyelembe kell venni, hogy a kvantumkémia megalkotását követő közel századik évben az atomokat és kölcsönhatásaikat még mindig newtoni szinten kezeljük csupán. S ez igen skizoid helyzet. Szóval a méret ebben az esetben nagyon is számít.

– És mi ennek a haszna vagy a kára?

– A haszon vagy kár fogalmak nehezen passzíthatók egy makromolekulához, szerintem. Ám ha mégis, akkor a több tudást tekinthetjük hasznosnak, míg annak hiányát károsnak, ha máshol nem, hát legalább szellemi fejlődésünk esetében.

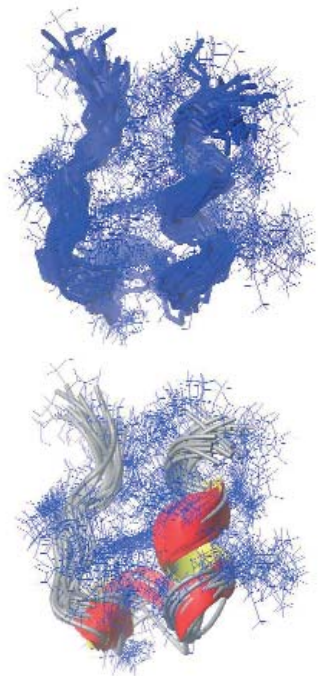
– De ha a molekulák világára gondolunk, csak van valami haszna vagy kára ezeknek a dinamikus mozgásoknak, például a fehérjék ismételt le- és feltekeredésének.

– A biológiai funkció tipikusan a föltekeredett globuláris fehérjékhez köthető, és azt gondoljuk, hogy ez a konformáció az, amiben a fehérje hasznossá válik, mert el tudja látni biológiai funkcióját (Anfinsen, Nobel-díj 1972). Arra nincs közvetlen bizonyítékunk, hogy a fehérjék reverzibilisen spontán le- és feltekerednének a biológiai rendszerekben. A hasznosság azonban nem függ össze szigorúan a térszerkezettel, mert vannak fehérjék,

amelyek határozott térszerkezet nélkül is képesek biológiai funkciót betölteni. Ezek az ún. belsőleg rendezetlen fehérjék, amelyek úgy is hasznosak tudnak lenni, hogy nincs nekik időátlagban jellemzett térszerkezetük. Az aggregátumoknak van téralkatuk, szupramolekuláris komplexeket képeznek, és nagyon „haszontalanok" tudnak lenni, mert a Parkinson-, az Alzheimer- és a kergemarha-kór, a prionbetegségek, összefoglalóan az ún. fehérjekonformációs betegségek kísérőjelenségei. Ezeknek a kutatói között magyar kémikusokat is találunk Christopher Dobson, a University of Cambridge világhírű kutatója mellett, például a szintén világhírű Penke Botondot a Szegedi Tudományegyetemről.

– Milyen módszerekkel vizsgáljátok ezt a folyton változó világot?

– A gyűjthető adatokat gyakran a felbontás, azaz a megalkotható „kép" részletgazdagságának függvényében szoktuk osztályozni. A legjobb képet, azaz atomi szintű felbontást a diffrakciós eljárások és az NMR-módszerek eredményezhetik. De igen hasznosak lehetnek a kvalitatívabb módszerek is, éppen gyorsaságuk és könnyebb kivitelezhetőségük okán. E módszerek közös hátránya viszont, hogy legalább 10–100 nM koncentrációjú oldatokból 10–100 µl-re, vagy parányi, de azért mégis látható kristályokra van szükségünk a mérések elvégzéséhez. Ha meggondoljuk, akkor ez még mindig sok száz- vagy ezermilliárd molekulakópiát igényel. Ez nemcsak sok anyag, hanem tipikusan nem az a mennyiség, ahogy a sejtes rendszerekben az egyes fehérjetípusok előfordulnak. A sejtek össz-fehérjekoncentrációja az adatgyűjtési körülmények során alkalmazottakkal ugyan összemérhető, ám egy-egy sejtben sok ezer fehérjefajta fordul egyszerre elő, térben meghatározott helyeken. Így óhatatlanul megszólal a kutatóban a kisördög: mennyire relevánsak a mérési körülményeink, s az így nyert adatok milyen elhanyagolások mellett vonatkoztathatók az élő rendszerekre?



– A pályaválasztásban általában van egy-két meghatározó személy vagy esemény. A Te életedben volt-e ilyen?

– Bár volna, mert akkor most könnyű lenne a válaszadás. Ám mégis szerencse, hogy a válaszadás nem szorítkozhat csupán néhány névre. Életem úgy alakult, hogy érdeklődésemet és tudásomat sok lelkes és önzetlen tanáromnak, kutatótársamnak és diákomnak együttesen köszönhetem.

– Mennyire volt egyenes az utad, a pályád az ELTE Szerves Kémiai Tanszékére?

– Ami utólag egyenesnek és talán egyszerűnek látszik – hiszen már 1977-ben is az ELTE Szerves Kémiai Tanszékének dolgozója voltam –, közel sem volt egyértelmű. Sohasem reméltem, amikor laboránsként Hollósi Miklóst s a tanszék munkáját segítettem, hogy én itt valaha hallgató, netán doktorandusz lehetek. És valóban, fel sem vettek 1978-ban az egyetemre! Tíz évvel később, a doktori cím megszerzése után nem volt tanársegédi állás – ki hitte volna, hogy öt évvel később ez is megoldódhat? Azt pedig, hogy 2007 és 2010 között a tanszék vezetője voltam, ma is furcsállom.

– Sokfelé jártál a világban: az Egyesült Államokban, Kanadában, Angliában. Hogyan hatottak ezek az utak a pályafutásodra?

– Igen megtermékenyítően. Egy magyarnak a 80-as évek vége felé utazni, világot látni sem volt egyszerű, nemhogy külföldön tanulni vagy dolgozni. Hát még Amerikában! Nagyon inspirált, s a hátrányokat (gyengébb nyelvtudás, kevés fizetés) messze meghaladta az, hogy Bostonban dolgozhatok, egy nagy hírű egyetem laboratóriumában kutathatok. Lehet abban is jót találni, ha az embernek nem adatik meg valami azonnal vagy egyszerűen. Lenyűgözött a gazdag könyvtár, mint a korlátlannak tűnő tudás gyűjteménye, a sok és könnyen beszerezhető vegyszer meglendítette fantáziámat, s „két kézzel" kísérleteztem, állítottam elő érdekes peptideket és glikopeptideket. Sokat, nagyon sokat kellett dolgoznom, és bár örömmel tettem, nem volt egyszerű három kisgyermekkel. A szakmai kreativitás mellett ekkor tanultuk meg feleségemmel a kreatív életvitel titkait is. Hogyan hat az emberre, ha két év „Amerika után" az MIT egyik előadótermében adhat elő 1000 fő előtt, egy szakmai konferencián? Igen jól, még ha az előadás előtt nagyon féltem is.

– Külföldön vagy itthon kutatni, élni? Valószínűleg vannak érveid pro és kontra. Biztosan a hazai mellett szól a több, hiszen minden külföldi utadról hazajöttél/hazajöttetek. Beszélnél erről?

– Örömmel! Itthon, ha nehezebbek is a körülmények, a család és a közvetlen munkatársakon túl nemzeti dimenziója is van a munkának. Ez elveszhet, ha az ember arra kényszerül, hogy ne a hazájában éljen és dolgozzon, hanem valahol a nagyvilágban. Vannak ilyen nehezebb sorsú kollégáim, barátaim. Nekem ebben a dologban is a könnyebb rész jutott. Csodával határos módon lett itthon állásom, s ráadásul ezt megtarthattam akkor is, ha időről időre rövidebb-hosszabb tanulmányútra külföldre mentem. Így volt ez, amikor Oxfordban voltunk két évet, vagy pár évvel ezelőtt Madisonban. Köszönet érte.

– Az biztos, hogy az akadémiai pályán levő ember életéhez hozzátartozik az utazás, a mobilitás.

– Ha a kutató nem utazik, akkor a világ körülötte beszűkülhet, ha nem jár konferenciákra, akkor nem ismerheti meg mások izgalmas gondolatait, eredményeit. S ez baj! De ha az ember túl sokat utazik, csak házal, mint egy vigéc, akkor meg nem marad ideje elmélyülni, netán saját kezűleg dolgozni, és olyan lesz, mint a gyermek, kinek elvették a játékszerét; frusztrált. Így aligha lehet boldog. No, nem mintha az ember életének értelme egyedül a boldogságban rejlene, de azért sokan törekszünk erre. Talán itt is van harmonikus középút? Erre is rá kell találni.

– A mobilitásnak van egy másik területe is. A belföldi. Erről mi a véleményed?

– Magyarország nagyon Budapest-központú, és ezt mi, pestiek alig érezzük, kevéssé értékeljük. Már a szóhasználat is suta: „lemegyek vidékre, felmegyek Pestre".

– Egyetem vagy ipar? Kérdésként vetődhet fel az ember pályáján. Akár rögtön a pályaválasztáskor, de a karrier építése során is. Kerültél-e ilyen dilemma elé életed során? Egyáltalán menynyire tartod kívánatosnak az átjárhatóságot az akadémiai és az ipari szféra között?

– Amerikában többször is hívtak, és kínáltak volna jobban fizető ipari állást, de valahogy az életem nekem nem így alakult.

Itthon is van több barátom, aki az iparban dolgozik, és boldognak, eredményesnek látom őket. Nem hiszem, hogy ez két elkülönült sziget lenne, bár a kutatás hangsúlyai és peremfeltételei mások egy iparvállalatnál, és mások az akadémiai szférában. Jó, ha megtaláljuk azt a helyet, ahol hatékonyan tudjuk a tudásunkat gyümölcsöztetni.

– Az egyetemi oktatói létnek egyik nagyon vonzó oldala a fiatal emberek állandóan megújuló közege, amelyben élünk, amely – meggyőződésem – fiatalon tart, állandó megújulásra késztet bennünket is. Később öregszünk, legalábbis úgy érezzük.

– Pedig sok kollégám éppen arról panaszkodik, hogy a rengeteg diák oktatásába őszül bele. Én szeretem a lelkes szemeket, amelyek csillogva várják tőlünk, tanároktól a tudást; bár sohasem csalódnának! Érdekes látni, ahogy bontakoznak, megízlelve a tudás fájának gyümölcsét. Érdeklődőbbé, okosabbá válnak napról napra. Sajnos nagyon sok múlik rajtunk, tanárokon, kutatókon, a mi példaadásunkon és szakmaszeretetünkön.

– Hogy érzed magad tanárként, egyetemi oktatóként?

– Köszönöm, jól.

– És hogy érzed magad egyetemi, közéleti emberként, értelmiségiként?

– Nem szoktam gyakran panaszkodni, ilyenné neveltek. De igazán nem illene most panaszkodni Bolyai-díjas akadémikusként. Mi többről álmodhattam volna valaha?

– Azért az jó érzéssel tölt el, amikor egy ilyen rangos elismerés, mint a Bolyai-díj megtalál. Feltétlenül megnyugszik, feltöltődik tőle kicsit az ember.

– Igen. Ám érdekes, és sokan kétkedve fogadják, mikor elmondom, hogy megrázkódtatás is volt számomra ez a kitüntető díj. Az öröm mellett a kiválasztottság felelőssége szakadt hirtelen rám! Miért? Miért pont én? Furcsa, de korábban ezt az érzést, ezeket a kérdéseket csak gondokkal teli helyzetekben éreztem és tettem fel magamnak. Megtisztelő a kurátorok és az alapítók bizalma, kitüntető figyelme, de egyben nagy óvatosságra is int. Még keresem a „miértre” a választ, és remélem, hamarosan meglelem.

– A karácsony személyes hangvételt is megenged. Tudjuk, hogy neves történelmi család leszármazottja vagy. Perczel Mórt is őseid között tudhatod. Bemutatnád családod múltját és jelenét?

– Perczel Mór 1848-as tábornokot – az idén ünnepeltük születésének 200. évfordulóját – sokan ismerik, csak Budapesten több utca viseli nevét. A mi családunk tagjai a Mórnál visszafogottabb Perczel Béla (I) leszármazottjai. A 19 testvér közül Béla (1819–1888) – az ükapám – bár kevésbé ismert közszereplő, mégsem érdemtelen, hiszen volt igazságügy-miniszter, majd a Curia és a Deák-párt elnöke. Felemelő érzés, de egyben számos kötelezettséggel is jár egy történelmi család sarjaként világra születni, élni és dolgozni. Közelebb a mához, édesapám Perczel Dénes építészmérnök, édesanyám kristályfizikával kapcsolatos területen dolgozott. Hárman vagyunk testvérek, a két öcsém – Gábor és Tamás – 11 gyermekével együtt 14 unokatestvér szokott a családi találkozók alkalmával összejönni. Már ha sikerül az ilyen a mai rohanós időkben. Feleségem, Perczel Forintos Dóra a SOTE-n tanszékvezető, klinikai pszichológiával, betegek gyógyításával foglalkozik. Két fiunk – Kristóf és György – orvostanhallgató, míg Júlia lányunk viszi a humán vonalat a családban: ő pszichológiát és művészettörténetet tanul az ELTE-n.

– Olvasóink nevében is kívánok békés, boldog karácsonyt szeretteid körében, és 2012-ben is hasonló sikereket, mint a magunk mögött hagyott esztendőben.

Köszönöm a beszélgetést.

Kiss Tamás

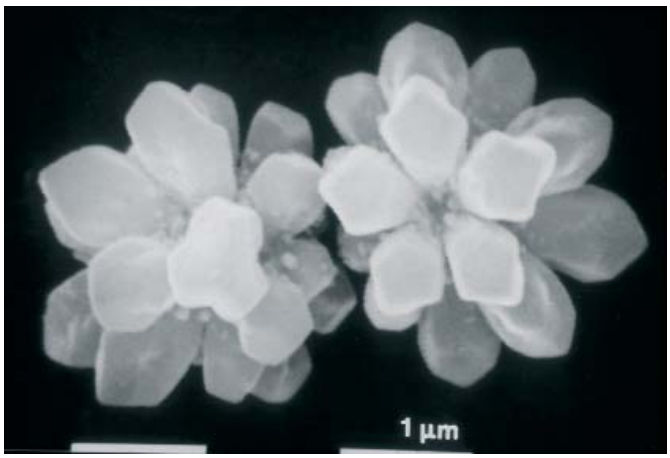
Hargittai István

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
és MTA–BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport

A kvázikristály többé már nem kvázi...

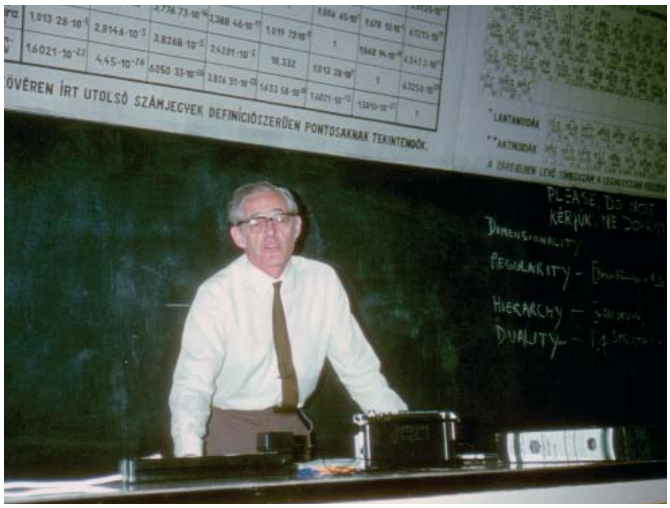
A 2011-es kémiai Nobel-díj

Amikor Dan Shechtman a Technion – az Izraeli Műszaki Egyetem – kutatója 1981-ben elkezdte vendégkutatói munkáját az Egyesült Államok Szabványügyi Hivatalában, témája megadott tulajdonságú ötvözetek kialakítása volt. Azt is mondták neki, hogy bármilyen irányban elkalandozhat, amerre csak kíváncsisága elviszi. Amikor azután Shechtman hirtelen hűtéssel előállított alumínium-mangán ötvözeteket tanulmányozott elektronmikroszkópban, valóban hagyta, hogy kíváncsisága vezesse. Az alumínium-mangán ötvözetekről azt tartották, hogy a túl nagy mangántartalom már előnytelenül befolyásolja tulajdonságaikat. Shechtman azonban egyre növelte a mangántartalmat, mert ér-



Csanády Ágnes kvázikristály-felvétele alumínium-mangán ötvözetről

dekesnek találta az elektrondiffrakciós képeket, amelyeket ezek az ötvözetek szolgáltattak. Amikor elérte a 25%-os mangántartalmat, olyan diffrakciós kép tárult elé, amely már több volt, mint érdekes – egyszerűen „lehetetlen” volt. A diffrakciós kép tízes szimmetria jelenlétére utalt, amiről Shechtman már egyetemi tanulmányai óta tudta, hogy szilárd fázisban nem létezik. A kristályok belső szerkezetében – a klasszikus krisztallográfia tanítása szerint – nem jöhet létre ötös, hetes – és így tovább –, ma-



Alan L. Mackay 1982 szeptemberében Budapesten tartott előadást az ötös szimmetriáról (Hargittai I. felvétele)

gasabb szimmetria. A tízes ráadásul az ötös kétszerese és minden színvonalas krisztallográfiai tankönyv bizonyítást közölt, hogy az ötös szimmetria nem létezhet. Shechtman azonban inkább hitt a saját szemének és az elektrondiffrakciós felvételnek, mint annak, amiből annak idején vizsgázott is. Mindez 1982. április 8-án történt, és ezzel eldőlt, hogy Nobel-díjat érő felfedezést tett. Ezt azonban sokáig egyedül Shechtman hitte csak el.

J. Desmond Bernal, a kiváló brit krisztallográfus vetette fel először annak lehetőségét, hogy szabályos szerkezetek létezhetnek a klasszikus krisztallográfia szigorúan zárt rendszerén kívül is. Ez a zárt rendszer a kristályok világában 230 tércsoport-szimmetriát ismer, de Bernal kitekintett a kristályok világán túlra is. Az ötös szimmetria lehetősége különösen foglalkoztatta, ahogy korábban olyan tudósokat is, mint Johannes Kepler és olyan művészeket is, mint Albrecht Dürer. Bernal legközelebbi tanítványát, a szintén brit Alan L. Mackay-t ugyancsak izgatta az ötös szimmetria kérdése, és megpróbálta a teret ikozaéderes testekkel kitölteni, amiben el is ért sikereket. Az ún. Mackay-féle poliéder hírnevet hozott számára. 1982 szeptemberében meghívtuk Mackay-t, hogy az akkori MTA Szerkezeti Kémiai Kutatólaboratóriumban tartson előadást az ötös szimmetriáról. Ebben az előadásban Mackay bemutatta az ötös szimmetriájú szabályos, de nem periodikus szerkezetről készített szimulációs diffrakciós képét, és arra figyelmeztetett, hogy ha vakon hiszünk abban a dogmában, hogy szilárd fázisban nem fordulhat elő ötös szimmetria, akkor az esetleg szemünk elé kerülő ötös szimmetriájú szerkezet mellett is elmehetünk anélkül, hogy felismernénk. Shechtman ekkor már öt hónappal korábban megfigyelt ilyen szerkezetet, de Mackay és az egész tudományos világ még hosszú ideig mit sem tudott erről.

Shechtmannak nem volt könnyű dolga, hogy a szakemberekkel elfogadtassa megfigyelését. A jóindulatúak azt ajánlották neki, hogy térjen vissza a tankönyvekhez, mert nyilván hiányosak az ismeretei, de voltak olyanok is, akik kigúnyolták, amikor megpróbálta nekik elmagyarázni, hogy mit látott. Felfedezésének elismertetésében a legnagyobb akadályt Linus Pauling ellenállása jelentette. Nemcsak arról volt szó, hogy a világ legnagyobb élő kémikusa nem hisz a megfigyelésében, de olyan tudóssal került szembe, aki korábban maga is dogmákat döntött meg (a fehérjék alfa-hélixének felfedezésével kapcsolatban) és aki az ikozaéderes szerkezetek világában is jelentős sikereket ért el. Pauling szerint azonban Shechtman diffrakciós képe ikerkristályoktól származott és nem addig ismeretlen szerkezetektől. Ráadásul, amikor Shechtman először próbálta leírni megfigyelését, egy fizikai folyóirat szerkesztője azzal vágta vissza, hogy a fizikusokat nem érdekelné, és csak egy metallurgiai lapban tudta közölni a cikkét. De nem is írta meg jól a közleményt, ami új volt benne, azt az adatok és érdektelen leírások szinte eltemették. Csak 1984 novemberében sikerült olyan dolgozatot megjelentetnie, akkor már három társszerzővel, amelyik jelentőségéhez méltóan mutatta be a felfedezést. A cikk megjelenését ezer és ezer közlemény követte. A korábbi szerkesztői véleményre a tudományos közösség alaposan rácáfolt. Az egyik elméleti jellegű dolgozatban nevet is javasoltak az új szerkezetnek – „kvázikristály” –, és ez a név megragadt. Korábban kristálynak számított minden olyan szerkezet, amely szabályos és periodikus, és amorfnak, amely nem szabályos és nem is periodikus. A kvázikristályok szerkezete szabályos, tehát tudjuk pontosan, hogyan lehet generálni ezeket a szerkezeteket, de nem ismétlődőek. Shechtman felfedezése nyomán a Nemzetközi Krisztallográfiai Unió megváltoztatta a kristály meghatározását, és ma már az általa létrehozott diffrakciós képpel definiálják. Ennek megfelelően a kvázikristályok is kristályok, erre a változtatásra utal a jelen közlemény címe is.

Dan Shechtman 1995-ben Budapesten (Hargittai I. felvétele)

Miben látom Shechtman legfontosabb érdemeit? Mint a legtöbb tudományos kutatóra, rá is jellemző volt a kíváncsiság és az ambíció. Kíváncsisága abban mutatkozott meg, hogy az értelmetlennek tartott nagy mangántartalmú alumíniumötvözetekről is szeretett volna adatokat gyűjteni. Ambíciója pedig abban, hogy elfogadtassa igazát, vagyis a megfigyeléseit. Mindez szerencsésen párosult állhatatosságával, mert anélkül már rég feladhatta volna azt a küzdelmet, amelyet kezdetben szinte az egész tudományos közvélemény ellenében folytatott. Természetesen szerencséje is volt, mert útjába került egy addig teljesen ismeretlennek számító szerkezet, de az a kifejezés, hogy „útjába került”, nem teljesen helyesen fejezi ki azt, ami történt. Louis Pasteur szerint a szerencsés véletlenek a felkészült elméknek kedveznek, és Shechtman valóban ilyen felkészült elme volt. Nem tudhatjuk, hogy korábban más is láthatott-e olyan ötvözeteket, amelyek szerkezete ötös vagy tízes szimmetriájú volt. Ha igen, akkor valószínűleg csak legyintett az illető kutató és folytatta a kísérleteit. Shechtman felismerte a megfigyelés jelentőségét és nem maradt nyugton mindaddig, amíg az általa felismert szerkezetek nem váltak közös ismereteink részévé. Ebben volt a legnagyobb érdeme.

IRODALOM

A kvázikristály felfedezéséről részletesen szól a következő könyv: Hargittai István és Hargittai Magdolna, Szimmetriák a felfedezésben. Vince Kiadó, Budapest, 2003, lásd 7. fejezet, pp. 148–182.

Dan Shechtman emberi és kutatói tulajdonságait és a felfedezés természetét tárgyalja a következő könyv: I. Hargittai, Drive and Curiosity: What Fuels the Passion for Science. Prometheus Books, Amherst, New York, 2011, lásd 8. fejezet. A könyv magyar fordítása 2012-ben jelenik meg az Akadémiai Kiadó gondozásában.

Balogh György Tibor[a]–Könczöl Árpád[a]–Sándor Márk[b]

[a]Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Nyrt. Szintézistámogató Laboratórium
gy.balogh@richter.hu

[b]Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Nyrt.
Felfedező Kémiai Kutatólaboratórium

Új megoldások az eredeti gyógyszerkutatás szintézis-támogató analitikájában

A 90-es évek második felétől, de különösen az elmúlt 5–8 évben az eredeti gyógyszerkutatás preklinikai fázisában egyre nagyobb hangsúlyt kaptak a nagy áteresztőképességű (HTS) biológiai vizsgálati módszerek, melyek naponta akár néhány tízezer vagy akár százezer molekula tesztelését is lehetővé teszik. A HTS-vizsgálatok léptékének megfelelő számú vegyület előállítását a preparatív szerves kémia eszköztárában megjelent párhuzamos szintézisek biztosítják [1]. Az egyes gyógyszerkémiai csoportok preparatív hatékonyságát tovább növeli, hogy egy adott projekten belül általában csak behatárolt szerkezeti körhöz tartozó vegyületeket állítanak elő. Ennek köszönhetően az adott vegyületcsalád kémiáját az egy csapatban dolgozó vegyészek rövid időn belül megismerik és így gyorsabban képesek akár a klasszikus totálszintézissel is nagyszámú vegyület előállítására. A növekvő hatékonyságú szintetikus kémiai és biológiai technika mellett azonban továbbra is nélkülözhetetlen az előállított minták kvalitatív és kvantitatív analitikai jellemzése. Ennek megfelelően az egyre növekvő mintaszám jelentős kihívást jelent a korai fázisú gyógyszerkutatást támogató analitikusoknak. A fentiekben vázolt új, nagy hatékonyságú gyógyszerkutatási stratégia átvétele és kialakítása mintegy 10 éve kezdődött el a Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Nyrt. eredeti kutatásában, de az ezzel összeköthető funkciók specifikálását célzó átszervezéseknek köszönhetően az elmúlt 5 évben vált igazán hatékonnyá. Napjainkban a Társaság gyógyszerkutatásának korai fázisában a gyógyszerkémia három, alapvetően nagy mintaszámhoz köthető analitikai igényét kell kielégíteni: i) szükséges a szerves kémiai szintézisek nyomon követése, illetve a párhuzamos szintézissel előállított mintákban a várt termék és a keletkező melléktermékek azonosítása, valamint ezek százalékos mennyiségének megadása; ii) a HTS-találatok („hit”-ek) kvalitatív és kvantitatív analitikai jellemzése; iii) a klasszikus preparatív kémiával előállított végtermékek tisztaságának meghatározása. A fentieknek megfelelően a támogató analitikának mintegy 50–100 preparatív vegyész akár 100 mintáját, illetve a HTS-vizsgálatok eredményét képező hitek számától függően akár további több száz mintát kell minősítenie naponta. Ennél – az egyébként évről évre növekvő mennyiségű – napi mintaszámnál már sem az eddig általánosan használt papíralapú leadási-adatszolgáltatási rendszerrel, sem az egyedi analitikai megközelítéssel nem tudtunk megfelelő hatékonyságú analitikai támogatást biztosítani, így szükségessé vált annak újragondolása és átalakítása. A következőkben a szintézistámogató analitika problémáinak megoldására kialakított rendszerünk informatikai, kemoinformatikai és analitikai vetületeit szeretnék bemutatni.

Szintézistámogató analitikai és informatikai rendszer

A szintézistámogatás fő feladata és egyben legfontosabb szolgáltatása, hogy gyors és releváns analitikai információkkal segítse a preparatív vegyészek munkáját. E tevékenységet gyógyszeripari környezetben nagy áteresztéssel, hagyományosan folyadékkromatográfiás-tömegspektrometriás (LC–MS) technikával támogatják [2]. Számszerűsítve mindez azt jelenti, hogy esetenként akár több 96 cellás mérőlemezt is megtöltő egyedi minta (nyers reakcióelegy, köztitermék, oszlopkromatográfiával nyert frakció, végtermék) minőségéről és összetételéről kell eredményt szolgáltatunk naponta. Ekkora mintavolumen kezelése (mintaregisztráció, eredményszolgáltatás, adattárolás) viszont már mind analitikai, mind adminisztrációs szempontból komoly kihívást jelent. E problémakört szem előtt tartva, 2009 tavaszán egyrészt az analitikai mérőberendezés és mérőmódszer optimálását, másrészt egy, a teljes, addig papíralapú (!) munkafolyamatot felváltó elektronikus adatkezelő rendszer fejlesztését kezdtük el. Munkánk során a Wyeth Researchnél megvalósított Masslynx/Openlynx® (Waters) szoftvereken alapuló, nyílt hozzáférésű LC–MS-rendszer alapvetéseit tekintettük kiindulópontnak [3]. A folyamat eredményeként létrejött rendszer gyorsasága és robusztussága alapvetően három pilléren nyugszik: i) a vegyész és az analitikus közötti megbízható elektronikus adatáramláson (oda és vissza); ii) a gyors és robusztus analitikai mérőrendszeren; iii) az automatizált és egységes kiértékelésen. A következőkben a kialakított rendszert ebben a felosztásban kívánjuk bemutatni.

Elektronikus regisztrációs rendszer

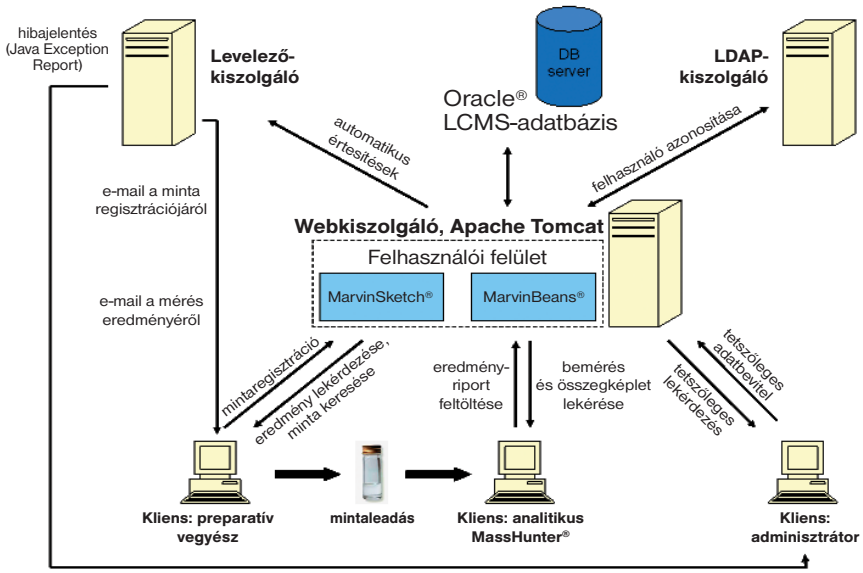
Az LC–MS-vizsgálatot támogató informatikai rendszer kialakításánál fő szempontunk az elektronikus adatáramlás (mintaleadás és analitikai eredményközlés) megvalósítása és az adatok elektronikus tárolásának és hozzáférhetőségének biztosítása volt. A minták adatainak tárolására rendelkezésünkre állt a Társaság kutatásán üzemeltetett adatbázis-kezelő, a minták regisztrálására és a mérési eredmények

böngészésére viszont saját felhasználói felületet kellett terveznünk. Ennek kialakításánál webalapú megoldásokban gondolkodtunk, számolva a webes alkalmazások azon előnyével, hogy a Társaság informatikai rendszerének bármely pontjáról elérhetőek és használatukhoz – a böngésző-programot leszámítva – a felhasználó oldalán nincs szükség szoftverek telepítésére. A ChemAxon által Javában fejlesztett keminformatikai alkalmazások könnyű integrálhatóságát szem előtt tartva a felület megvalósításakor a Java Server Pages (JSP) technológia és az Apache Tomcat szervlet konténer használata mellett döntöttünk **(1. ábra)**.

