

A TARTALOMBÓL:

Kémiaoktatás
a miskolci Földes Ferenc
Gimnáziumban

Nyílt levél a Lendület
program tudománymetriai
vonatkozásairól

EuCheMS Newsletter,
2011. május



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

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



2011 – A Kémia Nemzetközi Éve



**Thermo Scientific LC/MS/MS és GC/MS/MS
készülékek környezet- és vízanalitikára**

- Hármass kvadrupol tömegspektrométerek kiemelkedő érzékenységgel és felbontással
- EQuan on-line SPE mintaelőkészítő és dúsító rendszer
- TraceFinder szoftver széleskörű komponens könyvtárral és módszergyűjteménnyel
- Kromatográfiás oszlopok és egyéb kiegészítők

AAS

ICP-OES

ICP-MS

UV

FTIR/Raman

GC

GC/MSⁿ

HPLC

UHPLC

LC/MSⁿ

Kizárólagos képviselet:

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

Telefon: 1-221-5536 • Fax: 1-221-5543

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

Thermo
SCIENTIFIC



LXVI. évf., 5. szám, 2011. május



A Magyar Kémikusok Egyesületének
– a MTE SZ 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, NEMES GÁBOR,
ZÉKÁNY ANDRÁS
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
SZÉKERES 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

nka
Nemzeti Kulturális Alap



Beköszöntött a tavasz. A külföldről és belföldről érkező hírek nem melegíthették fel a szívünket az utóbbi hetekben, de az egyre melegebb napsugarak jótékony hatást gyakorolhattak hangulatunkra. Remélem, így lesznek ezzel e számunk olvasása közben is. Igazi májusi egyveleget kínálunk Önöknek.

A Kémia kiválóságai sorozatunkban a miskolci Földes Ferenc Gimnázium mutatkozik be. Az ország egyik nagy múltú és nagy hírű középiskolája kiváló pedagógusgárdája révén méltán vívott ki elismerést és megbecsülést elsősorban a szűk szakma és az érintett szülők körében (sajnos, nem társadalmi szinten), mert az ott folyó természettudományos/kémiaoktatás, mint lapunkban olvashatják, valóban kiemelkedő színvonalú. Nem elsősorban a pedagógusok hibája, sokkal inkább az elmúlt évtizedek oktatáspolitikájának érthetetlen és értelmezhetetlen vargabetűi okozzák, hogy munkájuk eredménye nem nyilvánul meg számos tanulójuk kémiatudásának emelkedő színvonalában, hanem csak a versenyeken edződött, a tehetséggondozásba bekapcsolódott, a kémia iránt igazán érdeklődők kicsiny százalékának sikereiben. A Földes bemutatkozását más iskolák is követni fogják.

A középiskolákban kiváló nyújtó fiatalokból könnyen lesznek kiemelkedő fiatal kutatók, mint Lente Gábor, akit az OTKA a hónap kutatójává választott márciusban. A vele készített, a fiatalok számára igazán sok tanulságot tartalmazó beszélgetést is e számunkban olvashatják. Neve egyébként sem ismeretlen olvasóink előtt, hiszen egyik állandó rovatunk, az igen népszerű Vegyészleletek szerkesztője, szerzője. Ebben a számban egy rövid írást is olvashatnak tőle: az MTA Lendület programja pályázatainak bírálati rendszerén gondolkozott el.

Gyárakban, üzemi, egyetemi, kutatóhelyi laboratóriumokban dolgozó vegyészek, vegyész-mérnökök saját bőrükön tapasztalhatják, hogy nálunk a munkavédelem, balesetvédelem elviselendő rossznak számít. Ez nem tipikusan magyar sajátosság, inkább Európa keleti felén honos. Lett is ebből bajunk. Amíg a szomszédra mutogathattunk, addig elvultunk a mutogatással és a pereskedéssel, azután a nyakunkba szakadt a baj a vörös iszap formájában. Az év elején elhatároztuk, hogy szétnézzünk vegyipari, gyógyszeripari vállalatainknál a munkavédelem, a balesetvédelem, a megelőzés terén. Ezt előkészítendő olvashatják Rác László szakértői cikkét.

A magvasabb és komolyabb tudomány iránt érdeklődők igényét Keszei Ernő és Kovács Balázs cikke hivatott kielégíteni, akiknek írása a femtokémiai kísérletek kiértékelésének speciális problémavilágába visz el bennünket.

Jó olvasást kívánok!

2011. május

Kiss Tamás

Kiss Tamás
felelős szerkesztő

TARTALOM

MUNKA- ÉS BALESETVÉDELEM A VEGYIPARBAN

RÁCZ LÁSZLÓ: Felelős gondoskodás. Negyedszázada született a vegyipari cégek kezdeményezése 142

A KÉMIA KIVÁLÓSÁGAI

ENDRÉSZ GYÖNGYI: Kémiaoktatás a miskolci Földes Ferenc Gimnáziumban 147

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

KESZEI ERNŐ, KOVÁCS BALÁZS: Femtokémiai kísérletek kiértékelése hatékony genetikai és evolúciós módszerekkel 152

Saját lelet (Beszélgetés Lente Gáborral) 158

LENTE GÁBOR: Nyílt levél a Lendület program tudományometriai vonatkozásairól 160

MEGEMLEKEZÉS

KUBINYI MIKLÓS: Varsányi György (1921–2010) 161

OTROK GYÖRGYNÉ: Jedlovsky Pál (1938–2010) 162

KÉMIATÖRTÉNET

MÉNES ANDRÁS: Száztíz éve született Linus Pauling 162

VEGYÉSZLELETEK

Lente Gábor rovata 164

EGYESÜLETI ÉLET

A HÓNAP HÍREI 166

EuCheMS Newsletter, 2011. május 171



Címlap:

A Kémia
Nemzetközi Éve.
Ametiszt, rubin,
spektrumok
– Vámos Endre
képein



Rácz László

Felelős gondoskodás

Negyedszázada született a vegyipari cégek kezdeményezése

Bevezetés

A felelős gondoskodás (születés kori nevén „responsible care[®]”) kezdeményezést – a vegyipari cégek önkéntes programját, amelynek az a célja, hogy EBK- (egészségvédelmi, biztonsági és környezetvédelmi) teljesítményüket a kormányok által megkívánt szinteket meghaladva javítsák – Kanadában negyedszázada, 1985-ben fogalmazták meg először. Az észak-amerikai kezdeményezés elemei idővel megjelentek egyes szakmai szervezetek útmutatóiban (ágazati és regionális standardokban) és/vagy az (állami és közösségi) jogrendszerben.

A közlemény másik aktualitását az utóbbi idők legnagyobb hazai magyarországi vegyipari katasztrófája, a MAL Zrt. ajkai timföldgyárában a kolontári vörösiszap-tároló tavalyi gátszakadása adja.

Jelen közlemény a felelős gondoskodás felfogásának keletkezését, születését és fejlődését, valamint a mögötte meghúzódó filozófiát igyekszik bemutatni.

Vegyipari környezeti katasztrófák – a felelős gondoskodás kezdeményezésének születése

Az amerikai központú Union Carbide bhopali (India) üzemében 1984 decemberében bekövetkezett, sok ezer halálos áldozattal járó metil-izocianát-kiszabadulás és az azt megelőző észak-amerikai tragédiák (Love Canal, Torre Canyon) sokak számára a vegyipar felelőtlenségét és arroganciáját példázták. Olyan vélemény is megfogalmazódott, hogy a vegyipar sokkal többet foglalkozik saját nyereségességével és kínos ügyeinek takargatásával, mint alkalmazottaival, környezetével és vevőivel.

A felelős gondoskodás kezdeményezését („go beyond what is required” – „tegyünk többet a külső kívánalmaknál”) az észak-amerikai vegyiparban indult el. A bhopali incidenst követően kezdetben Kanadában a katasztrófa műszaki tanulságaira,

Jeleztük januári számunkban, hogy ez évben a vegyipari cégek munkahelyi baleset-megelőzési stratégiájával, gyakorlatával is foglalkozunk. Utánanézzünk, mennyi a valószínűsége annak, hogy más vállalatoknál az ajkai timföldgyárában előfordult vörösiszap-ömléshez hasonló katasztrófa alakulhasson ki. Megvizsgáljuk, hogy a munkavédelmi előírások mennyiben zárják ki ilyen esetek kialakulásának elvi lehetőségét, a munka- és balesetvédelem honi gyakorlata pedig mennyire zárja ki ezen elvi lehetetlenség tényleges kialakulását. (A felelős szerkesztő)

míg az Egyesült Államokban (a mai American Chemical Council által) a közvélemény fenntartásainak a korábbiaknál jobb kezelésére (a kommunikációs gondokra) összpontosítottak.

A „felelős gondoskodás” kifejezés 1981 nyarán jelent meg a Kanadai Vegyitermék-gyártók Szövetségének anyagában („Felelős gondoskodás a kanadai vegyiparban”). A dolgozat átvette a Dow Chemical „üzemeltetési fejelem” elvét, kimondva, hogy „fegyelmesszük önmagunkat, hogy az üzemeket úgy működtessük, ahogyan azok működését megtervezték”. 1983-ban a Szövetség a felelős gondoskodás elveit beépítette a kanadai szövetségi kormány részére készített egyik anyagba, ezzel szándékozva jelezni, hogy a vegyipar felelőssége gazdasági szerepén túl kiterjed EBK-kötelezettségei kezelésére is. A Szövetség tagjai az ezt tartalmazó „politikai nyilatkozatot” 1984 áprilisáig aláírták.

Miután 1984 decemberében Bhopalban „bekövetkezett az elképzelhetetlen” (l. fentebb), a Kanadai Vegyitermék-gyártók Szövetsége speciális munkacsoportot állított fel a DuPont képviselőjének vezetésével. Ennek feladata lett a bhopali üzem és közösségi kapcsolódásai biztonsági audit rendszerének kidolgozása. Az elkészült 1985. évi „Biztonsági értékelési folyamat” címet viselő dokumentum és továbbfejlesztett változata útmutató elveket tartalmaz a felelős gondoskodáshoz. Ezzel 1985-ben megszületett a vegyipar önkéntes felelős gondoskodás kezdeményezése.

A felelős gondoskodás elvét követő vegyipari vállalat kötelezettséget vállal EBK-teljesítményének folyamatos javítására és a tevékenységével és eredményeivel kapcsolatos nyitott kommunikációra. E célját a jogszabályoknak és szabályzatoknak történő megfelelés és az azokon felüli kötelezettségvállalás, valamint a kormányzattal és más érintettekkel kötendő együttműködési és önkéntes kezdeményezések követése útján éri el.

Később más cégek, szövetségek is csatlakoztak a kezdeményezéshez és az a vegyipar biztonságos és környezetbarát irányításának egyedülálló etikájává és elkötelezettségévé vált a világ több mint 50 országában, köztük – a résztvevő társaságok körében – Magyarországon is.

A felelős gondoskodás részletesebb tartalma

Ma az ICCA (Vegyipari Szövetségek Nemzetközi Tanácsa) a felelős gondoskodás őrzője és globális szintű menedzsere. A nemzeti vegyipari szövetségek a felelősök a saját nemzeti programok kidolgozásáért és futtatásáért és a felelős gondoskodás tagvállalati szintű végrehajtásának felügyeletéért. Egyes szövetségek megkövetelik tagjaiktól a felelős gondoskodás alkalmazását, mások nem. A nemzeti felelős gondoskodás programok eltérhetnek egymástól a nemzeti jogforrásoknak történő megfelelés, a munkagyakorlat és a kulturális helyzet stb. függvényében.



Az ICCA által kiadott, a felelős gondoskodáshoz kapcsolódó *egyetemes alapelvek* kötelezik a vállalatokat és a nemzeti szövetségeket az együttműködésre, hogy

- folyamatosan javítsák a technológiákat, folyamatokkal és termékekkel kapcsolatos EBK-ismereteiket azok életciklusa során úgy, hogy elkerüljék az embernek okozott és a környezeti károkat;
- hatékonyan használják a forrásokat és minimalizálják a veszteséget;
- őszintén számoljanak be teljesítményükről, eredményeikről és hiányosságairól;
- hallgassanak az emberekre, működjenek együtt velük aggályaik és elvárásai megértése és kezelése érdekében;
- működjenek együtt a kormányokkal és szervezetekkel hatékony szabályozások és standardok kidolgozásában és megvalósításában, azokat teljesítsék, vagy túlteljesítsék;
- nyújtsanak segítséget és adjanak tanácsot a felelős menedzsment erősítésére az értéklánc mentén mindazoknak, akik menedzselik és használják a vegyi termékeket.

A felelős gondoskodás ICCA által jegyzett 2006. évi *egyetemes alapokmánya* (Responsible Care® Global Charter) megteremti a felelős gondoskodás közös globális vízióját és lehetőséget ad a nemzeti programok nagyobb harmonizációjára. Az alapokmány túllép az 1985. évi felelős gondoskodás útmutató eredeti elemein, amikor a folyamatos javítás folyamatát a vegyi termék gyártásán túl kiterjeszti más tevékenységekre is, különösen olyanokra, amelyek a termékek biztonságos használatához és kezeléséhez kapcsolódnak az értéklánc mentén. Az alapokmány a következő kilenc elemet tartalmazza:

1. A felelős gondoskodás fentebb felsorolt egyetemes alapelveinek átvétele.
2. A nemzeti felelős gondoskodás programok alapelveinek (az „alapvető sajátosságok”) átvétele. A felelős gondoskodás „alapvető sajátosságai”:
 - a tagvállalatok által aláírandó útmutató elvek összeállítása és megvalósítása;
 - a felelős gondoskodást jelző elnevezés és logó elfogadása;
 - olyan menedzselési gyakorlat megvalósítása rendszerek, kódexek, politikák vagy útmutató dokumentumok sorozatával, amely segíti a vállalatokat a jobb teljesítmény elérésében;
 - teljesítményjelző készlet kifejlesztése a javulások méréséhez;

- kommunikáció az érintett felekkel a tagságon belül és azon kívül;
- a legjobb gyakorlat megosztása információs hálózaton keresztül;
- a szövetségi tagok bátorítása arra, hogy kötelezzék el magukat a felelős gondoskodás mellett és hogy vegyenek részt abban;
- módszeres eljárások bevezetése és alkalmazása a tagvállalatoknál a felelős gondoskodás mérhető elemei megvalósításának verifikálására.

3. Elkötelezettség a fenntartható fejlődés iránt.

4. Folyamatos fejlődés és teljesítményjelentés (szakaszos értékelés; elkötelezettség műszaki segítség nyújtására; menedzsment rendszer megközelítés elfogadása a felelős gondoskodás kötelezettségeinek teljesítésére; tiszta és biztonságos technológiák hasznosítása; a felelős gondoskodás végrehajtásában az önellenőrzésen felüli tanúsítás kialakítása).

5. A vegyi termékek megfelelő kezelésének erősítése világszerte, termékgondozás („product stewardship”) útján.

6. A felelős gondoskodás kiterjesztésének elősegítése a vegyipari értéklánc mentén.

7. A nemzeti és globális felelős gondoskodás irányítási folyamatának aktív támogatása.

8. Válasz az érintetteknek a vegyipar tevékenységével és termékeivel kapcsolatos elvárásaira.

9. Megfelelő források nyújtása a felelős gondoskodás hatékony végrehajtásához [1].

Az *Európai Vegyipari Tanács (CEFIC)* rögzítette a felelős gondoskodás nyolc „alapvető sajátosságát”, valamint az egyetemes alapelveket (l. fentebb). A nemzeti vegyipari szövetségek (a tagok) saját nemzeti felelős gondoskodás programokat készítenek az említett „alapvető sajátosságok” bázisán, amelyek egyike a szövetségektől megkívánja a tagvállalataik által aláírandó útmutató elvek elkészítését és megvalósítását.

A CEFIC jövőképe a felelős gondoskodás teljesítményére a következőket tartalmazza:

- az üzemeltetők nem okoznak sérülést az alkalmazottaknak, a szerződött partnereknek és a közösségnek;
- nincsenek az üzemek működéséből vagy a termékek elosztásából fakadó ártalmas környezeti vagy emberi hatások;
- a bolygó forrásai hatékony használatának folyamatos javítása;

- a vevői igényeket kielégítő olyan termékek biztosítása, amelyek biztonságosan gyárthatóak, szállíthatóak, használhatóak és deponálhatóak;
- a vegyipart minden egyes érintettje és a nyilvánosság nyitott, becsületes és hiteles iparágnak fogadja el;
- általában a „közbeszédben” a vegyipart olyan felelős iparágnak tekintik, amely fontos szerepet játszik abban, hogy a társadalom számára széles tartományban előnyöket nyújt.

A precíz beszámolás a felelős gondoskodás középpontjában áll. A felelős gondoskodást megvalósító vállalatok EBK-teljesítményadataikat közlik, amiket nemzeti szövetségi tagvállalatok esetén a nemzeti szövetség összegez. A nemzeti szövetségek összegzett adataiból a CEFIC, illetve interkontinentális szinten az ICCA készít összefoglaló beszámolókat. A kulcs teljesítménymutatókat rendszeresen felülvizsgálják. A CEFIC 2006-ban aktualizálta a felelős gondoskodás EBK-beszámolójának útmutatóját [2].

Magyarországon a Magyar Vegyipari Szövetség fogja össze a CEFIC égisze alatti felelős gondoskodás kezdeményezést. Honlapjukon korábban a részt vevő tagvállalatok felsorolását is megtaláltuk, 2010 decemberében csak az ICCA globális alapokmányát olvashatjuk itt [3].

Tudunk arról, hogy nem MAVESZ-tagok is vannak a felelős gondoskodást megvalósítók között: egyes cégek kontinentális vagy interkontinentális szakmai szervezeti tagságuk kapcsán kötelezték el magukat a felelős gondoskodás elveinek követésére.