A webes alkalmazás mintaleadó-, kiértékelő- és keresőfelületként szolgál, biztosítja a háttéradatbázis egyszerű és biztonságos elérését, egységesíti, szabályozza és gyorsítja az információközlést. A Társaság informatikai infrastruktúráját használva a rendszer képes a felhasználók azonosítására és jogkörük pontos meghatározására, továbbá automatikus üzeneteket küld elektronikus levél formájában a fontosabb eseményekről, így a minták sikeres regisztrációjáról és a mérési eredmények elérhetővé válásáról. A webes alkalmazás felülete egyszerű, letisztult, a mérési feladatokhoz kapcsolódó speciális igények kielégítésére alkalmas. Mivel az alkalmazás kódját magunk gondozzuk, a jövőben is fenntartható az elvárásoknak való pontos megfelelés.

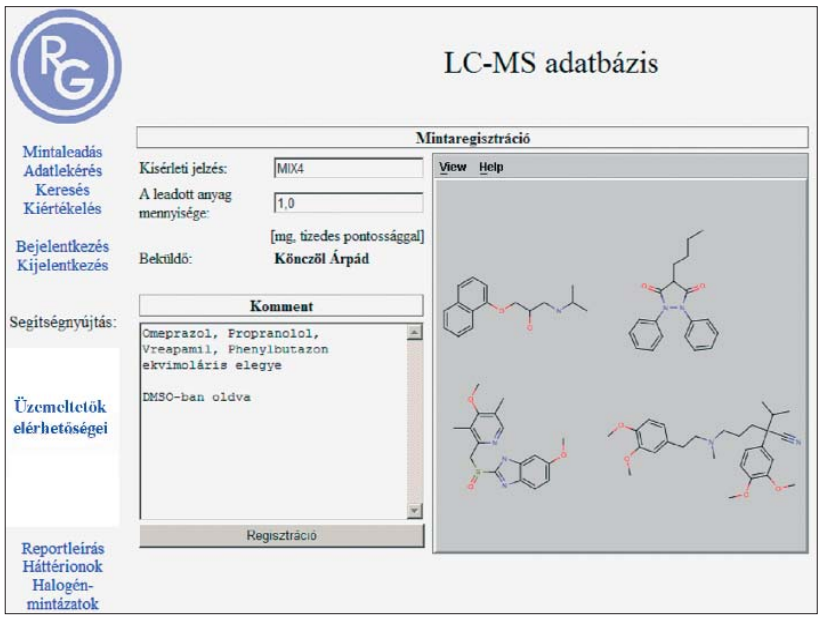
Mintaleadás, információáramlás

A hagyományos szintézissel előállított minták adatai (reakcióegyenlet, szerkezet(ek), leadott mennyiség, kísérleti jelzés, illetve komment ablakban egyéb információk, pl. milyen oldószerben oldódik a minta) a regisztrációs felületen keresztül, a ChemAxon által fejlesztett szerkezetrajzoló program (Marvin Applet®) segítségével kerülnek a rendszerbe **(2. ábra)**. A rendszer működését négy darab referenciagyógyszer keverékének példáján (növekvő sorszám szerint a **3. ábrán** (1: Propranolol, 2: Fenilbutazon, 3: Omeprazol, 4: Verapamil) mutatjuk be. Az adatok és a berajzolt szerkezetek alapján a mérés kiértékelése elvégezhető, a kiértékelést követően az eredmények bekerülnek a mintaadatbázisba, amiről a felhasználó emailben értesítést kap, a kiértékelés pedig a weboldalon keresztül megtekinthető *(3. ábra)*. A felület használatával a humán interakció a minta fizikai leadására korlátozódik, a mintával kapcsolatos minden adatszolgáltatás a felületen keresztül zajlik. A minták adatai visszakereshetőek, a mérési eredmények egységes, mindenki számára jól értelmezhető formában tárolódnak az adatbázisban. Ezen felül a felhasználók számára a weblapon elérhetőek az analitikai eredményekről készült riport értelmezését megkönnyítő segédanyagok, de csoportunk tagjainak elérhetőségei is, így mind informatikai, mind analitikai probléma esetén közvetlen segítséget tudunk nyújtani.

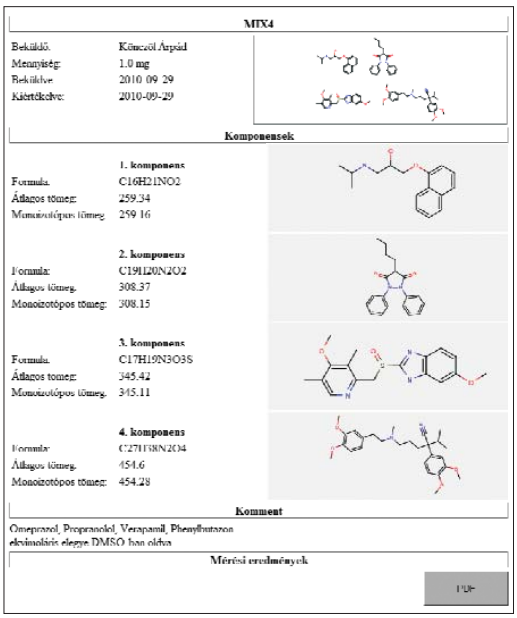


1. ábra. A regisztrációs rendszerek felépítése

2. ábra. Mintaleadás a regisztrációs felületen



3. ábra. A minták adatainak lekérdezése. A kiértékelés letölthető pdf-ben a weboldalról



Szintéziskövetés LC–MS-technikával

A kromatográfiás technikákon alapuló analitikai rendszerek, ahogy a vegyipar egyéb területein, úgy a gyógyszerkutatás korai fázisában is domináns szerepet játszanak. Az elemzés gyorsításának, a miniatürizálásnak és az automatizálás fokozásának trendjét a nagy hatékonyságú folyadékkromatográfia (HPLC) területén megvalósult technológiai, műszeres és szoftveres fejlesztéseken is jól nyomon lehet követni [4]. A HPLC az elmúlt 5–6 évben vitathatatlanul a gyors kromatográfia térhódításáról szólt. A gyors kromatográfia révén a hagyományos HPLC-rendszerek dimenzióihoz képest a felbontóképesség megtartása (legtöbb esetben növelése) mellett az analízis időtartamának jelentős, akár egy nagyságrenddel való csökkentése is elérhetővé vált. Mindehhez az automata injektorok területén az injektálások közti mintaáthordás (carry over) tökéletes kiküszöbölése és a jól reprodukálható kis injektálási térfogat (0,05–1,0 µl) biztosítása, az eluenseket szállító pumpák esetén a nagy ellenállások ($\Delta p = 600–1200$ bar) leküzdése, magas mintavételezési frekvenciájú detektorok kialakítása és nem utolsósorban a készülék geometriájából adódó holt terek jelentős minimalizálása teremtette meg az alapot. Értelemszerűen ezzel párhuzamosan a kereskedelmi forgalomban elérhető analitikai oszlopok és töltetek jellemző dimenziói is csökkenésnek indultak: 1,0–4,0 mm-es belső átmérőjű micro/narrowbore kolonnák és 2 µm-nél kisebb szemcseátmérőjű, nagy mechanikai stabilitású töltetek jelentek meg. Az ipari környezetben rutinszerűen használható állófázisok választéka is jelentős, már-már exponenciális léptékű bővülésen esett át. A teljességre való törekvés igénye nélkül érdemesnek tartjuk kiemelni a héjszerű (pelikuláris) szemcséjű tölteteket, amelyeken kis diffúziós úthossz (kis csúcsszélesedés) révén, közepes nyomásesés ($\Delta p <$ 600 bar) mellett nagy hatékonyság érhető el; a monolitikus tölteteket, amelyek hagyományos HPLC-készülékeken ($\Delta p < 200$ bar) megfelelő hatékonyság mellett gyors elemzéseket ($t_{elemzés} < 5$ perc) tesznek lehetővé; illetve a nagyon poláros komponensek elválasztására fejlesztett HILIC (hydrophilic interaction liquid chromatography) technika állófázisait [5].

A szintézisek követésére kialakított LC–MS-rendszerünk optimalizálása során a 90/10-es menedzselési szabályt tartottuk szem előtt: egy megfelelően gyors és robusztus alapmódszert kívántunk kidolgozni, amely a minták közel 90%-ára megfelelő eredményt ad az összes minta elemzésére fordított idő 10%-a alatt, hogy a fennmaradó 10%-nyi, az alapmódszerrel nem mérhető minta vizsgálatára a készülék és (nagyobb részben) az analitikus munkaidejének 90%-a álljon rendelkezésre [6]. Az alapmódszer fejlesztésekor legmegfelelőbbnek egy rövid (5 cm-es) és héjszerű szemcsékkel töltött, fordított fázisú C_{18}-as oszlopcsalád (Ascentis® Express Fused-Core, majd Kinetex®) savas eluens (trifluorecetsavval savanyított) melletti, gyors, lineáris gradiens programmal való használata bizonyult, amelyen a szükséges felbontóképesség és robusztusság megtartása mellett biztonságosan csökkenteni lehetett a mérésidőt 8 perc/minta sebességre. E módszer alternatívájaként pedig egy pentafluor-fenil-csoporttal módosított állófázison (Sigma-Aldrich®) alapuló rendszert választottunk, jellemzően kevésbé savas pH-értékű eluens mellett, amely ily módon egyedi és egyben eltérő szelektivitást biztosít az alapmódszerhez képest. Az összehasonlítható eredmények és az egyenletes minőség érdekében a következő paramétereket rögzítettük: a minták oldásához használt oldószerek alkalmazásának „erősorrendjét" (dimetil-szulfoxid, metanol, acetonitril, tetrahidrofurán), az injektált mintaoldat koncentrációját (1,0 mg/ml) és az injektált térfogatot (1–2 µl), az UV-detektálás hullámhossz-tartományát ($\lambda = 240$ nm, 25 nm-es sávszélességgel), valamint az ionforrás beállításait és a kromatogramok integrálási paramétereit. A nyers adatok automatikus és egyben korrekt kiértékelését egy speciális tömegspektrometriás szoftverrel (Agilent MassHunter®) oldottuk meg, melynek beállításait retrospektív módon optimáltuk. Ily módon jutottunk el egy robusztus értékelő automatizmushoz, amely egy szintén általunk kialakított, egységes és letisztult riportformátummal kiegészülve megteremtette az alapját egy, az elektronikus riportálást is magában foglaló, webalapú rendszer kialakításának.

Az LC–MS-mérések automatizált kiértékelése, elektronikus riportkészítés

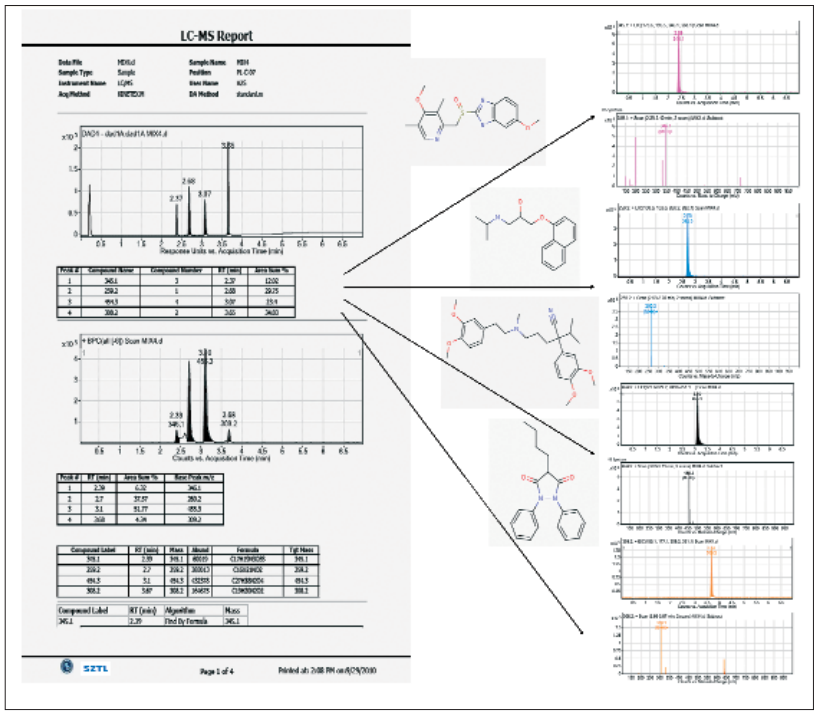
A fentiekben bemutatott, szintézis követésére kifejlesztett LC–MS-rendszer által szolgáltatott eredményekből a **4. ábrán** látható pdf formátumú riport készül, melyet a már ismertetett informatikai rendszeren keresztül juttattunk el az adott mintát leadó vegyészkollegának. A Microsoft Office Excel 2007®-ben specifikusan erre a célra szerkesztett templát alapján készülő riportfájl három fő tartalmi-logikai egységre tagolható:

A riport első részében a 240 nm-es hullámhosszon 25 nm-es sávszélességgel felvett UV-kromatogram (DAD1) látható. Az alatta feltüntetett táblázat pedig a talált csúcsok retenciós idejét RT (min) és a minta területszázalékos összetételét adja meg. Nagyon fontos, hogy amennyiben a mintához a weblapon berajzolt komponens megfelelő biztonsággal (0,1 AMU-nál kisebb tömegdifferenciával) és pár ezres beütésszámnál nagyobb intenzitással azonosítható, úgy a táblázat Compound Number oszlopában a weblapon szereplő sorszámával megjelölésre kerül. Amennyiben e táblázatban nincs megjelölve a keresett komponens, két lehetőség állhat fenn: a minta valóban nem tartalmazza azt, vagy a vegyület nem UV-aktív, és így a totál ion-kromatogramon (BPC) jelenik csak meg.

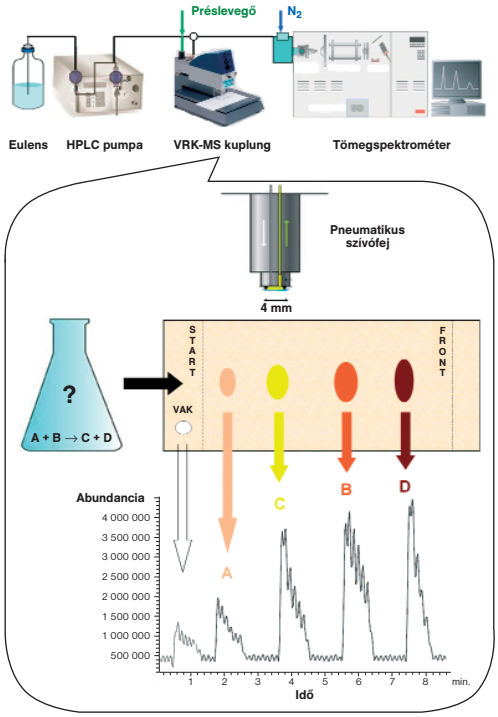
A riport második része a háttérkorrekcióval módosított totál ion-kromatogramot (BPC) és a hozzá tartozó táblázatban az egyes csúcsokhoz tartozó bázis m/z értékeket tartalmazza. Az egyes molekulaiontömegek az első táblázatban szereplő UV-elnyelés alapján számolt területszázalékokkal a táblázatban látható retenciós idők segítségével párosíthatóak össze.

A riport harmadik része szolgál a keresett komponensek azonosításának igazolására. A harmadik táblázat a növekvő retenciós idők sorrendjében sorolja fel a keresett komponensek monoizotópos tömegét, mért beütésszámát (Abund), összegképletét (Formula), keresett tömegét (Tgt Mass). Ezek után az egyes megadott komponensek molekulaion-tömegére extrahált ionkromatogramokat (EIC) és a hozzájuk tartozó tömegspektrumokat találjuk. Segítségükkel meggyőződhetünk arról, hogy a keresett komponens beütésszáma szignifikáns-e (ezres nagyságrendtől annak tekinthető, fő komponensre százezres nagyságrendű) és hogy – Cl-, Br-tartalom esetén – az izotópeloszlás is megfelel-e a vártnak. Ha a minta nem tartalmazza a keresett komponenst, akkor ezen a felületen kis beütésszámot (ezres nagyságrend alattit) kapunk a táblázatban, zajos kromatogram és tömegspektrum áll elő. Ez lényegében indirekt módon bizonyítja, hogy a keresett komponens nem detektálható a mintában. A szoftver a tipikus $[M+H]^+$ molekulaion mellett keres $[M+Na]^+$ adduktra, dimerre ($[2M+H]^+$) és e molekulaionok vízvesztett formáira is.

A szoftveres automatizmus természetesen nem működik minden esetben tökéletesen, de a kialakított riporttemplát és a kiértékelési protokoll gyorsan és rugalmasan hozzáigazítható az esetlegesen felme-



4. ábra. LC–MS-eredmény riportjának szerkezete



5. ábra. A VRK–MS-rendszer felépítése

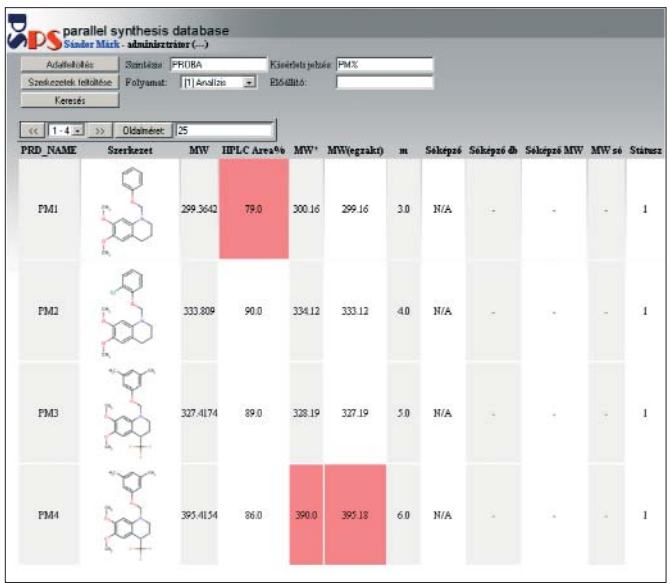
rülő egyedi igényekhez (pl. szteroidok, kis molekulasúlyú fragmensek analízisekor). Az eredményszolgáltatás már többnyire a mintaleadás napján, de legkésőbb 24 órán belül megtörténik; ez a gyorsaság a kialakított rendszert lényegében az originális szintetikus kémiai munka „analitikai motorjává” tette.

Nyílt hozzáférésű VRK–MS

A preparáló vegyészkollégák számára szintéziseik követésére további alternatívaként nyílt hozzáférésű (open access) vékonyréteg-kromatográfiával kapcsolt tömegspektrométer (VRK–MS) használatát is biztosítjuk. A kapcsolt technika és a kuplung [7] sematikus felépítését és működését az **5. ábra** mutatja be. A VRK–MS-kuplung lényegében egy váltószelepből és egy pneumatikus elven működő szívófejből áll. A HPLC-s pumpából állandó áramlási sebességgel érkező szerves oldószerben (acetonitrilben) dús eluens a rétegkromatográfiás foltra légmentesen rázáródó szívófejen keresztül egy 4 mm-es átmérőjű körön belül impulzusszerűen leoldja a mérni kívánt komponenseket, amelyek közvetlenül a tömegdetektor (esetünkben electrospray) ionforrásába kerülnek és a rögzített tömegspektrumuk alapján könnyen azonosíthatóvá válnak. A rendszer jellegéből következik, hogy a magas szerves oldószertartalom miatt jó hatásfokú a vivő eluens elpárologtatása, ami javítja a vegyületek detektálhatóságát. A mérési szekvenciát célszerű egy „vak” foltnak (pl. a felvitt minta startvonala alól) megfelelő háttérspektrum felvételével kezdeni, mivel a különböző rétegek különböző fluoreszcens festékeket, ragasztóanyagokat is tartalmaznak, amelyek zavarhatják a keresett komponensek detektálását. Az eddig összegyűlt tapasztalatok alapján a VRK–MS-rendszer nagyon gyors, robusztus, és egyben a szintézistámogató LC–MS alternatívájaként is szolgálhat, hiszen az LC–MS-technikával nehezen kezelhető kis molekulasúlyú, kromofór csoporttal nem rendelkező kiindulási vagy intermedier vegyületek kimutatását, reakcióinak követését teszi lehetővé.

Párhuzamos szintézisek adatbázisa

A Társaság kutatásában szinte minden kémiai programnak része a párhuzamos szintézissel történő aktív komponensek előállítása, ami a vásárolt molekulabankok mellett, illetve azokkal együtt megfelelő vegyületszámot biztosít a HTS biológiai szűréshez, valamint a szerkezet-hatás összefüggések feltárásához. Fontos azonban kiemelni, hogy az így előállított vegyüle-



6. ábra. Párhuzamos szintézissel előállított anyagok a vegyülettári elhelyezés előtt. A nem elég tiszta vagy nem szerkezetazonos anyagokat a rendszer kiemeli, további sorsukról az analitikus dönt

tekkel szembeni analitikai (elsősorban a minta tisztaságára vonatkozó kevésbé szigorú) kritériumok, illetve a minták kezelési és tárolási körülményei (nem szilárd, hanem oldat formában, 96 és 384 cellás mérőlemezen) eltérnek az egyedileg előállított vegyületekétől. Ennek megfelelően az analitikai támogatás segítéséhez szükség volt egy új alkalmazás létrehozására is, mely a párhuzamos szintézissel előállított anyagok vegyülettári elhelyezésig tartó mozgását követi **(6. ábra)**. A folyamat a minták analitikai minősítésre való regisztrációjával indul (1. státusz), majd a sikeres HPLC-s tisztaságvizsgálatot követően (2. státusz) – ami analitikai szempontból megegyezik a korábban bemutatott szintézisk ö vetésnél alkalmazott LC–MS-méréssel – a minták vegyülettári elhelyezésével (3. státusz) és a kémiai adatbázisba történő regisztrációjával zárul (4. státusz). A folyamat során a webes felületen a különböző szereplők (vegyész, analitikus, vegyülettári adminisztrátor) mindig azokat az anyagokat látják, amelyekkel foglalkozniuk kell, és csak a saját szerepkörüknek megfelelő adatokat módosíthatják, illetve adhatják meg. A vegyész által sikeresen regisztrált minták (konzisztens szerkezet és a tömeg) láthatóvá válnak az analitikus kolléga számára, majd továbbkerülnek vegyülettári elhelyezésre, ha a tisztaságuk megfelelő és az MS-sel azonosított molekulatömegük megegyezik a számított egzakt tömeggel. A vegyülettári elhelyezést követően a vegyülettár adminisztrátora rögzíti az anyagok helykódjait a weboldalon, végül az anyagok automatikusan bekerülnek a vállalat kémiai adatbázisába.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS. A szintézisk ö vető LC–MS analitikai vizsgálatokban való közreműködéséért Huszár Lászlónénak és Csomontányi Józsefnének tartozunk köszönettel. A párhuzamos szintézisek adatbázis kialakításában nagy segítségünkre volt és hasznos tanácsokkal látott el bennünket Gyulai Zsuzsanna. A kézirat gondos átolvasásáért Keserű György Miklósnak mondunk köszönetet. A szerzők közül Balogh György Tibor a Bolyai János kutatási ösztöndíj támogatásával készítette a publikációt.

IRODALOM

[1] R. Mannhold, H. Kubinyi, G. Folkers, High Throughput-Screening in Drug Discovery. Wiley-VCH, Weinheim, 2006.
[2] W. M. A. Niessen, Progress in liquid chromatography – mass spectrometry instrumentation and its impact on high-throughput screening, J. Chromatogr. A. (2003) 1000, 413–436.
[3] L. M. Mallis, A. B. Sarkahian, J. M. Kulishoff, Jr. W. L. Watts, W. L. Watts, Open-access liquid chromatography/mass spectrometry in a drug discovery environment, J. Mass Spectrom. (2002) 37, 889–896.
[4] Dinya E., Humán gyógyszerfejlesztés – A molekulatervezéstől a terápiáig, Medicina Könyvkiadó, Budapest, 2006, 65.
[5] R. Lobrutto, Y. Kazakevich, HPLC for pharmaceutical scientists, Wiley, New Jersey, 2007.
[6] M. S. Lee, LC/MS applications in drug development, Wiley, New York, 2002.
[7] http://www.camag.com/TLC-MS.

ÖSSZEFOGLALÁS

Balogh György Tibor–Könczöl Árpád–Sándor Márk: Új megoldások az eredeti gyógyszerkutatás szintézistámogató analitikájában

Az elmúlt 8–10 évben a Richter Gedeon Vegyészeti Gyár Nyrt. eredeti gyógyszerkutatása, de ezen belül is a gyógyszerkémia terén jelentős lépéseket tettek a kémiai programok racionalizásáért. Hatékonyabbá vált a hagyományos preparatív kémiai munka, és általánossá vált a párhuzamos szintézisek alkalmazása. Mindez jelentősen növelte a Társaság kutatási programjainak hatékonyságát és fokozta a szintézistámogató analitika terhelését. A megnövekedett mintaszám jelentette kihívásra a támogató analitika automatizálásával, valamint a mintaleadással és a riportálással járó adatközlést egységesítő és gyorsító, a biztonságos adattárolást megvalósító informatikai rendszer kialakításával válaszoltunk. Közleményünkben az általunk létrehozott szintézistámogató rendszer működését mutatjuk be a minták leadásától az analitikai eredmények közléséig.

Axial Chem

ÚJ SZÉCHENYI TERV

SAJTÓKÖZLEMÉNY

FEJLEMÉNYEK AZ „AKTÍVSZÉN KEMOSZORBENSEK GYÁRTÁSA IONCSERÉLŐ HULLADÉKOKBÓL AZ AXIÁL CHEM KFT.-BEN" PROJEKT MEGVALÓSÍTÁSÁBAN

GOP-1.1.1-09/1-2009-0081

A fémtartalmú ioncserélők és aktívszenek előállításának technológiáját kidolgoztuk.

A hulladék ioncserélő gyanta alapú kemoszorbens gyártás fejlesztési munkálatai jelentős mértékben előrehaladtak. Különféle szulfonált és karboxilát típusú hulladék gyantákból többféle fémmel (Fe, Mn, Zn, Cu, Ni) különféle aktív fémtartalmú specieseket tartalmazó aktivált szén kemoszorbensek előállítási körülményeit meghatároztuk. Az ioncserélő berendezés elemeit megépítettük és az előkészítő technológiát beüzemeltük. A pirolíziskemence építése/átépítése folyamatban van, kemoszorbens mintákat gyártottunk további oszlopkísérletekhez, és a kemence belső konstrukciójának átalakításán dolgozunk az előzetes kísérletek eredményei alapján.

AXIÁL CHEM Vegyipari Kereskedelmi Kft.
3792 Sajóbábony, Gyártelep 1.
E-mail: angyal.andras@axialchem.hu
www.axialchem.hu
www.ujszechenyiterv.gov.hu

MAGYARORSZÁG MEGÚJUL

A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

ÚJ SZÉCHENYI TERV

SAJTÓKÖZLEMÉNY

FEJLEMÉNYEK AZ „BIOBUTANOL ÜZEMANYAG KEVERŐKOMPONENS GYÁRTÁSTECHNOLÓGIA/GYÁRTÓ BERENDEZÉS FEJLESZTÉSE" PROJEKT MEGVALÓSÍTÁSÁBAN

GOP-1.1.1-09/1-2009-0069

Oleil-alkoholos in-situ és heptanalos ex-situ rész-áramszűréses extraktív-fermentációt dolgoztunk ki.

A biobutanol alapú üzemanyag adalék előállításának kísérleti és fejlesztési munkálatai során meghatároztuk a butanol extraktív kinyerési technológiák illeszkedési pontjait a fermentációs üzemhez. Az in-situ folyamatos fermentációban oleil-alkohollal, míg a nagyhatékonyságú ex-situ részáramszűréses kvázi-folyamatos technológiában heptanallal mint extrahálószerrel végezzük a további munkát. A rektifikáló kolonna tervezése, megépítése és kipróbálás valamint a célfeladatra optimalizálás megtörtént. Az egész folyamat gazdaságossági számításait elvégeztük.

KEMOBIL Vegyipari Termelő és Értékesítő Zrt.
2890 Tata, Agostyáni út 81.
E-mail: kemobil@kemobil.hu
www.kemobil.hu
www.ujszechenyiterv.gov.hu

MAGYARORSZÁG MEGÚJUL

A projektek az Európai Unió támogatásával valósulnak meg.

Barna Dóra – Gyevi-Nagy László – Tasi Gyula
Szegedi Tudományegyetem Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék | tasi@chem.u-szeged.hu

Linearizálni vagy nem linearizálni: paraméterek hibaterjedésének analitikus és numerikus számítása

A tudományos kutatásban elvitathatatlanul fontos szerep jut a legkisebb négyzetek módszerére épülő lineáris és nemlineáris regressziós analízisnek [1,2]. A módszer alkalmazására számtalan példát találhatunk a fizikai-kémiai szakirodalomban [3]. A témával foglalkozó cikkek jelentős része azonban bonyolult matematikai összefüggésekkel számolja a becsült paraméterek hibaterjedését. Jelen cikkünkben egy lényegesen egyszerűbb numerikus megoldást mutatunk be, amelyet a jól ismert szimplex módszerre építettünk. A szimplex módszert kiegészítettük úgy, hogy a paraméterek becsült hibáihoz is hozzájuthassunk. A kérdéses numerikus eljárást az irodalomban megtalálható néhány kísérleti adatsor elemzésén keresztül mutatjuk be. A példák jól illusztrálják, hogy az eljárás egyszerűbb és sokszor pontosabb megoldást szolgáltat, mint számos, rutinszerűen alkalmazott módszer.