A 2002. évi johannesburgi „Fenntartható fejlődés” világcúcs utáni fejlemények

Az 1992. évi Földcsúcs (Rio de Janeiro) a vegyi anyagok biztonságával foglalkozó Kormányközi Fórum alakult. Ennek munkája nyomán a 2002. évi johannesburgi csúcsra részt vevő országok azt a célt tűzték ki, hogy 2020-ra a vegyi anyagok használata és termelése az emberi egészségre és a környezetre minimális szignifikáns hatással járjon az alapos kockázatértékelés és kockázatkezelés alapján, az elővigyázatossági elvet követve.

Ennek folyamánként, az ENSZ Környezetvédelmi Programmal (UNEP) párhuzamosan, két kormányzati kezdeményezés indult: a „Marrakech Folyamat” és a „Stratégiai Megközelítés a Nemzetközi Vegyitermék-kezeléshez” (SAICM). Aktua-



litása miatt érdemes kiemelni az EU környezeti felelősség irányelvét is (amely nem csupán a vegyipart érinti). Emellett a vegyipar nyilvános kötelezettségeket vállalt és programokat mutatott be a vegyitermék-biztonság javítására az értéklánc mentén: ezek a már említett felelős gondoskodás egyetemes alapokmánya, továbbá a globális termékstratégia, a hosszú távú kutatási kezdeményezés, a nagy volumenű vegyi termékek programja és a SusChem. Jellemző, hogy az önkéntes kezdeményezések a jogi kötelezettségekkel futnak versenyt, az önkéntes kezdeményezések idővel jogi kötelezettségeké válnak.

Kormányzati kezdeményezések: a Marrakech Folyamat

A Marrakechben (Marokkó) 2003 júniusában indult Folyamat globális célja a regionális és nemzeti kezdeményezések támogatása a fenntartható fogyasztás és termelés (SCP) irányába történő váltás előmozdítására. A Folyamat tízéves keretprogramok készítésére szólít fel.

A Marrakech Folyamat az Európai Unióban több fontos programot és kezdeményezést indított, ilyenek a tematikus stratégia a természeti erőforrások fenntartható felhasználásához, a zöld közbeszerzés (GPP), az integrált termékpolitika (IPP), a környezet-technológiai akcióterv, az öko-menedzsment és auditséma, valamint az ökocímke séma (amelyekkel itt nem foglalkozunk).

Kormányzati kezdeményezések: a Stratégiai Megközelítés a Nemzetközi Vegyitermék-kezeléshez (SAICM)

A SAICM 2003-ban indult, a világ több mint 100 országa által elfogadott, jogilag nem kötelező érvényű megállapodás a johannesburgi csúcson kitűzött fenti cél megvalósítására. A célt többek között kockázatcsökkentéssel, tudás- és információszerezéssel, irányítással, kapacitásbővítési és műszaki együttműködéssel és az illegális nemzetközi kereskedelem megszüntetésével kívánják elérni [4].

Az Európai Unió főbb történelmi hozzájárulásai a SAICM-hez (bár nem szükségszerűen ehhez készültek) a REACH, a GHS és a három többoldalú konvenció (bázei, rotterdami és stockholmi). A 2006 évi REACH rendelettel (vegyi termékek regisztrációja, értékelése, engedélyezése vagy tiltása) lapunk hasábjain a Körvtvélyessy Gyula szerkesztette sorozat foglalkozott. A 2008-ban megújított GHS rendelet globálisan harmonizált rendszer alkalmazását írja elő a vegyi termékek osztályozására és

címkezésére. A Bázeli Konvenció (1992) megállapodás a veszélyes hulladék országhatárokon átnyúló szállításának csökkentésére, a keletkező hulladék mennyiségének és toxicitásának csökkentésére, a környezetbarát hulladékkezelésnek a keletkezés helyéhez minél közelebbi biztosítására. A Rotterdami Konvenció (2004) megállapodás bizonyos veszélyes vegyi termékek nemzetközi kereskedelméhez kapcsolódó felelősségmegosztás előmozdítására, jogilag kötelező érvényű „előzetesen közölt hozzájárulási” (PIC) eljárás bevezetésével. A Stockholmi Konvenció (2004) ugyancsak megállapodás a tartósan megmaradó szerves szennyező anyagok (POP) környezetbe kerülésének megszüntetésére vagy csökkentésére.

Az OECD 2003-ban útmutatót adott ki az ipar, a hatóságok és a közösségek számára a biztonsági teljesítmény indikátorokról (SPI), hogy segítse a veszélyes anyagok biztonságos kezelését életciklusuk során [5].

Kormányzati kezdeményezések: az EU környezeti felelősség irányelve (2004)

A környezeti felelősségről szóló, a tagállamok által 2007 áprilisának végétől alkalmazandó 2004/35/EK irányelv [6] „a szennyező fizet” elvet alkalmazza a környezeti károkozás megelőzésére és a helyreállításra. Környezeti károkozáson a védett fajokon, a természetes környezetben, és bizonyos vizekben és talajban okozott károkat értik (a légszennyezés nem tartozik az irányelv hatálya alá). Környezeti károkozás veszélye esetén az üzemeltetőnek késlekedés nélkül megelőző intézkedéseket kell tennie az illetékes hatóság mielőbbi értesítése mellett. Az illetékes hatóság bármikor kérhet az üzemeltetőtől információt, utasítást adhat az üzemeltetőnek a megelőző intézkedések megtételére, vagy maga teheti meg a szükséges megelőző intézkedéseket. A helyreállítás költségei magukban foglalják a környezeti veszély és fenyegetés, az intézkedési alternatívák költségeit, valamint az adminisztratív, jogi és végrehajtási költségeket, az adatgyűjtési és más általános költséget, továbbá a monitorozási és a felügyeleti költséget is. A megelőző és helyreállítási intézkedések költségeit az üzemeltető köteles viselni, hacsak nem bizonyítja, hogy a kárt harmadik fél okozta és az az alkalmazott megfelelő biztonsági intézkedések ellenére, vagy egy közhivatal specifikus kötelezvényének, utasításának történő megfelelés eredményeként következett be.

Ilyen esetekben a tagállamoknak megfelelő intézkedéseket kell hozniuk ahhoz, hogy az üzemeltető fedezze a felmerült költségeket. A tagállamok eltekinthetnek attól, hogy az üzemeltető a helyreállítási költségeket fedezze, amennyiben az üzemeltető bemutatja, hogy nem hibázott és nem volt hanyag és a környezeti kár kifejezetten engedélyezett kibocsátás, vagy esemény következménye, és az üzemeltető az engedély feltételeivel teljes összhangban járt el, vagy ha a környezeti kár olyan kibocsátás, tevékenység vagy egyéb termékkezelés következménye, amelynek kapcsán az üzemeltető nem tartott környezeti károkozástól az adott tudományos és műszaki ismeretek alapján.

Magyarországon az EU-irányelvet négy törvénymódosítással (1995. évi LIII. törvény a környezetvédelem általános szabályairól, 1996. évi LIII. törvény a természetvédelemről, 2000. évi XLIII. törvény a hulladékkezelésről és 1995. évi LVIII. törvény a hulladékkezelésről), két kormányrendelet-módosítással [219/2004. (VII.21.) a felszíni vizek védelméről és 220/2004. (VII.21.) a felszíni vizek védelméről], továbbá két új kormányrendelet (a természeti károk értékeléséről és a kártalanítási szabályok, valamint a környezeti károk megelőzése és helyreállítása) megalkotásával adaptálták.

Vegyipari kötelezettségvállalások: a Felelős Gondoskodás Egyetemes Alapokmánya és a Globális Termékstratégia (GPS)

Az ICCA – a johannesburgi csúcsot követően – aktualizált alapokmánya 2006 februárjában jelent meg (tartalmát l. fentebb) [1].

Ehhez kapcsolódóan globális termékstratégiát is kiadtak, amely az alapokmány két kulcselemét taglalja: a termékgondozási teljesítmény javítását célozza meg a vállalatok számára javasolt intézkedésekkel, a vegyipari szövetségeikkel és más vállalatokkal és azok szövetségeivel történő együttműködésben, az értéklánc mentén. Az ICCA átfogó termékgondozási útmutatót készített az ipar és a továbbfelhasználók számára [1].

Vegyipari kötelezettségvállalások: Hosszútávú Kutatási Kezdeményezés (LRI)

Az LRI-t az Amerikai Kémiai Tanács (ACC) indította abból a célból, hogy a vegyi termékek potenciális hatásait az emberre, a vadvilágra és a környezetre jobban megismerhessék, a döntéseket információkkal jobban megalapozzák és a társadalmi bizalmat javítsák.



A vegyi termékek, az egészség és a környezet kölcsönhatásainak feltárására független és egyben kiváló kutatóhelyeket szponzorálnak. Az eredményeket ingyenesen közkinccsé teszik. Az LRI-hez csatlakozott a CEFIC és a Japán Vegyipari Szövetség (JCIA) is. A „tudomány helyzete” (State of Science – STOT) tanulmányokat 1988-tól publikálják.

Vegyipari kötelezettségvállalások: Nagy Volumenű (HPV) Vegyi Termékek Program

1998-ban az ICCA célul tűzte ki, hogy 2005-ig leszállítja az OECD-nek a globális vegyi anyag-termelés több mint 90%-át lefedő 1000 nagy volumenű vegyi termék teljes információs adatlapját (Screening Information Data Sheet – SIDS).

Később azt vállalták, hogy 2010-ig elkészítik az USA HPV vegyi termékeinek felhasználási, expozíciós és veszélyességi információit. A kapcsolódó japán „Kihívás Program” más nemzetközi vagy regionális programokban nem érintett HPV-termékek veszélyességi adataira és expozíciós információira terjed ki. Az EU REACH rendelete ugyancsak információgyűjtést ír elő, a vegyi termék veszélyességétől és volumenétől függő tartalommal [1]. A bejelentés után 10 évvel, 2008 közepén csupán 1201 (43%) HPV vegyi termék rendelkezett adatlapokkal és ráadásul ezek harmadánál hiányosságokat találtak [7].

Vegyipari kötelezettségvállalások: SusChem

A 2004-ben indult Európai Technológiai Platform a Fenntartható Kémiaért (ETP SusChem) széles körben fog össze szervezeteket és egyéneket a fenntartható kémia, kutatás, fejlesztés és innováció előmozdítására Európában. Három technológiai szekciója az adott területek tevékenységének koordinálására: ipari biotechnológia, anyagtechnológia és reakció- és folyamattervezés.

A SusChem Stratégiai Kutatási Akcióterv (SRA) három projektje közül egy, az F³ gyár (Faster and more Flexible Future production – Gyorsabb és rugalmasabb jövőbeni termelés) azt célozza meg, hogy a vegyi termékeket és intermediereket olyan folyamatokban állítsák elő, amelyek minimális hatással vannak a környezetre és alkalmazhatóak a termékválaszték gyors változásaihoz.

A kiterjesztett termékfelelősség

A kiterjesztett termékfelelősség (Extended Product Responsibility – EPR) eszméjét a

svéd kormány egyik 1975. évi hivatalos nyilatkozata ismertette, amely szerint „Annak a felelőssége, hogy a termelési folyamatban keletkező hulladékról környezeti és forrástakarékossági szempontból megfelelően gondoskodhassanak, elsődlegesen a gyártónál kell, hogy legyen. Mielőtt a termék gyártását elvégeznék, tudni kell, hogy a termelési folyamatból keletkező hulladékot hogyan kezelik, csakúgy, mint a termék kidobás utáni kezelésének módját”. Az EPR nem csupán a vegyi termékekre, hanem a teljes termékválasztékra kiterjed és a „szennyező fizet” elvet követi.

Az OECD 2001. évi definíciója szerint az EPR olyan környezetpolitikai megközelítés, amelyben a termelő fizikai és/vagy pénzügyi termékfelelőssége kiterjed a termék életciklusának fogyasztó utáni fázisára is. Ezért az EPR-t olyan szennyezést megelőző politikaként írják le, amelynek a célja a tisztább termelés és a hulladékkeletkezés megelőzése (újrafelhasználás, csökkentés, recirkuláció, célszerűen már a termékfejlesztési szakaszban betervezve).

Az első EPR-program, a német csomagolási rendelet 1991-ben a csomagolási hulladék kezelésének felelősségét az iparra hárította. Később az EPR más termékekre (elemek, elektronika, hűtők, gépjármű-abroncsok, háztartási gépek, elhasznált gépkocsik, festékek) is kiterjedt. Az EU 2003. évi elektronikai irányelve kötelezővé teszi az EPR alkalmazását és mérgező anyag határértékeket állít fel. Az EPR alkalmazása terjed az egész világon [8].

A kiterjesztett *termelői* felelősség az EU 2008/98/EK hulladékirányelvének egyik követelménye. Mindazok, akik hivatászerűen fejlesztenek, gyártanak, feldolgoznak, kezelnek, eladnak vagy importálnak termékeket, kiterjedt termelői felelősséggel rendelkeznek. A követendő intézkedések közé tartozik a visszavitt vagy felhasználás után maradt termékek elfogadása, a hulladékok azutáni kezelése saját pénzügyi felelősség alatt [9].

A felelős gondoskodás alapja

Az előírt eljárások be nem tartása, pillanatnyi figyelmetlenség vagy más ok még ma is tragikus következményekhez vezethet. A cégvezetők hozzáállása meghatározó az ilyen esetek kialakulásában, és az azutáni magatartásuk az esetek kezelésében eléggé jellemző. A katasztrófák utáni cégvezetői nyilatkozatokból üzleti etikai megközelítésük is kikövetkeztethető. A tágabb

értelemben vett felelős gondoskodás gazdasági értelemben is megtérül.

Számos példa mutatja, hogy a katasztrófák gyakran sokszerűen érik a felelős személyeket, a hírt a vezetők először el sem akarják hinni, majd bagatellizálják a bajok jelentőségét és/vagy más/másokat okolnak azok bekövetkezéséért. Az 1984. évi bhopali katasztrófában érintett Union Carbide (2001-től a Dow Csoport tagja) honlapján 2011 elején azt olvashatjuk [10], hogy a „bhopali gázszivárgást szabatózsakció okozta”; miközben a cég nagy összegű kompenzációt fizetett az áldozatok családtagjainak, és még az utóbbi időben is megjelentek újabb kártérítési igények. Az időközben állami irányítás alá vont 2010. évi kolontári, deveszeri katasztrófa érintettjének honlapján 2011 elején fellelhető közlemény szerint [11] a 2010. októberi gátszakadaskor „természeti katasztrófa történt”, és ugyanott a részvénytulajános mellett a cég felelősségét vitató jogi képviselői nyilatkozat is olvasható. Más negatív és pozitív kommunikációs példa is idézhető lenne. Előfordulhatnak szakmailag korrektnek tekinthető, vagy emberileg érthető, de az empátia szinte teljes hiányában született és az érintettek jó részének körében erős negatív indulatokat gerjesztő megnyilatkozások.

A felelős gondoskodás alap gondolata az, hogy a részt vevő vegyipari cégek a törvényi és a szabályozási kötelezettségeiket betartják és azokon felül önkéntes vállalásokat teljesítenek. A felelős gondoskodás (a benne levő termék-gondozással együtt) a fenntartható fejlődés szociális felelősség pillérének része. Etikai elemeit az **1. táblázat** listázza.

A menedzsment-iskolákban tradicionálisan tanított üzleti etikai elv szerint a társasági stratégiai vezetés feladata a részvényesek (shareholders) részvényesi értékének (shareholder value), vagyis a profit (részvényérték, osztalék) növelése. Az új „üzleti etika 2.0” a stratégiai vezetés feladatává az értékalapú vezetést, a kötelezettségek túlteljesítését, így az összes érintett (stakeholders) (vagyis nem csupán a részvényesek) [13], korábbi meghatározás szerint a „közjó” (common good) [14] szolgálatát teszi. Az új modell a kétezer éves etikai arany szabályon alapul: „Mindazt, amit akartok, hogy veletek tegyenek az emberek, ti is tegyétek velük” [15].

A fenntartható fejlődés (és a felelős gondoskodás) hosszabb távon megtérül. Gazdasági háttérét egyebek között a „Factor Four” (Négyes szorzó) koncepció [16] is magyarázhatja. A hamburgi Wupperthal Ins-



Régi etika	Új etika
Teljesítsd a törvény megkívánta minimumot!	<i>Tedd a helyes dolgot!</i>
Légy visszafogott!	<i>Legyen látható, amint a helyes dolgot teszed!</i>
Csak a termelési kötelezettséggel foglalkozz!	<i>Termékgondozás az életciklus mentén.</i>
Bagatellizáld a közösségi aggályokat!	<i>Keress és foglalkozz a közösségi aggályokkal!</i>
Kockázati információt csak szükség esetén adj ki!	<i>A közösségnek és az alkalmazottaknak joguk van minden kockázat ismeretére.</i>
Mindegyik cég önmagáért harcol.	<i>Szükséges a kölcsönös segítségnyújtás.</i>

1. táblázat. A felelős gondoskodás új etikája [12]

titute alapítója (és az egyesült Németország első elnökének unokája) és két szerzőtársa négyszeres „forrás-termelékenységet” vizionál megduplázódó jóléttel és a forrásfelhasználás feleződésével több hatás eredményeként. Ezek a következők: kis emisziók, energiatakarékosság, kis nyersanyagfogyasztás, víztakarékosság, helytakarékosság, hulladékmentes termelés, kisebb szennyezés, helyi hozzáférhetőség, természetes anyagok, természetvédelem, szolid éves hozamok, munkahely-megőrzés és -teremtés, könnyű kezelhetőség, zéró egészségügyi kockázat, magas fokú biztonság. Állításukat ötven esettanulmánnyal támasztják alá. Von Weizsäcker ausztráliai szerzőkkel együtt megjelentetett későbbi kötetében [17] arról ír, hogy most már valószínűsítéstől létezik ahhoz, hogy 80%-os, vagy ötszörös „forrás-termelékenység” javulást érjünk el a legnagyobb gazdasági ágazatokban – az épületeknél, az iparban, a mezőgazdaságban és a közlekedésben.

Megemlítendő, hogy az Európai Unió 2011 januárjában (hasonló elnevezéssel)

„Forráshatékony Európa” kezdeményezéséről adott ki kommunikációt. Az elképzelések kétirányúak: egyrészt a természeti erőforrások még fenntarthatóbb hasznosítását, másrészt a forráshatékony és kis (2050-re 80–95%-kal kisebb) szén-dioxid-kibocsátással járó növekedésre való átállást célozzák meg [18]. A részletek megvitatására időközben nyílt konzultációt indítottak.

A fenntartható fejlődés, a felelős gondoskodás tehát követendő irányzat nemcsak etikai, hanem gazdasági szempontból is. Az élenjárók önkéntes vállalásai egy idő után gyakran közösségi, állami jogszabályi előírások formájában minden érintett számára kötelező érvényűvé válnak. ●●●

IRODALOM

- [1] <http://www.icca-chem.org/>; magyarul (csak az egyetemes alapokmány): http://www.mavesz.hu/images/stories/rc_global_charter_magyarul_1.pdf
- [2] www.cefic.org
- [3] www.mavesz.hu
- [4] <http://www.chem.unep.ch/saicm/>
- [5] <http://www2.oecd.org/safetyindicators/>
- [6] Directive 2004/35/CE of the European Parliament and of the Council of 21 April 2004 on environmental lia-

bility with regard to the prevention and remedying of environmental damage OJ L 143, 30.4.2004, p. 56.

- [7] http://www.edf.org/documents/2734_WelcomeTracker.htm
- [8] <http://www.grrn.org/resources/>
- [9] Directive 2008/98/EC of the European Parliament and of the Council of 19 November 2008 on waste and repealing certain directives. OJ L 312, 22.11. 2008, p. 3.
- [10] www.unioncarbide.com/history
- [11] www.mal.hu
- [12] Jacques Bussón: Product Stewardship. TAIEX presentation. Tatranska Lomnica 17 June 2003.
- [13] Gorrell, P.: Business Ethics 2.0. Performance Management, December 2010. http://talentmgmt.com/performance_management/2010/December/1397/index.php
- [14] H. J. Alford, M. J. Naughton: Managing as if faith mattered. University of Notre Dame, 2001.
- [15] Máté evangéliuma 7:12
- [16] E. von Weizsäcker, A. B. Lovins, L. H. Lovins: Factor Four – Doubling wealth, halving resource use. Earthscan Publication Ltd. London, 1997.
- [17] E. von Weizsäcker, K. Hargroves, M. H. Smith, Ch. Desha, P. Stasinopoulos: Factor Five – transforming the global economy through 80% improvements in resource productivity. earthscan Publication Ltd. London, 2009.
- [18] http://ec.europa.eu/resource-efficient-europe/pdf/resource-efficient_europe_en.pdf

ÖSSZEFOGLALÁS

Rácz László: Felelős gondoskodás. Negyedszázada született a vegyipari cégek kezdeményezése

A közlemény áttekinti a felelős gondoskodás kezdeményezés születésének körülményeit, ismerteti tartalmát. Kitér a vegyi anyagokat érintő újabb kormányzati intézkedésekre és az önkéntes vegyipari kötelezettségvállalásokra. Rámutat, hogy az önkéntes kezdeményezések a jogi kötelezettségekkel futnak versenyt. Kísérletet tesz a felelős gondoskodás filozófiai alapjainak felvázolására.

Arany minősítést kapott a MOL fenntarthatósági teljesítménye



A MOL egyedüli kelet-közép-európai vállalként arany minősítést (SAM Gold Class) kapott a fenntarthatóság terén elért eredményei alapján – derül ki a Dow Jones

Fenntarthatósági Indexhez kapcsolódó elemzések készítője, a svájci SAM (Sustainable Asset Management) által most megjelentetett 2011-es Fenntarthatósági Évkönyvből.

A felmérésbe a Dow Jones tőzsdeindex alapján a világ 2500 legnagyobb vállalatát hívják meg. A független értékelés a fenntarthatóság három dimenzióját vizsgálja: a hosszú távú gazdasági, társadalmi és környezeti teljesítményt. Mindezek alapján, 58 gazdasági szektorból, az első 15%-ba eső társaságok kerülhetnek az évkönyvbe.

A MOL tavaly a bronz minősítést kapta, és elnyerte a „Legjobbban fejlődő” („Sector Mover”) vállalat címet. Ennek feltétele, hogy az iparág legjobb vállalata minimum 75%-os eredményt érjen el, a vizsgált cég pedig hozzá viszonyítva 5%-on belülre kerüljön. Ebben az évben a világ 113 olajvállalatából 68 került részletes vizsgálat alá, 17 került az évkönyvbe és közülük 8 érdemelt ki az arany minősítést.

„Az elmúlt években számos, a fenntarthatóságot szolgáló fejlesztési akciót indítottunk el, és örömeinkre szolgál, hogy ezek gyümölcse beérett egy ilyen neves elismerés formájában. A MOL továbbra is elkötelezett fenntarthatósági gyakorlatának folytatására” – mondta Kapusy Pál, a MOL fenntartható fejlődés vezetője.

Banai Endre



Endrész Gyöngyi

■ Földes Ferenc Gimnázium

Kémiaoktatás a miskolci Földes Ferenc Gimnáziumban

2011 a kémia éve. Ebben az esztendőben emlékezünk Marie Curie-re, akit 100 éve, 1911-ben tüntettek ki kémiai Nobel-díjjal és 25 éve elhunyt nagy tudósunkra, Szent-Györgyi Albert biokémikusra, aki mind a mai napig az egyedüli magyar tudós, aki itthon végzett kutatásaiért kapott Nobel-díjat. (A következőkben az idézetek tőle származnak.)

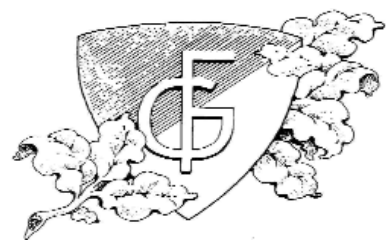
A mi iskolánk is jeles évfordulót ünnepel. Több mint négy évszázada annak, hogy Sárospatak után a helyi lokálpatrióták törekvései eredményeként létrejött az alapfoknál magasabb képzést nyújtó középiskola, az ún. „rectoris schola”. Jogelődjeivel együtt 450 éves az iskolánk, 60 éve létezik a Földes Ferenc Gimnázium, 100 éve a mai épület falai között.

„A természet hatalmas, az ember parányi. Ezért aztán az ember léte attól függ, milyen kapcsolatot tud teremteni a természettel, mennyire érti meg, és hogyan használja fel erőit saját hasznára.”

Országos felmérések szerint a gimnáziumokban tanított tárgyak népszerűségi listájának utolsó helyén évtizedek óta a kémia, illetve a fizika tantárgy áll.

A kémia tantárgy nehézsége – ugyanakkor szépsége – összetettségében rejlik. Sokféle tudásra, képességre van szükség tanulásakor. Van memoriter része, de sok benne a logikai elem. Számos összefüggés segíti a környezetünkben zajló jelenségek értő szemlélését, a bennünk végbemenő folyamatok megértését. Hozzá tartoznak a számítási feladatok, amelyek megoldásához elengedhetetlen a jó matematikatudás. A kémia ugyanakkor kicsit a csodák világa is, a mindig és mindenki számára izgalmas kísérleteivel.

Ennek az összetett tudománynak a helyzete biztosan nem az országos átlagot mutatja a „reáliák fellegvárának” tartott Földes Ferenc Gimnáziumban. A hozzánk



Miskolc – számunkra – legszebb tere, iskolánk 100 éves épületével

érkező diákok nem ijednek meg a nehéz feladatoktól. Szeretik a kihívásokat, hiszen tanulni és tudni akarnak. Bizonyítani akarják tudásukat, képességeiket a – sok esetben, egykor szintén ez iskola padjait koptató – szülők, testvérek, vagy egyszerűen csak önmaguk előtt.

Az 1988/89-es tanévtől a speciális matematika mellett iskolánkban (ismét) beindultak a (régi hagyományokra épülő kémia, fizika, biológia, illetve történelem, informatika) tagozatok. Azóta folyamatosan működik – megyénkben egyedülként – a kémia tagozat. Valójában a „kémia egyedi tantervű csoport” megnevezés a helyes, nemcsak azért, mert erre adta meg az engedélyt az önkormányzat, hanem mert a régebben működő tagozatokhoz képest az óraszám kisebb (jelenleg évfolyamonként 4–5–4–4 óra). Az is igaz ugyanakkor, hogy a két évről, heti 2–2 órára csökkentett normál gimnáziumi kémia óraszámokhoz képest, ma már nagyon örülünk ezeknek az óraszámoknak.

Az elmúlt két évtizedben tanúi lehetünk a természettudományok sajnálatos társadalmi presztízscsökkenésének. Ez a kémia tagozatra első helyen jelentkezők csökkenő számán sajnos érezeti is hatását. Ugyanakkor kiszélesedett a kémiatudást és érettségit igénylő szakmák száma, így –

az első és második helyen való megjelölést is figyelembe véve – kétszeres-háromszoros túljelentkezés mellett válogathatunk a felvételizők közül. A kémia tagozatra általában féléves tanulókat vehetünk föl, de az elmúlt időszakban iskolánk szerkezeti változásai miatt 5 alkalommal is csak harmadosztályos tanulóval dolgozhattunk. (Az érettségi statisztikában éppen ezek a kis létszámú csoportok vannak benne.) Nincsenek ugyan beiskolázási gondjaink, de elgondolkodtató az a tény, hogy miközben Miskolcon 20 év alatt több mint duplájára nőtt a gimnáziumok száma, az iskolába kerülők létszáma megfelelődött (sőt, az általános iskolába járó nyolcadikosok száma ennél nagyobb arányú csökkenést mutat).

Az sem segít a jövőképen, hogy az általános iskolák többségében az utolsó 2 évben tanított kémia heti 1,5 órára redukálódott. Azokból az iskolákból pedig egyáltalán nem számíthatunk kémia tagozatra jelentkezőkre, ahol összevontan tanítják a természettudományokat. Hogy mit változtat ezen a helyzeten a tervezett kötelező természettudományos érettségi, azt most még nem tudjuk. Azt viszont tudjuk, hogy az igen összetett tudást igénylő tagozatunkra érkezők nem szokták döntésüket megbánni.



A KÉMIA KIVÁLÓSÁGAI

Hogy mit jelent nekik a kémia tagozat? Erre a kérdésre válaszoljon a számos tehetséges diákunk közül is kiemelkedő, sokoldalú Parázs Dávid. (A cikket a 2002-ben megjelent iskolaévkönyvünkéből idézzük.)

„A kémia őse az alkímia: mágusok, varázslók ősi szent tudománya. A titkos tudás, amely képes megszerezni a Bölcsek Kövét, s amely annak birtokában bármely hitvány anyagból képes aranyat előállítani.

1998. szeptember 1. Parázs Dávid, a „bármely hitvány anyag” belép a Földes Ferenc Gimnázium tagozatának aajtáján. Nem tud annyit sem kémiából, mint az általános iskolában végeztek, hiszen egy eltérő tantervű nyolcosztályos gimnáziumból érkezett. Tudása kevés, de hatalmas benne a vágy a folyton mozgó anyag felépítésének megértése iránt. S a varázslat elkezdődött és tart négy évig. A Mágus, a nagy varázsló Endrész Gyöngyi tanárnó. Ha magyaráz, ragyog az arca, szavaitól az összefüggések megvilágítódnak, a kémia tudományának birodalma vonzó, érdekes kalanddává változik. Határozott egyénisége lebilincselő, kemény következetessége munkára készítet, humora felold, mint a királyvíz az aranyat. Mi lesz veled, Parázs Dávid?

S a többiek? Itt van például Jakab Gergely, aki már nyolcadikban országos kémiaverseny döntőse lett. . .

Elkészülni, vigyázz, rajt! Le kell győzni magamat. Mi kell hozzá? A kisebbségi érzésem, mert úgy érzem, hogy keveset tudok másokhoz képest. Ez az érzés nem irigységet generál bennem, hanem hajtóerőt. Kellenek hozzá társak, akiket érdemes legyőzni. Kell hozzá Endrész tanárnó egyénisége, tudása, magas fokú hivatástudata, szakmai igényessége. S kell hozzá a kémia, amely egyike a legvarázslatosabb tudományoknak. Ha az ember kitartóan és folyamatosan tanulja, megnyílik előtte egy hatalmas világ, amely magába fogad,

világszemléletet ad, gondolkodásra készítet, és nem szorít ki másét az életéből. Sem a zenét (tíz éve zongorázom az Egressy Béni Zeneiskolában), sem az irodalmat (2001 júliusában egy nemzetközi irodalmi pályázat győzteseként Cipruson tanulhattam), sem a sportot (úszom, futok), sem a társasági életet (kerékpározás, éjszakai túra).

A kémia tagozathoz egy osztály is tartozik: jó osztály, sajátos atmoszférával, igazi diákélettel, egymás meg- és elismerésével. S hozzá tartoznak a semmihez sem fogható kísérletek, például meglátni a vas(III)-rodanid vérvörös színét vagy a metilnarancs indikátor sárgából vörössé válását.

A „hitvány anyag” a Bölcsek Kövének fényétől lassan kezd átalakulni. Parázs Dávid elindult az úton, bár az első és második osztályban még nem jutott országos döntőbe. Harmadik évben a kémia tagozaton végzett munka meghozta az első gyümölcsöket: OKTV-döntőbe jutást, a Nemzetközi Kémiai Diákolimpia válogatóversenyének 6. helyét.

Az aranyá válás elkezdődött. Köszönet érte az iskolának, amelynek ilyen tanárai vannak.”

Parázs Dávid „aranyá válása” folytatódott: végzős diákként a kémia OKTV-n 10. helyezett lett, a Nemzetközi Kémiai Diákolimpián pedig bronzérmes. Vegyész tanulmányait az ELTE-n kezdte, majd ösztöndíjjal Japánban, Oszaka nemzetközi egyetemén diplomázott.

A kémia tagozat tanterve lehetővé teszi, hogy az emelt szintű érettségi követelményrendszerét alaposan megtanítsuk, annak mind az elméleti, mind a számítási feladatait kellően begyakoroljuk.

Az első 3 évfolyamon „hagyományos” sorrendben tanítjuk az általános (9. évfolyam), a szerves (10. évfolyam), és a szer-

vetlen kémiát, az elektrokémiával kiegészítve (11. évfolyam). Az utolsó év pedig az érettségire való felkészülés jegyében telik.

Természetesen az alapfokú laboratóriumi ismeretek és jártasság kialakítása is része a tantervnek. Az első két évben a kvantitatív analízis a kiemelt témánk (sav-bázis és redoxi-titrálások), a 11. évfolyamon pedig a kvalitatív (kationok osztályozása és kimutatása, anionok jellemző reakciói). Az utolsó évben az emelt és középszintű érettségien sorra kerülő kísérletek elemzése a legfőbb feladatunk.

A versenyekre való felkészítés a kétszintű érettségi bevezetése óta némileg átalakult. Addig a versenyek érettségien túlmutató ismereteire nagyobb mértékben került sor a tanórákon, azóta kevésbé, feldolgozásuk inkább szakköri formában folyik. Ennek az oka persze leginkább az, hogy csökkent (országos szinten is) a kémiaversenyeken induló diákok száma. A 90-es években minden tagozatos indult például az OKTV-n, sőt, nagyrésztük bejutott a II. fordulóra is. Az utóbbi években 11-ben a tagozatosok általában fele még elindult a versenyeken, a 12. évfolyamon sokszor már csak azok, akik az előző évben sikeresek voltak. Ennek részint az is az oka, hogy a II. forduló létszáma az elmúlt években alaposan lecsökkent, de az is igaz, hogy egyre kevesebben vállalják a versenyzéssel járó igen sok pluszmunkát. Különösen amióta az OKTV nem váltja ki az érettségit. Igaz, a pluszpontok is csábítók, mivel azonban az érettségire való készülés egészen mást helyez előtérbe, mint az OKTV, az utolsó évben leginkább már csak az „ismétlők” versenyeznek. Ugyanakkor az is tapasztalat, hogy tanítványaink az érettségien rendszeresen választják a kémia érettségit emelt szinten, annak ellenére, hogy a sikeres felvételükhöz gyakran elegendő lenne a középszintű vizsga is.

Tanóra a kémia-előadónkban



Az Irinyi-versenyre készülő a titrálással ismerkednek a laboratóriumunkban





Az utóbbi években tagozatosaink többsége (egyre nagyobb hányada) kémiával tanul tovább. A legnépszerűbb a vegyész, vegyészmérnöki pálya, de többen készülnek orvosnak, gyógyszerésznek is.

Iskolánkban van kémia-előadó, laboratórium, rendelkezünk az alapvetően szükséges taneszközökkel, vegyszerekkel, laboratóriumi eszközökkel és laboráns is segíti munkánkat. Sok minden fejlesztésre szorulna, modern taneszközeink sem nagyon vannak, de iskolánk egyre nehezebb gazdasági helyzete komolyabb korszerűsítést nem tesz lehetővé. Az alapvető dolgok pótlását azonban mindig megoldjuk. Az iskola vezetés is igyekszik megteremteni a megfelelő feltételeket, de sok segítséget kapunk a szülőktől is. A pályázati forrásokat is igyekeztünk és folyamatosan igyekszünk kihasználni, hogy minden eszköz adott legyen a tanítás és a versenyekre készülés során.

A tagozatok eredményes működéséhez szükség van jól felkészült, elkötelezett tanárookra is. Közülük a legnagyobb elismerés Barzó Pálné tanárnőt illeti meg, neki köszönhetjük a kémia tagozat újraindítását is. Nevét, munkásságát sokan ismerjük és tiszteljük. Személye és számos eredményes versenyzője révén iskolánk országosan is hírnévre tett szert a kémia oktatása terén. A kémia tagozaton tanító (illetve korábban itt tanított) tanárok valamenynyien az ő tanítványai voltunk.