A kísérleti adatok megfelelő kiértékelés nélkül általában nem sokat érnek. A legtöbb kísérlet idő- és költségigényes volta miatt azonban körültekintően kell eljárnunk a mérési adatok feldolgozásakor, így a paraméterbecslésnél is. A drága és körülményes adatgyűjtéssel szerzett adatok ugyanis sokat veszíthetnek értékükből, ha nem a lehető legprecízebb módszerrel analizáljuk őket. Érdemes tehát megkeresni az adott problémához leginkább megfelelő regressziós eljárást, hiszen a regressziós eljárások lényegesen olcsóbbak és gyorsabbak a kísérleti technikáknál, a végeredmény pontosságát viszont jelentősen befolyásolják.

A legkisebb négyzetek módszerén alapuló lineáris és nemlineáris regressziós analízis a kémiában az egyik leggyakrabban alkalmazott eljárás. Azonban kijelenthetjük, hogy a statisztika történetének leghíresebb prioritási vitája éppen ennek a széles körben elterjedt eljárás felfedezésének kapcsán robbant ki. A vita két főszereplője a német géniusz, Carl Friedrich Gauss (1777–1855) és a francia Adrien-Marie Legendre (1752–1833) volt. Gauss és Legendre mellett egy amerikai, Robert Adrain (1775–1843) is közölt egy írást a legkisebb négyzetek módszeréről 1808-ban.

Vitán felül áll, hogy elsőként Legendre publikálta a kérdéses módszert az 1805-ben megjelent *Nouvelles méthodes pour la détermination des orbites des comètes* című írásában. A legkisebb négyzetek módszere elnevezést is Legendre használta elsőként. Gauss viszont csak az 1809-ben megjelent *Theoria motus corporum coelestium in sectionibus conicis solem ambientium* című könyvében fejtette ki a legkisebb négyzetek módszerét. Ebben a könyvben Gauss megemlítette Legendre munkáját is, de hozzátette, hogy ő maga már 1795-től kezdve használta ezt a módszert, s azért nem publikálta, mert úgy gondolta, a legkisebb négyzetek módszere olyannyira kézenfekvő, hogy bizonyára már őelőtte is többen alkalmazták. Legendre természetesen sértve érezte magát az állítás miatt, és válaszlevelében – amellett, hogy gratulált Gaussnak könyve megjelenéséhez – megírta, hogy ilyesfajta prioritással kapcsolatos igény nem jelenthető be anélkül, hogy korábbi publikációk ne igazolnák az igény jogosságát. Gaussnak viszont nem állt rendelkezésére ilyen bizonyíték, így az elkövetkező években minden lehetséges úton igyekezett alátámasztani a kijelentését [4,5]. Ez a törekvése azonban nem hozott egyértelmű eredményt. Az általa közölt bizonyítékok egyike alapján sem jelenthető ki teljes bizonyossággal, hogy az említett esetekben Gauss valóban a legkisebb négyzetek módszerét használta volna.

A legkisebb négyzetek módszere

A történeti áttekintés után ismerkedjünk meg a legkisebb négyzetek módszerének alapjaival. Tegyük fel, hogy rendelkezésünkre állnak kísérleti adatpárok $\{(X_i, Y_i),\ i = 1, 2, \ldots, m\}$, beleértve azok korrelálatlan, véletlenszerű hibáit is mind az X_i, mind pedig az Y_i értékekre vonatkozóan. Emellett adott egy $f(x;\mathbf{p})$ matematikai modell, amelynek $\{p_i,\ i = 1, 2, \ldots, n\}$ paramétereit a $\mathbf{p}$ paraméter-vektor tartalmazza. Ez a matematikai modell teremt kapcsolatot a változók között:

$$\begin{aligned} X_i &= x_i + \varepsilon_{xi} \\ Y_i &= y_i + \varepsilon_{yi} \\ y_i &= f(x_i;\mathbf{p}) \end{aligned} \qquad \textbf{I.}$$

ahol x_i és y_i a pontos, hibamentes értékek. Az egyszerűség kedvéért jelen esetben csak egy független és egy függő változót tekintünk. Már most érdemes megjegyezni azonban, hogy megfelelően választott modell esetén statisztikai szempontból nem ját-

szik szerepet az, hogy mit választunk független és mit függő változónak, a kettőnek felcserélhetőnek kell lennie.

Ha a választott modellfüggvény valamennyi paraméterében lineáris, akkor lineáris legkisebb négyzetek módszeréről (LLS) beszélünk. Ha egy vagy több paraméterében nem lineáris, akkor nemlineáris legkisebb négyzetek módszeréről (NLS) van szó.

Tegyük fel, hogy a véletlenszerű hibák normális eloszlásúak, zérus várható értékkel, nullától különböző varianciával (szórásnégyzettel), továbbá, hogy a hibák függetlenek egymástól.

$$E\left(\varepsilon_{yi}\right)=0$$

$$D^2\left(\varepsilon_{yi}\right)=\sigma_{yi}^2 \qquad \textbf{II.}$$

$$\mathrm{Cov}\left(\varepsilon_{yi},\varepsilon_{yj}\right)=0 \quad (i\neq j)$$

$$E\left(\varepsilon_{xi}\right)=0$$

$$D^2\left(\varepsilon_{xi}\right)=\sigma_{xi}^2 \qquad \textbf{III.}$$

$$\mathrm{Cov}\left(\varepsilon_{xi},\varepsilon_{xj}\right)=0 \quad (i\neq j)$$

Itt hallgatólagosan azt is feltételezzük, hogy a független és a függő változóhoz tartozó hibák között sem áll fenn korreláció.

A legkisebb négyzetek módszerének alkalmazásakor az a célunk, hogy meghatározzuk azt az optimális $\hat{\mathbf{p}}$ vektort, amely minimalizálja a **IV.** összefüggés $S(\mathbf{p})$ célfüggvényét, vagyis az $R_{xi} = X_i - \hat{x}_i$ és $R_{yi} = Y_i - \hat{y}_i$ maradékok súlyozott négyzetösszegét, ahol általános esetben a súlyfaktorok: $w_{yi} = \sigma_{yi}^{-2}$ és $w_{xi} = \sigma_{xi}^{-2}$ [6–8].

$$S(\mathbf{p})=\sum_{i=1}^{m} w_{yi}R_{yi}^2+\sum_{i=1}^{m} w_{xi}R_{xi}^2 \qquad \textbf{IV.}$$

A célfüggvény minimalizálásával tehát minimálisra csökkentjük a kísérleti és a számított pontok közötti súlyozott merőleges távolságokat. Ha a **IV.** egyenlet jobb oldalán lévő tagok közül csak az elsőt vesszük figyelembe, vagyis $\forall\sigma_{xi}=0$ és $\forall\sigma_{yi}=\sigma$ („zero” δx és „uniform” δy a [9] hivatkozásban), abban az esetben a klasszikus legkisebb négyzetek módszeréről (ordinary linear/nonlinear least-squares: OLLS/ONLS) beszélünk. A súlyozott legkisebb négyzetek módszere esetében (weighted least-squares: WLLS/WNLS) az y értékek hibái nem feltétlenül azonosak („zero” δx és „nonzero” δy a [9] hivatkozásban). Az általános esetben mind az x, mind pedig az y értékek hibái nullától különbözőek („nonzero” δx és „nonzero” δy a [9] hivatkozásban): ezt a módszert általános legkisebb négyzetek módszerének nevezzük (general least-squares: GLLS/GNLS). A független, illetve a függő változó sztenderd hibájának jelölésére a δx és a δy mellett az $SE(x)$, illetve az $SE(y)$ rövidítések is használatosak.

Bizonyítható, hogy adott feltételek mellett – megfelelő súlyfaktorok használatával – a **IV.** egyenlet a következő, jóval egyszerűbb alakra redukálható [7]:

$$S(\mathbf{p})=\sum_{i=1}^{m} w_i R_{yi}^2 \qquad \textbf{V.}$$

Például, ha az x értékeiben tapasztalható zaj nem túl nagy, akkor a **VI.** egyenlet adja meg az **V.** összefüggésben használandó súlyfaktorokat [7].

$$w_i=\frac{1}{\sigma_{yi}^2+\left(\frac{\partial f}{\partial x}\sigma_{xi}\right)^2} \qquad \textbf{VI.}$$

Ha modellfüggvénynek az egyszerű kétparaméteres egyenest választjuk (paraméterek a és b):

$$y_i=f\left(x_i;a,b\right)=ax_i+b \qquad \textbf{VII.}$$

akkor az **V.** és a **VI.** egyenletek egzaktak lesznek, és a **VI.** egyenlet következőképpen fog kinézni:

$$w_i=\frac{1}{\sigma_{yi}^2+a^2\sigma_{xi}^2} \qquad \textbf{VIII.}$$

Érdemes megemlíteni, hogy Irvin és Quickenden bemutattak egy közelítő, iteratív megoldást a GLLS probléma megoldására [10]. Eljárásuk az **V.** és a **VIII.** egyenletekre épül. Érdekességként megemlíthető, hogy a kérdéses módszer OLLS és WLLS esetekben is alkalmazható.

A linearizálás veszélyei

Mielőtt a nemlineáris regressziós analízis széles körben elterjedt volna, gyakran alkalmaztak különböző linearizálási eljárásokat, amelyek segítségével az eredetileg nemlineáris adatsorokra is lehetett egyenest illeszteni megfelelő transzformáció, például logaritmizálás után. Az egyenesillesztés annak köszönheti népszerűségét, hogy a változók közti lineáris kapcsolatot sokkal könnyebben észrevesszük, mint például egy exponenciális összefüggést, illetve az illesztett egyenes könnyen extrapolálható, ami bonyolult, sokparaméteres görbékről általában nem mondható el.

A regressziós analízishez választott modellfüggvény linearizálása ezek alapján nagyon logikus lépésnek tűnhet. Számos alkalmazása ismert kémiai jellegű kísérleti adatok kiértékelésében is: például reakciókinetikai adatok logaritmizált összefüggéseinél, a ligandumkötődés analízisénél használt Scatchard-féle görbénél [11], vagy az enzimkinetikai kísérletek során alkalmazott Lineweaver–Burke-módszernél [12].

Azonban nem szabad figyelmen kívül hagyni az adatok transzformálásával járó kockázatokat [13]. Az alapvető problémát az jelenti ezekben az esetekben, hogy a transzformáció torzítja a kísérleti adatokhoz tartozó hibákat. A klasszikus lineáris regresszió egyik alapfeltevése az, hogy a véletlenszerű mérési hiba Gauss-eloszlást követ, várható értéke minden pontban zérus, szórása pedig ugyanaz a konstans minden x értéknél. További feltétel, hogy a mérési hibák egymástól függetlenek legyenek. Ezek a feltételek azonban a linearizálás után csak ritkán teljesülnek. További gondot jelenthet, hogy egyes transzformációk megváltoztatják az x és az y változók közti kapcsolatot. A Scatchard-görbe esetében pédául az x változót, azaz a kötött ligandum mennyiségét felhasználjuk az y érték, vagyis a kötött/szabad ligandum mennyiségének a számításához. Ebben az esetben a klasszikus LLS nem lehet jó választás, mivel a mérési hiba mindkét változóban megjelenik.

Mivel ilyen esetekben nem teljesülnek a lineáris regresszió feltételei, az illesztett egyenes meredekségéből, illetve tengelymetszetéből származtatott mennyiségek nem a lehető legpontosabb paramétereket fogják szolgáltatni. Éppen ezért a linearizálás segítségével végzett paraméterbecslés manapság már egyértelműen elavultnak számít, különösen mivel a nemlineáris regressziós módszerek már egyszerűen és gyorsan végrehajthatók. Mindezek ellenére mind a mai napig könnyen találhatunk olyan közleményt a kémiai szakirodalomban, amelyben linearizált összefüggést használnak nagy pontosságú mérési adatok kiértékelésére [14,15], kockáztatva ezzel a végső kísérleti eredmények pontosságát. Figyelembe véve, hogy mennyi idő- és energiabefektetést igényel a kísérleti vagy a számításokkal nyert adatok minél pontosabb összegyűjtése, érdemes a kapott adatok elemzését

a lehető legprecízebb módszerrel elvégezni, hiszen azok lényegesen egyszerűbbek és gyorsabbak a legtöbb kísérleti vagy számításos kémiai technikával összehasonlítva, viszont jelentősen befolyásolják a végeredmény pontosságát.

Szimplex módszer hibaanalízissel

A szekvenciális szimplex módszer kifejlesztése változó méretű formában 1965-re tehető, és Nelder, valamint Mead nevéhez köthető [16]. A szimplex módszer többváltozós függvények minimalizálását teszi lehetővé. Viszont, apró változtatásokkal, nemcsak függvények minimumainak, hanem maximumainak, sőt nyeregpontjainak a meghatározására is felhasználható. A szimplex módszer robusztus, direkt kereső eljárás: alkalmazásához csak a szimplex pontjaiban számított függvényértékekre van szükség. A paraméterek optimális értékeire általában könnyű jó minőségű közelítést adni, amiből azután a kiindulási szimplexünk előállítható. Ha biztosak akarunk lenni az eljárással kapott pontban és ellenőrizni akarjuk annak a jellegét, akkor érdemes újból elindítani a keresést a kapott pontból. Néha kiderülhet, hogy az eljárás csak elakadt egy nem megfelelő helyen, és az újabb kereséssel jobb ponthoz jutunk.

Sajnálatos módon a szimplex módszerhez eredetileg nem tartozott hibaanalízis. Ezt a hiányosságot azonban megpróbálták pótolni [16,17]. A hibaanalízishez végeredményben a **V** varianciakovariancia mátrixot kell előállítani a függvény minimumában:

$$\mathbf{V} = 2s_{r2}\mathbf{H}^{-1}$$

$$s_{r2} = \frac{S(\hat{\mathbf{p}})}{m-n} \qquad \text{IX.}$$

$$H_{ij} = \left.\frac{\partial^2 S}{\partial p_i \partial p_j}\right|_{\mathbf{p}=\hat{\mathbf{p}}}$$

ahol s_{r2} a reziduális variancia (maradék szórásnégyzet), $\mathbf{H}^{-1}$ pedig a Hesse-mátrix inverze, amelyet a célfüggvény paraméterek szerinti második deriváltjai építenek fel. A célfüggvény Hesse-mátrixa analitikusan és numerikusan is meghatározható. Ha nem akarunk sok időt eltölteni az analitikus deriválással, érdemes a numerikus megoldást választani: analitikus gradiensvektorokból is tudunk jó minőségű Hesse-mátrixot készíteni. A célfüggvény paraméterek szerinti első és második deriváltjainak numerikus meghatározása különböző véges differencia formulákkal könnyen végrehajtható [18].

Az optimális paraméterek becsült sztenderd hibáit a varianciakovariancia mátrix diagonális elemei szolgáltatják, a paraméterek páronkénti korreláltságának mértékét kifejező korrelációs koefficiensek pedig az off-diagonális kovarianciákból és a diagonális varianciákból származtathatók:

$$\mathrm{SE}(\hat{p}_i) = \sqrt{\mathrm{Var}(\hat{p}_i)} = \sqrt{V_{ii}} \qquad \text{X.}$$

$$r_{\hat{p}_i\hat{p}_j} = \frac{\mathrm{Cov}(\hat{p}_i, \hat{p}_j)}{\mathrm{SE}(\hat{p}_i)\mathrm{SE}(\hat{p}_j)} = \frac{V_{ij}}{\sqrt{V_{ii}}\sqrt{V_{jj}}} \qquad \text{XI.}$$

Pearson–York-adatsor

A fentiekben bemutatott paraméterbecslő eljárást elsőként az irodalomban jól ismert Pearson-féle lineáris adatsoron [19] alkalmazzuk, kiegészítve a York által javasolt súlyfaktorokkal [20]. Az **1. táblázat**ban látható, hogy a függő és a független változók értékei hasonlóak bármely mérésből származó kísérleti adatokhoz, azonban a súlyfaktorok – amelyek megegyeznek a szórásnégyzetek reciprokával – három nagyságrendet is lefednek, miközben a legnagyobb *x*, illetve *y* érték is csak kb. ötszöröse a legkisebb mért értéknek. Az adatsor nagy előnye, hogy az illesztéssel kapható egzakt eredmények ismertek, ezért gyakran alkalmazzák új paraméterbecslő eljárások tesztelésére és a meglévő módszerek összehasonlítására [21].

x	w_x	y	w_y
0,0	1000,0	5,9	1,0
0,9	1000,0	5,4	1,8
1,8	500,0	4,4	4,0
2,6	800,0	4,6	8,0
3,3	200,0	3,5	20,0
4,4	80,0	3,7	20,0
5,2	60,0	2,8	70,0
6,1	20,0	2,8	70,0
6,5	1,8	2,4	100,0
7,4	1,0	1,5	500,0

1. táblázat. A Pearson-adatsor kiegészítve a York által javasolt súlyfaktorokkal [19,20]. A súlyfaktorok megfelelnek az x, illetve y értékekhez tartozó szórásnégyzetek reciprokának

Korábban már említettük, hogy abban az esetben, ha a választott módszer megfelelően kezeli a függő és a független változó hibáját, akkor a végeredménynek invariánsnak kell lennie a változók szerepének felcserélésével szemben. A **2. táblázat**ból jól látható, hogy a szimplex módszeren alapuló lineáris illesztés eleget tesz ennek a követelménynek. Összehasonlítás céljából az általunk meghatározott paraméterek és becsült hibáik mellett más módszerekkel kapott illesztések eredményeit is feltüntettük. Ezek közül a Williamson–York-féle [22–24], illetve a Neri és munkatársai [25] által közölt eredmények tekinthetők egzaktnak, amelyekkel az általunk meghatározott paraméterek gyakorlatilag megegyeznek.

		Meredekség	Tengely-metszet
Jelen munka	y–x	–0,48053(7011)	5,4799(3561)
	x–y	–0,48053(7011)	5,4799(3561)
OLLS	y–x	–0,53958(4210)	5,7612(1890)
	x–y	–0,56589(4420)	5,8617(2160)
WLLS	y–x	–0,61081	6,1001
	x–y	–0,66171	6,4411
Williamson–York	y–x	–0,48053(7060)	5,4799(3590)
	x–y	–0,48053(7060)	5,4799(3590)
Neri és munkatársai	y–x	–0,48053	5,4799
	x–y	–0,48053	5,4799
Krane és Schecter [28] (iteratív GLLS)	y–x	–0,46345	5,3960
	x–y	–0,55049	5,8163

2. táblázat. A Pearson-adatsorra különböző illesztési és súlyozási technikákkal kapott paraméterek. A zárójelekben a paraméterek sztenderd hibái szerepelnek. Az irodalmi adatok a [21] hivatkozásból származnak

Michaelis–Menten-enzimkinetika

A lineáris, illetve nemlineáris regressziós problémák megoldására szánt numerikus módszer tesztelésére egy olyan enzimkinetikával foglalkozó problémát is választottunk, amely a jól ismert Michaelis–Menten-módszert alkalmazza. A példa részletes bemutatása megtalálható a [9] irodalmi hivatkozásban a mérési adatokkal együtt. A Michaelis–Menten-egyenlet (**XII.**) nemlineáris összefüggés a reakció kezdeti sebessége és a szubszrát koncentrációja között, amelyet gyakran használnak első közelítésként enzimkatalizált reakciók kísérleti adatainak kiértékelésére.

$$r = \frac{V_{max}[S]}{K_M + [S]} \qquad \textbf{XII.}$$

A **XII.** egyenletben r a kezdeti sebesség, V_{max} a maximális sebesség, $[S]$ a szubsztrátkoncentráció, K_M pedig a Michaelis-állandó. A **XII.** összefüggés inverze:

$$[S] = \frac{K_M r}{V_{max} - r} \qquad \textbf{XIII.}$$

A **XII.** és **XIII.** egyenletek linearizált formái közül most csak a Woolf–Lineweaver–Burk-alakot [12] mutatjuk be a **XIV.** egyenletben, az inverz formát pedig a **XV.** egyenletben.

$$\frac{1}{r} = \frac{K_M}{V_{max}}\frac{1}{[S]} + \frac{1}{V_{max}} \qquad \textbf{XIV.}$$

$$\frac{1}{[S]} = \frac{V_{max}}{K_M}\frac{1}{r} - \frac{1}{K_M} \qquad \textbf{XV.}$$

A **3. táblázat**ban látható kísérleti adatsorban $[S]$ a nikotinamid-mononukleotid szubsztrát koncentrációja mmol/dm^3-ben megadva, $SE([S])$ pedig a hozzárendelhető sztenderd hiba; r a nikotinamid-dinukleotid képződési sebessége μmol/(min·mg·enzim) egységben, $SE(r)$ pedig az ehhez tartozó hiba.

$[S]$, mmol/dm^3	$SE([S])$, mmol/dm^3	r, μmol/(min·mg)	$SE(r)$, μmol/(min·mg)
0,138	0,011	0,148	0,015
0,220	0,015	0,171	0,015
0,291	0,017	0,234	0,019
0,560	0,028	0,324	0,023
0,766	0,031	0,390	0,023
1,460	0,044	0,493	0,025

3. táblázat. A kísérleti enzimkinetikai adatok a [9] hivatkozás alapján

Annak érdekében, hogy a **XIV.** és a **XV.** összefüggéseket alkalmazhassuk, a *3. táblázat* adatait transzformálni kell. Ehhez Salter egyik cikkét hívhatjuk segítségül, amely a hibaterjedés számításával foglalkozik [26]. Az általa közölt formulákat alkalmazva az alábbi, **XVI.** és **XVII.** egyenletekkel adható meg a reciprok mennyiségek hibája.

$$SE(1/[S]) = SE([S])/[S]^2 \qquad \textbf{XVI.}$$

$$SE(1/r) = SE(r)/r^2 \qquad \textbf{XVII.}$$

A **4. táblázat**ban bemutatott adatokat a *3. táblázat* kísérleti adatainak transzformálásával nyertük: $1/[S]$ a szubsztrát koncentrációjának reciproka, $SE(1/[S])$ pedig ennek a sztenderd hibája, mindkettő dm^3/mmol egységben megadva, $1/r$ a nikotinamid-dinukleotid képződési sebességének reciproka (min·mg·enzim)/μmol egységben, $SE(1/r)$ pedig az ehhez tartozó hiba.

$1/[S]$, dm^3/mmol	$SE(1/[S])$, dm^3/mmol	$1/r$, (min·mg)/μmol	$SE(1/r)$, (min·mg)/μmol
7,2464	0,5776	6,7568	0,6848
4,5455	0,3099	5,8480	0,5130
3,4364	0,2008	4,2735	0,3470
1,7857	0,0893	3,0864	0,2191
1,3055	0,0528	2,5641	0,1512
0,6849	0,0206	2,0284	0,1029

4. táblázat. A transzformált kísérleti enzimkinetikai adatok

A *3.* és *4. táblázatokban* levő adatokra a legkisebb négyzetek módszerével végrehajtott illesztések eredményeit az **5. táblázat** mutatja: K_M a Michaelis-állandó mmol/dm^3-ben megadva, V_{max} pedig a maximális kezdeti sebesség μmol/(min·mg·enzim) egységben. A zárójelekben a paraméterek sztenderd hibái szerepelnek. Az irodalmi adatok a [9] hivatkozásból származnak. Látható, hogy a paraméterekre általunk kapott becsült értékek megegyeznek a [9] hivatkozásban közöltekkel. A becsült hibák viszont sok esetben eltérnek egymástól. Annak érdekében, hogy fényt derítsünk az eltérés okára, számítsuk ki a becsült hibákat analitikusan is a Salter munkájában [26] közölt hibaterjedési formula alapján.

A **XIV.** egyenletből behelyettesítve a **VII.** egyenletben szereplő a és b paraméterek helyére a megfelelő kifejezéseket, a következőt kapjuk:

$$a = \frac{K_M}{V_{max}} \qquad \textbf{XVIII.}$$

$$b = \frac{1}{V_{max}} \qquad \textbf{XIX.}$$

$$c = f(a,b) = \frac{a}{b} = K_M \qquad \textbf{XX.}$$

A sztenderd OLLS illesztés a következő eredményt adja:

$$\hat{a} = 0,75280 \pm 0,07815 \qquad \textbf{XXI.}$$

$$\hat{b} = 1,70845 \pm 0,30326 \qquad \textbf{XXII.}$$

$$\mathrm{Cov}(\hat{a},\hat{b}) = -0,01935 \qquad \textbf{XXIII.}$$

Alkalmazzuk a [26] hivatkozásban közölt hibaterjedési formulát a c paraméter szórásnégyzetének a meghatározására:

$$\mathrm{Var}(\hat{c}) = [grad\, f]^T \mathbf{V}\, grad\, f \qquad \textbf{XXIV.}$$

$$= \begin{pmatrix} 1/\hat{b} & -\hat{a}/\hat{b}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{Var}(\hat{a}) & \mathrm{Cov}(\hat{a},\hat{b}) \\ \mathrm{Cov}(\hat{a},\hat{b}) & \mathrm{Var}(\hat{b}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\hat{b} \\ -\hat{a}/\hat{b}^2 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{\mathrm{Var}(\hat{a})}{\hat{b}^2} + \frac{\hat{a}^2\mathrm{Var}(\hat{b})}{\hat{b}^4} - 2\frac{\hat{a}\,\mathrm{Cov}(\hat{a},\hat{b})}{\hat{b}^3}$$

$$= 0,00209 + 0,00612 + 0,00584$$

Ha a c paraméter sztenderd hibájának számítása során csak a **XXIV.** összefüggés első két tagját vesszük figyelembe, vagyis el-

Egyenlet sorszáma	Módszer	Jelen munka		Irodalmi adat	
		K_M, mmol/dm³	V_{max}, µmol/(min·mg)	K_M, mmol/dm³	V_{max}, µmol/(min·mg)
XIV.	OLLS	0,4406(1185)	0,5853(1039)	0,4406(906)	0,5853(1039)
	WLLS	0,5552(739)	0,6715(455)	0,5552(556)	0,6715(455)
	GLLS	0,5721(742)	0,6797(436)	0,5721(562)	0,6797(439)
XV.	OLLS	0,4891(1404)	0,6228(1219)	0,4891(1404)	0,6228(1219)
	WLLS	0,6190(557)	0,7016(246)	0,6190(558)	0,7016(247)
	GLLS	0,5721(742)	0,6797(436)	0,5721(750)	0,6797(439)
XII.	ONLS	0,5965(692)	0,6904(373)	0,5965(692)	0,6904(373)
	WNLS	0,5869(821)	0,6849(495)	0,5869(821)	0,6849(495)
	GNLS	0,5860(771)	0,6854(452)	0,5860(708)	0,6854(429)
XIII.	ONLS	0,6224(394)	0,7039(149)	–	–
	WNLS	0,5906(526)	0,6912(232)	–	–
	GNLS	0,5860(779)	0,6854(458)	–	–

5. táblázat. A 3. és 4. táblázat adatain a legkisebb négyzetek módszerével végzett illesztések eredményei. A zárójelekben a paraméterek sztenderd hibái szerepelnek. Az irodalmi adatok a [9] hivatkozásból származnak

hanyagoljuk az *a* és *b* paraméterek kovarianciáját, akkor a **XXV.** egyenletet kapjuk.

$$\mathrm{SE}(\hat{c}) = \sqrt{\mathrm{Var}(\hat{c})} = \sqrt{0,00209 + 0,00612} = 0,0906 \quad \textbf{XXV.}$$

Amennyiben viszont a paraméterek korreláltságáról sem feledkezünk meg, és a **XXIV.** egyenlet mindhárom tagját figyelembe vesszük, akkor a **XXVI.** összefüggéshez jutunk.

$$\mathrm{SE}(\hat{c}) = \sqrt{\mathrm{Var}(\hat{c})} = \sqrt{0,00209 + 0,00612 + 0,00584} = 0,1185 \quad \textbf{XXVI.}$$

Az *5. táblázatból* kiderül, hogy a módszerünk pontosan ugyanezt az eredményt szolgáltatja. Hasonlóan végrehajtott számításokkal igazolható, hogy valamennyi, általunk numerikusan elvégzett hibabecslés helyes eredményt ad.

Figyelembe véve, hogy jó modell esetén nincs jelentősége annak, hogy mit tekintünk függő, illetve független változónak – a változók felcserélésével ugyanazt az eredményt kell kapnunk – értékelhetjük a különböző paraméterbecslő eljárásokat. A számításaink eredményét áttekintve látható, hogy mind a GLLS, mind pedig a GNLS módszer ugyanarra az eredményre vezet, ha az inverz összefüggésekről van szó (lásd az *5. táblázat* 3. és 6., illetve 9. és 12. sorát).

Ugyanez azonban nem mondható el az irodalmi adatokról, ahol az inverz összefüggésekkel végzett illesztések eredménye eltér egymástól. Érdemes megemlíteni, hogy a szerző, D. P. Chong éles kritikát fogalmaz meg [9] cikkében a vegyészekkel szemben annak kapcsán, hogy a fizikai-kémiai problémák megoldásakor linearizált összefüggéseket használnak anélkül, hogy figyelembe vennék a linearizálás torzító hatását. Mindazonáltal a Chong által végrehajtott regressziós analízis sem tekinthető helyesnek, hiszen a változók szerepének a felcserélésével szembeni invariancia általában nem teljesül.

6. táblázat. Az abszolút zérus hőmérséklet meghatározásához felhasznált mérési adatok (a [27] hivatkozás alapján) és az egyedi, illetve a globális legkisebb négyzetek módszerével becsült paraméterek. A globális illesztésből származó abszolút zérus hőmérséklet félkövéren szedve látható

Adatsor	Hőmérséklet, °C	Nyomás, torr	Abszolút zérus hőmérséklet, °C	Meredekség
1	50	599	–277,4 ± 7,2	1,8471 ± 0,0549
	0	512		
	–70,5	394		
	–195,8	145		
2	50	399	–274,5 ± 4,8	1,2393 ± 0,0247
	0	341		
	–69,5	259		
	–195,8	95		
3	50	203	–271,1 ± 2,9	0,6347 ± 0,0079
	0	172		
	–69	130		
	–195,8	47		
Globális	–	–	**–276,1 ± 3,2**	1,8562 ± 0,0259
	–	–		1,2317 ± 0,0194
	–	–		0,6225 ± 0,0142

Az abszolút zérus hőmérséklet meghatározása

A harmadik példában az abszolút zérus hőmérsékletet határozzuk meg lineáris modellfüggvényt használva. A kísérletekben gázminták nyomását mérték különböző hőmérsékleteken [27]. A mért nyomást a hőmérséklet függvényében ábrázolva egyenest kapunk, amelynek az x-tengellyel való metszete megadja az abszolút 0 hőmérsékletet. A feladat érdekességét az adja, hogy ebben az esetben globális illesztést hajtunk végre. Ugyanis a mérést különböző mennyiségű vagy anyagi minőségű gázzal végrehajtva a kapott egyenesek meredeksége eltérő, az x-tengelymetszet viszont minden esetben azonos lesz.