A gimnáziumok szakmai munkájának megítélésében az egyik fontos elemet a tanulmányi versenyeken elért eredmények jelentik. A Földes Ferenc Gimnázium mindig is kiemelt feladatának tekintette a tehetséggondozást. A versenyeredmények hosszú sora pedig önmagáért beszél. Ezek elérése diáktól, tanártól egyaránt sok munkát igényel. Igaz, hogy az utóbbi években csökkent a versenyen indulók száma, de a legjobb képességűek munkakedve, elszántsága, kitartása nem változott. A versenyeredményekben a kémia tagozatosok az élenjárók, de kiemelkedő eredményeket értek el a speciális matematika tagozatosok is.

Az iskolánkban folyó kémiaoktatás eredményeire méltán lehetünk büszkéek. 2001-ben, illetve 2006-ban (az azt megelőző 15, ill. 20 év eredményeit összesítve) az iskolák országos rangsorában a 2. helyezettek voltunk az Irinyi János kémiaversenyen, 5., illetve 6. helyezettek a kémia OKTV-n elért eredményeket tekintve.

„Az iskola dolga, hogy megtaníttassa velünk, hogyan kell tanulni, hogy felkeltse a tudás iránti étvágyunkat, hogy megtanít-

VERSENYEREDMÉNYEINK

NEMZETKÖZI KÉMIAI DIÁKOLIMPIA

1994. Kós Gábor	bronzérem
1999. Rokob Tibor András	aranyérem
2000. Rokob Tibor András	aranyérem
2002. Parázs Dávid	bronzérem
2007. Farkas Ádám László	póttag
2009. Bacsó András	póttag

A KÉMIA OKTV-N AZ ELSŐ HÁROM HELYEN VÉGZETT TANULÓINK:

Kós Gábor	3. helyezett	(1993)
Lázár Ágnes	1. helyezett	(1995)
Lázár Ágnes	2. helyezett	(1996)
Rokob Tibor András	2. helyezett	(2000)
Kovács Tamás	2. helyezett	(2001)
Bacsó András	3. helyezett	(2009)

KÉMIA OKTV, IRINYI JÁNOS KÖZÉPISKOLAI KÉMIAVERSENY

Év:	Az Irinyi-döntőn díjazottak száma:	Az Irinyin szóbelizők száma:	OKTV-döntősök száma:	OKTV, az első 10-ben végzetek száma:
1991.	4	2	–	–
1992.	2	2	–	–
1993.	5	5	2	1
1994.	8	6	2	2
1995.	3	2	5	3
1996.	4	1	5	3
1997.	1	–	5	–
1998.	2	2	2	1
1999.	5	3	1	–
2000.	2	–	3	1
2001.	1	–	3	–
2002.	2	1	3	1
2003.	3	3	1	1
2004.	3	1	1	1
2005.	–	–	4	–
2006.	2	–	2	1
2007.	2	–	3	1
2008.	–	–	1	1
2009.	2	–	1	1
2010.	2	1	1	–

AZ IRINYI JÁNOS KÉMIAVERSENYEN 7 DIÁKUNK VOLT GYŐZTES, KÖZÜLÜK HÁRMAN KÉT ALKALOMMAL IS:

Bozsó Ferenc	(1990, 1991)
Valentini Pál	(1992)
Somodi Sándor	(1993, 1994)
Lázár Ágnes	(1994)
Lukács László	(1996)
Rokob Tibor András	(1998, 1999)
Zwillinger Márton	(2010)

son bennünket a jól végzett munka öröme és az alkotás izgalmára, hogy megtanítson szeretni, amit csinálunk, és hogy segítsen megtalálni azt, amit szeretünk csinálni.”

A gimnáziumok megítélésének méltán legfontosabb eleme, hogy az iskola milyen eredményességgel készít fel a továbbtanu-

A Vegyész TORNÁN DÍJAZOTT TANULÓINK:

2000.	Matisz Gergely	2. hely
	Rokob Tibor András	4. hely
2001.	Matisz Gergely	1. hely
2002.	Parázs Dávid	1. hely
	Jakab Gergely	5. hely
2008.	Bacsó András	7. hely
2009.	Bacsó András	4. hely
2010.	Zwillinger Márton	2. hely

lásra. Ezen a téren a Földes Ferenc Gimnázium mindig kiemelkedően jól teljesített. A kémia tagozat működtetése mellett természetesen számunkra is a legfontosabb feladat az érettségire való felkészítés.

A 2001-től beiskolázásra kerülő osztályokkal már az új, kétszintű érettségire készülünk. Nagy kihívást és változást hozott



A KÉMIA KIVÁLÓSÁGAI

ez mindannyiunk számára. Más és legfőképpen másként kellett, hogy tanítsunk. Az új érettséginek ugyanakkor voltak előnyei is. Újrarendeltük a tananyagot (és módszereinket is), amiben az egyértelműen leírt vizsgamodellek, a részletes követelményrendszer, egyszóval az érettségi kiszámíthatósága sokat segített. Iskolánk kémia tagozatos tanárai részt vettek a megfelelő továbbképzéseken, így emelt szinten is rendelkezünk vizsgáztatói joggal. A két-szintű érettséginek ezért mindkét szinten tevékeny résztvevői vagyunk: felkészítő- és vizsgáztató tanárként, sőt multiplikátor-ként, feladatíróként, tankönyvi lektorként is. A tavaszi-nyári érettségi időszakban minden alkalommal a mi iskolánkban (is) folyt kémiből az emelt szintű vizsgáztatás.

Iskolánkban igazán különleges helyzetben van a kémia: a diákok olyan nagy létszámban választják érettségi tantárgyként, hogy általában 2–2 fakultációs csoportot indítottunk (a tagozaton kívül) a 11. és 12. évfolyamon is. A nagyfokú érdeklődés legfőbb oka az iskolánkban működő biológia tagozat, ahonnan a diákok a biológia mellett rendszerint a kémiát választják felvételi tantárgyként. Nincs könnyű helyzetünk. Az első két évben a heti 2–2 óra (általában nagy létszámú osztályokban) a középszintű érettségi anyagát is nehezen teszi elsajátíthatóvá. A szerves kémia, a számítási feladatok, a kísérletek terén a legrosszabb a helyzet. Így hát sok teendő marad az utolsó két év fakultációs óráira. A heti 2 óra ehhez nagyon szűkösen elég, tanártól, diáktól egyaránt nagy koncentrációt igényel. A fakultációnak ugyanakkor nagy előnye az, hogy az odajáró diákok tanulni és tudni akarnak. Sokan közülük orvosi egyetemre készülnek, ahol különösen magasak a bejutási pontszámok. Ezért a diákok motiválásával már nincsen gond, aktívak az órákon, és az otthoni munkában is nagyon megbízhatóak.

2002-ben az azt megelőző 15 évet összesítve 165 diákunk írt kémiből felvételi dolgozatot. (Ennél persze lényegesen nagyobb volt a kémiából továbbtanulók száma, hiszen akkoriban sokan kerültek be a felsőoktatásba a középiskolában szerzett pontjaikkal.) Azt a 15 évet összesítve az országban csupán 2 gimnáziumban felvételiztek ettől nagyobb számban. Mára sem sokat változhatott a helyzet, hiszen az országban a kémiából emelt szinten érettségizők több mint 2%-a a mi iskolánkból kerül ki.

A táblázatokban bemutatjuk az elmúlt 6 év érettségi eredményeit, kiemelve a tagozatos csoportok eredményét. Az érettségi-

átlagok minden esetben az országos átlag fölöttiek. A sok szép teljesítmény közül is kiemelkedik a 2009-ben érettségizett kémia tagozatosok 92,7%-os emelt szintű átlaga!

Diákjaink a felsőoktatásban (is) kiválóan helytállnak. Jó érzés az érettségi találkozókon azt hallani, hogy még az egyetemi évek alatt is hasznosítani tudták az itt megszerzett tudást. De talán még jobb érzés, amikor arról mesélnek, hogyan segítik egymást később is volt diákjaink, és hogy az egyetemen, de később a munkahelyen is elvárják tőlük a magas szintű teljesítményt, mert ők „földesisták”. E nagycsaláddhoz való tartozás érzését tantestületünk tagjai jól ismerik: tanárként is, de sokan vagyunk, akik életünk talán leg meghatározóbb gimnáziumi 4 évét szintén a Földes vörös téglás épületében éltük meg.

„Olyan lesz a jövő, mint amilyen a ma iskolája.”

A Földes Ferenc Gimnázium egyik legkiválóbb diákja, kémiából az eddigi legeredményesebb versenyzőnk, iskolánk speciális matematika tagozatára járt. Rokob Tibor András kétszeres Irinyi-győzelme mellett az OKTV-n második helyezett lett. Az eddigi legfiatalabb magyar résztvevője volt a Nemzetközi Kémiai Diákolimpiának, amelyeken két alkalommal is aranyérmes volt. Érettségi után az ELTE vegyész szakán folytatta tanulmányait, majd elméleti kémikusként a MTA Kémiai Kutatóközpontjában helyezkedett el. „Promotio sub auspiciis praesidentis Rei Publicae” kitüntetéssel 2010. október 7-én avatta doktorrá hazánk köztársasági elnöke. Egykori tanítványunk sikere a jubiláló Földes Ferenc Gimnázium és az ünneplő kémikusok közös öröme. Volt diákunkat Schmitt Pál a következő beszéddel köszöntötte az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karán a kitüntetéses dok-

tori cím adományozására tartott ünnepi közgyűlésén.

„Tisztelt Rokob Tibor András! Tisztelt Hölgyeim és Uraim!

A szép eredményeknek jár az ünneplés. Nemcsak a sportpályákon, a hangversenytermekben, de az iskolák, egyetemek, kutatóhelyek csöndesebb, visszafogottabb, a reflektorfénytől távolabb eső világában is.

Amióta oktatás létezik, a kiváló tanulókkal jelképesen és szó szerint is kezet ráznak. Azok közül, akiknek fontos a tanulás, az ismeretek folytonos bővítése, senki sem ezért a dicséretes pillanatért dolgozik. Mert maga a megszerzett tudás nagyobb érték, mint a begyűjthető cím. Mégis fontos a visszajelzés. Az egyén számára a megtett utat méri, a közösséget pedig jó példával ajándékozza meg.

A mai dicséret igazán különleges. Ilyenből csak nagyon kevés akad. Tanulmányokért ez a legmagasabb elismerés, ami adható: a köztársasági elnök jelenlétében átnyújtott kitüntetéses doktori cím. És ebben nem az elnök személye a fontos, hanem az, amit képvisel.

Az államelnök a nemzet nevében ráz kezet, a közösség köszönetét fejezi ki. Annak ugyanis, aki középiskolai, egyetemi tanulmányai során és a doktori képzésben is mindvégig kiválóan, jelesre teljesített, leginkább köszönet jár. Mert komolyan vette a feladatát, sosem volt rest, mert hozzáállásával, kiváló eredményeivel talán akaratlanul is örök értékek, a műveltségismerés fennmaradásához járult hozzá.

Hölgyeim és Uraim!

Manapság sokat hallunk a természettudományos tárgyak nehéz soráról, s rajta keresztül az oktatás általános problémáiról. Való igaz, hogy az elmúlt esztendőben sok esetben eltolódtak a hangsúlyok: mintha megcsúszott volna az alap az egész

A KÉTSZINTŰ ÉRETTSÉGI EREDMÉNYEI						
Év	2005	2006	2007	2008	2009	2010
Középszinten érettségizők száma	22 fő	9 fő	14 fő	21 fő	17 fő	23 fő
Átlaguk	75,1%	74,2%	85,1%	86,5%	78,6%	77,4%
Országos átlag	–	58,3%	61,9%	65,3%	70,3%	75,5%
Gimnazisták átlaga	–	73,5%	74,7%	75,2%	77,6%	81,2%
Emelt szinten érettségizők száma	11 fő	32 fő	32 fő	11 fő	11 fő	20 fő
Átlaguk	84,7%	72,5%	81,6%	82,9%	92,5%	73,4%
Tagozatos érettségizőink száma	8 fő	14 fő	8 fő	10 fő	10 fő	13 fő
Átlaguk	85,4%	85,2%	83,2%	82,0%	92,7%	75,8%
Országos átlag	–	68,9%	67,0%	74,3%	76,0%	69,9%
Gimnazisták átlaga	–	73,2%	69,1%	78,1%	79,4%	72,9%



iskolarendszer alatt. Már nem a minél több és szélesebb tudás, a minél teljesebb műveltség számít, csak a jó közérzet. Sok jog és kevés kötelesség. Sok lehetőség és kevés maximalizmus.

Én azonban abban hiszek, hogy a tökéletesre törekvés nem hiábavaló. Az elérhető legtöbbet kell akarni. És abban is hiszek, hogy lassanként újra ez a felemelt mérce válik a magyar oktatás igazodási pontjává. Nemcsak az fontos, hogy minél többen tanuljanak a felsőoktatásban, hanem az is, hogy minél többet. Tudomásul kell vennünk, hogy a tehetségek tekintetében is egyre nagyobbra nyílik az a bizonyos olló: vagyis egyre több átlagos, vagy átlag alatti képességre egyre kevesebb kibontakoztatott (vagyis lehetőséghez jutó,

megmutakozó) tehetség jut. Ne essünk abba a hibába, hogy az elvárásokat a rossz tapasztalatok miatt lejjebb visszük, az átlaghoz kötjük. Épp fordítva! A kivételeseknek kell maguk után húzni a többieket.

A természettudományos tárgyak presztízsét is valahogy így, a tehetségek megmutatásával, a nagy eredmények ismertetésével lehetne visszaadni! A kimagasló képességeknek jár a köz tisztelete. Sokkal inkább jár, mint a percmemberkének. Legyen a tehetség újra olyan érték, amit nemcsak elvben tisztel a társadalom, de akár rajong is érte, példaként állítva maga elé.

Tisztelt Ünnepe!

Ritoók Zsigmond, Bolyai-díjas klasszikafilológus professzor mondta egyszer, hogy mindig kellene az új ismeretek, mert

ha csak régieket bírunk, azok „előbb-utóbb megzúdulnak bennünk”. Én ennek fényében természetesen nem kívánhatok mást Önnek és a kémiatudományoknak, mint hogy mindig leljen, leljenek új tudásra. A mai nap ne valami lezárása, hanem a sikeres folyamatok átélése, a továbblépés, a jövő ünnepe legyen. A szükséges visszajelzés megtörtént, lehet folytatni a munkát!

Ehhez pedig kitartást, lendületet, további tudás elkötelezettséget kívánok!”

A szándék, hogy a természettudományos tárgyak presztízse javuljon, a tehetségek, a jelentős szakmai eredmények, az áldozatos felkészítő munka kellő figyelmet kapjon, nagyon fontos. Elérhetővé válhat az a cél, hogy ne csak 2011 legyen a kémia éve.



VISSZHANG

Néhány megjegyzés a Debreceni Egyetem Kémiai Intézetéről szóló cikkhez

1956-ban kezdtem a Kossuth Lajos Tudományegyetemen tanulmányaimat kémia-fizika szakon. Ekkor kezdődött az ötéves képzés, ami abból a szempontból volt hasznos, hogy ötödéven a szakdolgozatírással és tanítással foglalkoztunk, illetve választott speciális kollégiumot hallgattunk.

Kiváló oktatóim voltak mindkét szakon. A szerves és analitikai kémiát Szarvas Pál professzor úr tanította akkor megjelent új könyve alapján. Gergely Artúr is szerepelt előadói között. A szerves kémiát Nánási Pál oktatta. Mindketten mindennapi emberként közeledtek tanítványaikhoz, és ugyanakkor sikerült megszerettetniük a kémiát minden szépségével, nehézségével együtt. A nehéz fizikai kémiát Imre Lajos professzor úr oktatta. Lipták András évfolyamtársunk is volt, később pedig sokat dolgozott a Biokémiai Tanszéken vegyészként, majd rektor is volt.

A kémiai kísérleteket megszerettem, ezért gimnáziumi tanári éveim során évekig kémiaszertáros voltam, és a kémiai anyagvizsgálat fakultációt vezettem Kecskeméten, a Bányaai Júlia Gimnáziumban. Tanítványaim is megszerették a kémiai kísérleteket, de ezekre a sajnálatosan kevés óraszám miatt már szinte alig kerül sor.

Csernus Lászlóné Csongor Lilla

Kémiai veszélyek és méregtelenítés: mi a biztonságos megoldás?

Százakat érintő katasztrófák...

A kémia a kezdetektől a merészesség, a felfedezésvágy, a kockázatvállalás tudománya. Szép, de nem veszélytelen hivatás. Gondoljunk csak az ipari balesetekre, melyek minden évben százával történnek szerte a világban.

1976-ban az olaszországi Sevesóban történt hatalmas robbanás egy vegyi üzemben: egy triklór-fenolt előállító reaktor robbant fel és mérgező dioxin felhő lepte el a környéket. 2000 ember szenvedett dioxinmérgezést, százakat kellett evakuálni. 2001-ben egy toulouse-i gyárban ammónium-nitrát robbant be 31 ember életét követelve. 2005-ben pedig egy németországi kisváros biogázüzeméből szabadult ki mérgező hidrogén-szulfid...

Se szeri, se száma a hasonló baleseteknek, amelyek meglepő módon nagyrészt nem emberi gondatlanság miatt, hanem műszaki hiba, ellenőrizhetetlenül váló reakciók vagy véletlen külső tényezők miatt következnek be. A kémia területén azonban nem csak ilyen katasztrófák fenyegetik az embert...

Milyen toxikus veszélyek fenyegethetnek egy kémikust?

Számos legendás vegyész vesztette életét munkája során, munkaköri ártalomként

elszenvedett mérgezésben. A leghíresebb és legfájdóbb ilyen történet Marie Curie-é, aki épp azért a felfedezésért kapta meg 1911-ben a kémiai Nobel-díjat, amely halálát is okozta.

A zseniális tudós a legkisebb elővigyázat nélkül dolgozott radioaktív anyagokkal, radioaktív izotópot tartalmazó csöveket tartott az íróasztalán és a zsebében – élvezve a szép kékeszöld fényt, amelyet az elemek sugároztak magukból.

Halála legyen minden vegyész számára intő példa: bármilyen sokat is ismerünk meg a bennünket körülvevő világból, a veszélyekről soha nem tudhatunk eleget...

Tegyen a veszélyek ellen!

Testünk biokémiai laboratóriuma a máj. Számátalan toxikus anyagot képes semlegesíteni, 500 féle különböző működést végez, miközben még önmagát is képes regenerálni. Ha azonban túlzott terhelés éli, egyre kevésbé tud alapfeladatának megfelelni. Ilyenkor kompenzációra szorul.

Ilyen lehetőséget nyújt a napjainkban újra felfedezett silymarin, amelyet a hagyományos keleti és ókori görög orvostudomány már évszázadok óta ismer. Ez a csodálatos

májvédő anyag a máriatövis növényből nyerhető ki. A Silegon 140 mg ezt az összetevőt tartalmazza.

Miért ajánlott a Silegon 140 mg étrend-kiegészítő kapszula szedése?

Semlegesíti a májsejtekben lebomló mérgező anyagokból keletkező szabad gyököket, megakadályozza a mérgező anyagok májsejtbe való bejutását, és a túlterhelt májsejtek pótlásával segíti a máj újjáépülését.



Keszei Ernő–Kovács Balázs

■ ELTE TTK Kémiai Intézet
keszei@chem.elte.hu■ ELTE TTK Matematikai Intézet
koboet@cs.elte.hu

Femtokémiai kísérletek kiértékelése

hatékony genetikus és evolúciós módszerekkel

Bevezetés

A femtokémia elnevezés elemi reakciók vizsgálatának kísérleti módszereit takarja; ezek segítségével a kémiai reakciók során végbemenő molekuláris események közvetlenül megfigyelhetők a lejátszódásukhoz szükséges 10^{-15} s = 1 femtoszekundum (1 fs) időskálán. Az elnevezést az 1999-ben Nobel-díjjal kitüntetett Ahmed Hassan Zewail terjesztette el, aki ezen tudományterület megalapozásáért kapta a Nobel-díjat. Ez az időskála nem elérhető az elektronikai eszközökkel végrehajtott mérések számára, ezért a femtokémiában más időmérési módszereket kell alkalmazni. Az időmérés általában valamilyen sebességű (vagy például a mutatós óra esetén valamilyen szögsebességű) mozgás adott idő alatt megtett útjára vezeti vissza az időt. Közismerten a fény mozog a fizikailag elérhető legnagyobb sebességgel, így kézenfekvő az „ultrarövid” idők mérését a fény által megtett úthossz mérésére visszavezetni. Ehhez azonban az is szükséges, hogy az időmérésre használt fényjel (impulzus) időbeli kiterjedése a mérendő idők nagyságrendjét ne haladja meg. Erre alkalmas impulzuslézerek az 1980-as évek közepe óta állnak rendelkezésre. [1,2]

Az impulzuslézerek működése során is érvényes a (Heisenberg-féle) határozatlansági reláció, amely szerint a fényimpulzus időbeli szélességének és energiabeli szélességének szorzata nem lehet kisebb egy küszöbértéknél, amit a kvantummechanika törvényei szabnak meg. A fényimpulzus fotonjainak energiája arányos azok hullámhosszával reciprokával, így minél kisebb az impulzus időbeli szélessége, annál nagyobb a reciprok-hullámhosszban mérhető energiasáv szélessége. A konkrét ösz-

szefüggésekből az következik, hogy látható fényimpulzusok esetén a hullámhosszban kb. 10 nm spektrális szélességű impulzus időbeli szélessége mintegy 100 fs. Mivel az elemi reakciók elindítása (egy molekula gerjesztése abba az állapotba, amelyből a kívánt reakció elindul) meglehetősen szűk energiatartományban (az ún. rezonanciatartományban) történhet csak meg, a hatékony gerjesztés végett a spektrális szélesség 10 nm-nél általában nem lehet sokkal nagyobb, így az időbeli szélesség sem lehet sokkal kisebb 100 fs-nál. Ez az időbeli jelszélesség viszont már összemérhető az elemi reakciók lejátszódásához szükséges idővel, ami a 10–1000 fs tartományba esik. (Mivel elemi reakciók során a molekulákban az atommagok elmozdulása a molekularezgések priódusidejének nagyságrendjébe esik, ezért ez az időintervallum egyúttal azonos a molekularezgésekre jellemző idővel.) Ennek megfelelően a méréshez használt fényimpulzus áthaladásának ideje alatt a reakció jelentős mértékben előrehaladhat, ami megnehezíti a pontos időmérést.

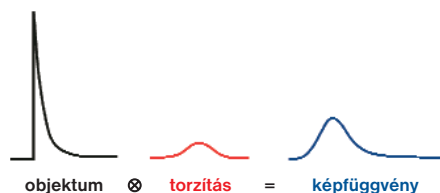
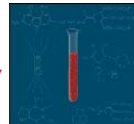
Az időmérés két impulzus egymáshoz képest történő késleltetésén alapszik. Az első (nagy energiájú) lézerpulzus gerjesztéssel elindítja a reakciót, míg a második (kisebb energiájú) lézerpulzus megméri az előidézett reakció okozta optikai változást. Ez lehet a reakció miatt bekövetkező fényelnyelés megváltozása, vagy a fényelnyelés kiváltotta gerjesztés következményeképpen kibocsátott fluoreszcencia intenzitásának megváltozása. [2] A reakció idejéhez mérhető jelszélesség következtében azonban a reakció a gerjesztő impulzus áthaladása közben már észrevehető mértékben előrehalad, és a mérő impulzus áthaladása közben is folyik még. Emiatt a

reakció nem egyetlen meghatározott időpillanatban indul, és nem egyetlen, meghatározott időpillanatban mérjük az annak lefolyása közben kialakuló változást sem. A mérés eredménye ezért egy időben „elmosódó” jel, amelynek matematikai leírása a következőképpen fogalmazható meg.

A mérés során a mérendő függvény olyan módon torzul, mintha azt egyetlen mérőjel kiszélesedése torzítaná el. Ez az egyetlen „mérőjel” a gerjesztő és a mérő lézerpulzusok korrelációjával állítható elő, ami időbeli kiterjedésére nézve egy mindkettőnél szélesebb, de azokra némileg hasonlító jel. A mérendő jelet – ami a reakció lefolyását jellemzi – ennek a mérőjelnek a szélessége miatt elmosódott, torzított jelként kapjuk meg. Az így mérhető jel matematikai leírása igen jó közelítéssel az alábbi integrállal adható meg [2]:

$$i(\tau) \approx \int_{-\infty}^{\infty} o(t) s(\tau - t) dt. \quad (1)$$

A képletben a jelölések az optikai képalkotásban szokásos fogalmakra utalnak. Az $o(t)$ jelölés a leképezendő torzítatlan *objektum*, az $s(t)$ a leképezést torzító tökéletlen optikai berendezés (angolul: *spread*, azaz kiszélesedés), az $i(t)$ pedig a keletkezett kép (angolul: *image*) elnevezéseinek rövidítése. Ennek megfelelően *objektum*, *torzítás*, illetve *képfüggvény* néven említjük őket a továbbiakban. A fenti integrál hatását a matematikában *konvolúciónak* nevezik, amit röviden $i = o \otimes s$ alakban szokás felírni. A mért jelekről tehát elmondhatjuk, hogy az a reakció során pillanatszerűen előálló o objektumfüggvény s torzítással kapott i képe, azaz a két fényimpulzus τ késleltetése esetén mérhető képfüggvény. A konvolúció hatását az **1. ábrán** szemléltethetjük.



1. ábra. A kinetikai jel (objektum) torzulása a gerjesztő és mérő impulzusok (torzítás) hatására

Szavakban összefoglalva az objektum a következő torzulásokat szenved el a konvolúció során:

- időben kiszélesedik;
- csökken az amplitúdója;
- csökken a jelváltozások mértéke;
- eltűnnek a szakadások.

A mérés értelmezéséhez ettől a torzítástól kell megszabadulni; azaz a torzítatlan jelet kell előállítani. A feladat tehát az ismert $s(t)$ torzítás és $i(t)$ képfüggvény ismeretében az $o(t)$ objektum meghatározása, ami a valóságban lejátszódó kémiai folyamatot jellemzi a mérési eljárás torzításától mentesen. Ez a feladat a fenti integrálegyenlet megoldását jelenti, ami az $o(t)$ függvényt eredményezi. A megoldás a konvolúciót „tünteti el” (annak inverz művelete), ennek megfelelően az eljárás neve *dekonvolúció*. Az egzakt megoldás azonban nehéz, és csak akkor lehetséges, ha az $i(t)$ képfüggvény pontosan ismert. Ha a képfüggvényt csak kísérleti hibákkal terhelve ismerjük (márpedig a mérések mindig tartalmaznak kísérleti hibákat; ha más nem, kerekítési, azaz digitális csonkítási hibákat), akkor *végtelen számú* megoldása létezik a matematikai feladatnak, amelyek közül azonban csak egyetlen megoldás az, amelyik a kémiailag helyes objektumfüggvényt adja.

Azt mondhatjuk tehát, hogy a konvolúció inverz műveletét szeretnénk végrehajtani, ám a jó megoldást eredményező egyszerű dekonvolúciós módszer nem ismeretes. Ennek hiányában egyszerű és gyors numerikus dekonvolúciós módszereket keresünk, amelyek megbízhatóan szolgáltatják a jó megoldást.

Dekonvolúciós módszerek

Az egyik elterjedt dekonvolúciós módszer az ún. *rekonvolúció*, ami azonban csak *indirekt de-*

konvolúciót tesz lehetővé [3]. A módszer lényege, hogy a kémiai folyamatról gyűjtött kísérleti adatok felhasználásával összeállítunk egy valószínű reakciómechanizmust, aminek alapján felírjuk az optikai abszorbanca, vagy a fluoreszcencia időbeli változásának modellfüggvényét (ez lesz a feltételezett objektumfüggvény) amelyben előfordul több ismeretlen paraméter. Ezt a függvényt konvolváljuk az ismert torzítófüggvénnyel, ami a várt képfüggvényt modellezi. Az így kapott („rekonvolváltnak”) függvény paramétereit becsljük a kísérletileg meghatározott képfüggvényhez történő illesztés segítségével.

A módszer hátránya nyilvánvalóan az, hogy az (ismeretlen) reakciók bonyolultak lehetnek, azok tulajdonságait éppen a femtokémiai mérések alapján szeretnénk megtudni, így az indirekt úton kideríthető mechanizmus nem igazán megbízható. A modellfüggvény rögzítését követően legfeljebb annak paramétereit tudjuk meghatározni, azt nem igazán, hogy helyes volt-e a feltételezett modell.

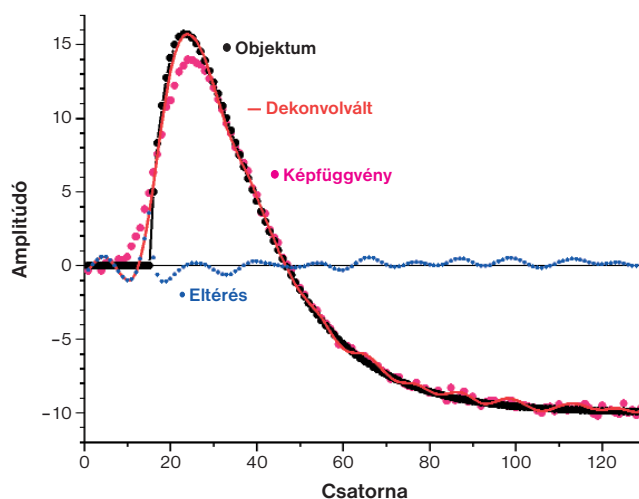
Az egyik legelterjedtebb *direkt dekonvolúciós* módszer az *inverz szűrés* [3]. Ehhez már nincs szükség az objektumfüggvény modelljére. Alapja az a matematikai összefüggés, amely szerint az (1) egyenlet mindkét oldalát Fourier-transzformálva a konvolúció szorzásba megy át [2,3]. A szorzásnak már létezik egyszerű inverz művelete, az osztás. Ezért ha a képfüggvény

Fourier-transzformáltját elosztjuk a torzítás Fourier-transzformáltjával, megkapjuk a keresett objektum Fourier-transzformáltját, amiből inverz Fourier-transzformációval megkapható az objektumfüggvény. Osztani természetesen csak nemzérus mennyiséggel lehet, és éppen ez szab korlátot a módszer alkalmazhatóságának. A lassan változó képfüggvény és torzítás következtében mindkettő Fourier-transzformáltjában a kis frekvenciáknál viszonylag nagy amplitúdók jelentkeznek, de a nagyobb frekvenciák felé az amplitúdó hamar igen kicsivé válik, így közel zérus értékű képfüggvény-transzformált értékeket kell osztani közel zérus értékű torzításfüggvény-transzformált értékekkel. A kísérleti zajok hatására ezek az értékek zérus körül ingadoznak, így a hányadosuk ingadozása erősen felnagyított lesz. Az inverz Fourier-transzformáció emiatt sok nagyságrenddel nagyobb zajt eredményez, mint amekkora a zajmentes jel lenne. Kísérleti hibák esetén ezért ez a módszer korrekciók beépítésével sem vezet igazán jó eredményre. Az egyik legjobb eredményt mutatjuk be a **2. ábrán**, egy korábbi közleményünk alapján [3].

A másik gyakran használt direkt módszer az *iteratív dekonvolúció*, melynek során az objektumfüggvény valamely o_0 közelítését (ami általában maga a mért képfüggvény) konvolváljuk a torzítással és összehasonlítjuk a képfüggvénnyel, majd a kettő eltérését figyelembe véve valamely algoritmus szerint módosítunk ezen a közelítésen, így kapjuk a következő o_1 közelítő függvényt [3]. Ezt az iterációt egészen addig folytatjuk, míg valamilyen korlát alá nem csökkentjük a közelítés konvolváltságának eltérését a mért képfüggvénytől. Sajnos, a kísérleti hibák miatt ez a módszer is hasonló problémákhoz vezet, mint az inverz szűrés, bár a zajerősítés mértéke sokkal kisebb.

Mindkét fenti módszer akkor vezet használható eredményekhez, ha a dekonvolúciós eljárásba minél több olyan megkötést építünk be, amely a megoldást a jó irányba tereli; például ha a megoldásfüggvényről szerzett előzetes ismereteinket használjuk fel a megkötések megfogalmazásához. Ennek alapján kézenfekvőnek tűnt, hogy kihasználhatjuk a konvolúció által okozott torzítás részletes tulajdonságait is a megoldás „jó irányba

2. ábra. Szintetikus adatok dekonvolúciója inverz szűréssel. [3] A fekete körök a hibamentes objektumfüggvényt jelölik, amit szintetikus adatok esetén ismerünk. A ciklámenszínű körök az ebből számítható mért függvény pontjai, amelyek már a véletlenszám-generátorral szimulált mérési hibákat is tartalmaznak. A kisebb kék körök a kettő különbségéből adódó reziduális eltéréseket jelölik. A piros dekonvolváltnak követi a fekete objektum hirtelen felfutását, a zajcsökkentés hatására pedig hullámzik is, ami az eltérésen jobban látszik



terelése” érdekében. Ennek felismerésével jutottunk el az evolúciós módszerek, ezen belül is a genetikus algoritmusok alkalmazásához. Ezek a módszerek jól adaptálhatók a dekonvolúciós feladat megoldására, viszonylag gyors konvergenciát biztosítanak, és mint később látni fogjuk, a gyakorlatban elterjedt direkt dekonvolúciós módszerek hibái segítségükkel elkerülhetők.

Evolúciós és genetikus módszerek

Ezen optimalizáló algoritmusok alapjainak lerakása John Holland és kutatócsoportja munkásságához kapcsolódik [4], akik a természetes szelekció mechanizmusának „utánzásával” hagyományos numerikus módszerekkel nem kezelhető optimalizációs feladatok megoldására dolgoztak ki módszereket. Röviden szólva azt a természetes szaporodási folyamatot modellezték, amelyben generációk sokaságán át egyre rátermettebb egyedek jönnek létre. A genetikus algoritmusok általában a következő elven működnek. Az adott optimalizációs feladat megoldását mint egy *populáció* egy *egyedét* jelenítik meg. Az egyed egy lehetséges megoldás, a populáció pedig együtt számon tartott megoldások összessége. A megoldások (egyedek) *értékelése* során kiszámítjuk azok *rátermettségét* (angol eredetű magyar kifejezéssel: *fitness*), ami a megoldástól elvárható tulajdonságok teljesítésének mértéke. A nagy rátermettséggel rendelkező egyedeket nagyobb valószínűséggel *választjuk ki* a szaporításra, amit általában két szülő *keresztezésével* érünk el. (A keresztezést szokás *rekombinációnak* is nevezni, két *haploid* kromoszóma *diploiddá* egyesülésére utalva.) A keresztezéssel létrejött új egyedjelöltet először *mutációnak* vetjük alá, majd ezt követően válhat *utóddá*, egy lehetséges új egyeddé. Elegendő számú utód létrehozása után *kiválasztjuk* a következő generációt. Ez vagy csak az utódgenerációból, vagy a szülők és utódok együtteséből történhet, de van olyan eljárás is, ahol a szülők generációjából csak a legrátermettebb(ek) kerül(nek) be az új generációba, egyébként az az utódokból áll. (Ezt nevezik *elitizmusnak*, ami garantálja, hogy az új generáció legrátermettebb egyede soha ne legyen kevésbé rátermett, mint a megelőző generációé.)

Az eljárás mindig a *kezdeti populáció* előállításával indul, majd ezt követi az újabb generációk kialakítása a fenti eljárással. Minden egyes generáció egy új iterációs lépésként értelmezhető. Az iteráci-

ót addig folytatjuk, amíg elérünk egy megfelelő konvergencia-kritériumot a legrátermettebb egyed esetében, vagy meghaladjuk a generációk számának előre kitűzött felső korlátját. Az eljárás mindkét esetben befejeződik, és megoldásként az aktuális generáció legrátermettebb egyede – a *nyertes* – lesz az eljárás eredménye.