A paraméterbecsléshez három nyomás-hőmérséklet adatsort használunk, ezek mindegyike négy mérési pontot tartalmaz, a gáz mennyisége az első adatsortól a harmadikig fokozatosan csökken. A **6. táblázat**ban láthatók a mérési adatok, valamint az egyedi lineáris és a globális illesztésből kapott paraméterek a becsült hibákkal együtt. Összevetve az eredményeinket a [27] hivatkozásban közölt eredményekkel elmondhatjuk, hogy a kétféle módszerrel kapott paraméterek és becsült hibáik gyakorlatilag megegyeznek.

IRODALOM
[1] Tasi, Gy., Matematikai kémia. JATEPress, Szeged 2009.
[2] Tasi, Gy., Számítógépes kémia. JATEPress, Szeged 2010.
[3] Wilson, E.B., Jr., An Introduction to Scientific Research. Dover Publications, New York 1990.
[4] Plackett, R.L., Biometrika (1972) 59, 239.
[5] Stigler, S.M., Annals of Statistics (1981) 9, 465.
[6] Deming, W.E., Statistical Adjusment of Data. John Wiley & Sons, New York 1943.
[7] Wolberg, J., Prediction Analysis. Van Nostrand, Princeton 1967.
[8] Powell, D.R., J.R. Macdonald, Computer J. (1972) 15, 148.
[9] Chong, D.P., J. Chem. Educ. (1994) 71, 489.
[10] Irvin, J.A., T.I. Quickenden, J. Chem. Educ. (1983) 60, 711.
[11] Scatchard, G., Annals of the New York Academy of Sciences (1949) 51, 660.
[12] Lineweaver, H., D. Burk, J. Am. Chem. Soc. (1934) 56, 658.
[13] Motulsky, H. J., A. Christopoulos, Fitting Models to Biological Data Using Linear and Nonlinear Regression. A practical guide to curve fitting. GraphPad Software Inc., San Diego CA 2003.
[14] Balabin, R.M., J. Phys. Chem. A (2009) 113, 1012.
[15] Balabin, R.M., J. Phys. Chem. A (2009) 113, 4910.
[16] Nelder, J.A., R. Mead, Computer J. (1965) 7, 308.
[17] Phillips, G.R., E.M. Eyring, Anal. Chem. (1988) 60, 738.
[18] Abramowitz, M., I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions. Dover Publications, New York 1972.
[19] Pearson, K., Philos. Mag. (1901) 2, 559.
[20] York, D., Can. J. Phys. (1966) 44, 1079.
[21] Cantrell, C.A., Atmos. Chem. Phys. (2008) 8, 5477.
[22] Williamson, J.A., Can. J. Phys. (1968) 46, 1845.
[23] York, D., Earth and Planet, Sci. Lett. (1969) 5, 320.
[24] York, D., et al., Am. J. Phys. (2004) 72, 367.
[25] Neri, F., G. Saitta, S. Chiofalo, J. Phys. E: Sci. Inst. (1989) 22, 215.
[26] Salter, C., J. Chem. Educ. (2000) 77, 1239.
[27] Salter, C., J. Chem. Educ. (2003) 80, 1033.
[28] Krane, K.S., L. Schecter, Am. J. Phys. (1982) 50, 82.

ÖSSZEFOGLALÁS

Barna Dóra–Gyevi-Nagy László–Tasi Gyula: Linearizálni vagy nem linearizálni: paraméterek hibaterjedésének analitikus és numerikus számítása

A hibabecsléssel kiegészített szimplex módszer kiválóan alkalmazható kísérleti adatoknak a legkisebb négyzetek módszerén alapuló regressziós analízisére. A sztenderd hibák gyors és pontos meghatározásához azonban az analitikus vagy a numerikus úton számított Hesse-mátrixra, illetve az ebből levezethető variancia-kovariancia mátrixra van szükségünk. Ebből azután a becsült paraméterek varianciája és kovarianciája is meghatározható. Az így kapott numerikus módszer megoldást kínál számos, a kémia körébe tartozó paraméterbecslési problémára.

IUPAC–ThalesNano Prize in Flow Chemistry

A ThalesNano Zrt. és az IUPAC közös díjat alapított az áramlásos kémia területén kifejtett szakmai teljesítmény elismerésére.

A ThalesNano Zrt. és az Áramlásos Kémiai Tudományos Társaság (Flow Chemistry Society) ezúton jelenti be, hogy az IUPAC (The International Union of Pure and Applied Chemistry) és a ThalesNano Zrt 2011 nyarán megalapította az „IUPAC–ThalesNano Prize in Flow Chemistry" elnevezésű díjat, amely

7500 USD

értékű jutalommal jár.

A díj a ThalesNano Zrt. kezdeményezésére jött létre, és alapvető célja az áramlásos kémia kulcsfontosságú szerepének elismerése a kémiai tudományok fejlődésében. A díjra olyan nemzetközileg elismert kutató jelölhető – akár a tudományos, akár az ipari területről –, akinek munkássága, közvetlenül vagy publikációi által, kimagaslóan hozzájárult az áramlásos kémia fejlődéséhez. A jelölést 5 további támogató megnevezésével

2012. január 31-ig

kell benyújtani az IUPAC titkárságára (secretariat@iupac.org). A díj odaítéléséről az IUPAC által erre kijelölt bizottság dönt az ajánlások alapján. A jelölés módjáról és az elbírálásról a részletek az IUPAC aktuális honlapján találhatóak:

http://www.iupac.org/web/nt/2011-09-29_2012_IUPAC-ThalesNano_prize.

Bízunk benne, hogy ez az újonnan alapított díj hozzájárul az áramlásos kémia hazai és nemzetközi elterjedéséhez és elismeréséhez.

2012 IUPAC–Richter Prize in Medicinal Chemistry

Call for Nominations

The 2012 IUPAC-Richter Prize will be presented in May 2012 at the ACS National Medicinal Chemistry Symposium at the University of Arizona, Tucson, where the recipient will also give a plenary lecture on the subject of his/her research. The recipient is required to repeat the lecture at a medicinal chemistry Symposium in Europe.

It is anticipated that a contribution will be made to travel expenses but this cannot be guaranteed.

The prize is to be awarded to an internationally recognized scientist, preferably a medicinal chemist, whose activities or published accounts have made an outstanding contribution to the practice of medicinal chemistry or to an outstanding example of new drug discovery.

Prize USD 10 000

The Prize has been established by a generous gift from the **Chemical Works of Gedeon Richter PLC.** (Budapest, Hungary) to acknowledge the key role that medicinal chemistry plays in improving human health.

Applicants should be received by NOMINATION only, with just one person needing to serve in that capacity, al-though a total of five (5) individuals should be listed as referees overall. The package must be submitted electronic-ally and should contain a complete resume, a professional autobiography of not more than two pages, and a one-page summary of what the individual considers to be his/her activities, accomplishments and/or publications that have had the most significant impact upon the field of Medicinal Chemistry. The material will be forwarded confidentially to an independent selection committee appointed by the IUPAC Subcommittee on Medicinal Chemistry and Drug Development.

The call for nominations for the 2012 IUPAC-Richter Prize is now open.

Deadline 31 December 2011

For further information, please contact Professor C. Robin Ganellin at c.r.ganellin@ucl.ac.uk. Nomination materials should be submitted by 31 December 2011 to IUPAC Secretariat by email at: secretariat@iupac.org. Telephone: +1 (919) 485 8700 Fax: +1 (919) 485 8706

Dancsó Éva
Budapesti Eötvös József Gimnázium

Kémiaoktatás a Reáltanoda utcában

Múltunkról

Budapest V. kerületében egy szűk kis utca a benne működő nagy múltú iskoláról kapta a nevét. 1854-ben alapították a pesti főreáliskolát, amely a főváros első nem felekezeti középiskolája volt. 1861-től a Reáltanodában már magyar nyelvű oktatás folyt. Az első magyar tantestületben a vegytant a kor híres borásza, Preysz Móric tanította. 1875-ben nyolcosztályos reáliskolává alakult az intézmény. 1934-ben az új oktatási törvénynek megfelelően a reáliskolák nyolcosztályos gimnáziummá alakultak. Ebben a korszakban vette föl az iskola Eötvös József nevét. 1946-tól ismét új oktatási struktúrát vezettek be: négyosztályos gimnáziumi oktatás indult, amely 1992-ben két, hat évfolyamos osztállyal bővült.

Az iskola mindig büszkén ápolta hagyományait, a német nyelv és a reáliák magas színvonalú oktatása az Eötvös József Gimnáziumban ma is elsőbbséget élvez. A gimnázium hat párhuzamos osztálya közül két, négy évfolyamos osztály kimondottan reál érdeklődésű diákokat vonz, az általános tantervű hat évfolyamos osztályok diákjainak is legalább a fele a reáliák irányában találja meg fő érdeklődési területét.

Az iskola homlokzata

Tárgyi feltételek

Az intézmény fenntartói mindig nagy súlyt helyeztek a tárgyi feltételek biztosítására. Az épületben jelenleg egy előadó, egy laboratórium és egy szertár szolgálja a kémia tanítását. A közelmúltig a fogyóeszköz- és vegyszerellátás is jónak volt mondható. Az utóbbi időben egyre jobban figyelünk a fölszámolt laborokból és szertárakból ajándékként beszerezhető eszközökre és anyagokra. A vegyiparban dolgozó szülők és régi diákok természetbeni adományokkal tudják segíteni az intézményt. Más szülők az iskolai alapítványon keresztül pénzadományokkal támogatják az iskolát. Ennek köszönhetően az egyre nehezedő gazdasági helyzetben is sikerült megőrizni a diákok számára a kísérletező tanítás élményeit.

Személyi feltételek

Pillanatnyilag hat fő tanít aktívan kémiát. Ebből egy kolléganő jövőre nyugdíjba készül. Két kismamát várunk vissza a következő tanévre. A munkaközösségből három pedagógus szakvizsgával rendelkezik, ketten rendszeresen érettségiztetnek emelt szinten. Mindannyian folyamatosan részt veszünk különböző továbbképzéseken, konferenciákon. Két kollégánk tagja a Kutató Tanárok Országos Egyesületének.

Az iskolánkban ma működő osztálytípusok

Jelenleg két, hat évfolyamos osztályunk van (A és B). Az idejáró diákok általános tanterv szerint tanulnak minden tantárgyat, és a 11–12. évfolyamon van módjuk fakultációs órák keretében alaposabban elmélyülni az általuk választott tudományágakban.

Az E osztály öt évfolyamos angol–német nyelvi irányultságú. A kilencedik évfolyamon, amit mindenki csak „nulladikként” emleget, elsősorban a nyelveket tanulják, de emellett csekély óraszámban a szinten tartás kedvéért más tárgyakat is tanulnak, például heti két órában természettudományt. Tananyaguk elsősorban kísérletezés, a természettudományos megközelítés és látásmód megismerése. Ezt a kurzust a fizikusokkal közösen tanítjuk. A következő két évben a középiskolás általános és szerves kémiát tanulják, 12–13. osztályban pedig ők is fakultálhatnak kémiából. A 13. évfolyamon jutnak el az érettségiig.

C osztályunk matematika és angol irányultságú. Ezt a két tantárgyat tanulják emelt óraszámban, de a természettudományok valamennyi ága népszerű ebben az osztálytípusban.

A D osztályban a diákok emelt óraszámú természettudományos képzésben részesülnek. A tizedik év végén magabiztosabban mozognak a fizika, a kémia és a biológia világában, mint más osztályokba járó társaik, ezért általában külön fakultációs csoportot szervezünk a számukra az utolsó két évfolyamon.

Az F osztály diákjai humán tagozatosak. A legfőbb tantárgyaik a magyar, a történelem, a művészettörténet és az angol, de a 11–12-es évfolyamon a kémia fakultációs képzés előttük is nyitva áll.

Az **1. táblázat** a kémia tantárgy heti óraszámairól és a csoportbontásokról tájékoztat.

Az *1. táblázatból* kiolvasható, hogy hat évfolyamos diákjaink és a természettudományos osztályba járó D-sek tanulmányaik során végig, reál irányultságú C osztályosaink pedig 9. évfolyamon csoportbontásban, tehát 15–17 fős csoportokban tanulják a kémiát. Többen nem is férnek el a laboratóriumban. Ez a létszám jó lehetőséget ad a kísérletező kémiaoktatásra.

Középiskolai tanulmányaik utolsó két évében valamennyi diákunk választhatja a kémia fakultációt az utolsó előtti évfolyamon heti két, az utolsó évfolyamon heti négy órában.

Motiválás

Már hetedikben igyekszünk fölkelteni a diákok érdeklődését a természettudományok iránt. Minden tanévben három napon úgynevezett témanapot tartunk. Ilyenkor reggeltől délig minden tanítási órán ugyanazzal a tantárggyal foglalkozunk. A hetedikesek számára ezek a napok először kémiáról, második alkalommal biológiáról, harmadszor pedig matematikáról szólnak. Az órák azonban nagyon eltérnek a megszokottaktól. Csoportokban foglalkoztatjuk a diákokat. A kémia és a mindennapi élet kapcsolatára igyekszünk rávilágítani. Kolloidikát tanítunk puding és tejszínhab készítése közben, falazunk, vakolunk, szappant főzünk. Népszerű órák ezek a gyerekek körében.

Felkészülés a továbbtanulásra

Az érettségi vizsgákra a fakultációs órákon készülnek fel a diákok. Mint a név is mutatja, ezeket a tárgyakat bizonyos feltételek mellett szabadon vehetik föl, az, hogy milyen csoportok indulnak, elsősorban a jelentkezők számától függ. Hosszú évek óta két fakultációs csoportot tudunk indítani, mivel a kémiát választók létszáma 30–40 fő között mozog. A tizenegyedik évfolyamon az általános kémia rendszerező, bővítő ismétlése és a feladatmegoldó rutin jelentős növelése a program. Tizenkettedikben a leíró kémia bővítő, rendszerező ismétlése a cél, valamint az érettségi rutin megszerzése. Az utolsó hónapokban írásbeli és szóbeli próbavizsgákat szervezünk közép- és emelt szinten is. Mindkét vizsgaszint valamennyi kísérletét elvégezzük, megbeszéljük. Diákjaink körében emelt szinten ritka a 100 megszerezhető pontból a 90 pont alatti írásbeli dolgozat, de a középszintű teljesítmények leggyengébbjei is elérik a jó osztályzatot. Kémiából érettségiző diákjaink többsége az első helyen megjelölt egyetemre vagy karra nyer felvételt.

Évente nagyjából 180 fő érettségizik iskolánkban. Közülük csupán 3–4 diák jelentkezik a TTK vegyész szakára vagy vegyészmérnöki képzésre. Hozzávetőleg ugyanennyien biológus- vagy környezetmérnöknek készülnek. Általában 1–2 diákunk választja a gyógyszerész-, állatorvosi vagy biológusképzést. A kémia fakultációt választó diákok túlnyomó többsége orvosi egyetemre készül. 2001 óta még senki nem akart kémia szakos tanár lenni.

1. táblázat. Heti óraszámok

Osztály/ évfolyam	A általános	B általános	C matematika–angol	D természet-tudományos	E angol–német	F humán
7.	2 óra cs.b.	2 óra cs.b.				
8.	2 óra cs.b.	2 óra cs.b.				
9.	2 óra cs.b.	2 óra cs.b.	2 óra cs.b.	3 óra cs.b.	1 óra cs.b.	2 óra
10.	2 óra cs.b.	2 óra cs.b.	2 óra	2,5 óra cs.b.	2 óra	2 óra
11.	2 óra fakt.	2 óra fakt.	2 óra fakt.	2 óra fakt.	2 óra	2 óra fakt.
12.	4 óra fakt.	4 óra fakt.	4 óra fakt.	4 óra fakt.	2 óra fakt.	4 óra fakt.
13.					4 óra fakt.	

cs.b.: csoportbontás fakt.: fakultációs óra

Pályaorientáció

Idestova harmadik éve működik nálunk a „Pálya Program”. Az ötletgazda és az egész projekt működtetője iskolapszichológusunk, Szabó Csilla. Szülői értekezleteken összegyűjti azoknak a szülőknek, nagyszülőknek, rokonoknak az elérhetőségét, akik hajlandóak egy-egy délutáni foglalkozás keretében mesélni munkájukról, esetleg meg tudják szervezni, hogy diákok látogassanak a munkahelyükre. Sokan nem is gondolnák, hogy a diákok családtagjai milyen szívesen mutatják be saját szakterületüket. A természettudományos és mérnöki pályák is gyakran szerepeltek ebben a programban. Ez segít nekünk abban is, hogy üzemlátogatásokat tehessünk. Kisebb-nagyobb létszámú érdeklődő csoporttal meglátogattunk gyógyszergyárakat, gázgyárat, meteorológiai intézetet, műanyagfeldolgozó üzemet, hulladékfeldolgozó vállalatot. A közszolgáltatást végző intézményekben, mint amilyen a Fővárosi Vízművek, a Fővárosi Csatornázási Művek, a Paksi Atomerőmű, mindig szívesen látott vendégek voltunk.

Hasonlóképpen fontosnak tartjuk, hogy diákjaink megismerjék a kutatók munkáját. Amióta az MTA Kémiai Kutatóközpont nyaranta „Aki kíváncsi kémikus” tábort szervez a középiskolás diákoknak, iskolánkból minden évben egy vagy két fiatal ad be sikeres pályázatot és nyeri el a táborban való részvétel jogát. Minden évben ellátogatunk vidéki egyetemekre, intézetekbe is. Diákjaink számára emlékezetes élmény a Szegedi Tudományegyetem, a Debreceni Egyetem, illetve az egri Eszterházy Károly Főiskola kémiai tanszékeinek megismerése, vagy az MTA Biológiai Kutatóközpontjában, az MTA Kísérleti Orvostudományi Kutatóintézetének és az MTA Atommagkutató Intézetének jó néhány laboratóriumában tett látogatás. Ezek a látogatások segítenek kialakítani a természettudományok egységes szemléletét, hiszen az iskolán kívüli világban már nem tantárgyakban kell gondolkozni. Például a biológiai kutatás jelentős részben kémiai és fizikai kísérletek sokasága és matematikai statisztika alkalmazása.

A legszorosabb kapcsolatunk természetesen a közeli egyetemekkel van. A SOTE partnerintézménye vagyunk. Gyakran van módunk a BME laboratóriumainak meglátogatására, és rendszeresen részt veszünk az ELTE nyílt laboratóriumi programjain.

Diákjaink több ajándék pólót begyűjtöttek már az „Alkímia ma” előadásokon.

Soha nem feledkezünk meg a „Kutatók éjszakájáról” sem.

Pályaorientációs munkánk lényegét tehát úgy lehetne összefoglalni, hogy mindent megteszünk azért, hogy a gyerekek minél több orvos, gyógyszerész, mérnök és vegyész munkáját ismerjék meg.

Kémiaórán

Tehetséggondozás

Iskolánk tehetségpontként való akkreditációja most zajlik. Minden igyekezetünkkel azon vagyunk, hogy megtaláljuk és fölkaroljuk a kémia tantárgyban tehetséges diákokat. A tehetséggondozás eszköztárából a gyorsítást és a dúsítást alkalmazzuk.

A gyorsításra az is rákényszerít bennünket, hogy az Irinyi János Kémiaversenyen a kilencedikesektől már a márciusi fordulóban gyakorlatilag ugyanazokat az ismereteket kérik számon, mint amelyeket a tizenkettedikesektől az OKTV döntőjében. Szerintünk ugyan ez nem tesz jót a verseny népszerűségének, de alkalmazkodunk hozzá. Arra is van példa, hogy egy tehetséges diák a tizedik év előtt osztályozó vizsgát tesz szerves kémiából azért, hogy az OKTV-n is kipróbálhassa oroszlánkörmeit. Eddig három diákunk összesen öt ízben jutott ki a Nemzetközi Kémiai Diákolimpiára. Pál András egy arany-, Vass Márton két ezüst- és Sveiczer Attila szintén két ezüstéremmel gazdagította a magyar csapatok sikerlistáját. Az olimpiai felkészülés is a gyorsítás jegyében zajlik. Ahhoz, hogy valaki bekerülhessen az olimpiai csapatba, minél korábbi életkorban célszerű részt vennie a kéthetes egyetemi felkészítő tanfolyamon. Az ehhez vezető út a Kökél levelező versenye, vagy a megfelelő OKTV-eredmény.

A tananyag dúsításának legfőbb színtere a szakkör, amit minden évfolyam számára működtetünk. Az idei tanévtől kezdve hetedikes és nyolcadikos szakköreinket bárki látogathatja az iskolán kívülről is, szeretettel várjuk a kémia iránt érdeklődő gyerekeket. A foglalkozások október első hetében kezdődnek, de később is bármikor lehet csatlakozni. A tehetséggondozó szakkör ingyenes.

A hetedikes szakkör célja a kémia iránti érdeklődés fölkeltése. Szeretnénk megtanítani a gyerekeknek azt, hogy mi módon tehetünk föl a körülöttünk lévő világról értelmes kérdéseket, hogyan tervezzük meg a kísérleteinket, hogyan végezzünk megfigyeléseket, és milyen egyszerű magyarázatok adhatók a megfigyelt jelenségekre. Tehát a hetedikes szakkör fő profilja a kísérletezés. Azért nem feledkezünk el a matematikai kompetenciák kémiában való hasznosításáról sem. A kémiai számítások a korosztály számára kiírt Hevesy György Kémiaversenyre való fölkészülést is segítik. A foglalkozások kezdésének időpontja csütörtök délután 14 óra 45 perc.

A nyolcadikos szakkör még mindig sok kísérlettel, játékkal, és számítási feladatok segítségével igyekszik közelebb hozni a leíró kémiát a diákokhoz. Keddi napokon délután 14 óra 45 perckor kezdődik.

A felsőbb osztályosok szakkörei már nem föltétlenül évfolyamok szerint szerveződnek. Előfordul, hogy egy előző évben Irinyi-versenyen döntős tizedikes diák és egy olyan tanuló, aki épp most kötelezte el magát a tantárgy mellett, valamelyik fakultációs csoportban hasonló szinten van, és ugyanabba a csoportba jár. A tizenegyedikeseknek különösen javasolt a szakkör látogatása, mivel ebben az évfolyamban a heti két óra nagyon kevés az érettségire való felkészüléshez. Az is előfordul, hogy egy-egy évfolyam különböző osztályainak több kolléga is tart szakkört eltérő időpontokban. Minden évben van kutató diák szakkörünk is. Hetedikestől tizenkettedikesig bárki vállalkozhat kutatómunkára. Ha az ifjú kutató már annyira elmélyült a témájában, hogy az iskola anyagai vagy eszközei határt szabnak a további munkának, kivétel nélkül mindig találunk gyári, intézeti vagy egyetemi mentort a további kutatáshoz. Az iskolának van egy házi versenye is ebben a témában, melynek KEDV a címe: Kutató Eötvös Diákok Vándordíja. Mindig nagy érdeklődés kíséri ezt a programot.

Eredményeink

Az utóbbi tíz évre visszatekintve a következő eredményekről adhatunk számot: Évente átlagosan harminc kémia érettségi. Eddig kétharmad részben középszintű vizsgákat tettek diákjaink, de az orvosi egyetem követelményrendszerének változása ezt a jövőben az emelt szintű vizsgák felé fogja elmozdítani. Régi diákjaink még hosszú évekig visszajárnak hozzánk. Ilyenkor beszámolnak gondjaikról, örömeikről és hajdani évfolyamtársaikról. Innen tudjuk, hogy az Eötvös-diákok nem szoktak lemorzsolódni a kreditrendszer útvesztőiben.

A kémiaigényes szakmákban végzett diákjaink sikeresen elhelyezkedtek. Többen doktori iskolákban folytatják tanulmányaikat.

A különböző kémiaversenyeken is sikereket érnek el tanulóink. A **2. táblázat** foglalja össze az utóbbi tíz év eredményeit.

Tanulóink – az utóbbi tíz évben tizenöten – rendszeresen részt vesznek az Országos Diákvegyész Napokon Sárospatakon és Miskolcon, valamint a Pécsi Kémikus Diákszimpóziumokon. Ezeken az eseményeken is számos elismerés éri őket.

2. táblázat. Versenyeredmények

Curie Kémia Emlékverseny	1 diák a döntőben	1. helyezés
Hevesy György Kémiaverseny	7 diák a döntőben	2., 3., 5., 5., 6., 19., 23. helyezés
Irinyi János Kémiaverseny	12 diák a döntőben	1., 2., 2., 2., 5., 6., 7., 7., 7., 15., 18., 26. helyezés
OKTV	12 diák a döntőben	1., 1., 2., 2., 9., 9., 9., 14., 23., 23., 25., 26. helyezés
Nemzetközi Kémiai Diákolimpia	10 diák az előkészítő tanfolyamon	4 ezüstérem
KUTDIÁK országos verseny	5 diák a döntőben	3 különdíj
Hlavay-versenyek	5 diák a döntőben	1 első díj

Ezek a rendezvények nemcsak a résztvevők kémiatudását gazdagítják. Mivel itt előadást kell tartani, a természettudományos érdeklődésű fiatalok, akik többnyire nem a szavak emberei, rákényszerülnek, hogy szépen, szabatosan fejezzék ki magukat.

Tanulóink részt vesznek a Kökél, illetve a VegyÉsztorna feladatmegoldó versenyeken. Az itt megjelent feladatsorok gyakran kisebb-nagyobb irodalomkutatásra is kényszerítik őket.

A kémia éve az Eötvösben

A kémia éve alkalmából a 2010–11-es tanévben havonta egy kísérleti bemutatóval színesített délutáni előadást tartottak a szakkörös diákok. Ezeknek az előadásoknak a témája általában jelentősen meghaladta a középiskolás tananyagot, és mindenki beleadta kedvenc területéről gyűjtött ismeretanyagát. Tervezzük, hogy ezt a programot ebben a tanévben is folytatjuk. A jubileumi év alkalmából számos érdekes, új versenyt hirdettek meg. Sajnos igen sok megmérettetés a tanév végére csúszott, és bizony néha nagy erőfeszítést jelentett megfelelni a követelményeknek. Ugyanakkor az újszerű feladatok csábítóak voltak.

A természettudományok ifjú művelői nem szószátyárak. Ez akkor is megmutatkozott, amikor a Magyar Vegyipari Szövetség „Kell nekünk vegyipar?” című eszszépályázatára nem a kémia iránt érdeklődő, hanem a humán érdeklődésű diákok adtak be pályamunkákat, amelyekkel két különdíj mellett a fődíjat is elnyerték.

A tanév végének másik nagy izgalma a televízió Delta műsorának „Atomok itt, molekulák ott, kémia az egész világ” című versenye volt, amely az osztálykirándulásokkal és a matematikai tehetséggondozó táborral is ütközött, de nagyon ötletes feladatokat tartalmazott, valamint lehetővé tette, hogy a fiatalok megismerjék, hogy a televíziós forgatás valóban úgy folyik-e, ahogyan kívülállóként elképzelték. (Majdnem.) Végül sikerült bejutni a döntőbe, ahol második helyezést ért el a csapat. Ennek a játéknak az izgalmairól maguk a versenyzők írtak összefoglalót a Kökél legfrissebb számában.

A Delta vetélkedőjének is részfeladata volt egy film elkészítése. Ebbe a tevékenységbe úgy belejött a kis csapat, hogy egy újabb munkával menten benevezett a „Show your science” videofilm-feltöltő versenybe, ahol 2. helyezést ért el, az ezt követő „tudás-feltöltés” meghívásos versenyt pedig megnyerték a filmes csapatunk tagjai.

Összefoglalás

Az Eötvös József Gimnáziumban, a hajdani Reáltanodában nagy hagyománya van a reáltárgyak alapos oktatásának. Még a mai nehéz időkben is igyekszünk megteremteni a magas színvonalú oktatás megfelelő tárgyi feltételeit.

Két reál irányultságú négy évfolyamos osztályunk, hat évfolyamosainknak legalább fele és még humán osztályaink tanulóinak is 5–10%-a természettudományos, orvosi vagy mérnöki pályán képzeli el a jövőjét. Ezek közül a pályák közül jó néhány kémiaigényes foglalkozás. Ezért hetedikes koruktól kezdve igyekszünk a diákok kémia iránti érdeklődését fölkelteni és ébren tartani. Sok-sok szorgalmas munkával tehetséges diákjaink még országos és nemzetközi szinten is szép eredmények elérésére képesek. Azon fáradozunk, hogy tehetségeink ne kallódjanak el, kapjanak meg minden segítséget, ami képességeik kibontakoztatásához szükséges.

Mindezek mellett nem feledkezhetünk meg azokról sem, akiknek a természettudományok iránti érdeklődése átlagos. A kémia tanítási órákon ők is el kell jussanak egy olyan szintre, hogy biztonságosan eligazodjanak a háztartásban és másutt őket körülvevő kémia világában. Ne legyenek becsaphatók áltudományos maszlagokkal, és ésszerűen védjék a környezetük értékeit. Nagy segítség ehhez a Kémia Nemzetközi Éve. Kár, hogy hamarosan a végéhez közeledünk.

Kutrovácz László – Schróth Ágnes

ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskola

„Mint a pedagógia kísérleti állomása, a gyakorlóiskola a legnagyobb hatással volt a középiskolai tanítás módszereinek újjáalakítására. Közoktatásügyi alkotásaink között a gyakorlógimnázium az egyetlen teljesen eredeti, mellyel a legműveltebb államokat is megelőztük, és a külföldön nemcsak mély érdeklődést, hanem meleg elismerést is szereztünk.”

(Beőthy Zsolt, a tanárképző intézet igazgatója a XIX. század végén)

Az iskola homlokzata

Az ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskolát – illetve jogelődjeit – 1872-ben azzal a céllal alapították, hogy színtere legyen a leendő középiskolai tanárok felkészítésének.

Mint a kezdő idézet is mutatja, a tanárképzésnek ez a fontos intézménye egész Európában új pedagógiai elgondolásnak számított. Az intézmény létrejöttében kiemelkedő szerepe volt Kármán Mórnak, Eötvös Józsefnek és Trefort Ágostonnak. Az iskola – három tanév kivételével – alapítása óta az ELTE tanárképző intézménye. 1957-ben az iskola névadója Ságvári Endre lett, 1991-ben iskolánk Trefort Ágoston nevét vette fel.

A kiemelkedő szakmai tudású és módszertani felkészültségű tanárok példájából

merítve indultak tanári pályájukra a tanárjelöltek. Innen ered az iskolának az 1950-es évekig közismert neve, a „Minta". Napjainkig hagyománynak tekinthető, hogy a tanári karból mindig voltak, akik az egyetemi oktatásban is részt vettek, és a tanítás mellett tudományos munkát folytattak. Diákjaink számára változatosságot jelent, de egyben alkalmazkodóképességet kíván tőlük, hogy rendszeresen „kistanárok" tanítják őket minden félévben néhány héten keresztül.

Kémiából hosszú évekig a három vezetőtanárnál, valamint külső intézményként a Fazekas Mihály Fővárosi Gyakorlóiskolában félévenként 12–15 tanárjelölt gyakorolt. A 2000-es évek közepétől a tanárjelöltek száma folyamatosan csökkent, és napjainkban már csak 2 –3 hallgató végzi szakos tanítási gyakorlatát iskolánkban évente, a külső gyakorlóhelyet évekkel ezelőtt meg is kellett szüntetni. Hasonló tendencia figyelhető meg a többi természettudományos tantárgy esetében is. Ez a helyzet előrevetíti, hogy kémiából várhatóan milyen tanárhiány lesz, ha egy nagy létszámú kémiatanári korosztály nyugdíjba megy.

A kémia munkaközösség feladatai közé tartozik a kémiatanár szakos tanárjelöltek iskolai tanítási gyakorlatának vezetése is. Ők koordinálják a jelöltek iskolai életét. A vezetőtanárnál és egyéb kollégáknál való hospitálások során a jelöltek megismerkedhetnek a legújabb tanítási és tanulásszervezési módszerekkel. A sokrétű, változatos és eredményes oktatási példákat látva a „kistanárok" kialakíthatják saját módszertani eszköztárukat, amelyet aztán élesben is kipróbálhatnak az általuk tartott tanórákon. A visszajelzések alapján sok jelöltünk az itteni gyakorlat során erősödött meg hivatástudatában, és választotta végül a tanári pályát.

Az iskola épületét több lépcsőben kibővítették, az oktatás szerkezete is változott. A ma is működő, önálló kémia szertár és előadó a hatvanas évek közepén, az emeletráépítés során épült. Az ötvenes években az eredetileg nyolcosztályos fiúgimnáziumból tizenkét osztályos (8+4) koedukált iskola lett. Mivel a középiskolai tanárképzés színtere a felső tagozatos és a gimnáziumi osztályok voltak, az alsó tagozat megszűnt, majd 1994-től fokozatosan hat évfolyamos gimnáziummá alakult az iskola. Mind a négyosztályos, mind a hatosztályos gimnáziumi rendszer három–három párhuzamos osztállyal szerveződött.

A hetvenes években bevezetett fakultációs rendszerben a természettudományos tantárgyak, így a kémia is, jelen voltak. Az iskolában – mindenki számára kötelezően – öt éven keresztül heti két órában tanítottak kémiát, és ehhez kapcsolódott két éven keresztül csoportbontásban heti két óra fakultáció, valamint egy komoly, egymásra épülő szakköri rendszer. Sok diákot érdekeltek a természettudományos tárgyak. A kémia szertárban komoly műhelymunka folyt. Az itteni élet motorja, szakmai irányítója a kiváló szakember és pedagógus, dr. Körner Miklósné, Éva néni volt. Tanítványai kiemelkedő eredményeket értek el a hazai és nemzetközi versenyeken, sokan lettek közülük vegyészek, orvosok. Méltó tanítványa és követője volt dr. Csobod Éva, aki évekre átvette Éva nénitől a munkaközösség vezetését, és tanítványai szintén kiváló eredményeket éretek el az OKTV-n.

A kilencvenes években szakmai kihívás és feladat volt az iskolai kémiatanításban a biológia tagozat megjelenése a gimnáziumban. Ezekben az osztályokban a mindenki számára kötelező 3×2 óra mellett a második évfolyamon csoportbontásban kémiai laboratóriumi gyakorlat volt, majd a negyedik évfolyamon a kémiával továbbtanulók számára heti két óra felvételi előkészítő. Két szempontból szerettünk kémiatanárnak lenni a tagozatos osztályokban. Egyrészt a diákok az átlagosnál nagyobb mértékben érdeklődtek a természettudományos tárgyak iránt, legtöbbjük szívesen foglalkoztott a kémiával is. Másrészt a másodikos kémiai laboratóriumi gyakorlaton komoly kémiai számításokat és műszeres méréseket is végeztünk. Ezek nagyon jól megalapozták a gyerekek egyetemi tanulmányait. A biológia tagozatos diákok sajnos ritkán indultak kémiaversenyeken. Energiáikat a biológiaversenyekre fordították. Amíg a tagozat indulásakor szinte minden tanuló a tagozatnak megfelelő irányban tanult tovább, a kilencvenes évek közepétől egyre több problémát jelentett, hogy a tagozatos óraszámok mellett miként készüljenek fel a diákok – az akkor legnépszerűbb – jogászi és közgazdászi pályákra; az osztályok kb. harmada tanult csak tovább biológia irányába. A tagozattal párhuzamosan indult a húszéves múltra visszatekintő Ökotábor is. Ennek kémiai vonatkozásairól később írunk.

A kilencvenes évek központi tantervi rendelkezései alapjaiban átalakították a kémiaoktatást. Amíg korábban hetediktől tizenegyedik osztályig heti két óra volt a kötelező óraszám (összesen 10 óra), addig a tantervi reformok után az általános és középiskolában együttvéve csak négy évig volt kémia, összesen 7 órában. Ez a legtöbb iskolában az időigényes kísérletezés csökkentését jelentette, így a kémia népszerűsége még inkább csökkent.

Iskolánk, mint 1994 óta felmenő rendszerben hatosztályos gimnázium (a biológia tagozat 1999 óta megszűnt), meg tudta tenni, hogy nyolcadiktól tizenegyedikig heti két órában tanítja a kémiát. Így a szervetlen kémia maradt a tizenegyedik osztályban. Ezzel elkerültük a sok gimnáziumban kialakult szerencsétlen helyzetet. Nagyon fontosnak tartjuk, hogy a 17–18 éves korosztály minden tagja találkozzon az iskolában a kémiával. Egyrészt erre a korra érnek meg a diákok, hogy elvont dolgokról is gondolkodjanak, másrészt a szervetlen kémia olyan hétköznapi, háztartási környezetszennyezési, egészségügyi vonatkozások megbeszélésére ad lehetőséget, amelyek véleményünk szerint nélkülözhetetlenek, az általános műveltség részét képezik. Fontosnak tartjuk, hogy ezekkel az ismeretekkel felvértezve fejezzék be tanulmányaikat azok a diákok is, akik nem tanulnak tovább kémiát.

A nyolcadikos kémiaórákat heti egyszer kétórás szervezésben, csoportbontásban tartjuk. Ez lehetőséget ad arra, hogy minden órán kísérletezzünk, a gyerekek egyéni haladását jobban kövessük. Ez az év lényegében bevezetés a kémiába, a legfontosabb kémiai fogalmakkal, valamint a környezeti kémia alapjaival ismerkedünk kísérleti tapasztalatok alapján. A magyarázatokban a daltoni atommodell szintjén maradunk. A gyerekek házi dolgozatokat írnak, valamint csoportokban és projektekben is dolgoznak. Ennek az évnek az anyaga még a kilencvenes évek közepén egy Soros-pályázat keretében körvonalazódott. Ekkor teljes osztállyal dolgoztunk. A tanévet olyan „vizsga" zárja, amelynek során minden diák bemutatja a csoportnak az év során elvégzett kísérletek egyikét, és magyarázzák a tapasztaltakat Nagyon jónak tartjuk, hogy figyelembe tudjuk venni a gyerekek korosztályi sajátosságait, nem kell olyan módon tanítanunk, ami nem felel meg ennek. Úgy véljük, jó lenne ezt a szempontot figyelembe venni más iskolatípusoknál is, és akkor talán a kémiához és a természettudományos tárgyakhoz való érzelmi kötődés jobb lenne, így többen tanulnák szívesen. Ez az első lépés ahhoz, hogy többen válasszák továbbtanulási irányuknak is a kémiát. Természetesen a hiteles, elkötelezett és szakmailag jól felkészült tanári személyiség meghatározó ebben az oktatási formában is.

Tizenegyedik évfolyamon állandó program a sajtófigyelés. Ennek keretében minden héten egy diák multimédiás prezentáció formájában beszámol a legfontosabb kémiai témájú hírekről és értelmezi is azokat. Elvárjuk, hogy az ilyen hírekben gyakorta előforduló szakmai hibákat, pontatlanságokat diákjainak észrevegyék és javítsák. Célunk az érettségi vizsgák szóbeli részére való készülésen túl az is, hogy diákjainak az iskolából kikerülve kellő hozzáértéssel és esetleges kritikával olvassák a természettudományos témájú híreket.

Évek óta növekvő arányban döntenek úgy a tanulók, hogy az utolsó két évben emelt óraszámban tanulják a kémiát, azaz – a hagyományos kifejezéssel élve – választják fakultációs és egyben felvételi tárgyuknak. Ez az érték az évfolyamonkénti 95–100 tanulóból 20–29 közötti létszám. Az idei tanévtől kezdődően a kémiát – más tantárgyak feltételeit lassan utolérve – új struktúrában tanítjuk a tizenegyedik osztályban. A három párhuzamos osztályból a 29 „faktos” gyerek külön tanul az alapórán (szervetlen kémia), és vannak a klasszikus faktos csoportok. A létszámból következően idén is két faktos csoportunk indult. Ezzel meg tudjuk valósítani, hogy más anyagot tanítsunk tizenegyedikben azoknak, akik kémiával akarnak később foglalkozni, illetve azoknak, akiknek céljai között nem szerepel a természettudományok további tanulása.

A sok előny mellett egy hátrányát is felvállaltuk a szerkezetnek. Az országos kémiaversenyek rendszerébe nem illeszkedünk, mivel egy évvel elcsúszunk attól. Ez az oka annak, hogy lényegében csak az OKTV-n tudunk indulni, és eséllyel a tizenkettedik évfolyamon.

A kilencvenes évek közepétől az iskolában tudatos környezeti nevelési munka folyik. Elsők között kaptuk meg az Ökoiskola címet, valamint 2003-ban az Innovatív Iskolahálózat tagjai lettünk. Ez a két momentum hatással van a kémiatanításunkra is. Nagy hangsúlyt fektetünk a környezeti tartalmak tanítására, egyik célunk, hogy környezettudatos és környezeti kérdésekben is felelős gondolkodású diákokat engedjünk ki padjainkból. A klasszikus kísérletezés mellett fontosnak tartjuk, hogy az IKT-eszközöket is a kémi oktatás szolgálatába állítsuk, használjuk tanórákon. Törekszünk arra, hogy a klasszikus óravezetést – a kísérleteken túl is – kiegészítsük interaktív tanulói tevékenységekkel.

Mint említettük, a kémia már húsz éve jelen van az iskolai Ökotáborban. A biológia tagozatos osztállyal kezdtük. Műszeres és vegyszeres kémiai vízvizsgálatokat végeztünk. A kémiai alapok mélységéből visszavéve jelenleg is folytatjuk a méréseket. A méréssor komplex szemlélet kialakítására ad lehetőséget, hiszen a kémiai vizsgálatokkal párhuzamosan biológiai, geológiai és mikroklíma-mérések is folytak. A táborban alkalmazzák a diákok az év közben megszerzett ismereteket, ugyanakkor a táborban végzett mérések alapjai több esetben egy projektnek, versenymunkának, valamint érettségi projektnek, sőt későbbi egyetemi kémiai tanulmányok során írt diákköri dolgozatoknak. A számszerű eredmények mellett a diákok megtanulják a tudományos kísérletezés, az önálló kísérlettervezés és elvégzés, valamint kiértékelés alapelemeit. Nagyon fontos, hogy a gyerekek csapatban dolgoznak egy-egy vizsgálat során. Az utóbbi években a terepi vizsgálatok mellett megjelentek a táborban önállóan a kémiai érdekességek, érdekes kísérletek. Kiemelkedő esemény volt, amikor a 2010-es évben az NTP–OKA–III. „Természettudományos Tehetséggondozó Projekt” című nyertes pályázat keretében az iskolai „Természettudományos diákkutatók” műhely kémia iránt érdeklődő tizenegyedikes tagjait a tanárok felkészítették a levegő, a víz, a talaj vizsgálati és mérési lehetőségeire. Ezek a diákok kémiai foglalkozásokat vezettek, előadásokat tartottak a táborban a fiatalabb diákoknak. A táborban szerzett tapasztalok alapján a következő tanév tizenegyedikes kémia fakultációs óráin azok a gyerekek vezették a méréseket, akik tizedikesként voltak az Ökológia táborban. Ők segítették diáktársaikat az új ismeretek elsajátításában.

A trefortos kémiai tehetséggondozás fontos részét képezik a délutáni szakkörök is. A tanévek többségében minden évfolyam számára sikerül foglalkozást indítanunk. A nyolcadik évfolyamon célunk a tanórán megismert laboreszközök használatának és az alapvető kísérletezési elemeknek a begyakorlása. Nem titkolt célunk az is, hogy már ekkor megnyerjük a tárgynak a diákokat. Kilencedik évfolyamon elmélyítjük az atom- és molekulaszerkezeti ismereteket és komolyabb számítási példákkal is megpróbálkozunk. A tizedik osztályosokkal már összetett kísérleteket végezhetünk el és bekapcsolódunk az iskolai szintű rendezvények szervezésébe. Tizenegyedik és tizenkettedik évfolyamon a szakkör a fakultációs órák kiegészítéseként fut. Részben a számolási feladatok gyakorlása céljából, részben – főleg a végzősök esetén – az OKTV-re való készülés jegyében.

A szakkörös diákokkal rendszeresen bekapcsolódunk az iskolai szintű egész napos programokba. A Trefort napon (egyes években a rendezvény több napot foglal magában) tudományos jellegű előadások és műhelyfoglalkozások várják a diákokat. A kémia munkaközösség tagja vagy meghívott vendégeink gyakran előadóként szerepelnek ekkor. Kiemelkedően sikeresek a kisebb csoportoknak szervezett kísérletes műhelyfoglalkozások. Ezeket gyakran szakkörösök segítségével vezetjük.

A rendszerint tavaszi hónapokban megrendezett Művészeti napnak is állandó résztvevői vagyunk. Ilyenkor jellemzően a kémia művészetekkel való kapcsolatára helyezzük a hangsúlyt kiscsoportos foglalkozásainkon. Jelentős szerepet kapnak a színek és a formák.

Az idei évben a sor egy újabb, kémiával kapcsolatos rendezvénnyel egészült ki. Szeptember 23-án délután és este a „Kutatók éjszakája” programsorozat keretében neves tudósok tartottak előadásokat iskolánkban. Szakköröseink pedig kísérletezéssel együtt járó órákat vezettek a kisebbeknek.

Az ENSZ a 2011-es évet a Kémia Nemzetközi Évének nyilvánította. Ebből az alakalomból februárban a Magyar Kémikusok Egyesületének felhívására részt vettünk a „Vízzel tüzet – Tűzzel vizet!” akcióban. A jeles nap minden szünetében interaktív kísérleteket végeztünk a folyosón

Az évente érettségiző három osztály kémiaeredményeinek összehasonlítása az országos átlaggal az utóbbi öt év átlagában

	2007	2008	2009	2010	2011
Középszinten érettségizők száma	2 fő	7 fő	15 fő	14 fő	7 fő
Átlaguk	78%	84,85%	83,80%	90,85%	81,57%
Országos átlag	61,90%	65,30%	70,30%	75,50%	?
Emelt szinten érettségizők száma	11 fő	0	3 fő	8 fő	7 fő
Átlaguk	78,90%	0	81,00%	87,62%	87,85%
Országos átlag	67,00%	74%	76%	69,90%	?

Titrálás kémia fakton

a diákokkal, délután pedig nagyszabású bemutatót tartottunk az előadóteremben és az iskola udvarán. A pozitív visszajelzéseken fellelkesülve áprilisban újabb kémianapot szerveztünk a szakkörös diákok bevonásával. Ennek „főszereplője” a folyékony nitrogén volt.

A tavalyi év fontos eredménye volt, hogy sikeresen pályáztunk az NTPA–OKA–XXI. pályázaton, melynek keretében tehetséggondozó műhelyt hoztunk létre a legkiemelkedőbb szakkörös diákokból. Ebben a vegyes korosztályú csoportban differenciált foglalkozásokat vezettünk és lehetőség nyílt arra is, hogy az idősebb és nagyobb tudású diákok egyféle mentorként segítsék a munkában a kisebbeket. A pályázat eredményeképpen több drága vegyszert sikerült beszerezni, és ennek kifutásaként rendezhettük meg a jelentős anyagi ráfordítással járó tavaszi második kémiai jeles napunkat is a „Kémia éve” jegyében.

Iskolánk a korábban már említett csúsztatott kémiaoktatásának és általános kémia tantervű jellegének köszönhetően nem büszkélkedhet jelentős számú versenyeredménnyel. A klasszikus országos kémiaversenyeken (Hevesy, Irinyi) nincs esélyünk sikerrel szerepelni, hiszen ehhez a diákoknak másfél évnyi anyagot kellene előre megtanulni. *Mint korábban említettük, eséllyel az OKTV-n a tizenkettedikes korosztályban indulhatunk. Itt az utóbbi években rendre egy-egy döntős diákunk volt.* Az utóbbi évek újszerű versenyein viszont nagy lelkesedéssel és sikeresen veszünk részt. A Vízművek által kiírt „Legjobb a vízben” verseny döntőjében és az „Ökováros” verseny döntőjében is trefortos csapat nyert.

Fodor Erika diákjai több alkalommal eredményesen szerepeltek hazai és nemzetközi kísérletes diákszimpóziumokon. A 2008-as évben pedig 450 csapat közül a második helyezést érték el az Európai Uniós Természettudományos Versenyen. A tanárnőnek köszönhető a hely- és eszköztakarékos, környezetbarát mikrokísérleti eszközök megjelenése is a Trefortban.

A szakkörösökkel a tavalyi év multimédiás versenyein is részt vettünk. A „Show Your Science” versenyen a legjobb tízbe jutott a csapat, majd ugyanők a Fáy András Alapítvány által szervezett Tudásfeltöltés verseny döntőjében közönségdíjat nyertek. Felkérést kaptunk a Múzeumok éjszakáján való kísérletes bemutató szervezésére a Millenáris Parkban, amit örömmel vállaltunk el.

A Trefort Gyakorlóiskola kémia munkaközösségeként a célunk kettős. Egyrészt, hogy az itt töltött évek eredményeként kémiai vonalon továbbtanuló diákjaink biztos tudást kapjanak, amellyel könnyedén megállják helyüket az első egyetemi években. Visszalátogató diákjaink beszámolói alapján úgy látjuk, hogy nagy többségben sikeresen veszik az egyetemeken eléjük torlódó kémiai tárgyú akadályokat. A tavalyi év nyarán a Semmelweis Egyetem partneriskolái körébe fogadta iskolánkat, ezzel is elismerve a Trefortban folyó természettudományos oktatást.

Másrészt törekszünk arra, hogy minden tanulónk úgy hagyja el az iskola kapuit, hogy ismeri környezete kémiáját és azt figyelembe véve egészségesen és környezettudatosan él.

Végezetül néhány vélemény az elmúlt években végzett diákoktól, kémiatanulásukról:

„A Trefort kémiaoktatásából kétségkívül az első évet tartottam a leghasznosabbnak, amikor nyolcadikosként először találkoztam tantárgyként a kémiával. Ez az év (többnyire kísérletezéssel telt el) volt ugyanis az, ami alapvetően meghatározta a tárgyhoz való pozitív hozzáállásomat. Erre tudott építkezni a többi év, majd a kémia fakultáció is, megadva számomra egy olyan alapot, ami eljuttatott a sikeres érettségin át az egyetemre, ott pedig a komolyabb kémiás tárgyakból való levizsgázásra, hiszen a fakultáció, de az alapoktatás színvonala is bőven elérte, sőt néha meg is haladta az orvosi egyetem alapozó kémiájának színvonalát.” (Tóth Eszter – SE ÁOK, II. évf.)

„Az, hogy a Trefortban tanultam kémiát, megkönnyítette szinte minden kémiához kapcsolódó tárgy elvégzését az egyetemen. Az OKTV-szakkörön megoldott feladatok után nem volt nehéz teljesíteni az első félévben igen nagy bukási aránnyal rendelkező Kémszámot. Az elvégzett kísérletek révén a laborban is otthonosabban mozogtam. A tanáraim is kihozták a lehetőségekből a maximumot, nem véletlen, hogy az évfolyamból ennyien kötöttünk ki kémia, gyógyszerész vagy vegyészmérnöki szakon.” (Kassa Eszter – BME VMK, II. évf.)

„Szerencsémre tudásszomjam enyhítésére a tanárok rengeteg lehetőséget biztosítottak, szakkörök, fakultációk és személyes kedvencem, az ökotábor keretein belül. Ilyen háttérrel nemcsak az érettségin, de még az orvosi egyetem első évében is könnyebben vettem az akadályokat.” (Reszkető Róbert – SE ÁOK, II. évf.)

„Trefortos kémiatanulmányaim számos szinten segítettek elérni sikereimet a Semmelweis Egyetemen. Ezen sikerek nem csak jegyekben, vagy versenyeredményekben, illetve magában a sikeres felvételi eljárásban mérhetők. A pontos kivitelezés s a kísérleti munka, szituáció tisztelete már ebben az időben képes volt megalapozni azt a hozzáállást, mely az éles, komoly laboratóriumi munkában elengedhetetlen. Az a légkör, hozzáállás, amit kedves tanáraimtól 6 év alatt kaptam, képes lesz mindig a tudományok felé terelni a diákokat. A Trefortban kémiát tanulni jó és ösztönző.” (Bessenyei Dávid – SE ÁOK, IV. évf.)

Az ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskola kémiatanáraiként igyekszünk hosszú és eredményes múltra visszatekintő iskolánk nagy tanáregyéniségeinek nyomdokain járni és a „Minta” szellemiségében végezni tehetségfejlesztő munkánkat.

TÚL A KÉMIÁN

Google-hatás az emberi memóriában

Egy közelmúltban megjelent tanulmány következtetései szerint az Internet jelentős hatással lehet az emberi memória fejlődésére. Azt már régebben is tudták, hogy az emberek az ismeretek megjegyzését hajlamosak megosztani – egy házaspár tagjai közül gyakran a feleség emlékszik a névnapok és születésnapok dátumaira, míg a férj a távoli rokonok nevére. Így kimondatlan egyezség révén nem kell mindkettőjüknek észben tartani ugyanazt az információt. Az újonnan végzett kísérletsorozatban arra voltak kíváncsiak, hogy milyen mértékű ez az információtárolás-megosztás számítógépekkel. A teszten résztvevők felének előzetesen azt mondták, hogy az általuk látott véletlenszerű információkat elmenti egy számítógép, míg egy másik csoport tagjai arra készültek, hogy a látottakat a gép azonnal törli is. Nem okozott nagy meglepetést, hogy a második csoport tagjai jobban emlékeztek az információkra. Ugyanezt tapasztalták akkor is, amikor az első csoport tagjai az információ elmentésének is tanúi voltak, a mentés helyére viszont lényegesen jobban emlékeztek, mint a kontrollcsoport tagjai a látott információkra. Úgy tűnik tehát, hogy az ember sokkal könnyebben jegyzi meg az információk elérési útját, mint magukat a tényeket.

Science 333, 776. (2011)

Szervetlen sejtelőd

Angol tudósok az élet keletkezésének új kísérleti modelljét alkották meg. Szilika nanorészecskék felszínére szilanol- és dimetilszilán-csoportokat vittek fel, így váltakozva hidrofil és hidrofób részek jöttek létre. Az olajban előállított részecskék lipid kettős rétegekre emlékeztető membránt alkottak, amelyek megfelelő körülmények között vízcseppeket is magukba zártak. A membrán átjárható volt, vagyis az olajban oldott anyagok a sejtszerű képződmény belsejébe is bejutottak. A munka során azt is igazolták, hogy enzimek a biokémiai rendszerekben már megismert aktivitásukat megőrzik a szilícium-sejtecskében lévő vízben.

Chem. Sci. 2, 1739. (2011)

CENTENÁRIUM

Heike Kamerlingh Onnes: Further experiments with liquid helium. D. On the change of electrical resistance of pure metals at very low temperatures, etc. V. The disappearance of the resistance of mercury *Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences, Proceedings of the Section of Sciences*, Vol. 14 I, pp. 113–115. (1911. december)

Heike Kamerlingh Onnes (1853–1926) holland fizikus volt, a leideni egyetemen dolgozott. Érdeklődési területének középpontjában az alacsony hőmérsékletek elérése állt. Elsőként állított elő folyékony héliumot, s ennek segítségével felfedezte a szupravezetés jelenségét, amiért 1913-ban fizikai Nobel-díjat kapott.

IDÉZET

„A posta trombitált, a grófnő feladatta magára utazó bundáját, s midőn Iván a kocsiba felemelé, mégis csak kénytelen volt neki kezét nyújtani és rávesztegetni ezt a szép szót: „Isten önnel”. Mikor tovarobogtak, a grófnő azt kérdé az apáttól:

– Ugyebár ez az ember egy bűvész?

– Nem – felelt a pap. – Gonoszabb annál. Természettudós.

– Hm! Kellemetlen ember.”

Jókai Mór: Fekete gyémántok

Hosszú életű antihidrogén

A CERN laboratóriumaiban először állítottak elő antihidrogént úgy, hogy tulajdonságait is sikerült valamennyire megvizsgálni. Az eljárás lényege, hogy antiprotonokat pozitronfelhőben mozgatnak elektromos tér segítségével, majd egy mágneses csapdával megpróbálják befogni a keletkezett antihidrogén-atomokat. A kísérlet egyes fázisainak megfelelő időzítésével a keletkezett antiatomokat sikerült mintegy 15 percre stabilizálni, ami már elég idő ahhoz, hogy alapállapotba kerüljenek, s így megállapított tulajdonságaik összehasonlíthatók legyenek a szokásos hidrogénével.

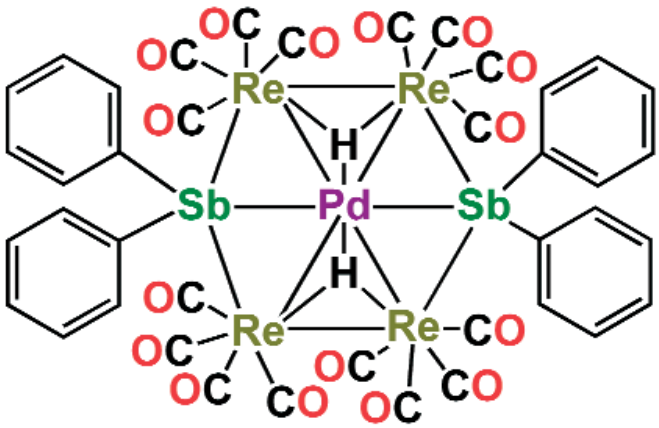
Nature Phys. 7, 558. (2011)

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

A HÓNAP MOLEKULÁJA

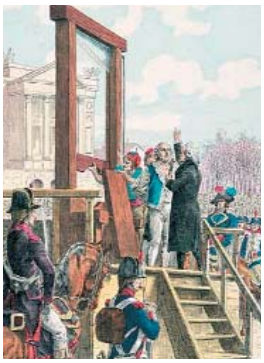
A nehéz atomokat tartalmazó heterociklusos vegyületek kémiájában is különleges helyet foglal el az ábrán látható vegyület ($C_{40}H_{22}O_{16}PdRe_4Sb_2$), amely alapvetően Re_2Sb hármas fémgyűrűk dimerizációjával, majd a dimerben Pd megkötésével állítható elő. A vegyületben a hat gyűrűalkotó fém, a központban lévő Pd és a hídligandum szerepét játszó két hidridion majdnem egy síkban van. A Re–Re kötéstávolságok átlagos értéke 339 pm, míg a Pd–Re kötéstávolságoké 296 pm.

J. Am. Chem. Soc. 133, 12994. (2011)



Királyi vér

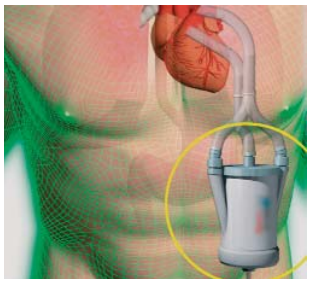
Amikor XVI. Lajost 1793-ben guillotine alá küldték, a jelenlévők közül többen is megmártották zsebkendőjüket a francia



király kifolyt vérében. Egy ilyen zsebkendő a történelem viharai során egy dísztök belsejébe is eljutott, majd elveszett, de a dísztök egy olasz család tulajdonában máig fennmaradt. A néhai zöldség belseje megőrizte a vérminta kis részét, s ezt a közelmúltban alaposan meg is vizsgálták. A DNS-analízis alapján kimutatták, hogy a vér kék szemű, az átlagostól jelentősen eltérő genetikai jellegzetességeket mutató férfitól származik. Ez a leírás éppen ráillik XVI. Lajosra – bár a biztos azonosításhoz egy másik mintára is szükség van egyik leszármazottjától. Erre lenne is lehetőség: XVI. Lajos fia XVII. Lajos volt, ő 1795-ben halt meg, s szívét mind a mai napig a párizsi Saint-Denis-székesegyházban őrzik.

Forensic Sci. Inter. Gen. 5, 459. (2011)

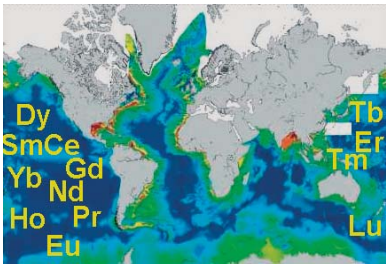
Műtüdő levegővel



Súlyos tüdőbetegek számára jelenthet nagy könnyebbséget egy amerikai kutatócsoport által kifejlesztett új készülék. Poli-dimetilsziloxánból mikrofluidikai csatornákat készítettek, amelyek előbb kisebb csatornákra ágaztak szét, majd műkapillárisokban végződtek. A csatornákat levegő és vér be- és kivezetésére alkalmas részekkel is ellátva a kutatók az emberi tüdőhöz hasonló struktúrát alkottak, a csatornákat pedig gázáteresztő membránnal vonták be. A kísérletekben disznóvért használva folyamatos vér- és levegőáram fenntartása mellett oxigén–szén-dioxid csere zajlott le a rendszerben. Ugyan ma már léteznek hasonló készülékek, ezek mindegyike tiszta oxigént használ, így az újítás nagy jelentőségű lehet az orvosi gyakorlatban.