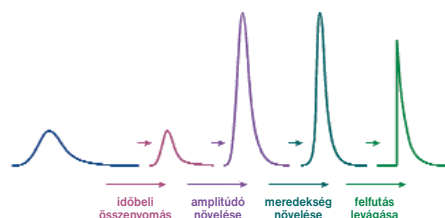
A leelterjedtebb genetikus algoritmusban – amely a legközelebb áll a természetes szaporodás és kiválasztódás módjához – a *genotípust* egy *bináris* (0 és 1 elemekből álló) *jelsorozat* kódolja, amit *kromoszómának* neveznek. Ebből a jelsorozatból lehet „dekódolni” a tulajdonképpeni egyedet (azaz megoldást), amit *fenotípusnak* neveznek. A *genetikus operátorok* a bináris jelsorozaton végeznek (bináris) műveleteket, amelyek hatására a 0-ból és 1-ből álló jelsorozat megváltozik. A genetikus operátorok végzik a kiválasztás, a keresztezés, a mutáció stb. műveletét. Ez a „klasszikus” genetikus algoritmus azonban a feladatok sokrétűsége miatt hamar szűk keretnek bizonyult. Az egyik legkézenfekvőbb változtatás a bináris jelsorozat helyett valós számokból álló vektorok alkalmazása, amelynek elemei pl. lehetnek egy optimális megoldás paraméterei, de a vektor lehet *maga a megoldás* is. (Utóbbi esetben természetesen nincs szükség fenotípusra.) Valós jelsorozat esetén a genetikus operátorok nem bináris műveleteket végeznek, hanem *aritmetikai* (számítási) műveleteket. Gyakran célszerű a kezdeti populációt úgy előállítani, hogy egyedei ne teljesen véletlenszerűek legyenek, hanem eleve rendelkezzenek jelentős mértékű rátermettséggel. A különböző algoritmusok még abban is különbözhetnek, hogy a számítás során egy egyed kódolásához két kromoszómát alkalmaznak-e (*diploid* szaporodás), vagy csak egyet (*haploid* szaporodás). A genetikus algoritmusok sajátosága, hogy több egyedből áll a populáció, ebből választanak ki alkalmanként két szülőt a keresztezéshez, és a kiválasztáson és a keresztezésen túlmenően mutációt is alkalmaznak. A tágabb értelemben vett evolúciós módszerek esetében ezek nem mindegyikét alkalmazzák a megoldás keresése során.

Napjainkra kialakult a genetikus algoritmusok elterjedt használata, amelyek az eredetileg javasolt, természetet utánzó eljárásnak igen sokféle változatát foglalják magukban. Ezek használhatósága a jól megválasztott adatszerkezeten és a hatékony genetikus operátorokon múlik. A következőkben először bemutatjuk az általunk kifejlesztett genetikus algoritmus

egy-egy lépéseit, amelyhez helyenként hozzáfűzünk néhány fontos speciális megjegyzést.

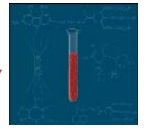
Teremtés és rátermettség

Igen gyakori megoldás, hogy a genetikus algoritmus kezdeti populációját *véletlenszerűen* állítják össze. Előzetes vizsgálatainkból azonban kiderült, hogy a dekonvolúciós eljárásához ez a módszer nem alkalmazható. Célravezetőnek bizonyult azonban az a módszer, amelynek segítségével már annyira rátermett egyedeket (objektumfüggvényeket) „teremtünk”, amelyek képesek a következő generációk során igen nagy fitnessszel rendelkező egyedek létrehozására. Esetünkben a legcélszerűbb adatszerkezetnek az tűnik, ha a keresett megoldásfüggvény (a populáció egy egyede) eleve olyan alakú, mint maga a torzítatlan képfüggvény, azaz azonos időközökben egymást követő jelmagasságok (amplitúdók) sorozata. Ennek megfelelően az egyed egy valós számsorozat, amely maga a gén; nincs szükség ebből fenotípus kiszámítására. Az ilyen egyedek előállíthatók a mért képfüggvényből a konvolúció korábban felsorolt torzításainak figyelembevételével, ezen hatások minél hatékonyabb „visszaforchtásával” a *teremtés*, azaz a kezdeti populáció előállítása során. A teremtés lépéseit a **3. ábra** szemlélteti egy olyan objek-



3. ábra. A teremtési operátorok hatása egy reaktáns esetén mérhető jelre (képfüggvényre)

tumra, amely a femtokémiai reakció egy reaktánsának megfelelő jelsorozat. A konvolúció hatásának megfordítása során először összenyomjuk a jelsorozatot, majd megnöveljük az amplitúdóját és a meredekségét, végül a sorozat elejét a pillanatszerű keletkezés érdekében levágjuk. (A reaktáns a gerjesztő lézerezés hatására keletkezik. Ha a gerjesztés pillanatszerű lenne, a reaktáns végtelen rövid idő alatt, hirtelen keletkezne.) Mivel azt szeretnénk, hogy a kezdeti populáció egyedei minél változatosabbak legyenek, a teremtés során véletlen paraméterek felhasználásával alkalmazzuk a teremtés egyes lépéseit. Ez



azt jelenti, hogy az összenyomás, az amplitúdó- és meredekségnövelés, valamint a levágás helye véletlen számok függvénye, így az egyes egyedek egymástól különbözőek lesznek.

Az egyes egyedek fitnessét – a keresett megoldáshoz való közelségüket – valamilyen módon számszerűsíteniük kell. Mivel maga az objektum nem ismert, ezért az egyetlen lehetőség az, hogy az egyedeket a torzító impulzussal konvolváljuk, az így kapott rekonvolváltakat pedig a mért jelhez (a képfüggvényhez) hasonlítjuk; kiszámítjuk a kettő eltérését. Az egyes mérési adatok eltéréseinek átlagos értékét e -vel jelölve egy lehetséges rátermettségi függvény például a következő:

$$\text{fitness} = \frac{1}{1 + e^2} \quad (2)$$

Láthatóan ez a függvény zérus eltérés esetén éppen 1, míg az eltérések növekedése esetén monoton csökken.

Keresztezés, mutáció és elitizmus

A kezdeti populáció létrehozása után elkezdődhet a populáció szaporítása, a tulajdonképpeni evolúció. A létező genetikus algoritmusok erre sokféle lehetőséget kínálnak, amelyek túlnyomó része valószínűségi alapon működik. A legegyszerűbb lehetőség az, amikor minden egyed egyforma valószínűséggel lesz szülő. Egy másik lehetőség, mikor az egyes egyedek esélye a szülővé válásra valamilyen módon súlyozva van. Például minél fittebb egy egyed, annál nagyobb valószínűséggel válik szülővé. Ez utóbbi kiválasztási eljárást igen gyakran egy ún. *rulettkerek* módszerrel szokták megoldani, amit mi is alkalmaztunk. Az elnevezés magyarázata a következő. Képzeljünk el egy rulettkereket, amit körcikkekre bontunk. Minden egyes körcikk megfelel egy lehetséges szülőnek, a körcikk területe (vagy ívhossza) pedig arányos az adott szülő fitnessével. A keréken véletlenszerűen kiválasztunk egy szögértéket, így találunk meg egy kiválasztott szülőt. A keresztezéshez két kiválasztott szülőnek megfelelő jelsorozat azonos sorszámú elemeit a szülők rátermettségével súlyozva átlagoljuk, így kapjuk meg az utódot. A súlyozott átlagolás következményeként a rátermettebb szülők tulajdonságai nagyobb mértékben befolyásolják az utódok tulajdonságait. (Meggjegyezzük, hogy az utódok ily módon történő létrehozása a *haploid* szaporodásnak felel meg, mivel mindegyik szülőnek csak egyetlen génje vesz részt az utód kialakításában.)

A természetben a szaporodás során általában minden újonnan létrejövő utód génjei *mutálódnak*. Ez az átlagképzéssel történő szaporodás esetén kiemelten fontos, mivel az egyedeknek vannak olyan tulajdonságai, amelyek a keresztezés során korlátok közé vannak szorítva. Ilyen például a jelsorozat maximuma. Egy utód maximuma legfeljebb akkora lehet, mint valamelyik szülőé, vagy annál kisebb. A mutáció ennek megfelelően esetünkben a jelsorozat elemeinek egy véletlen számmal történő szorzását jelenti, amely csökkentheti is, növelheti is a jelsorozat amplitúdóját, ezzel a maximumát is. Annak érdekében, hogy a mutáció ne növelje meg a zajt (az egymást követő elemek ingadozását), igen körültekintő módon kellett „kordában tartani” a változásokat. A zajerősítést az a mutáció akadályozza meg hatékonyan, amelyik a jelsorozat szomszédos elemeit összehangoltan, „simán” változtatja. Mi egy véletlen Gauss-függvényt állítunk elő, amit hozzáadunk a mutációra váró utódjelölt jelsorozathoz. A függvény amplitúdója lehet pozitív vagy negatív, annak értékét egy előre megadott intervallumon belül a véletlenszám-generátor határozza meg. Hasonlóképpen véletlen választások eredménye a függvény hossza, valamint maximumának helye is. Ha a véletlen következményeként a mutáló függvény „kilóg” a jelsoróból, akkor csak azt a részét adjuk hozzá a jelhez, amely azzal időben átfed. Ezzel a mutációs módszerrel nemcsak a zaj erősítését sikerült megakadályozni, de elértük a kísérleti zaj kismértékű csökkentését is.

A szülő kiválasztás, keresztezés és mutáció addig folytatódik, amíg létrehozunk a következő generáció megfelelő számú egyedét. Dekonvolúciós genetikus algoritmusunk fontos eleme még az ún. *elitizmus*, amelynek a természetben nincs mindig megfelelője, ám az algoritmus hatékonyságát javítja. Az elnevezés azt takarja, hogy minden generációból a legrátermettebb („elit”) egyedeket és ennek mutációját keresztezés nélkül mindig betesszük a következő generációba. Ennek megfelelően előzetesen elegendő a populációszámánál kettővel kevesebb egyedeket létrehozni. Az elitizmus azért fontos, mert így az algoritmus során a rátermettség monoton nő, semmiképpen sem csökkenhet.

A fenti műveletek eredményeképpen létrejön egy újabb generáció, amelyben ismét meghatározzuk az egyedek rátermettségét. Ezután kezdődhet a következő generáció létrehozása. Az egymást követő populációkat addig szaporítjuk, amíg azok legjobb egyedének rátermettsége egy elő-

írt korlát fölé nem emelkedik, ami egyúttal azt jelenti, hogy a kitenyészített populációban van legalább egy olyan egyed (a *nyertes*), amelyet rekonvolválva a mért képfüggvény és az így előállított megfelelőjének eltérése alatta van egy előre megállapított közöbértéknek. (Ha a legjobb egyed nem éri el ezt a korlátot, akkor az előre megadott legnagyobb generációs szám után az eljárás leáll, és a nyertes az addigi leg fittebb egyed.) A dekonvolúció eredménye – a keresett megoldás – az így kapott jelsorozat lesz.

Szintetikus adatok dekonvolúciója

A genetikus módszereket először szintetikus adatokon próbáltuk ki. Ezeket úgy állítottuk elő, hogy egy kétlépéses reakció kinetikai modelljéből kiszámítottuk a reaktáns, a köztitermék és a végtermék koncentrációját, majd az azokhoz rendelt elnyelési spektrum alapján kiszámítottuk a különböző hullámhosszakon mérhető pillanatnyi (torzítás nélküli) jelsorozatot. Amint tudjuk, a reaktánsnak megfelelő elnyelés pillanatszerűen felfut, majd lassan lecseng. A köztitermék jele lassabban fut fel, és ugyancsak lecseng, míg a végtermék jele egy lassan felfutó, telítésbe menő függvénynek felel meg. Ezek közül nyilvánvalóan a reaktáns jelsorozata torzul a legnagyobb mértékben (l. *1. ábra*), és annak kezdeti szakadását a legnehezebb helyreállítani a dekonvolúció során. [3] Ennek megfelelően az eljárást először ezzel a függvénnyel próbáltuk ki.

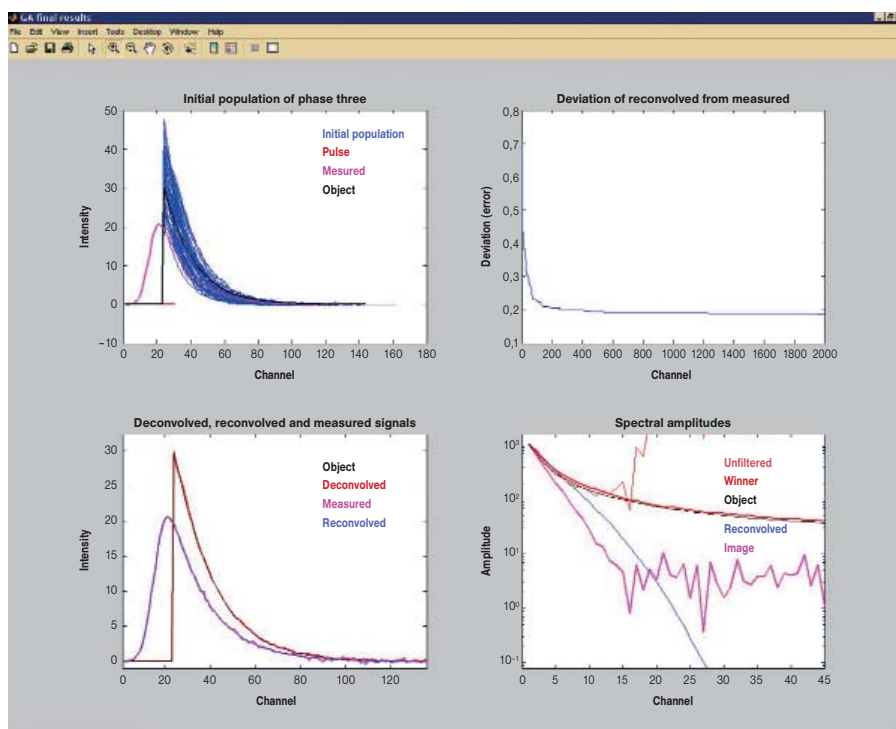
A dekonvolúciós eljárást Matlab környezetben, egy több szegmensből (m-fájlból) álló programcsomag formájában kódoltuk. Az optimális kezdeti populációt eleinte próbálgatással hoztuk létre. Ennek során azt tapasztaltuk, hogy olyan kezdeti populációt kell „teremteni”, amelynek egyedei nem különböznek túlzottan a keresett objektumtól, és szaporodásuk során ahhoz gyorsan közelebb jutnak. A megfelelő populáció előállítására elég hosszadalmas próbálgatásokkal alkult csak ki, ami nagyon időtrábló tevékenység, és meglehetősen jól át kell hozzá látni a teremtési paraméterek hatását a létrehozandó populációra. Emiatt megpróbáltuk a teremtést is evolúciós módszerekkel kiváltani, amelyekkel a fent leírtaknak megfelelő kezdeti populációt próbálgatás nélkül tudjuk létrehozni.

A teremtést végző algoritmus két fázisra bomlik szét. Ebben a két fázisban határozzuk meg az esetleges hirtelen felfutás

helyét és a maximum közelítő értékét. Ezt követi azután a harmadik fázis, a tulajdonképpeni genetikus algoritmus, az első két fázis során kialakított kezdeti populációból indulva. Az algoritmus kialakításánál szem előtt tartottunk még egy nagyon fontos szempontot; a három különböző típusú reakció lehetőleg egyetlen, azonos eljárás keretében történő kezelését.

Az első fázis a felfutás vágási helyének megkeresése. Ezt – és a jelsorozat maximumának értékét – első közelítésben egy inverz szűréssel határozzuk meg. Ez természetesen nem teljesen pontos, ezért több nagy egyszámú kezdeti populációt hozunk létre a közelítőleg meghatározott vágási hely egy tágabb környezetében minden lehetséges vágási helyen (azaz diszkrét időpontban). Minden egyes populációt néhány generáción át tenyésztünk, majd megvizsgáljuk, hogy melyikben található a legátermettebb egyed. Ezen egyednek megfelelő vágási helyet kiválasztjuk, és ezzel indítjuk a második fázist. A második fázisban az előző fázis során meghatározott vágási hely körül egy szűkebb környezetben létrehozunk több kezdeti populációt, melyek egyszáma már kisebb, mint az első fázis során volt. Ezen populációkat ismét szaporítani kezdjük, ám most nem a legjobb egyedet keressük, hanem azt a populációt, amely a legtöbbet fejlődik (rátermettsége a legjobban nő) az egymást követő generációk során az első fázishoz képest. A szaporítás ebben a fázisban már sokszor (pl. 20-szor) egymás után ismétlődik, a véletlenszám-generátor különböző véletlen sorozataival együtt. Amelyik populáció a legtöbbször érte el a legjobb eredményt, azt tekintjük a teremtés „nyertesének”, és annak szakadásihely- és amplitúdónövelés-értékeivel végezzük el a végső genetikus algoritmus kezdeti populációjának kialakítását.