Lab Chip 11, 2901. (2011)

Ritkaföldfémek az óceániszapban



A ritkaföldfémeket, amelyek érceit gazdaságossági okok miatt jelenleg szinte kizárólag Kínában bányásszák, egyre többet használja a technológia, s napjainkra jelentős hiány alakult ki belőlük. Erre a problémára jelenthet megoldást japán kutatók felfedezése: a fémek kinyerése óceáni üledékből is nyereséges lehet. Geokémikusok azt már korábban is tudták, hogy a tengerfeneken viszonylag jelentős mennyiségben lehetnek ritkaföldfémek, de a földrajzi eloszlást csak a közelmúltban térképezték fel a Csendes-óceán 78 helyéről származó mintegy 2000 üledékminta ICP-spektrometriás és röntgenfluoreszcenciás elemzésével. Az iszap európiumban és diszpróziumban különösen gazdagnak bizonyult. Becslések szerint évente 5 négyzetkilométernyi területről kinyert óceánüledék a világ egész ritkaföldfém-szükségletét biztosíthatja.

Nature Geosci. 4, 535. (2011)

Újratölthető magnézium-kén elem

A Toyota autógyártó óriáscég kutatói régóta dédelgetett álmokat valóra váltva elkészítették az anódként magnéziumot, katódként pedig ként használó elem első újratölthető változatát. Az elem energiasűrűsége kétszerese az elterjedten használt lítiumakkumulátorénak. A kulcskérdés a megfelelő elektrolit megtalálása volt. A kutatók egy nagyon gyengén nukleofil szerves magnézium-halogenidet, a hexametildiszilazid-magnézium-kloridot reagáltatták alumínium-kloriddal. Kristályosítás és oldás után olyan elektrolithoz jutottak, amely igen gyenge nukleofil, s így megfelelt az elemben elektrolitként. A gyakorlatban is jól használható technológia kifejlesztéséhez még egy problémát meg kell oldani: a katód anyagát alkotó kén feltöltés során egy mellékreakcióban poliszulfidok képződése közben oldódik az elektrolitban. Ezt a reakciót mindenképpen ki kell küszöbölni a széles körű felhasználás előtt.

Nature Commun. 2, 427. (2011)

Hermecz Istvánra emlékezünk

Elhunyt Hermecz István, a Magyar Tudományos Akadémia levelező tagja, a Chinoin (ma Sanofi) gyógyszergyár egyik legjelentősebb kutatója.

Hermecz István 1944. május 7-én született Szegeden, majd a BME Vegyészmérnöki karán szerzett diplomát. Diplomamunkáját Mészáros Zoltán vezetése alatt készítette, már a Chinoin kutatási részlegén, ahol élete végéig, összesen 43 éven keresztül tevékenykedett.

Abban az időszakban, amikor István szakmai pályáját kezdte, a rendszerváltás előtti magyar vegyipari szemléletnek megfelelően az egyetemi és az ipari kutatómunka szorosan összefonódott, lehetővé téve, hogy az akkori magyar gyógyszeripar Európa elitjébe tartozzon. Egyre növekvő tudásának, elkötelezettségének köszönhetően István számos akadémiai és ipari szempontból is értékes munkában vett részt. Fő kutatási területe a nitrogénhídfős heterociklusok vizsgálata volt. A felfedezett új átrendeződési reakció alkalmazhatósági körének és mechanizmusának vizsgálata nemzetközi hírű szakemberré emelte. Ezt követően kérik fel a téma összefoglalásának elkészítésére a Comprehensive Heterocyclic Chemistryben. Jelentős eredmény volt továbbá az *N*-propil-*terc*-*N*-oxidok (a Jumex-ből kiindulva) Meisenheimer-átrendeződésével versengő új átrendeződésének elméleti alapjainak tisztázása is.

A Chinoin akkori profiljának megfelelően számos gyógyszerhatóanyag kerülőszintézisének megalkotása is a nevéhez fűződik, melyekről több mint 100 szabadalmi bejelentés is tanúskodik. Ezek közül ki kell emelni a kinolonok családjába tartozó ciprofloxacin antibiotikum független szintézisét, vagy az igen sokrétű hatással rendelkező rutaekarpin alkaloidok új, egyszerű szintézisét. Emellett a Chinoin originális portfóliójából a Probon (fájdalomcsillapító) és a már sanofis Fumagillin (antibiotikum) gyógyszerek kifejlesztése is összefonódik nevével.

Külön kell megemlékeznünk István prosztaglandin-kémiában kifejtett tevékenységéről. A Chinoin máig az egyik piacvezető a prosztaglandin-gyártók között, amelyhez először Mészáros Zoltán, majd később többek között Hermecz István elkötelezettsége, és zseniális jövőbelátása kellett. A PGE1, PGE2 ipari eljárásának kidolgozásában Hermecz Istvánnak éppúgy része volt, mint az éves kétmilliárd dollár forgalmú Latanoprost kifejlesztésében.

Nem mindennapi munkabírását és hatékonyságát mutatja, hogy mindeközben kandidátusi címet szerez 1976-ban, majd megvédi akadémiai doktori értekezését 1986-ban. Később habilitál. 1987-től tagja az MTA Szerves Kémiai Bizottságának amellett, hogy a gyógyszerkutatással foglalkozó bizottságban is tevékenykedik. 2001 és 2007 között az MTA közgyűlési doktor képviselője, 1990-től a Magyar Kémikusok Egyesülete, valamint a Magyar Farmakológus Társaság, 2004-től a Magyar Gyógyszerésztudományi Társaság vezetőségi tagja.

Több egyetemmel is szoros kapcsolatot ápol, a Semmelweis Egyetem docense, 1990-től címzetes egyetemi tanára. 1998-tól a BME, 2002-től a Szegedi Tudományegyetem magántanára.

Tehetségére a Chinoinban is felfigyelnek, először laborvezető, majd kutatási igazgató, igazgatótanácsi tag lesz.

A rendszerváltás során nehéz helyzetbe került Chinoinnak a Sanofi nyújt mentőövet, ahol a Preklinikai fejlesztés vezetői pozícióját tölti be. Ebben az időszakban jelentős változások történnek: sor kerül a modern originális gyógyszerkutatás bevezetésére, a magyarországi szervezetnek a nemzetközi szervezetbe való betagozódására. A kutatási és fejlesztési tevékenységek eddig nem tapasztalt elválasztása, a Chinoin teljes kutatási portfóliójának átalakulása, az erőforrások átértelmezése jellemzi ezt a folyamatot. István vezetésével a vizsgamunkának tekinthető Satavaptan (diuretikum) fejlesztését sikeresen valósítják meg, amelyről a francia vezetés igen elismerően nyilatkozik. Ez megnyitja az utat a beruházások folytatása, a K+F tevékenység teljes integrálódása felé. Az ezt követő időszak a Sanofi folyamatos bővüléséről szól. Eközben a Preklinikai fejlesztés István vezetésével a Sanofi egyik leghatékonyabban működő egységévé válik Budapesten. Ebben az időszakban J-F. Dehecq, a Sanofi akkori elnöke, a Chinoint a Sanofi ékkövének nevezi.

Halad a modern kor kihívásaival, folyamatosan keresi a megújulást, az új kémiai módszerek bevezetésének lehetőségét az ipari gyakorlatba. Erről tanúskodnak a „Kémia újabb eredményei" kombinatorikus kémiáról, illetve az ionos oldószerek alkalmazhatóságáról szóló kötetei is.

A rendszerváltás alaposan átalakítja a gyógyszeripar és az egyetemek kapcsolatát. Különösen igaz ez a Sanofira. István jelentős erőfeszítéseket tesz a magyar tudományos élettel való viszony újraépítésére. Ennek keretében folytatja bizottsági munkáit, 1996-ban alapító tagja az MTA Gyógyszerkémiai és Gyógyszertechnológiai Munkabizottságának, melynek haláláig elnöke. A munkabizottsági ülés ad helyt a híres „Esti beszélgetések"-nek, amelyek könyv formában is megjelentek, méltó emléket állítva a magyar kémiai társadalom jeles egyéniségeinek.

A Sanofi szigorú publikálási stratégiájának ellenére egyetemi hallgatókat és több mint 10 kollégát segít PhD-fokozat megszerzéséhez. Az originális gyógyszerkutatásban szerzett tapasztalatait egyetemi kurzus keretében osztja meg a BME hallgatóival.

Vezetőként sokat tesz munkatársaiért, folyamatosan támogatja a továbbképzéseket, olyan esetekben pedig, amikor nincs rá elegendő fedezet, saját maga pótolja ki a hiányzó összeget. Nyugdíjba vonulása (2009) után sem változik lendülete, tovább segíti a Sanofit. Kezdeményezésére a Sanofi és a BME közösen létrehozza a BME gyógyszeripari kihelyezett tanszékét a gyár területén, melynek vezetője lesz.

Ennek során igen komoly lehetőség nyílik a hallgatók előtt a gyár és az ott folyó kutatás megismerésére, a közös munkára. Döbbenten tapasztaljuk, hogy István fehér köpenyt vesz, megjelenik a laborban és elkezdi kémiai ötleteit megvalósítani.

2010-ben az MTA levelező tagjai közé választják addigi tevékenységének elismeréseképpen, amely a több mint 340 nemzetközi folyóiratban megjelent közleményt (több mint 1700 független hivatkozással), a 130 szabadalmat, a 6 könyvfejezetet és a „The Open Organic Chemistry Journal" főszerkesztői tisztségét is magában foglalja.

Az utolsó idők szakmai tevékenységét foglalja össze Molnár Annamária napokban történő doktori védése a pirido-pirimidin származékok funkcionalizálásának körében, illetve a Magyar Tudományok Ünnepe 2011 rendezvénysorozat keretén belül bemutatásra kerülő „A gyógyszerkutatás kémiája" könyv egyik fejezete, amelyen invitálására közösen dolgoztunk.

Mi, Chinoinosok, büszkék vagyunk arra, hogy az akadémiai tagsághoz, a számos díjhoz [Zemplén Géza-díj (1984), Kiváló Feltaláló (1985), Innovációs Díj (1994), Jedlik Ányos-díj (1997), Gábor

Dénes-díj (1997), Preisich Miklós-díj (2000), Széchenyi-díj (2005), Issekutz Béla-díj (2006)] vezető életpályájának részesei lehettünk a mindennapokban, és számos szakmai tapasztalattal, személyes emlékkel lehettünk gazdagabbak István által.

Barátként búcsúztunk tőled a temetéseden, Pisti, így fogunk megőrizni emlékezetünkben téged!

Finta Zoltán

József Gábor (1937–2011)

József Gábor, a Tiszai Finomító kialakítója, az OKGT egykori vezérigazgató-helyettese, a MOL Rt. nyugalmazott ügyvezető igazgatója, Ásványolaj- és Petrolkémiai Szakosztályunk volt elnöke életének 75. évében, 2011. szeptember 11-én eltávozott közülünk. Temetésére szeptember 29-én került sor a Fiumei úti Nemzeti Sírkertben, ahol utolsó útjára volt főnökei, pályatársai és kollégái is nagy számban elkísérték.

József Gábor 1937-ben született Dicsőszentmártonban, Erdélyben. A család 1940-ben került Magyarországra, Ajkára. Mindvégig kitűnő tanuló volt, 1955-ben a Veszprémi Vegyipari Technikumban technikusi oklevelet szerzett, országos kémiai tanulmányi versenyt nyert és így felvételi vizsga nélkül jutott a Veszprémi Vegyipari Egyetemre. 1960-ban a Veszprémi Vegyipari Egyetem Ásványolaj- és Szénfeldolgozó-ipari szakán kitüntetéses vegyészmérnöki diplomát kapott.

József Gábor 1960–1970 között a Komáromi Kőolajipari Vállalat almásfüzítői gyáregységében üzemvezető és gyáregységvezető-helyettes volt. 1970-ban bekerült a Tiszai Kőolajipari Vállalat nagyberuházását lebonyolító csapatba. 1973-tól 1-es vállalati törzsszámmal a TIFO Technológiai és Műszaki Fejlesztési Főosztály vezetőjeként (főtechnológusként) dolgozott. Szakmai munkásságának fő műve a Tiszai Finomító műszaki koncepciójának megfogalmazása és zöld mezős beruházásának megvalósítása volt. A Technológiai és Műszaki Fejlesztési Főosztály vezetőjeként a finomító terveztetésében, építésének koordinálásában és a későbbi fejlesztések megvalósításában meghatározó szerepet vállalt. A TIFO létesítésének koncepcióját kimunkáló Nehézipari Minisztérium az 1970. évi 7 millió tonna kőolaj-feldolgozással szemben 1980-ra mintegy 16 millió tonna kőolaj-feldolgozási igényt prognosztizált, amely csak a meglévő finomítók továbbfejlesztésével és az új leninvárosi (tiszaújvárosi) finomító felépítésével lett volna biztosítható. Ez a dinamika összhangban állt a kőolaj világpiaci árával, az 1970. évi 2,5 USD/barrel szinttel.

József Gábor 1985-ben pályázaton elnyerte az OKGT műszaki vezérigazgató-helyettesi pozícióját: hozzá tartozott a kőolaj-finomítás, a termékkereskedelem, a gázipari szolgáltatás és a Központ számítástechnikai rendszerének felügyelete és irányítása. Részt vett a magyar olajipar privatizációjának előkészítésében és a MOL 1991-es megalakításában: legnagyobb léptékű feladatának ezt a munkát, a magyar olajipar szervezeti reformjában történő közreműködését tekintette, amely nemzetgazdasági mértékű projektként valósult meg húsz évvel ezelőtt.

1991 októberétől, a MOL Rt. megalakulása után ügyvezető igazgató munkakört töltött be a vezérigazgató közvetlen irányításával, amikor főleg nemzetközi kapcsolatok építésén és a MOL arculatát kialakító PR munkákon dolgozott. Ezen belül egyebek között a nemzetközi szakmai kapcsolatok kiépítésén, a multinacionális cégekkel való együttműködés koordinálásán, a társasági részvényiroda megszervezésén fáradozott. Emellett az MTA Energiapolitikai Szakértői Bizottság tagja, a Kőolaj Világkongresszus Magyar Nemzeti Bizottságának titkára és nemzetközi kőolajipari rendezvények meghívott vendége, előadója és társelőadója is volt.

József Gábor a 90-es években betöltötte az MKE Ásványolaj- és Petrolkémiai Szakosztályának elnöki tisztségét.

1995-ben vonult nyugdíjba, műszaki-társasági megbízatásait pedig az elkövetkező években adta vissza.

József Gábor személyében kiváló olajipari szakembert és kiváló embert, a folytonosság és a csapatmunka igényes képviselőjét veszítettük el. Élete során mindvégig arra kereste a választ, hogy jól gazdálkodik-e a folyamatosan megszerzett szellemi gyarapodással és milyen módon szegődhet társává a kreativitás. Visszaemlékezéseiben mindig csapatjátékosnak tartotta magát, a környezetével való kapcsolatban is erre törekedett. Azt vallotta, hogy jelentősebb sikereinek titka a csapatmunkában és a folyamatos továbbtanulásban rejlik.

Emberi és vezetői kvalitásait nemcsak közvetlen munkatársai, de szakmai vitapartnerei is mindig méltányolták. Alakja minden ismerősében kellemes emlékeket ébreszt, mindenki barátsággal és megbecsüléssel fog gondolni rá. Emlékét tisztelettel és szeretettel megőrizzük.

Rácz László

Nyitrai József (1941–2011)

Megrendülve hallottuk a hírt, hogy rövid betegség után, tragikus hirtelenséggel 2011. augusztus 25-én elhunyt Nyitrai József, a BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék ny. egyetemi tanára, a kémiai tudományok doktora, a hazai kémiaoktatás és -kutatás kiválósága.

Első generációs értelmiségi volt, nagyon szegény családból, de szülei mindent megtettek boldog élete érdekében. Kezdetektől kiváló eredménnyel végezte iskoláit. Az óbudai Árpád Gimnáziumban alakult ki érdeklődése a természettudományok, ezen belül a kémia iránt. Emellett sportolt és zongorázni tanult, tanárai nagyon tehetségesnek tartották. A kitűnő érettségi után 1959-ben a BME Vegyészmérnöki Karán kezdte meg tanulmányait. Az egyetemi évek alatt tanulmányaira összpontosított, a zenetanulást feladta, de a zenének értő élvezete, a kultúra különböző ágai iránti érdeklődése egész életében megmaradt. Tudása és szorgalma szerénységgel párosult, és szívesen vett részt társai közösségi életében, vagy nyújtott segítséget, ha valaki kérte.

1993-ban nevezték ki egyetemi tanárnak, miután előző évben megszerezte a kémiai tudományok doktora tudományos fokozatot.

Igényessége tudományos munkáját és oktatói tevékenységét egyaránt jellemezte. 70-nél több publikációja neves szakmai folyóiratokban jelent meg; hazai és külföldi szakmai kongresszusokon és egyetemeken tartott előadásai, poszterei száma száz körül jár. A külföldi munkamegbeszéléseket, előadásokat német és angol nyelven tartotta. Az 1975/76-os tanévben Karlsruhéban Humboldt-ösztöndíjasként dolgozott.

Az az oktató volt, aki naprakész szakirodalmi tudással rendelkezett, aki minden egyes előadására és vizsgáztatására készült, akitől még a vizsga során is tanulhatott az arra fogékony és érdemes hallgató. Nem véletlen, hogy a hallgatók szavazata alapján megkapta a Kiváló Oktató-érmet, amire büszkébb volt, mint tíz más, magas társadalmi elfogadottságú kitüntetésére.

Oktatói munkája mellett részt vett a Vegyészmérnöki Kar szervezési, korszerűsítési és irányítási munkájában is. 1979–1985 között oktatási dékánhelyettes, 1986–1990-ig az Egyetemi Tanács, 1990–2000 között a Kari Tanács tagja.

Főbb kutatási területei: heterociklusos vegyületek kémiája; N-heterociklusok fotokémiája, béta-laktámok kémiája. 1980–2006 között aktív tagja volt az MTA több munkabizottságának.

Kiemelkedő volt a magyar kémiai elnevezésért és helyesírásért végzett tevékenysége is. 1977-ben társszerzője volt a „Kémiai elnevezés és helyesírás alapjai” c. könyvnek. 1998-ban jelent meg – az MKE kiadásában – Nagy Józseffel együtt írt könyve: Útmutató a szerves vegyületek IUPAC nevezéktanához. 1992-től haláláig képviselte hazánkat az IUPAC Szerves Kémiai Nómenklatúra Bizottságában. Az IUPAC nevében David Black főtitkár levélben fejezte ki részvétét és méltatta kiemelkedő tevékenységét.

Egyesületünkben hosszú időn át végzett aktív munkát. 1994–2003 között a Nemzetközi Kapcsolatok Bizottságának elnöke volt. Számos szerves kémiai tárgyú konferencián vett részt, tartott előadást, és szervezője volt nagy nemzetközi konferenciának is.

Büszke volt egész nagy családjára, de szerény, csendes természetével ezt sosem hangoztatta.

A gyászban osztozunk családjával, és emlékét megőrzi az egész vegyésztársadalom. Jóska, nyugodj békében!

Gálosi György

Gorondy Novák Zsuzsa (1943–2011)

Türelemmel viselt, súlyos betegségben ez év szeptemberében elhunyt Gorondy Novák Zsuzsa okleveles vegyészmérnök, gumiipari szakértő.

Aktív pályafutását a Taurus Gumiipari Vállalatnál, majd annak jogutódjánál, a Michelin Hungária cégnél töltötte. Pályakezdőként rövidesen a beszerzésre került, s végig hűséges maradt a területhez. Éveken át a központi beszerzést vezette. Intenzíven foglalkozott import gumiipari alapanyagok helyettesítésével, belföldi gyártók, szállítók felkutatásával, a gyártás megszervezésével. E tevékenységéért kiváló újítói elismerésben részesítették. Szaktudását, tájékozottságát az egész hazai gumis szakma elismerte. Évekkel a Taurus privatizációja után is hozzá fordultunk, ha valamilyen különleges igényre új beszerzési forrást kellett keresni, és mindig szorított rá időt, hogy segítsen.

Kedves, vidám ember volt, kellemes volt vele együtt dolgozni. Sokan emlékezhetnek olyan közös tárgyalásokra, amelyeken Zsuzsa teljes elkötelezettséggel, keményen képviselte cége álláspontját, és elérte mindazt, amit lehetett; tette ezt úgy, hogy a partnerei is elégedetten álltak fel az asztaltól. Nemcsak a szakmához, az emberekhez is értett.

Nyugdíjazása után se fordított hátat a gumiiparnak. Nagyon fontos tevékenysége volt az InterRubber cég magyarországi képviselete. Sok kis gumigyártó tudott beszerezni az ő segítségével vizsgálóműszereket, kisebb-nagyobb gyártóberendezéseket elérhető áron.

A Magyar Gumiipari Szövetség egyik legaktívabb tagjaként mindig kész volt a közösségnek dolgozni, legyen az tolmácsolás, szervezés, részvétel.

A MKE Gumiipari Szakosztályhoz fiatal mérnökként csatlakozott, és aktivitása nyugdíjba vonulása után sem szűnt meg. Ismert és elismert szakemberként, kiváló emberként tartottuk számon. Itt sem csak regisztrált tag volt, hanem teljes odaadással dolgozott, ameddig csak tehette. Lelkes, meggyőző személyisége, fáradtságot nem ismerő tenniakarása nagymértékben hozzájárult a Gumiipari Szakosztály fennmaradásához, sikeres működéséhez.

2011-ben az MKE Kiváló Egyesületi Munkáért oklevéllel ismerte el sokéves egyesületi munkáját, amit már betegsége miatt nem tudott személyesen átvenni.

Nemcsak kiváló kollégát, hanem egy igaz barátot veszítettünk el!

Nagy Tibor–Palotás László

Emlékezés az Eötvös-kollégista kémikusokra

Az Eötvös Collegiumot 1895-ben alapították Eötvös Loránd kezdeményezésére, az édesapa Eötvös József emlékezetére. Ez az intézmény – mely a párizsi École Normale Supérieure mintájára hazánkban 55 éven át az elit tanárképzés fellegvára volt – 1910-ben a Csillag utcai bérházból egy Alpár Ignác tervezte pompás épületbe költözött, a Gellérthegy oldalán levő Ménesi útra. Ebből az alkalomból az 1950-ben megszüntetett régi Eötvös Collegium jogutóda, az 1958-tól újjáéledő intézmény ünnepi konferenciasorozatot szervezett 2010. október 25–28. között. Ezen részt vettek az oktatásügy mai hivatalos felelősei, valamint a Collegiummal szakmai kapcsolatokat ápoló országok (Franciaország, Olaszország, Spanyolország, Németország, Ausztria, Anglia, USA, Dél-Korea) hazánkba delegált nagykövetei, kulturális képviselői, személyesen vagy üdvözlő levelek útján. Az ünnepélyes megnyitó után négynapos konferencia vette kezdetét, melyen – tematikus blokkokban, tudományterület szerint (Slavica, Graeca et Latina, Gallica et Hispanica, Germanica) – egyrészt a Collegium külföldi testvérintézményeinek képviselői, másrészt volt és jelenlegi Eötvös-kollégisták tartottak előadásokat, majd szemináriumok várták az érdeklődő hallgatókat. A konferencia anyagát Horváth László igazgató és munkatársai, Laczkó Krisztina, Horváth Károly és Péterffy András egy 1221 oldalas reprezentatív kiadványban tették közzé, melynek a *Lustrum* címet adták, a vaskos könyvhöz a Collegium életével kapcsolatos négy CD-DVD-lemezt is mellékeltek.

Ezen a rendezvényen Kucsman Árpád, az ELTE Szerves Kémiai Tanszékének emeritus professzora – kémia-fizika szakos kollégista 1945–1950 között – *Néhány szó a kémikus kollégistákról* címen tartott előadást, melynek szövege bővített formában *Kémikusok a régi Eötvös Collegiumban* címen került be a *Lustrum* kiadványba. A régi Collegium fennállása idején még nem létezett önálló természettudományi kar, csak bölcsészkar, így a reáliák (biológia, kémia, fizika, matematika) is beletartoztak a Collegium repertoárjába. A felvettek 20–25%-a lehetett biológia-kémia vagy matematika-fizika szakos, de ezen belül a kémiának speciális helyzete volt. A kémia-fizika szak ugyanis gyakorlatilag nem létezett, a biológia-kémia szakosok közül pedig csak alig néhányan tekintették a kémiát főszakjuknak. Egyébként a Collegium tanári kara se nagyon rajongott a vegyészekért, mert túl sok időt töltöttek az egyetemi laboratóriumokban, távol a Collegiumtól, a hatalmas könyvtárral rendelkező, kiscsoportos oktatásra, szemináriumokra specializálódott nevelő intézménytől. Ezért nem is került ki sok kémikus a régi Eötvös Collegiumból, de a kevesek szinte kivétel nélkül jelentős hírnévre tettek szert.

A kollégista kémikusok doyenje kétségtelenül Zemplén Géza, a kollégiumi „nagy generáció” tagja. Őt 1900-ban vették fel a Collegiumba és olyan társai voltak, mint az irodalomtörténész Horváth János, a zenetudós Kodály Zoltán, az író Szabó Dezső, a történész Szekfű Gyula, a művészettörténész Gerevich Tibor, a filmesztéta Balázs Béla, az író és szerkesztő Kuncz Aladár. Zemplén 30 éves korában lett a műegyetem professzora és az ő nevéhez fűződik a hazai tudományos szerves kémia megalapítása. Nála doktorált a 20 évvel fiatalabb kollégista Müller Sándor, aki viszont a pesti tudományegyetem tanáraként az elméleti szerves kémia első hazai művelője lett. A fizikai kémia és a szervetlen kémia se panaszkodhat: volt kollégistaként e területek elismert reprezentánsává vált Szabó Zoltán Gábor, a nemzetközi hírnevű professzor.

Eredeti célkitűzéséhez híven az Eötvös Collegium kiváló középiskolai tanárokat is nevelt. Közülük való a matematika-fizika-kémia szakos, karizmatikus pedagógus, a Kossuth-díjas Vermes Miklós. Ő a Fasori Evangélikus Gimnáziumban szervezte meg 1941-ben a kémia akkor kötelezővé vált gimnáziumi oktatását. Róla és 18 (!) volt kollégista-fasori kollégájáról Liptay György professzor emlékezett meg *Az Eötvös Collegiumból a Fasori Gimnáziumba* címen tartott előadásában, valamint a Kucsman Árpáddal közösen írt, *Eötvös-kollégisták a Fasori Gimnázium tanári karában* című dolgozatban, mely szintén a *Lustrum* kiadványban jelent meg. Itt szó esett az eredetileg görög-latin szakos kollégista Bánhegyi Györgyről is, aki az 1950-es években képezte át magát kiváló és elismert kémiatanárrá.

A kollégisták sokoldalúságára jellemző, hogy a kiváló elméleti felkészültségű Dessewffy Olivér – akit 1948-ben vettek fel az Eötvös Collegiumba és így csak két évig lehetett kollégista – diplomájának megszerzése után, 1952-től a Taurus Gumiipari Vállalatnál lett kutató, osztályvezető, fejlesztési főosztályvezető, majd tanácsadó; 1967-ben *Gumiipari nyersanyag-ismeret* címen tankönyvet is írt.

Kucsman Árpád

HÍREK AZ IPARBÓL

A MOL ismét bekerült a Dow Jones Fenntarthatósági Indexbe

A tavalyi sikert megismételve, továbbra is egyedüli vállalatként a régióból, a MOL-csoport bekerült a Dow Jones Fenntarthatósági Indexet alkotó vállalatok közé. Az értékelést a világ legjelentősebb vállalati fenntarthatósági elemzésre szakosodott cége, a svájci SAM (Sustainable Asset Management) végezte el.

A felmérés során a Dow Jones tőzsdeindex alapján a világ 2500 legnagyobb vállalatát vizsgálják, majd közülük választják ki azt a 10%-ot, amely fenntarthatósági szempontból a legkiválóbbnak tekinthető. Az idei felülvizsgálat során az olaj- és gázipari szektor 118 értékelt vállalata közül a MOL ismét bekerült a kiválasztott 12 cég közé.

„A 2006-ban bevezetett fenntarthatósági stratégiánk elismerése, hogy 2011-ben ismételten egyedüli cégként a régióból bekerültünk a világ legjobbjai közé. Ezt a vezetési megközelítést a mindennapi üzleti tevékenység szerves részének tekintjük, és az újabb elismerés kiváló külső megerősítést jelent a megkezdett út folytatásához” – mondta Molnár József, a MOL-csoport vezérigazgatója.

Nyolcvan literrel a Föld körül

A MOL támogatja Blaskovich Ákos és Csák Attila vitorlásútját, amely során kizárólag megújuló energiaforrásokkal hajózzák körbe a Földet. A 45 000 kilométer hosszú, másfél évig tartó hajóút különlegessége, hogy mindösszesze 80 liter üzemanyagot használnak fel a sportemberek, azt is csak akkor, amikor ez a szigorú szabályok miatt kötelező. A vitorlás a MOL használt sütőolajból készült biodízeljét viszi magával üzemanyagként, amit a MOL a támogatás részeként ad az utazóknak.

A páros három éve készül az útra; Tempest nevű hajójuk átalakítása és felújítása közel 30 ezer euróba került. A mindössze 14 méter hosszú, középkategóriás vitorlást a szokványos napelemek, a MOL-biodízel és a szélkerék mellett olyan újrahasznosított anyagokból gyártott, beépített akkumulátorok hajtják a Föld körüli út során, amelyekből borulás esetén sem kerülhet ki a sav a környezetbe. A sportemberek az ivóvizet vízkészítő berendezéssel a tengerből nyerik majd és többnyire tengerből kifogott halakat esznek. A hajótestet olyan algagátló anyaggal borították, ami kevésbé szennyezi a tengert, mint a hagyományos. Az útról beszámolók is érkeznek majd, amiket a www.youtube.com/user/molgrouptv címen lehet megtekinteni.

Vegyipari Mozaik

Science Europe – új, egységes tudományos kutatási szervezet az Európai Unióban. 2011. október 21-én Berlinben megalakult a Science Europe (SE), az új európai tudományos kutatási szervezet, amelynek székhelye Brüsszelben lesz. Korábban két szervezet képviselte az európai tudományos kutatást végző és finanszírozó szervezeteket: az Európai Tudományos Alap, a European Science Foundation (ESF) és az Európai Tudományos Tanácsok Vezetőinek Tanácsa, European Heads of Research Councils (EUROHORCs). A Science Europe abból a célból jött létre, hogy a két szervezet – amelyeknek tagszervezetei közt nagyon sok azonos van – legjobb hagyományait továbbvigye. Az új szervezet az európai tudomány meghatározó képviselője kíván lenni, célja a tudomány megalapozó értékeinek gazdasági-társadalmi-politikai érvényesítése.

A Science Europe létrejöttével a EUROHORCs feloszlott, az ESF pedig csak a már futó projektjeit viszi tovább, ezek lejártával néhány éven belül megszűnik.

Az új szervezetnek olyan, kutatást végző és kutatásokat finanszírozó szervezetek lehetnek a tagjai, amelyek jelentős szerepet játszanak a nemzeti kutatásokban, közpénzből finanszírozzák őket és működésük lényegében független a kormányoktól. Az alakuló gyűlésre 26 ország 54 szervezete kapott meghívást, köztük két magyar szervezet, az MTA és az OTKA.

A Science Europe legfőbb célja, hogy egységesen és erőteljesen képviselje a tudomány érdekeit az európai politikában, támogassa a tagszervezetek munkáját, szervezze a tagszerveztek közötti együttműködéseket, összehangolja az európai kutatások és finanszírozásuk elveit.

Az alakuló gyűlésen az 51 tagszervezet a Science Europe elnökének Paul Boyle-t, az angol Economic and Social Research Council vezetőjét választotta. A Science Europe legfontosabb döntéshozó szerve az elnökből, a két alelnökből és a hét közvetlenül választott tagból álló tíztagú Igazgatótanács. Az Igazgatótanács egyik tagjának Pálinkás Józsefet választották meg. *(MTA)*

H-gazdaság a jövőben. 2011. október 9–11. között, immáron nyolcadik alkalommal rendezték meg az Országos Anyagtudományi Konferenciát. A hidrogéngazdálkodásról Margitfalvi József tartott érdekes bemutatót.

A jövő energiagazdálkodásában jelentős paradigma-változás várható. A fosszilis alapú nyersanyagokról fokozatosan át kell térni a fenntartható fejlődést biztosító nyersanyagokra és a gazdaságos feldolgozásukat biztosító technológiákra. Az egyik alapvető kérdés az üvegházhatást kiváltó CO_2-kibocsátás mértékének jelentős csökkentése. A hidrogéngazdaság tulajdonképpen ez utóbbi cél elérésének egyik legfontosabb eszköze.

A hidrogéngazdaság igen jelentős kiterjedésű, igen szerteágazó ágazatnak tekinthető, amely magában foglalja a hidrogén előállítását, tisztítását, tárolását és szállítását, valamint a hidrogénnek tüzelőanyag-cellákban történő felhasználását villamosenergia-termelésre. Ennek megfelelően a jövőben a hidrogén meghatározó szerepet fog betölteni mind a közlekedésben, mind életünk egyéb területein. Az, hogy ez a változás milyen gyorsan fog bekövetkezni, többek között az anyagkutatás területén elérendő eredmények függvénye.

A hidrogén előállításához új, hatékony anyagokra, katalizátorokra van szükség a víz fotokatalitikus és biokatalitikus bontása érdekében. A különböző biomassza alapanyagokból kiinduló hidrogénelőállítás új tisztítási eljárásokat és ezekhez új katalizátorokat és adszorbenseket igényel. A hidrogén biztonságos és gazdaságos tárolása – főként a közlekedési eszközökben – csak új anyagok kifejlesztésével lesz megoldható. A szállítás biztonságának növelése is több anyagtudományi feladatot jelent. Az alkalmazásnál a tüzelőanyag-cellák (TC) fejlesztése a fő feladat, ami nemcsak komoly elméleti tudást igénylő tevékenység, hanem egy sor új anyag kifejlesztését is jelenti.

A fejlett technológiákkal rendelkező országokban ezekhez az anyagkutatásokhoz új kísérleti módszereket is alkalmaznak. Ezek közül kell kiemelni a nagy áteresztőképességű és kombinatorikus anyagkutatást. Ennek a módszernek az alkalmazásával jelentős mértékben le lehet csökkenteni a K+F tevékenységhez szükséges időt és költségeket. *(VIII. Országos Anyagtudományi Konferencia)*

Fórum a Természettudományi Kutatóközpontról. Az intézethálózat megújításával létrejövő MTA Természettudományi Kutatóközpont feladata multidiszciplináris természettudományi kutatások az enzimológia, a szintetikus kémia, a molekuláris farmakológia, az anyag- és környezetkémia, a műszaki fizika és az anyagtudomány, valamint a kognitív idegtudományok és a pszichológia területén. Az MTA-Q2 épületébe költöző Kémiai Kutatóközpont, az MTA Enzimológiai Intézete, az MTA MFA és a kognitív idegtudományi kutatásokkal is foglalkozó Pszichológiai Intézet munkatársait kutatói fórumon tájékoztatta a megújítás folyamatáról az MTA elnöke.

Pálinkás József emlékeztette a jelenleg négy különböző helyen és intézetben dolgozó kutatókat az Akadémia kutatóhálózatának széttöredezettségére és rugalmatlanságára. A 46 intézet vezetői egyre több megoldhatatlan feladattal szembesülnek: a csökkenő források túl nagy részét emésztik fel az adminisztratív költségek, túl kevés a fiatal, ígéretes kutató, elavultak a rendelkezésre álló műszerek, hiábavaló törekvés az alapellátáshoz tartozói feladatok meghatározása és a stratégia kialakítása.

A jövőnek dolgozunk, azon kutatók és intézetek érdekeit tartjuk szem előtt, akik és amelyek az ország versenyképességének zálogai, és 10, 20, 30 év múlva Magyarország fejlődéséhez járulnak hozzá. A legjobb szerkezet és szervezeti keret létrehozását tűztük magunk elé, hogy értéket teremtsünk a jövő nemzedék számára a kutatásokba fektetett összeg hatékonyabb gazdasági-társadalmi megtérülésére. Nem véletlen, hogy mind a társadalom felelősen gondolkodó tagjai, mind a döntéshozók részéről óriási várakozás és érdeklődés kíséri az Akadémián zajló megújítási folyamatot – mutatott rá az MTA elnöke, arra biztatva a megjelent kutatókat, hogy éljenek az új intézményi keretek teremtette lehetőségekkel.

Egy akadémiai kutatóhálózat célja a kiválóságok kinevelése és megtartása. Azoknak a fiataloknak kötelezzük el most magun-

kat, akik a nehéz gazdasági helyzetben is kitartanak a kutatói pálya mellett – szólalt fel a megújítás mellett az MTA Enzimológiai Intézetének igazgatóhelyettese. Vértessy Beáta tarthatatlannak minősítette a jelenlegi helyzetet, amikor a kutatócsoport-vezetők adminisztratív feladatok tömegével kénytelenek törődni. A kutatóközpontoktól azt várjuk, hogy azokban a kutatásoké legyen a főszerep – tette hozzá.

Az egyetemek és akadémiai intézetek hosszú távú kapcsolatát firtató kutatói kérdésre az elnök annak a meggyőződésének adott hangot, hogy egy főhivatású kutatóhálózatban intézményesen is biztosítani kell, hogy a kiemelkedő tehetségek egyetemi környezetben nehezen vagy egyáltalán nem megteremthető feltételek mellett végezhessék nagy kockázatú felfedező kutatásaikat és vehessenek részt jelentős technológiai fejlesztésekben.

Bakó Imre, a Kémiai Kutatóközpont munkatársa a világos kutatói követelmények felállítását sürgette. Az elnök válaszában a 2012-től új szervezeti keretek között megvalósítható „finomhangolás" egyik kiemelt feladataként nevezte meg a magas szintű kutatói követelményrendszer bevezetését és érvényesítését, az egyes kutatási témák nemzetközi versenyképességének szigorú értékelését.

Több felszólaló aggodalmát fejezte ki az elapadt kutatási pályázati pénzek miatt. Az elnök egyetértett azzal, hogy kormányzati szinten még mindig várat magára az új, központi pályázati rendszer kidolgozása. Pálinkás József azt is várja a tervezett megújulástól, hogy a kutatóközpontok a nemzetközi pályázatokon erőteljesebb konzorciumvezetői szerepvállalásra lesznek képesek. A tervek szerint 2012-től kezdődik az évek óta szükséges kutatási infrastruktúra megújítása a korszerűsített rendszerben. Az elnök ezzel összefüggésben a nyilvános kutatói fórumon is szorgalmazta, hogy az Új Széchenyi Tervben jelenjen meg a kutatások infrastrukturális feltételeinek megújítását célzó programelem. *(MTA)*

A legmodernebb cementgyár. Bruno Lafont, a Lafarge SA és Hans Peter Haselsteiner, a Strabag SE vezérigazgatója szeptemberben megnyitotta a két cég közös vállalkozásában működő új cementgyárát Királyegyházán.

Az új létesítmény Európa legmodernebb cementgyára, amely fenntartható gazdasági hasznot hoz majd a régiónak. A 800 milliós állami támogatással elkészült királyegyházi projekt jelentős társadalmi és gazdasági előnyökkel jár a kistérség számára. A cementgyárnak 130 alkalmazottja van, ugyanakkor további 300 fő közvetett foglalkoztatásához járul hozzá. A Lafarge bevonása révén ez a projekt lett az utóbbi 5 év legnagyobb francia beruházása Magyarországon, és harminc év óta ez az első cementgyár, amit Európában építettek.

Az építkezést a Strabag SE cége, a Nostra Cement Kft. irányította. A cementgyártásban világelső Lafarge az építkezés utolsó fázisában, 2010 májusától állította szakértelmét a projekt szolgálatába. A beruházás legnagyobb beszállítója a cementgyár-építésben világszerte sok tapasztalatot szerzett kínai CBMI volt. A királyegyházi építkezésen csaknem 3500 munkás vett részt, a gyárhoz összesen 160 000 köbméter betont használtak fel, megépítettek egy 105 méter magas hőcserélő tornyot, egy 60 méter magas klinkersilót, és egy 5 kilométeres vasúti pályát is.

Mivel a legmodernebb európai cementgyár a legújabb technológiát használja, megfelel a legszigorúbb környezetvédelmi előírásoknak is. A sikeres próbaüzem után a gyár több mint évi 1 millió tonna kiváló minőségű ömlesztett és zsákos cement előállítására lesz képes. A tervek szerint a termékek legnagyobb részét magyarországi építkezésekhez, elsősorban a Strabag beruházásaihoz használják fel. A cég máris megkezdte a cement szállítását a Pécsi Egyetem most épülő kutatóközpontjához, a Science Buildinghez. Emellett egy közös projekt kidolgozását is elkezdték a győri Audi gyárral. Hosszabb távon a helyi csapat által készített minőségi királyegyházi termék kihagyhatatlannak bizonyulhat mind az autópályák, mind a lakóingatlanok építése során. *(www.lafarge.com)*

Banai Endre összeállítása

OKTATÁS

Aki kíváncsi kémikus – harmadszor

Nem alaptalan a mai kutatónemzedék aggodalma: lesz-e elég tehetséges, elszánt és kitartó fiatal, aki majd átveszi tőlük a stafétabotot? Nem mindegyik intézet nézi tétlenül a természettudományi pálya iránti érdeklődés lanyhulását: a Szegedi Biológiai Kutatóközpont már sok éve rendez tábort a biológia iránt érdeklődő diákoknak, s jó példával jár elöl immár harmadik esztendeje az MTA Kémiai Kutatóközpontja is.

Az idén június 26. és július 2. között nyílt meg az Aki kíváncsi kémikus címet viselő nyári kutatótábor Budapesten. Az a 25, 16–17 éves, 10. vagy 11. osztályos középiskolás diák vehetett részt ezen a bentlakásos, szabadidős foglalkozásokkal is színesített továbbképzésen, akinek pályázatát elfogadta egy bírálóbizottság. A jelentkezők a fölajánlott témák közül választhatták ki, hogy melyik területen szeretnének kutatómunkát végezni, és természetesen előzetes ismereteikről is számot kellett adniuk. Egyebek között kíváncsiak lehettek arra: az-e a DNS, amit lerajzolunk, vállalkozhattak családi házak energiaellátására alkalmas hidrogén tüzelőanyagokkal kapcsolatos kutatásra, a májsejtekben zajló gyógyszertranszport vizsgálatára, de kereshették a választ arra is, miként készül az aszpirin, vagy milyen műanyagok alkotják a mobiltelefon egyes alkatrészeit. A labormunkában elmélyedő,

előadásokat hallgató diákok témavezetőik irányításával igyekeztek tudományos feleletet adni a föltett kérdésekre. A tábor végén pedig, miként a fölnőtt kutatók, miniszimpóziumon számoltak be egyhetes munkájuk eredményéről.

Amint a tábor szervezője, Lendvayné dr. Győrik Gabriella elmondta: a Kémiai Kutatóközpont térítés nélkül látta vendégül és tanította a 25, kémia iránt érdeklődő diákot. A számukra ingyen biztosított szállás, a háromszori étkezés és a közlekedés költségei, valamint a kémia megkedveltetése érdekében kifejtett munka csekély befektetés ahhoz képest, amit a tudomány nyerhet azzal, hogy lelkes, tehetséges fiatalokat terel a kutatói pályára.

Ch.Á.

Sikeres magyar szereplés a 11. Grand Prix Chimique vegyésztechnikusi diákolimpián

2011. szeptember 25–30. között rendezték meg Dornbirnben (Ausztria) a 11. GPCh diákolimpiát 10 ország – Ausztria, Cseh Köztársaság, Franciaország, Horvátország, Magyarország, Németország, Svájc, Szerbia, Szlovákia és Szlovénia – 20 vegyésztechnikus diákja részvételével. Az országos válogatóversenyek eredményeként a magyar csapat tagjai *Nagy Sándor* és *Zsemberi Máté*, a Petrik Szakközépiskola most végzett diákjai voltak.

A GPCh alapvetően gyakorlatra épülő verseny, a versenyzőknek klasszikus és műszeres analitikai, valamint szerves preparatív feladatokat kell megoldaniuk a két versenynapon napi 9 órás munkában. Az analitikai rész esetén a végeredmény pontossága, a preparatív résznél a manuális munka játszik nagyobb szerepet a pontozásnál. A 11. GPCh egyik analitikai feladata egy mosószer foszfortartalmának fotometriás meghatározása volt, beleértve a mintafeltárást és a szabványból is ismert receptnek az adott mintára való adaptálását is. A másik feladatban egy mosólúg oldat savkapacitását kellett megmérni klasszikus analitikai módszerrel. A preparatív feladatban a 4-nitro-acetofenon redukcióját végezték el 4-amino-acetofenoná egy, az iparban is alkalmazott eljárás szerint. A terméket több lépésben megfelelően tisztítani kellett, és végül ellenőrizni kellett a termék tisztaságát is.

A magyar csapat tagjai: Zsemberi Máté és Nagy Sándor (középen), valamint Riedel Miklós nemzetközi zsűritag (balra) és Fogarasi József mentor

A magyar versenyzők sikeresen vettek részt a diákolimpián. Nagy Sándor két német diák mögött csak 2 ponttal lemaradva harmadik helyezett lett a 240 pontos skálán, Zsemberi Máté a 7–8. helyen végzett.

Az idei versenyen is tapasztalhattuk, hogy egyik-másik laboratóriumi művelet pontos végrehajtásáról országonként olykor eltérően vélekednek. A GPCh egyik haszna éppen abban van, hogy hozzájárul a vegyésztechnikus-képzés területén a laboratóriumi műveletek egységesebb és helyesebb kivitelezéséhez, és így az európai integrációhoz is. Azt is tapasztaltuk, hogy van néhány olyan fontos művelet, ami a magyar szakmai képzésben régebben szerepelt, de valószínűleg a csökkenő gyakorlati idő miatt jelenleg kimarad, vagy legalábbis nem szánnak rá a súlyának megfelelő időt.

A GPCh versenyeken Magyarország a kezdettől fogva részt vesz, és diákjaink a mostanihoz hasonlóan eddig mindig sikeresen helyt álltak. Nem megnyugtató viszont, hogy laboratóriumi képzettségük csak nehezen hozható nemzetközi szintre. Nagyon hiányzik a magyar szakképzésben az a számos nyugati országban jól működő gyakorlat, hogy a képzés egy jelentős része az iskolákkal való kooperációban, de gyárakban történik. Ez magyarázza a német diákok rendszeres jó szereplését, sőt a most először részt vevő svájci csapat jó eredményét is. Más országokban viszont a GPCh versenyre kiválasztott diákok állami támogatással megrendezett központi felkészítésen vehetnek részt. Az elmúlt húsz év tapasztalata az, hogy a magyar diákok személyes rátermettségükkel, és főleg az iskolák tanárainak külön áldozatos munkájával érhették el eredményeiket.

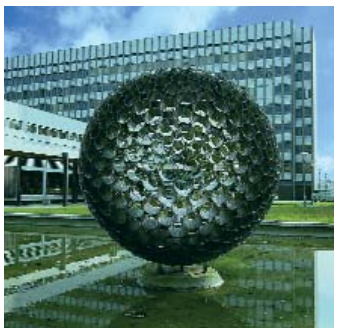
Köszönetet mondunk az érintett iskoláknak és tanáraiknak (beleértve azokat is, akiknek tanulója nem jutott el az ausztriai döntőig) a felkészítő munkáért, és köszönet illeti a 11. GPCh-re kiutazott magyar csapat támogatóit, a Richter gyógyszergyárat, a Petrik SZKI Alapítványt és az ELTE Kémiai Intézetét is. További részletek, a feladatok a http://www.chem.elte.hu/w/gpch/index.htm oldalon találhatók.

Riedel Miklós

Külföldi öregdiákokkal ünnepelt a 40 éves SZBK

VESZÉLYBEN A NEMZETKÖZI TOVÁBBKÉPZŐ TANFOLYAM?

Az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpontjában (SZBK) először 1972-ben, az intézmény alapításának évében rendezték meg az azóta hagyományossá vált nemzetközi továbbképző tanfolyamot, az International Training Course-t (ITC). Az eleinte UNESCO-támogatással megszervezett oktatóprogram iránti érdeklődés máig élénk maradt a külföldi hallgatók körében, ezért – a csökkent anyagi lehetőségek ellenére – az SZBK-nak eddig még minden esztendőben sikerült megrendeznie népszerű kutatóképző sorozatát. A jelentős, sikerekben bővelkedő múltra visszatekintő továbbképzésen résztvevők száma egyre gyarapodott, ezért született 2006-ban az az ötlet, hogy hívják meg az időközben külföldi egyetemeken, kutatóintézetekben már jelentős pozíciót betöltő, egykori diákokat is. Az első, úgynevezett alumni konferenciát az idén újabb követte, melyen a regisztráltak száma meghaladta a 140-et, s amelyen a résztvevők 60 előadásban, illetve poszteren számoltak be eredményeikről.



A szeptember 1-jén megkezdődött háromnapos tanfolyamnak különös hangulatot adott, hogy az SZBK ebben az esztendőben töltötte be 40. évét, így a szimpózium az ebből az alkalomból rendezett ünnepélyes előadássorozat részeként került a programba. Megtartását az Új Széchenyi Terv TÁMOP – 4.2. 3-08/1-2009-es programja, illetve az SZBK-val rendszeres üzleti kapcsolatot tartó szponzorok tették lehetővé. A szegedi intézményben dolgozó kutatók, a világ különböző laboratóriumaiban helyt álló, befutott egykori, ma már „öreg" diákok, valamint a jelenlegi hallgatók találkozása, eszmecseréi számos tapasztalattal, továbbgondolásra alkalmas ötlettel gazdagították a résztvevőket. A kutatói pálya iránt vonzódó végzős hallgatóknak lehetőség nyílt arra, hogy magas színvonalú, izgalmas témákba kapcsolódhassanak be, a kutatói munkához nélkülözhetetlen módszertani, publikációs, előadói és gyakorlati ismeretekkel gazdagodjanak.

Siklós László, a szervezőbizottság elnöke szerint a felsőoktatás és a tudományos kutatás anyagi nehézségeinek sajnálatos következménye, hogy míg az 1990-es évek közepéig a hazai végzős hallgatók számára is nyitva állt az ITC kapuja, azóta a magyar diákok kiszorultak ebből a továbbképzési lehetőségből, sőt jelenlegi formájában mára az egész kurzus eddigi megszakítás nélküli folyamata veszélybe került. Nagy veszteség érné a kutatói pályára készülő fiatalokat, minden túlzás nélkül a biológia jövőjét, ha a pénzhiány miatt megszűnne ez a nemzetközi kapcsolatok építésére is alkalmas, évenkénti szegedi kutatóképzés. Eddigi eredményeit, hasznát igazolja a tanfolyamot eddig elvégzett több mint 700 hallgató sikeres kutatói pályája.

Ch.Á.

Multidiszciplináris, modulrendszerű digitális tananyagfejlesztés

2009-ben minden eddiginél szélesebb körű, összesen 22 tárgyat érintő, átfogó tananyag-fejlesztési program indult a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kara, az ELTE Természettudományi Kara és a Typotex Elektronikus Kiadó Kft. konzorciumi együttműködésével. A projektet (azonosító: TÁMOP-4.1.2-08/2/A/KMR-2009-0028) az Európai Unió Európai Szociális Alapja és a hazai központi költségvetés vissza nem térítendő támogatás formájában 80% mértékig finanszírozta. A projekt honlapja: http://tamop.ch.bme.hu.

Az *Analitikai kémia* részben a szerzők úgy írták meg az egyes fejezeteket, hogy azok az elemzések általános szempontjai és a legelterjedtebb méréstechnikák megismertetése mellett segítsék az analitikához szükséges természettudományi alapok (általános, szervetlen és szerves kémia, fizika) megerősítését és előkészítsék a későbbi laboratóriumi gyakorlatokat is.

A *Szerves kémiai praktikum* a BSc-szintű szerves kémiai laboratóriumi ismereteket foglalja össze a mai kor követelményeinek megfelelően. Felépítése moduláris jellegű: az 1–6 fejezetek a környezetmérnököknek, az 1–8 fejezetek a vegyész- és biomérnököknek, a 7–9 fejezetek már a haladó szintű gyógyszeripari szakirányos hallgatóknak szólnak. A tananyag elsajátítását kb. 400 ábra, valamint 64 videó segíti.

A *Nanotechnológia kolloidkémiai alapjai* rész célja a kolloidkémiai szemlélet kialakítása, a klasszikus kolloidkémiai iparokat és eljárásokat ismertető tárgyak megalapozása, valamint a kolloidika modern anyagtudományi (nanotechnológiai) szerepének bemutatása.

A *Kémiai technológia* tárgy felöleli szinte az összes kémiával kapcsolatos iparágat (szervetlen és szerves vegyipar, vízkezelés, energiatermelés, szénhidrogén-ipari technológiák, biotechnológia), az ammóniaszintézistől a sörgyártásig. Így nemcsak több egyetemi szak képzésében jól használható tananyag készült el, hanem a kémia és technológia iránt érdeklődő szélesebb közönség is szívesen „lapozgatja" majd. Ezt a részt gondolja tovább három tananyag, az *Ipari mikrobiológia*, a *Fementációs feldolgozási műveletek* és a *Biomérnöki műveletek és folyamatok*.

A két egyetemről mintegy hetven oktató/kutató és közel húsz hallgató vett részt a munkában. Kiváló hazai szakemberek, elsősorban rangos vidéki egyetemek (pl. Pannon Egyetem, Debreceni Egyetem, Szegedi Egyetem) professzorai végezték a tananyagok lektorálását. A szerzők nagyon fontosnak tartják, hogy ipari szakemberek (Chinoin, Egis, Paksi Atomerőmű) is részt vettek az új tananyagok értékelésében.

Az elkészült tananyagok minimum 5 évig ingyenesen hozzáférhetők lesznek a www.tankonyvtar.hu oldalon, ugyanakkor a szerzők a tananyagokat öt éven át folyamatosan fejlesztik majd.

FELHÍVÁS

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kara, ill. Szerves Kémia és Technológia Tanszéke 2012 februájában újraindítja a MAB által akkreditált, újólag megszervezett

Gyógyszerkémiai szakirányú továbbképzési szakot.

A képzésen **egyetemi szintű vegyészmérnök, biomérnök, környezetmérnök, vegyész, biológus, kémiatanár, orvos, gyógyszerész és állatorvos végzettséggel rendelkezők vehetnek részt.** A posztgraduális, 4 féléves képzés **másoddiplomát ad,** és 2014 februárjában diplomamunka-védéssel, illetve záróvizsgával zárul. A képzés február végétől 12 alkalommal, heti egy teljes munkanapot vesz igénybe ezt követő vizsgaidőszakkal.

Felvilágosítás és előzetes jelentkezés (kérésre jelentkezési űrlap küldése) **Dr. Kádas István c. egy. docensnél,** a tanfolyam titkáránál **(BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8, 463-3695, ikadas@mail.bme.hu).**

Végleges jelentkezéshez szükséges még a **szakmai önéletrajz** és **oklevélmásolat** benyújtása. A képzés térítéses. A félévenkénti tandíj előreláthatólag: 350 000 Ft. A tandíjat a munkáltató tanulmányi szerződés kötése mellett részlegesen vagy teljes egészében átvállalhatja.

Jelentkezési határidő: 2012. február 15.

Dr. Keglevich György
tanszékvezető egyetemi tanár
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék
1111 Budapest, Budafoki út 8.
463-1111/5883, gkeglevich@mail.bme.hu

A Gépipari Tudományos Egyesület Hegesztési Szakosztálya elkészítette

Hegesztett kötések korróziós vizsgálatára vonatkozó, mértékadó nemzeti és nemzetközi szabványok annotációja

című kiadványát.

A kötet áttekinti a hegesztett kötések korróziós vizsgálati módszereit, a korróziós vizsgálatok új hazai lehetőségeit, az acélok jelölési rendszerét. A kiadvány nem helyettesíti a szabványokat, de kitűnő módszert nyújt a szabványokban való eligazodáshoz. Ára 8000 Ft + áfa. Megrendelhető a GTE Titkárságától (Szakács Annamária, telefon: 06/1-202 0656, email: mail@gteportal.eu).

DÍJAK, KITÜNTETÉSEK

Náray-Szabó Gábor elismerése

A EuCheMS (European Association for Chemical and Molecular Sciences) belgrádi közgyűlésén Luis Oro elnök Award for Service kitüntetést adott át Náray-Szabó Gábornak, a Magyar Kémikusok Egyesülete és a EuCheMS elődje, a FECS (Federation of European Chemical Societies) korábbi elnökének. Az indoklás kitér a díjazottnak a FECS-hez képest lényegesen nagyobb hatáskörrel működő EuCheMS létrehozásában vállalt meghatározó szerepére és az 1. Európai Vegyészkongresszus budapesti megrendezésére 2006-ban. A díjat egyidejűleg adták át a 2010. évi másik díjazottnak, Giovanni Natile korábbi EuCheMS elnöknek és Evelyn McEwan leköszönő főtitkárnak, a 2011. évi díj kitüntetettjének.

Luis Oro, a EuCheMS elnöke és a díjazott Náray-Szabó Gábor

Bajusz Sándor, a Magyar Gyógyszerkutatásért-díj 2011. évi kitüntetettje

A Magyarországi Gyógyszerkutatásért Alapítvány kuratóriuma és az eddigi díjazottak a 2011. évi díjat Bajusz Sándor professzornak, a Gyógyszerkutó Intézet tudományos osztályvezetőjének ítélték oda nemzetközileg magasra értékelt tudományos munkásságáért, a magyar gyógyszeriparban folytatott több évtizedes, originális magyar gyógyszerek kifejlesztésére irányuló kutatásaiért, oktatói és tudományszervezési tevékenységéért, amellyel nagymértékben hozzájárult a gyógyszerkutatással és fejlesztéssel foglalkozó, elkötelezett újabb generációk neveléséhez, továbbá a több mint 100 éves magyar gyógyszeripar nemzetközileg is magasra értékelt tevékenységéhez.

Bajusz Sándor a díjat átadók körében

A díj átadására ünnepélyes keretek között szeptember 5-én került sor az MTA Gyógyszerkémiai és Gyógyszertechnológiai Munkabizottság Egerszalókon tartott szimpóziumán.

Bajusz Sándor kiemelkedő eredményei között tartjuk számon többek mellett a biológiailag aktív peptidek körében megvalósított szintézisek és analógjaik tervezését, továbbá kivitelezését, valamint szerkezet-hatás összefüggések feltárását; meghatározó alkotói részvételét a humán ACTH totálszintézisének megvalósításában; az első szintetikus peptid trombin inhibitor kifejlesztését (GYKI-14 166, RGH-2958, „Bajusz sequence”); a Cetrorelix (SB-75), a női meddőség kezelésére a terápiába bevezetett LH-RH antagonista felfedezését; az első szintetikus enkefalin-analóg, analgetikus hatású peptid szintézisét; kaszpáz-specifikus inhibitorok, a peptidil-béta-homoaszpartátolok előállítását; a szepszisgátló peptidil-arginálok szintézisét.

Igen jelentős több évtizedes egyetemi oktatómunkája, amellyel hozzájárult a magyar gyógyszeripar magas szintű szakmai utánpótlásának biztosításához.

Szakmai-közéleti tevékenysége során 1991–2002 között az MTA Kémiai Osztály Peptidkémiai Munkabizottság elnöki tisztét töltötte be, 1991–1998 között a „European Peptide Society” Tanácsában tevékenykedett, majd 1999–2002 között Tudományos Tanácsában végzett tudományszervezői munkát.

Tudományos eredményeiről több mint 180, magas impaktú újságban megjelent tudományos közleményében számolt be. Kiemelkedő kutatási eredményeiből 40 alapszabadalom született.

Ismét átadták a Magyar Kémia Oktatásért-díjakat

Az idén már tizenharmadik alkalommal adták át a „Magyar Kémia Oktatásáért-díjat” annak a négy kémiatanárnak, akik kiemelkedő szakmai munkásságukkal hozzájárultak a jövő nem-

zedékének felkarolásához, az utánpótlás neveléséhez. A Richter Gedeon Alapítvány a Magyar Kémia Oktatásért kuratóriuma azokat az általános és középiskolai tanárokat jutalmazza, akik tudásukkal támogatják a tehetséges diákokat, odaadó munkájukkal segítik a magas szintű szakképzést. Az alapítványt 1999-ben a Richter Gedeon gyár hozta létre azzal a szándékkal, hogy vezető hazai gyógyszergyártó cégként közvetlenül vállalhasson támogató szerepet a magyarországi kémiaoktatásban, tehetséggondozásban és az ezzel kapcsolatos ismeretterjesztésben.