Az első két fázis lefutása után a keletkezett kezdeti populáció grafikusan megtekinthető, a felhasználó pedig az addigi eredmények ismeretében dönthet a harmadik fázis elindításáról a kapott kezdeti populációval, illetve a program leállításáról és más kezdeti paraméterekkel történő újraindításáról. Amennyiben a felhasználó elégedett a „teremtett” populációval, akkor a program az annak megfelelő paraméterekkel (időbeli összenyomás, amplitúdó- és meredekségnövelés, levágás helye) előállítja a kívánt egyszámú kezdeti populációt, és elkezdődik a tulajdonképpeni genetikus algoritmus, amelynek célja immár a végleges megoldás keresése. Amikor ez az eljárás megáll (vagy az előre megadott rátermett-



4. ábra. Reaktáns jellegű szintetikus femtokémiai adatsorozat dekonvolúciójának eredménye a Matlab program futása után kapott grafikus képernyőn. A bal felső diagramban a bemenő adatokat és a kezdeti populációt láthatjuk. (A fekete vonal a hibamentes objektumfüggvény, amit szintetikus adatok esetén ismerünk. A ciklámen-színű vonal az ebből számítható mért függvény, amely már a véletlenszám-generátorral szimulált mérési hibákat is tartalmazza.) A bal alsó diagramban a fekete objektum és a ciklámen-színű mért függvény mellett a piros dekonvoláltat, valamint az abból származó kék rekonvoláltat látjuk. A jobb felső diagram az átlagos eltérést mutatja az iterációs lépések (egymást követő generációk) függvényében. A jobb alsó diagram a bal alsó diagramon látható jelsorozatok Fourier-transzformáltjainak amplitúdóját mutatja a frekvencia függvényében, ami az eredmény jóságának megítélésében segít

segi küszöb, vagy a maximális populációszám elérése miatt), a felhasználó ismét grafikusan ellenőrizheti a kapott eredményt. A látottak tükrében eldöntheti, hogy megadott számú további iterációt kér, vagy leállítja a futást. További iteráció esetén változtathat a mutáció paraméterein is, amennyiben az indokoltnak látszik.

A 4. ábrán a teszteléshez használt reaktáns jelsorozat dekonvolúciójának eredményeit mutatjuk be, ahogy azt a felhasználó a képernyőn láthatja. Amint látható, a felfutás az objektummal egyezően lépcsőszerű, a maximum értéke nagyon jó, és nem látható hullámmás sem a dekonvolált jelben; sőt, a kísérleti ingadozás mértéke csökkent a dekonvolúció során.

Módszerek a konvergencia gyorsítására

A szakirodalomban sokat foglalkoznak a genetikus algoritmusok hatékonyságával. A hatékonyság növelésének egyik jól bevált módja a konvergencia sebességének növe-

lése, azaz a megfelelő rátermettséget elérő egyed megszületéséig kitenyésztenő populációk számának csökkentése. A genetikus algoritmusok vizsgálata során kiderült, hogy gyakran fordul elő az az eset, amikor a populáció egyedei nagymértékben hasonlítanak egymásra, emiatt a kiválasztás nem növeli igazán hatékonyan az utódok rátermettségét, így a konvergencia lelassul. A mutáció is elveszíti hatékonyságát a populáció rátermettségének javulásával; amíg kezdetben a nagy mutáció kedvez a rátermettség javulásának, viszonylag jó és egymáshoz nagyon hasonló egyedek esetében az általa előidézett változások olyan mértékű ingadozást okoznak az egyedek rátermettségében, hogy azok csak igen kis valószínűséggel javulnak tovább. Ha viszont kicsire választjuk a mutációt, akkor az iteráció kezdetén igen lassan javul csak a még nem eléggé rátermett populáció. Mindkét hátrány csökkentésére léteznek bevált módszerek.

A rátermettséget lehet például dinamikusan skálázni, ami azt jelenti, hogy a po-



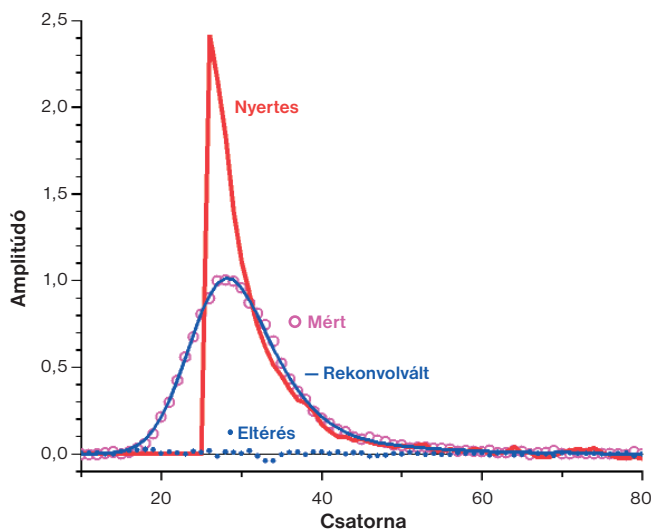
puláció rátermettségének javulásával úgy változik a fitness-függvény, hogy az egyes egyedek fitnessze közötti különbség egyre nagyobb legyen. Ezt elérhetjük pl. a (2) egyenlet nevezőjében lévő összeadandó 1-nél fokozatosan kisebbre történő megválasztásával. Ennek hatására a fitnessfüggvény értéke egyre nagyobb lesz, így az egyedek fitnesszeinek különbsége is növekszik, azaz jobban kiválasztódnak a rátermettebb egyedek.

A mutációk hatása is többféleképpen változtatható. Az egyik módszer a mutáció valószínűségének dinamikus növelése a generációváltások során, ami azonban a változás mértékét nem befolyásolja, csak annak gyakoriságát. A másik módszer éppen a változás mértékének dinamikus változtatása. Kezdetben viszonylag nagy mutációval indul az algoritmus, ami a rekonvált és a képfüggvény csökkenő eltéréseinek függvényében monoton csökken. Ennek hatására a javuló rátermettségű populáció egyedeinek rátermettségét a csökkenő mutációs változás nem tudja „elrontani”, így a rátermettség hatékonyabban javul.

Az általunk alkalmazott eljárásban a generációs szám növekedésével a rátermettséget a fent leírt módon dinamikus skáláztuk, a mutációk valószínűségét növeltük, a mutációk okozta változásokat pedig csökkentettük. Ezen korrekciók eredményeként gyorsabb konvergenciát és kisebb végső eltérést sikerült elérnünk. A program lehetőséget biztosít a felhasználónak az itt leírt korrekciók mértékének előzetes beállítására.

Kísérleti adatok dekonvolúciója

A bemutatott dekonvolúciós eljárást természetesen kísérleti adatok kiértékelésére fejlesztettük ki. Kísérleti adatok esetén a szintetikus adatokhoz képest az a különbség, hogy a program futása közben hozott döntéseinkhez nem tudjuk felhasználni az eredeti objektumfüggvény ismeretét. Ennek megfelelően természetesen növekszik a kapott megoldásfüggvény bizonytalansága is. Tapasztalatunk szerint ez nem vezet a megoldásfüggvénynek az „igazi” objektumtól való jelentősebb eltéréséhez. Ezt a szintetikus adatok új felhasználó által történő, objektumfüggvény nélküli dekonvolúciójával próbáltuk ki. A



5. ábra. Kísérleti fluoreszcencia-lecsengési adatok dekonvolúciója. Az üres körök a mért adatokat mutatják, a folytonos vonalak a dekonváltat, illetve a rekonváltat. A kisebb sötét körök az utóbbi kettő különbségéből adódó reziduális hibákat jelölik

tapasztalt viszonylag kis eltérés észrevehető mértékben csak a pillanatszerű felfutás maximumának értékét érintette. (Általában kismértékben csökkentette.)

Az 5. ábrán bemutatjuk valódi kísérleti adatok dekonvolúciójának eredményét. Ez az adatsor a dezoxi-adenozin-foszfát gerjesztését követően kialakuló molekulák fluoreszcencia-lecsengésének mérésével készült, még publikálatlan kísérletek eredménye [5]. A gerjesztés során képződött molekuláktól az várható el, hogy a fluoreszcencia hirtelen felfutással kezdődik, és monoton lecsengéssel folytatódik. Ezt a tendenciát sikerült egészen jól reprodukálni, miközben a dekonvált (nyertes) jel maximuma közel a mért jel 2,5-szeresére emelkedett. A felfutás itt is lépcsőszerű, és nem jelentkeznek nagyobb hullámzások sem a dekonvált jelben.

Összefoglalás

Az itt bemutatott munka célja femtokémiai kísérleti adatok dekonvolúciója, amelyek eredményeképpen a mérés közben fellépő kikerülhetetlen torzítás hatását numerikus módszerekkel kiküszöbölhetjük. Mivel a szakirodalomban leírt dekonvolúciós módszerek általában nem kielégítő eredményhez vezetnek, kidolgoztunk egy módosított genetikai algoritmust a feladat hatékony elvégzésére. Ennek során az automatikus „próbatenyéztéssel” kikísérletezett, meglehetősen nagy rátermettségű kezdeti populációt speciális mutáció segítségével sikerült zaj- és hullámzásmentes egyedek kifejlődésére készíteni. Szinteti-

kus adatok dekonvolúciójával kimutattuk, hogy az alkalmazott algoritmus rendkívül hatékonyan, szisztematikus hibák fellépése nélkül helyreállítja az eredeti, konvolválatlan függvényt. Az eljárás Matlab környezetben megvalósított implementációja a felhasználótól nem vár el túl sok beavatkozást. Az automatikusan kikísérletezett kezdeti populációról a felhasználó eldöntheti, hogy megfelelőnek találja-e, vagy új kísérleteket kér megváltozott paraméterekkel. Konvergencia hiányában arról is dönthet a felhasználó, hogy kér-e további iterációkat. Az eredmények részletesen kiíródnak egy adatállományba, de a képernyőn grafikus is megjelennek.

Az itt leírt evolúciós eljárás alkalmazhatósága nem korlátozódik ultragyors lézerspektroszkópiai eredmények dekonvolúciójára. Az eljárás minden olyan esetben alkalmazható, ahol valamely tranziens jel mérése során jelentős konvolúciós torzítás (a jel kiszélesedése) lép fel. Példaként említhetjük a femtoszekundum alatti attoszekundum felbontású, vagy az afölötti piko- és nanoszekundumos felbontású méréseket, ha kikerülhetetlen a konvolúció fellépése a detektálás során. Hasonlóképpen jól alkalmazható lehet az eljárás a tipikusan mikroszekundumtól milliszekundum tartományba eső tranziens elektromos jelek dekonvolúciójára. Kémiai példák közül megemlíthető még spektrumvonalak és kromatográfiás csúcsok dekonvolúciója, amennyiben nem ismert a jelalakok leírására alkalmas analitikus függvény, valamint farmakokinetikai vizsgálatok eredményei, amelyeket az élő szervezetekben történő szétterjedés és a metabolikus folyamatok lassúsága torzít ugyancsak konvolúcióval.



IRODALOM

- [1] Keszei E., Nobel-díj femtokémiai kutatásokért: A kémiai kötések felszakadásának és kialakulásának molekuláris eseményei, *Természet Világa*, 131. évf. 1. sz., 2000. január
- [2] Keszei, E., Femtokémia: a pikoszekundumnál rövidebb reakciók kinetikája, *A kémia újabb eredményei*, 86. kötet, Akadémiai Kiadó: Budapest, 1999.
- [3] Bányász, Á., Keszei, E., Model-free deconvolution of femtosecond kinetic data, *J. Phys. Chem. A* (2006) 110, 6192–6207.
- [4] Holland, J. H., *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan Press: Ann Arbor, 1975.
- [5] Keszei, E., Efficient model-free deconvolution of measured femtosecond kinetic data using a genetic algorithm, *J. Chemometrics* (2009) 23, 188–196.



Saját lelet

Beszélgetés Lente Gáborral

Lente Gábor a Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének habilitált egyetemi docense. Az MTA Fiatal Kutatói Testületének tagja, a Debreceni Egyetem – tehetséggondozásért járó – „Pro Cura Ingenii” díjának egyik első kitüntetettje. A legtöbbször biztosan az ő rovatát, a Vegyészleleteket olvassák lapunkban.

– Többnyire „hagyományos kémiai folyamatokat” tanulmányoz – például az ozon-tetroxid és a peroxidáció reakcióit –, de nemrég összefoglaló cikket írt a biológiai kiralitás molekuláris magyarázatáról. Mi a kapcsolat a kémiai és a biológiai rendszerek vizsgálata között?

■ Kutatóként általában reakciókinetikai ihletésű problémákat választok, és a korábbi munkáimban nem elsősorban az anyagokon volt a hangsúly, hanem a közöttük lejátszódó reakciók leírásán. A kinetikai interpretáció minden esetben meg lehetőségek bonyolult.

A kinetikai vizsgálatok alapvetően időfüggés-vizsgálatot jelentenek, tehát a kiindulási anyagok fogyását és a termékek keletkezését követjük nyomon. Ha sikerül, „közttermékeket” detektálunk, amelyek először keletkeznek, aztán elbomlanak a folyamatban. Ezeket a végén nem tudjuk kimutatni, de az időfüggő vizsgálatokból következtethetünk az atomi szintű változásokra. Egyetlen kémiai reakcióban általában három-négy, de akár ötven különböző atomi szintű kémiai változásnak az összegét is látjuk.

Majdnem mindig összetettebb kinetikájú rendszerekkel dolgozom, és ezekben a reakciók kinetikájának a leírása viszonylag nagy matematikai apparátust mozgat meg, például csatolt differenciálegyenleteket kell kezelni. A biológiai kiralitás eredetével kapcsolatos munkám is összetett kinetikai megközelítés, csak ezen a terepen egészen más anyagokról beszélünk, mint korábban.

■ Az interjú részleteket tartalmaz az OTKA honlapján megjelent beszélgetésből.



ban. Az összekötő kapcsolat tehát a reakciók időfüggésére kíváncsi megközelítés.

– Ez nem változott a munka során?

■ De igen. A hagyományos szemlélet, amit determinisztikusnak neveznek, lényegében az egyes anyagok koncentrációjának, mennyiségének időbeli változását írja le. Ennek akkor van létjogosultsága, ha nagyon nagy a molekulák száma, aminek egy kémiai rendszer (amelyben, mondjuk, tíz a huszadikon részecske van) általában eleget tesz. Ha ennél lényegesen kevesebb molekulánk van, akkor a „mennyiségi megközelítés”, a koncentrációváltozás követése már nem megfelelő, mert az egyedi molekulák közötti történések kerülnek előtérbe. Ezek valószínűségi törvényeknek engedelmessé válnak, ezért az egyedi molekuláris változásokat leíró kinetikát sztochasztikusnak nevezik. A sztochasztikus képből nem az derül ki, hogy mennyi anyag keletkezik egy bizonyos idő után, hanem az, hogy bizonyos mennyiségű anyag mekkora valószínűséggel keletkezik.

– Hogyan kapcsolódik ez a fajta megközelítés a biológiai kiralitáshoz?

■ Az élő anyag felépítésében majdnem kizárólag az L-aminosavak vesznek csak

részt, holott már nagyon régóta tudják, hogy az L-nek és a D-nek azonos az energiája. Az a hagyományos tudományos elképzelés, hogy a természet a legkisebb energiájú állapotra törekszik, nem magyarázza meg a különbséget. Ezért arra kell gyanakodnunk, hogy a két forma – valamilyen okból – különböző sebességgel keletkezett, és az élet tartja fenn ezt a különbséget. Az élet számára az azonos energia még nem azt jelenti, hogy a molekulák pontosan azonosak. Tehát a D- és L-aminosavak mennyiségének különbségét „kinetikai jelenség” válthatta ki, ha a két forma energiája pontosan megegyezik.

A királis aszimmetria létrejöttének a legjobb magyarázata ma abból indul ki, hogy valamilyen autokatalitikus kémiai reakció játszódott le. Semmilyen szimmetriatörvény nem tiltja, hogy ha történetesen L-aminosav keletkezik, ez a vele azonos molekulák keletkezését gyorsítsa, mintegy pozitív visszacsatolásként, a D-aminosavét pedig ne. Erősen sarkított megfogalmazásban: abban az őselevesben, amelyik az aminosavak kialakulása szempontjából fontos volt, minden egyes molekula képződésekor el kellett dölnie, hogy az D- vagy L-aminosav-e, nem lehetett „középállapot”. A legelső L volt, és az már akkora autokatalitikus hatást gyakorolt a következő molekula keletkezésére, hogy az L-aminosavak szaporodtak el.

Ha megjelenik az autokatalízis, akkor nagy mennyiségű anyag esetén is előfordulhat, hogy a reakció leírására csak a sztochasztikus megközelítésmód alkalmas. Azt szoktam mondani, hogy a hagyományos determinisztikus megközelítés többnyire a sztochasztikus megközelítés sok molekulára érvényes határesetete. De vannak olyan reakciók, amelyekre még ez sem teljesül a pozitív visszacsatolás miatt.

– Az interneten keresgélve láttam, hogy már Lente-modellre is hivatkoznak.

■ Csak egyetlen ilyen cikkről tudok, de annak legalább a címében szerepelek... Elég szigorú matematikai leírását adtam annak, hogy egy kiindulási molekulából, amely önmagában nem mutat királis sajátságokat, külső behatásra keletkezik egy



másik molekula, amely már királis, és a keletkezési sebességében megjelenik a visszacsatolás, az autokatalitikus hatás. Valószínűleg úgy gondolták a szerzők, hogy én írtam le először ezt a folyamatot, amiben nem vagyok biztos, mert a kémiai irodalom óriási. Most már tudom, hogy a matematikusok béta-eloszlásnak nevezik azt a valószínűségi eloszlást, amely szerint – a modellben – a kétféle királis termék keletkezik.

– *A természettudományban máskor is előfordul, hogy valaki olyan revelációnak számító függvényhez, alakzathoz jut el a folyamatok leírásakor, amiről kiderül, hogy a matematikusok régóta ismerik.*

■ A matematikában nagyon sok mindent levezettek anélkül, hogy bármiféle gyakorlati alkalmazása lett volna. A sztochasztikus kinetikát is „kitalálták” már az 1940-es években, csak akkor még nem került sor az alkalmazására. Szigorú matematikai megalapozása néhány évtizedes múltra tekinthet vissza, és magyar kutatók nevéhez fűződik: Tóth Jánoséhoz és Érdi Péteréhez.

– *Miért most került előtérbe a sztochasztikus megközelítés?*

■ Azért, mert új kísérleti eredmények születtek. 1995-ben publikáltak először példát arra, hogy nem királis kiindulási állapotból olyan királis anyag jön létre, amelyben nem azonos arányban képződnek a tükörképi párok, holott azt várnánk. Pontosabban 1995-ben azt mutatták ki, hogy nagyon erős visszacsatolás létezik, és 2002-ben írtak az első olyan reakcióról, amelyben mindenféle királis hatás nélkül, mondjuk, 4:1 arányban keletkezik a két tükörképi pár. Máig mindössze két reakciócsaládban mutatták ki ezt a jelenséget.