A bensőséges ünnepségre 2011. október 11-én a Magyar Tudományos Akadémia Vörösmarty-termében került sor. A kitüntetett kémiatanárok a rangos elismerés mellett az azzal járó 250 ezer forintos díjat is átvehették.

Az ünnepélyes hangulatot *Illés Eszter* fuvolaművész játéka teremtette meg. Az a regényrészlet („Für Elise"), amelyet *Kubik Anna* színművész mély átéléssel adott elő, nekünk, kémikusoknak különösen kedves volt, mert megtudhattuk, hogy az akkor még gimnazista Szabó Magda induló írói pályáját éppen hajdani kémiatanára egyengette. Megrázó volt mindnyájunk számára a gyárat alapító Richter Gedeon, a sikeres feltaláló-üzletember tragikus véget érő életét bemutató film.

A díjazottak (Dancsó Éva, Horváth Lucia, Varga Gábor és Drozdík Attila), az őket köszöntő diákjaik, a kuratórium tagjai és Dr. Pellioniszné dr. Paróczai Margit igazgató asszony társaságában

A tanárokat *Dr. Löw Miklós*, a kuratórium elnöke köszöntötte, a díjakat *Dr. Pellioniszné dr. Paróczai Margit*, a Richter gyár emberi erőforrás igazgatója adta át. *Dancsó Éva* tanárnő (Eötvös József Gimnázium, Budapest) tehetséges diákjai a kicsiknek, nagyoknak kiírt országos kémiaversenyektől az elmúlt 15 év alatt egészen a Nemzetközi Diákolimpia helyezettjei közé jutottak. *Drozdík Attila* tanár úr (Pannonhalmi Bencés Gimnázium) tanítványai kiemelkedően nagy számban vesznek részt az Országos Tanulmányi Versenyen, több mint száz tanítványa közül – szinte magától értetődően – számosan szereztek igen előkelő helyezéseket az országos döntőben is. *Horvát Lucia* tanárnőt (Roth Gyula Gyakorló Szakközépiskola és Kollégium, Sopron) és diákjait a sikeres versenyeredmények alapján még az *Oláh György* Nobeldíjas tudóssal való személyes találkozásra is meghívták. *Varga Gábor* tanár úr, „Gábor bácsi, az év tanára" (Zrínyi Miklós és Bolyai János Általános Iskola, Nagykanizsa) pályáját kis falusi iskolában kezdte, és ma is általános iskolában tanít, lelkesíti diákjait és juttatja őket országos tanulmányi versenyek első helyezettjei közé.

Az ünnepség kedves mozzanata volt, amikor a díjazottakat a mostani vagy volt diákjaik köszöntötték felidézve tanáruk személyiségét, szakmai és pedagógiai erényeit, sőt egy-két nehéz percet is. Az őszinte szeretettel elmondott, olykor vidám laudációk közül hadd idézzünk egyet. Drozdík Attila autója KDA rendszámát a diákjai úgy olvassák ki, hogy „a király drozdík attila". Engedtessék meg, hogy e helyen én is ezt a diák-szlenget használjam: minden idei díjazott „király" a maga területén, és szeretnénk, ha az ország összes kémiatanárára ezt mondanák a diákjai. Reméljük, hogy így is van.

Riedel Miklós

MKE-HÍREK

Konferenciák

XLIV. Országos Irinyi János Kémiaverseny, döntő

2012. május 11–13.
Miskolci Egyetem (Miskolc-Egyetemváros)
A versenykiírás hamarosan megtalálható
a www.irinyiverseny.mke.org.hu honlapon

CAC2012 XIII. Chemometrics in Analytical Chemistry

2012. június 25–29.
ELTE 1117 Budapest Pázmány P. sétány 1/A.
Online regisztráció hamarosan
a http://www.cac2012.mke.org.hu honlapon
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
TOVÁBBI INFORMÁCIÓ: Bondár Mónika és Schenker Beatrix, cac2012@mke.org.hu

MKE egyéni tagdíj (2012)

Kérjük tisztelt tagtársainkat, hogy a **2012. évi tagdíj** befizetéséről szíveskedjenek gondoskodni annak érdekében, hogy a Magyar Kémikusok Lapját 2012 januárjától is zavartalanul postázhassuk Önöknek. A tagdíj összege az egyes tagdíj-kategóriák szerint az alábbi:

- alaptagdíj: 7000 Ft/fő/év
- nyugdíjas (50%): 3500 Ft/fő/év
- ifjúsági tag (25%): 1750 Ft/fő/év
- gyesen lévő (25%): 1750 Ft/fő/év

Tagdíj-befizetési lehetőségek:

- banki átutalással
  (az MKE CIB banki számlájára: 10700024-24764207-51100005)
- csekken
  (kérésre az MKE Titkárság küld)
- személyesen
  (MKE pénztár, 1015 Budapest, Hattyú u 16. II/8.)

Banki átutalásos és csekkes tagdíjbefizetés esetén a **név, lakcím, összeg rendeltetése** adatokat kérjük jól olvashatóan feltüntetni.

Ahol a munkahely levonja a munkabérből a tagdíjat és listás átutalás formájában továbbítja az MKE-nek, ez a lista szolgálja a tagdíjbefizetés nyilvántartását.

Előfizetés a Magyar Kémiai Folyóirat 2012. évi számaira

A Magyar Kémiai Folyóirat 2012. évi díja fizető egyesületi tagjaink számára 1400 Ft. Kérjük, hogy az előfizetési díjat a tagdíjjal együtt szíveskedjenek befizetni. Lehetőség van átutalással rendezni az előfizetést a Titkárság által küldött számla ellenében. Kérjük, jelezzék az erre vonatkozó igényüket!

Köszönjük mindazoknak, akik 2011-ben kettős előfizetéssel hozzájárultak a határon túli magyar kémikusoknak küldött Folyóirat terjesztési költségeihez. Kérjük, aki teheti, 2012-ben is csatlakozzon a kettős előfizetés akcióhoz.

MKE Titkárság

Tájékoztatjuk tisztelt tagtársainkat, hogy

személyi jövedelemadójuk 1 százalékának felajánlásából idén 1 070 083 forintot

utal át az APEH Egyesületünknek.

Köszönjük felajánlásaikat, köszönjük, hogy egyetértenek a kémia oktatásáért és népszerűsítéséért kifejtett munkánkkal. A felajánlott összeget a „Kémia Nemzetközi Éve” programjai között is kiemelt hangsúlyt nyert, kémiát népszerűsítő események, tehetséggondozó tevékenységek (Középiskolai Kémiai Lapok, Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, VII. Kémikus Diákszimpózium – Pécs, a 2011-ben harmadszor is megrendezett Varázslatos Kémia Tábor) egyes költségeire fordítottuk, valamint arra a célra, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő, határon túli honfitársunkhoz.

Emlékeztető a 2011. szeptember 26-án megtartott GB-ülésről

Jelen vannak: Androsits Beáta, Banai Endre, Bognár János és Kovács Attila

Augusztus havi kontrolling értékelése:
A GB áttekintette az augusztusi időszakos gazdasági jelentést. Két nagyobb szabású rendezvényünk – az *MKE 1. Nemzeti Konferencia* és az augusztusi rendezésű *4th ECC for Sciences konferencia* – nagy létszámú érdeklődés mellett várhatóan a tervezettnél kedvezőbb eredménnyel zárul. A működtetési kiadások és a kiadványok takarékos költségvetése pozitívan járul hozzá az éves gazdálkodási elképzeléseink teljesítéséhez.

2. A GTÜ megvitatott és átszerkesztett pontjainak végleges elfogadása az IB-nek történő előterjesztésre.
Az Egyesület gazdasági tevékenységét szabályozó Ügyrend (GTÜ) megfelelő passzusainak áttekintését követően elkészítettük módosítási javaslatainkat. A módosítás célja, hogy az elmúlt évek gyakorlatát áttekintve aktualizáljuk az Egyesület gazdálkodási ügyrendjét.

3. A kontrolling új allokációs változatának megvitatása.
A GB a gazdálkodási folyamatok jobb áttekinthetősége érdekében megvizsgálta a működtetési költségek költséghelyenkénti megoszlásának néhány újabb változatát. Megállapodtunk abban, hogy a hagyományos kimutatások mellett alkalmanként az új költségallokációs formulát is alkalmazzuk.

Az emlékeztetőt készítette:
Bognár János
GB-elnök

A Szlovén Kémikusok Egyesülete megalakulásának 60. évfordulója alkalmából nemzeti konferenciát tartott Portorozban 2011. szeptember 14–16. között. Az ünnepi ülésre meghívást kapott Egyesületünk is. Az Egyesületet Dr. Liptay György alelnök képviselte. A EuCheMS delegáltján kívül a cseh, horvát, lengyel, magyar, német, norvég, osztrák, szerb és szlovák kémiai társaságok képviselői köszöntötték a szlovén vegyészkollegákat. A konferencián több mint 300-an vettek részt a kétmilliós országból. Minden előadás szlovén nyelven hangzott el. 14 kiállító támogatta a jól sikerült nemzeti konferenciát.

A Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából az MTA Kémia Tudományok Osztálya november 8-án előadói ülést tartott *Kémia: tudomány és társadalom* címmel. Az esemény záróakkordjaként Blaskó Gábor bemutatta *A gyógyszerkutatás kémiája* című könyvet, amelyet Keserü György Miklós szerkesztésében ad ki az Akadémiai Kiadó. A könyv megjelenését az MKE is támogatja.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL
LXVI. No. 12. December 2011

CONTENTS

A Christmas interview with the 2011 Bolyai Prize winner András Perczel 374
TAMÁS KISS

Quasicrystals aren't quasi any more… Nobel Prize in Chemistry 2011 376
ISTVÁN HARGITTAI

Novel solutions for the medicinal analytical chemistry of drug discovery 378
GYÖRGY TIBOR BALOGH, ÁRPÁD KÖNCZÖL, MÁRK SÁNDOR

To linearize or not to linearize: analytical and numerical computation of the error propagation of parameters 383
DÓRA BARNA, LÁSZLÓ GYEVI-NAGY, GYULA TASI

Teaching chemistry in the Budapest Eötvös József High School 389
ÉVA DANCSÓ

ELTE Trefort Ágoston High School 392
LÁSZLÓ KUTROVÁCZ, ÁGNES SCHRÓTH

Chembits 396
(Edited by GÁBOR LENTE)

Obituaries 398

News of the Month 401

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

2011. évi 66. évfolyamának

névmutatója

Szerkesztőbizottság:
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
SZEKERES GÁBOR (örökös főszerkesztő)
SZÉPVÖLGYI JÁNOS (a szerkesztőbizottság elnöke)
TÖMPE PÉTER
ZÉKÁNY ANDRÁS

Felelős szerkesztő:
KISS TAMÁS

Olvasószerkesztő:
SILBERER VERA

Tervezőszerkesztő:
HORVÁTH IMRE

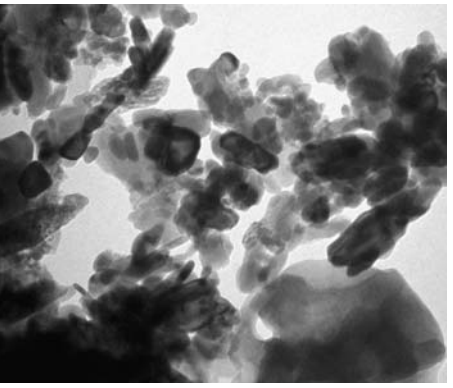
Szerkesztők:
ANDROSITS BEÁTA
BANAI ENDRE
JANÁKY CSABA
KOVÁCS LAJOS
LENTE GÁBOR
NAGY GÁBOR
ZÉKÁNY ANDRÁS

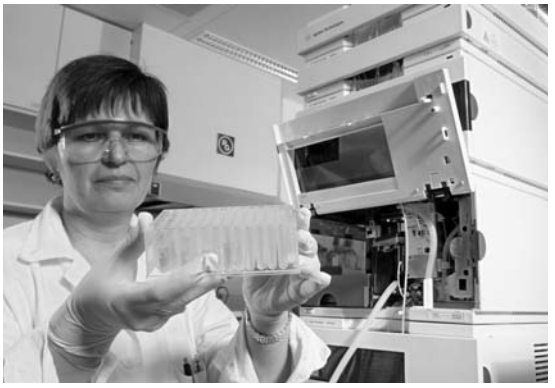
Szerkesztőségi titkár:
SÜLI ERIKA

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete
1015 Budapest, Hattyú u. 16. 2/8.

Felelős kiadó:
ANDROSITS BEÁTA ügyvezető igazgató

A Magyar Kémikusok Lapja
a Magyar Kémikusok Egyesületének – A MTESZ tagjának –
folyóirata és hivatalos lapja
a magyar vegyipar vállalatainak támogatásával





A

Antal József: Ezeréves kémiai emlékek Péten *(Vegyipar- és kémiatörténet)*....319
Antus Sándor: A polifenolok szerepe a szőlő és a bor életében *(Bor tematikus szám)*....335

B

Balogh György Tibor – Könczöl Árpád – Sándor Márk: Új megoldások az eredeti gyógyszerkutatás szintézistámogató analitikájában....378
Banai Endre: Vízben, borban kémia (A Természet Világa különszámáról)....285
Barna Dóra – Gyevi-Nagy László – Tasi Gyula: Linearizálni vagy nem linearizálni: paraméterek hibaterjedésének analitikus és numerikus számítása....383
Beck Mihály: Görög Sándor: Repkényszaggatás *(Könyvismertetés)*....251
Biczók László: Molekulák önszerveződésének vizsgálata fluoreszkáló alkaloidokkal *(Bruckner-termi előadások)*....87
Bizottságok beszámolói *(MKE Küldöttközgyűlés, 2011)*....228
Braun Tibor: Európai Feltalálói Díj, 2010. Wolfgang Krätschmer és a fullerénkutatás járványszerű terjedése....57
Braun Tibor: Empíriától a tudományig. Molekuláris és szupramolekuláris gasztronómia....114
Braun Tibor: Szendai. A hely szelleme....195
Bubenyák Máté lásd *Kökösi József*....263
Buglyó Péter: Új, félszendvics ruténium(II)komplexek: szilárd fázisú és oldategyensúlyi vizsgálatok *(Beszámoló a 45. Komplexkémiai Kollokviumról)*....37

C

Czirok János Balázs lásd *Pham Truong Son*....51

Cs

Csupor Dezső – Szekeres András – Tatsimo N. Simplice Joel – Kecskeméti Anita – Vékes Erika – Veres Katalin – Sulyok Edvárd – Szendrei Kálmán – Hohmann Judit: Szintetizálnak-e a növények Viagrát? Szintetikus hatóanyagokkal hamisított „növényi" étrendkiegészítők....45

D

Dancsó Éva: Kémiaoktatás a Reáltanoda utcában *(A kémia kiválóságai)*....389
Deák András – Faigl Ferenc – Nyulászi László – Pokol György: A Műegyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kara *(A kémia kiválóságai)*....233
Demeter Ádám: Polimorfiakutatás a gyógyszeriparban *(Bruckner-termi előadások)*....182
Domonkos Dávid – Hronszky Imre: A biotechnológiai klaszterek működésének magyarázata az értéklánc-modellel....83

E

Endrész Gyöngyi: Kémiaoktatás a miskolci Földes Ferenc Gimnáziumban *(A kémia kiválóságai)*....147

F

Faigl Ferenc lásd *Deák András*....233
Fodor Erika: Gondolatmorzsák a Sikeres Randevúk Tudományának kapcsán – avagy 2011 a Kémia Éve *(Fórum a köz- és felsőoktatásról)*....321

G

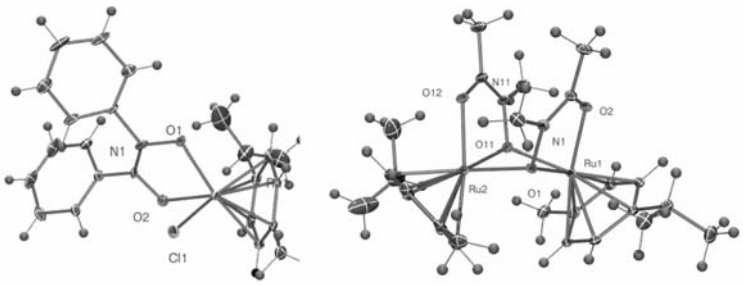
Galbács Gábor: Kántor Tibor 80 éves....134
Gál Tamás – Sándorné Kovács Judit – Károlyné Dombi Ágnes: Hamisított okmányok új vizsgálati lehetőségei....183
Gönczi Katalin lásd *Pham Truong Son*....51
Gráf László: A borozás öröme: San Francisco és Dörgicse *(Bor tematikus szám)*....357

GY

Gyevi-Nagy László lásd *Barna Dóra*....383

H

Haidegger Ernő: Búcsú Szekeres Gábortól....32
Hajós Dániel – Hajós György: A tokaji bor *(Bor tematikus szám)*.354
Hajós György: A „Magyar Tudományos Akadémia bora" borverseny 2011-ben *(Bor tematikus szám)*....350
Hajós György lásd *Hajós Dániel*....354
Hannus István lásd *Kukovecz Ákos*....70
Harangi János lásd *Vékey Károly*....342
Hargittai István: A kvázikristály többé már nem kvázi… A 2011-es kémiai Nobel-díj....376
Harrach Gergely lásd *Valicsek Zsolt*....42
Hermecz István lásd *Kökösi József*....263
Hohmann Judit lásd *Csupor Dezső*....45
Horváth Ottó lásd *Valicsek Zsolt*....42



Horváth Péter lásd *Kökösi József*.....**263**
Hronszky Imre lásd *Domonkos Dávid*.....**83**
Huszánk Róbert lásd *Valicsek Zsolt*.....**42**
Huszthy Péter: Jegyzőkönyv *(MKE Küldöttközgyűlés, 2011)*....**218**

I

Inzelt György: Az IUPAC ajándéka a Kémia Nemzetközi Évére. Változás az atomsúlyokban.....**112**

J

Jakusch Tamás – Kiss Tamás: Vanádium biospeciációja a vérszérumban *(Beszámoló a 45. Komplexkémiai Kollokviumról)*.....**40**
Janáky Csaba: 43. Kémikus Világkongresszus, Beszélgetés Tóth Klárával – Puerto Ricóban.....**326**

K

Kállay Miklós – Kerényi Zoltán: Borok kis koncentrációjú szerves savai *(Bor tematikus szám)*.....**338**
Károlyné Dombi Ágnes lásd *Gál Tamás*.....**183**
Kecskeméti Anita lásd *Csupor Dezső*.....**45**
Kele Péter: (Bio)ortogonális jelölésre alkalmas fluoreszcens vegyületek *(Bruckner-termi előadások)*.....**50**
Keglevich György: A mikrohullámú technika alkalmazása foszforkémiai átalakításokban *(Bruckner-termi előadások)*.....**181**
Kerényi Zoltán lásd *Kállay Miklós*.....**338**
Keszei Ernő – Kovács Balázs: Femtokémiai kísérletek kiértékelése hatékony genetikus és evolúciós módszerekkel.....**152**
Kéri György: Racionális hatóanyag-tervezés jelátviteli terápiához *(Bruckner-termi előadások)*.....**247**
Kiss Tamás lásd *Jakusch Tamás*.....**40**
Kiss Tamás: Az egyetemeknek valódi tudásközpontokká kell válniuk (Beszélgetés Fábián Istvánnal, a Debreceni Egyetem rektorával).....**81**
Kiss Tamás: A gyakorlati problémákat is alapelvekből kiindulva lehet megoldani. Beszélgetés Szépvölgyi János Gábor Dénes-díjas vegyészmérnökkel.....**178**
Kiss Tamás: Az első lépések, az első kérdések. Gyorsinterjú Simonné Dr. Sarkadi Liviával, a Magyar Kémikusok Egyesülete elnökével *(Tisztújítás)*.....**262**
Kiss Tamás: Karácsonyi beszélgetés Perczel András Bolyai-díjas kémikussal.....**374**
Kónya Zoltán lásd *Kukovecz Ákos*.....**70**
Kótai László lásd *Szépvölgyi János*.....**2**
Kovács Attila: Főtitkári beszámoló *(MKE Küldöttközgyűlés, 2011)*.....**214**
Kovács Balázs lásd *Keszei Ernő*.....**152**
Kovács Lajos: Hatékony rákgyógyszer-e a „B_{17}-vitamin”?.....**298**
Kovács Ottó: Zarzetzky József és gyufagyárai.....**130**
Könczöl Árpád lásd *Balogh György Tibor*.....**378**
Kökösi József – Váradi András – Bubenyák Máté – Rácz Ákos – Takács Mária – Horváth Péter – Noszál Béla – Szász György – Hermecz István: Bioizoszter alkaloid hibridek szintézise *(Bruckner-termi előadások)*.....**263**
Közhasznúsági jelentés *(MKE Küldöttközgyűlés, 2011)*.....**222**
Kubinyi Miklós: Varsányi György (1921–2010).....**161**
Kufár Róbert: Poli-Farbe – emberek, színek, innovációk *(A kémia kiválóságai)*.....**193**
Kukovecz Ákos – Kónya Zoltán – Hannus István: Kémia a Szegedi Tudományegyetemen *(A kémia kiválóságai)*.....**70**
Kurtán Tibor – Lente Gábor: A Debreceni Egyetem Kémiai Intézete *(A kémia kiválóságai)*.....**75**
Kutrovácz László – Schróth Ágnes: ELTE Trefort Ágoston Gyakorlóiskola *(A kémia kiválóságai)*.....**392**

L

Láng Győző lásd *Surján Péter*.....**238**
Lente Gábor: Abszolút aszimmetrikus reakciók értelmezése *(Beszámoló a 45. Komplexkémiai Kollokviumról)*.....**41**
Lente Gábor lásd *Kurtán Tibor*.....**75**
Lente Gábor: Vegykonyha (Robert L. Wolke: A tudós szakács; Hervé This, Marie-Odile Monchicourt: A tökéletes ebéd. Bevezetés a molekuláris gasztronómiába) *(Könyvismertetés)*.....**121**
Lente Gábor: Nyílt levél a Lendület program tudománymetriai vonatkozásairól.....**160**
Liptay György: Kovács Tibor: Majdnem 100 év. A Nitrokémia története 1921–2010 *(Könyvismertetés)*.....**96**
Lőrincz György lásd *Vékey Károly*.....**342**

M

Mátravölgyi Béla lásd *Pham Truong Son*.....**51**
Ménes András: Száztíz éve született Linus Pauling.....**162**
Ménes András: Százötven éve született Frederick G. Hopkins...**320**
Mészáros Mariann: Százéves lesz az EGIS: kutatás- és exportorientált fejlődés *(A kémia kiválóságai)*.....**109**
Miklós Endréné: Kémiaoktatás a kaposvári Táncsics Mihály Gimnáziumban *(A kémia kiválóságai)*.....**280**
Mosonyi György: Egy magyarországi állami nagyvállalat regionális multivá vált. A MOL Nyrt. két évtizedes fejlődéstörténete *(A kémia kiválóságai)*.....**34**
Mostbacher Éva: Kémiaoktatás a Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnáziumában *(A kémia kiválóságai)*.....**276**
Muzsnay Csaba: A földi felmelegedésnek és nem várt éghajlatváltozásainak egyik fő oka lehet az emberi tevékenységből származó légköri vízgőz (I.).....**265**
Muzsnay Csaba: A földi felmelegedésnek és nem várt éghajlatváltozásainak egyik fő oka lehet az emberi tevékenységből származó légköri vízgőz (II.).....**301**

N

Nagy Gábor: Az analógián alapuló gyógyszerkutatásról *(Könyvismertetés)*....95
Nagy Gábor: Richter Gedeon – 110 éve a fejlődés útján *(A kémia kiválóságai)*....106
Nagy Lajos: Lágyionizációs tömegspektrometriai módszerek alkalmazása a polimerkémiai kutatásokban *(Bruckner-termi előadások)*....88
Nagymarosy András: A klimatikus tényezők szerepe a borok kémiai összetételének kialakulásában *(Bor tematikus szám)*....346
Nagypál István: Beck Mihály: Humor a tudományban *(Könyvismertetés)*....26
Noszál Béla lásd *Kökösi József*....263

NY

Nyulászi László lásd *Deák András*....233

O

Otrok Györgyné: Jedlovszky Pál (1938–2010)....162

P

Pallagi Attila: „Safety first!" Munkavédelem és vörösiszap-kezelés Ausztrália egyik legnagyobb timföldgyárában *(Munka- és balesetvédelem a vegyiparban)*....186
Pallos József Péter – Blazics Gyula: A PannonPharma Cégcsoport *(A kémia kiválóságai)*....188
Papp Sándor: Bodor Endre (1921–2011)....199
Pham Truong Son – Gönczi Katalin – Czirok János Balázs – Mátravölgyi Béla – Sólyom Szabolcs: Új királis katalizátorok alkalmazása aminofoszforsavak sztereoszelektív szintézisében *(Bruckner-termi előadások)*....51
Pokol György lásd *Deák András*....233
Próder István: Magyar vonatkozású kémia- és vegyipar-történeti évfordulók *(Évfordulónaptár, 2011)*....12
Próder István – Vargáné Nyári Katalin: A Magyar Műszaki és Közlekedési Múzeum (MMKM) Vegyészeti Múzeuma *(A kémia kiválóságai)*....315

R

Rábai Gyula: Bazsa György 70 éves....62
Rácz Ákos lásd *Kökösi József*....263
Rácz László: Felelős gondoskodás. Negyedszázada született a vegyipari cégek kezdeményezése *(Munka- és balesetvédelem a vegyiparban)*....142
Rácz László: A kémia oktatása és a borkultúra az Eszterházy Károly Főiskolán *(Bor tematikus szám)*....362
Rácz László: Rátosi Ernő 80 éves....327
Rohály Gábor: Művészet-e a borkóstolás? *(Bor tematikus szám)*...352

S

Sándor Márk lásd *Balogh György Tibor*....378
Sándorné Kovács Judit lásd *Gál Tamás*....183
Sárkány Péter: Szőlőmagban az egészség? *(Bor tematikus szám)*.365
Schróth Ágnes lásd *Kutrovácz László*....392
Silberer Vera: Csapatmunkában. Beszélgetés Somogyi Gábor Pállal, az Országos Toxikológiai Intézet igazgatójával....10
Silberer Vera: Saját lelet. Beszélgetés Lente Gáborral....158
Silberer Vera: Személyre szabva. Beszélgetés Kéri Györggyel....248
Silberer Vera: Európai Feltalálói Díjak, 2011. Beszélgetés Christine Van Broeckhovennel és Blanka Řihovával....272
Silberer Vera: Kémia, történet. Beszélgetés Inzelt Györggyel....307
Sógor András – Szabó Zsolt: Biztonságtechnika és környezetvédelem a Richterben *(Munka- és balesetvédelem a vegyiparban)*...313
Sólyom Szabolcs lásd *Pham Truong Son*....51
Sulyok Edvárd lásd *Csupor Dezső*....45
Surján Péter – Láng Győző – Turányi Tamás: Az Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézete *(A kémia kiválóságai)*....238

SZ

Szabó Zsolt lásd *Sógor András*....313
Szász György lásd *Kökösi József*....263
Szekeres András lásd *Csupor Dezső*....45
Szendrei Kálmán lásd *Csupor Dezső*....45
Szente Lajos: A ciklodextrinek 2010-ben: az elmúlt 35 év eredményei, meglepetései, kudarcai *(Bruckner-termi előadások)*....8
Szépvölgyi János – Kótai László: Az ajkai vörösiszap-ömlés. A vörösiszap képződése, tulajdonságai és tárolása....2
Szollár Lajos: A Janus-arcú bor *(Bor tematikus szám)*....358

T

Takács Mária lásd *Kökösi József*....263
Tasi Gyula lásd *Barna Dóra*....383
Tatsimo N. Simplice Joel lásd *Csupor Dezső*....45
Tiffán Zsolt: Köszöntő *(Bor tematikus szám)*....334
Tímár János: Kovács Lajos (1920–2011)....199
Tóth Zoltán lásd *Turányi Tamás*....122
Tömpe Péter: Kémia évi beszélgetés Farsang Györggyel, az ELTE egyetemi tanárával....242
Turányi Tamás – Tóth Zoltán: Egyetemi hallgatók tévképzetei fizikai kémiából *(Fórum a köz- és felsőoktatásról)*....122
Turányi Tamás lásd *Surján Péter*....238

V

Valicsek Zsolt – Huszánk Róbert – Harrach Gergely – Horváth Ottó: Síkon kívüli fém-porfirinek egyensúlyi, fotofizikai, fotokémiai és kvantumkémiai vizsgálata *(Beszámoló a 45. Komplexkémiai Kollokviumról)*....42
Vámos Éva: Vegyésznők a Magyar Kémikusok Egyesületében, 1947–2009 *(A kémia kiválóságai)*....20
Váradi András lásd *Kökösi József*....263
Vargáné Nyári Katalin lásd *Próder István*....315
Veres Katalin lásd *Csupor Dezső*....45
Vékes Erika lásd *Csupor Dezső*....45
Vékey Károly – Lőrincz György – Harangi János: Elválasztástechnikai és tömegspektrometriás módszerek alkalmazása a borok vizsgálatában *(Bor tematikus szám)*....342
Vértes Attila: Hargittai István: Teller *(Könyvismertetés)*....310

W

Wartha Vince: A vörös borok hamisításáról (1880) *(Bor tematikus szám)*....364

Heidolph
Research made easy

Intelligens bepároló

Magyarországi képviselet:

Kvalitex

Kvalitex Kft./Ltd.
Pannónia u. 5.
H-1136 Budapest
HUNGARY
T.:(+36 1) 340 4700
F.:(+36 1) 339 8274
info@kvalitex.hu

Érdekli? A készülékről videó:

www.kvalitex.hu • www.heidolph.com

ITT

WTW

Az új inoLab® műszercsalád: pontos, megbízható, biztos

60 years of precise German engineering

100 % WTW QUALITY

Rendkívül pontosan lehet mérni...

... az inoLab 7110 sorozattal

Megbízhatóan lehet dokumentálni...

... az inoLab 7310 sorozattal

INTELLIGENS **I**

DIGITÁLIS **D**

SZENZOROK **S**

Biztonsággal lehet mérni...

... az inoLab Multi 9310 IDS sorozattal

inolab® a legjobb forrásból:

AKTIVIT **Kft.**

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

ISO 9001 Regisztrált