Az egyik egy koordinációs kémiai reakció, amely egyébként a kémikusok számára is emlékeztető arra, hogy a kiralitás nem csak az aszimmetrikus szénvegyületek sajátja. A reakcióban, amelyre Dilip Kondepudi amerikai kutató csoportja talált rá, egy oktaédres geometriájú, királis kobalt(III)-komplex keletkezik vizes közegben. Ebben az esetben a két tükörképi párból képződő mennyiség különbsége viszonylag kicsi, csupán néhány százalék, de a jelenség vitathatatlan.

A másik a nagyon híressé vált szerves kémiai Soai-reakció. Ennek a kísérleti eredménynek az értelmezése izgalomba hozta a szakmabelieket. Nyilvánvaló volt, hogy a determinisztikus kinetika nem alkalmazható, mert ennek az a sajátja, hogy egy kiindulási állapotból mindig ugyanabba a végállapotba jutunk. A sztochasztikus ki-

netikának pedig az a lényege, hogy a kiindulási állapotból bizonyos valószínűségekkel jutunk el különböző végállapotokba. A Soai-reakció esetében nyolcvannégyezer megismételték pontosan ugyanazt a kísérletet – vadonatúj lombikkal, vadonatúj oldószerral. Sajnos, nyolcvannégy pont egy matematikai eloszlás leírására még mindig nem sok, de azért már lehet valamit kezdeni vele. Ma már kizárólag a Soai-reakció leírására is szerveznek konferenciát. A legutóbbit éppen Magyarországon tartották 2010 szeptemberében, erről be is számolt a Magyar Kémikusok Lapja.

– *Hogyan talált rá erre a problémára?*

■ 2004-ben Pályi Gyula, aki a Modenai Egyetemen dolgozik, előadást tartott a Soai-reakcióról Debrecenben. Utána esténként számolgattam ezt-azt, kijött valami érdekes eredmény, és azt is be kell vallanom, hogy a feleségem rábeszélésére írtam meg az első cikkemet. Ez elég sikeresnek bizonyult, aztán jöttek újabb ötletek, azokat is publikáltam – egyfajta tudományos passzióként kezdődött a munka. Az intézetben elsősorban kísérleti kutatások folynak. A biológiai kiralitás vizsgálatokor csak elméleti leírás adok, ami nekem elég jól megy. A kísérleti feladatokban is az eredmények értelmezése az erősségem, mert a kémiai reakciók közötti bonyolult összefüggéseket viszonylag jól átlátom, és hamar megtalálom azt a matematikai leírást, ami másokat is meggyőz a modell helyességéről.

– *Milyen kísérleti munkák folynak a katalócsoportban?*

■ Elsősorban víztisztításhoz kapcsolódó kérdéseket igyekszünk megoldani. Itt kerülnek elő a „hagyományos” anyagok, például a klór-dioxid, az ózon, a klórfeholok lebontása, oxidációja áll a vizsgálatok középpontjában. Ezt az anyagot például ipari oldószerként és vegytisztító eljárásokban használják. Viszonylag mérgező, és gyakran bejut az ivóvízhálózatba. Az is probléma, ha a talajvízbe kerül bele.

– *Meg tudják szüntetni a szennyezést?*

■ Most dolgozunk rajta. Kémiai oxidálószerre van szükségünk, és általában nem is a megfelelő szer kiválasztása a kérdés, mert csak néhány környezetbarát oxidálószer közül választhatunk: ilyen például az ózon, a hidrogén-peroxid, esetleg a peroxi-monoszulfát-ion. Inkább azt a katalizátort kell megkeresnünk, aminek a segítségével oxidálhatjuk a triklóretilént. A projektben részt vesz egy másik csoport is, és valószínűleg sikerült olyan baktériumfajokat találniuk, amelyek átalakítják a

triklóretilént. Egyelőre nem tudjuk, melyik módszer a hatásosabb, lehet, hogy a kettő együtt vezet célhoz.

– *Az ilyen feladatok megoldásakor is a reakciók mélyére kell látni, vagy elég a klasztrikus laboratóriumi munka?*

■ A triklóretilén vagy a klórfehol oxidációs folyamataiban fel kell térképezni az elemi reakciókat, az atomi szintű lépéseket, amelyekkel már értelmezhető a folyamat. Ennek alapján könnyebben meg tudjuk találni az optimális körülményeket egy reakcióhoz. Például meg tudjuk mondani, hogyan lehet a legrövidebb idő alatt a legkevesebb vegyszer felhasználásával eltávolítani egy káros anyagot.

Igaz, a kinetikai kutatás néha kicsit idegen még a szintetikus kémikustól is, aki egy kiindulási anyagból előállít egy végterméket, amit aztán nagyon sok módszerrel jellemez. A kinetikában általában annak van kulcsszerepe, ami se az elején, se a végén nincs, vagyis a köztitermének. Nagyon korlátozott azoknak a kísérleti módszereknek a száma, amelyek ezekről információt tudnak adni. Ezért gyakran olyan Sherlock Holmes-i gondolatmenetre kényszerülünk, hogy ha kizártuk a lehetetlent, akkor a maradék nem lehet más, mint a valóság. A másik szívesen alkalmazott eszközünk Occam borotvája: amikor több magyarázatunk is van, akkor a legegyszerűbbet fogadjuk el, ha nincs olyan kísérleti információ, amely ennek ellentmond. Emiatt érzik azt a kinetikában kevésbé jártas kémikusok, hogy olyasmit állítunk, amire nincs elég bizonyíték, vagy legalábbis nincs olyan bizonyíték, amit ők annak tekintenek a stabil anyagok esetében.

Pedig ha nem a kinetika, nem a mechanizmus alapján próbálnánk kellő mennyiségű információt begyűjteni, borzasztó sok kísérleti munkára kényszerülnénk. Néha, persze, a véletlen is segít nekünk. Például a klórfeholok esetében jelentős felismerés volt, hogy még a látható fény is nagy hatást gyakorol a lebontásukra. Amikor Amerikában dolgoztam, egy meglehetősen sötét helyen délután elindítottam egy hosszú kísérletet; a készülék folyamatosan mérte az egyik reaktáns koncentrációját. Másnap délután azt vettem észre a görbén, hogy reggel hirtelen felgyorsult a reakció – akkortájt, amikor bementem a laborba. Nemso-kára rájöttem, hogy nemcsak bementem, hanem a villanyt is felkapcsoltam. De ha ez ekkora hatást fejt ki, mi történik, amikor egy lámpával közelről rávilágítunk a rendszerre? Ettől aztán több mint tízszeresére nőtt a sebesség.



– *Hogy érzi magát a munkahelyén?*

■ A közvetlen környezetemben nagyon jól, mert olyan emberek vesznek körül, akik egyrészt fiatalabbak nálam, másrészt nagyon tehetségesek, és szívesen dolgoznak. Olyan szempontból viszont nem mindig érzem jól magam, hogy a kutatáshoz mindenekelőtt pénzre van szükség, és lassan már nekem is annyi időt kell pályázással töltenem, hogy a kutatásra alig marad... Nemrég olvastam egy texasi professzor beszámolóját, akinek a becslése szerint a befutott amerikai kutatók a munkaidejük hetven százalékában a finanszírozás előteremtésén dolgoznak. Nálunk tanszékvezetők, Fábrián István megszerzi a támogatás nagy részét. Ennek ellenére már nekem is jelentős időt kell erre a tevékenységre fordítanom.

– *Van egy kurzusa az egyetemen* – Mai

molekulatudomány mindenkinek –, *amelyet inkább idősebb professzorok szoktak meghirdetni. Hogyan ötlött fel ennek az előadásfüzérnek a gondolata?*

■ Az egyetemen olyan tárgyakat is tanulni kell valamilyen szinten, amelyek egyáltalán nem kapcsolódnak az ember jövőbeli szakmájához. Ezt hívják értelmiségi modulnak. 2005 táján néhányan el akartuk érni, hogy a bölcsészek természettudományos kínálatból is választhatósanak. Korábban a Debreceni Egyetemen egyetlen fizikus tartott nekik előadásokat; én olyan témákról beszéltem, amelyek a munkámhoz kötődtek vagy szerettem olvasni róluk: például a gyógyszer-kémiairól, a periódusos rendszer történetéről, a doppingszerekről, a nukleáris balasztokról. A célközönséget, sajnos, kevésbé sikerült megszólítanom, de a kémiai

kötődésű hallgatóság állítólag kedvelte az előadásokat. Most a tanárképzésbe ágyazódott be a kurzus, mert a program vezetője, Tóth Zoltán, nagyon hasznosnak tartja.

– *Hogyan született a Vegyészletelek?*

■ Amikor Kiss Tamás az MKL felelős szerkesztője lett, megkérdezte, lenne-e kedvem tudományos hírrovatot szerkeszteni. Elsőre természetesen nem mondtam, de aztán rábeszélte. Két feltétellel vállaltam el a munkát: ritkán tudok elmenni a szerkesztőbizottsági ülésre, mert Debrecenben nagyon sokat kell oktatnunk, s ha hiányzom, akkor a munkámat másra háritom át; és nem vagyok hajlandó másokat noszogatni a hírek leadására, inkább én magam írom a rovatot.

– *Bevált a módszere!*

Silberer Vera

Nyílt levél a Lendület program tudományometriai vonatkozásairól

Prof. Pálinkás József
a Magyar Tudományos Akadémia elnöke

Tisztelt Elnök Úr!

Úgy vélem, a hazánkban dolgozó kutatók túlnyomó többsége nagy örömmel látta a Lendület program elindítását, amelynek 2011. évi kiírása január 11-i dátummal jelent meg [1]. Nincs kétségem afelől, hogy a program a benne kutatócsoporti támogatást elnyerők személyétől függetlenül az egész magyar tudományos élet, és ezen keresztül az ország javát fogja szolgálni.

Ezt a levelet az a szándék iratja velem, hogy a pályázati felhívásban kért tudományometriai adatok súlyos szakmai hibájára hívjam fel a figyelmet. Mindezt úgy teszem, hogy magam is a pályázók között vagyok. Ezt a levelet a beadási határidő és az eredmények kihirdetése között írom, így a saját pályázatom eredményessége vagy eredménytelensége nem befolyásolhatja itt ismertett véleményemet.

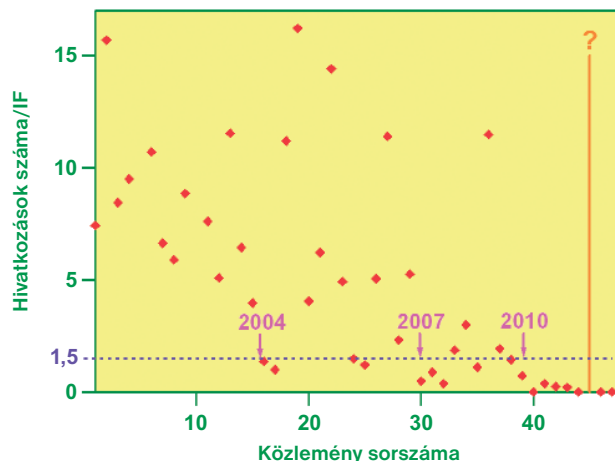
A pályázat 2. számú melléklete a témavezető tudományometriai mutatói és publikációs jellemzői között a következő adatokat is kéri [2]:

- a tudományterület folyóiratainak $1,5 \times IF$ -értékét meghaladó hivatkozottságú cikkek száma;
- legtöbbet hivatkozott cikke, az arra kapott hivatkozások száma, valamint adat arra vonatkozóan, hogy ez a szám milyen mértékben haladja meg a tudományterületi átlagot.

A pályázat kapcsán gyakran feltett kérdésekre adott válaszokat felsoroló dokumentum ehhez a ponthoz a következő segítséget adja [3]: „A kimagaslóan hivatkozott cikkek számát kell itt feltüntetni, melyekre jóval több tényleges hivatkozás érkezett, mint ami a folyóirat impakt faktorából következne. Miután egzakt im-

pakt faktor értékei csak egyes folyóiratoknak vannak, a tudományterületre jellemző élvonalbeli nemzetközi folyóiratok átlagos impakt faktorát a pályázónak [kell] megbecsülnie. A becsült értékek tekintetében nagyjából egyetértés van a kutatók között. E kimutatást összesítve elég megcsinálni, de az is jó megoldás, ha minden egyes olyan cikkre külön-külön elvágzik, amelyről a pályázó úgy gondolja, hogy ez legalább másfélszer több hivatkozást kapott, mint arra a folyóiraatra jellemző átlag, ahol a cikk megjelent. (Pl. ha a Nature impakt faktora 30, akkor a bírálók e pontban csak a 45-nél több hivatkozást kapott Nature-cikkek számára kíváncsiak.) Ez esetben nem kell az impakt faktorra „tudományterületi átlagot” becsülni.”

1. ábra. A levélíró publikációs adataiból a Lendület pályázat útmutatója szerint számolt, a kimagasló hivatkozottság eldöntésére szánt tudományometriai jellemző





Az impakt faktorok egyéni tudományos teljesítmény felmérésére való használata eleve igen ellentmondásos. A tudományometriai adatok összegyűjtését és terjesztését végző Thomson–Reuters cég a következő, elég határozott figyelmeztetést közli ezzel kapcsolatban: „Egyéni teljesítményekre való következtetések levonása nem tartozik az impakt faktorok helyes használatai közé... A Journal Citation Reportsban megjelenő adatokkal kapcsolatos legfontosabb információ, hogy kizárólag folyóiratok értékelésére alkalmasak. Ez egyszerűnek hangzik, de nagyon lényeges. Csak folyóiratok hasonlíthatók össze, személyek vagy intézmények semmiképpen.” [4]

Hazánkban, úgy tűnik, más véleményen van a tudományos közélet, mert az impakt faktorok használata egyéni teljesítmény felmérésére teljesen általános gyakorlatnak mondható. Ezt a magam részéről nem is ítélem el teljesen, hiszen a cél egyrészt valamiféle objektív adat figyelembevétele, másrészt maguk az alapelvek már hosszú évek óta változatlanok, így szerintem nagyon is szükséges előreláthatóságot visznek a folyamatba, harmadrészt az impakt faktorok ilyen használata jelentős, a tudományterületek közötti indokolt differenciálással történik.

A pályázati útmutatóból idézett részek azonban az impakt faktor kiszámítási módjának igen hiányos ismeretét tükrözik. Az útmutató ugyanis elég világosan azt kéri, hogy a pályázó az egy cikkre kapott hivatkozások számát ossza el a folyóirat impakt faktorával, s ha ez a hányados 1,5-nél nagyobb, akkor kimagaslóan hivatkozottnak minősítheti a cikket. Ennek két következménye is van:

1. A csekély impakt faktorú folyóiratokban megjelent közlemények nagyon könnyen bekerülnek a kiemelkedően hivatkozottak közé, mert ezeknél kicsi a tört nevezője, így kevés hivatkozás is 1,5 fölé növelheti a hányadost.

2. Az impakt faktor definíciója szerint egy adott folyóiratban megjelent cikkekre **egyetlen év alatt** érkező hivatkozások átlagos számát adja meg a publikációt követő két naptári évre vonatkozóan. A pályázati útmutatóban leírt eljárásnál az impakt faktort viszont a megjelenés óta eltelt idő alatti **teljes hivatkozottsággal** hasonlítják össze. Ennek az a következménye, hogy egy kutató régebbi cikkei majdnem mind kiemelkedő hivatko-

zottságúak lesznek. Ezt a hatást a levélíró saját publikációs adatait felhasználva demonstrálja a mellékelt ábra, amelyen az útmutató szerint számolt hányados látható a cikkek megjelenésének időrendjében adott sorszám függvényében, s a kiemelkedő minősítés küszöbértéket jelentő 1,5-es hányadost szaggatott vonal jelzi. Ez az ábra önmagában is rámutat az ellentmondásosságra: a levélíró 47 tudományos közleményéből 29-et minősít „kimagaslóan hivatkozott”-nak (ez persze kirívó túlzás), egy esetben (narancssárga vonal és kérdőjel) pedig nem értelmezhető a hányados, mert a folyóiratnak (még) nincs impakt faktora, a közleménynek viszont van már hivatkozása. A 2004-nél régebbi cikkek között nincsen olyan, amely ne lenne kimagaslóan hivatkozott, a 2004 és 2007 közti időszakban is csak négy ilyen akad, míg a 2007 után megjelent cikkek esetében csak négy került a küszöbérték fölé. Így egyértelműen látható, hogy – a pályázat kiírójának szándékával minden bizonnyal ellentétben – a megadott módszer elsősorban egy cikk korára ad információt, és nem kiemelkedő fontosságára.

Ez a szakmai hiba azért is aggodalommal tölt el, mert nagy veszélyét látom annak, hogy más pályázatok döntési szempontjai közé is kritika nélkül átvesszük – ezt jó lenne elkerülni. Véleményem szerint szerencsésebb lenne, ha a Lendület program ilyen szempontból már létező, kipróbált és évek hosszú sora alatt kifinomított tudományometriai eljárásokat használna – például az MTA doktori cím odaítélésénél használt rendszeren alapulva.

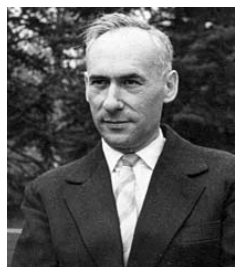
2011. március 1.

Tisztelettel:
Lente Gábor

Hivatkozások

- [1] http://mta.hu/mta_hirei/lendulet-2011-126804/ (utolsó elérés: 2011. március 1.)
- [2] http://mta.hu/data/cikk/12/68/4/cikk_126804/2._szamu_melleklet.pdf (utolsó elérés: 2011. március 1.)
- [3] http://mta.hu/data/cikk/12/68/4/cikk_126804/gyakori_kerdesek_febr_22.doc (utolsó elérés: 2011. március 1.)
- [4] <http://community.thomsonreuters.com/t5/Citation-Impact-Center/Thomson-Reuters-speaks-with-Jim-Pringle-about-Impact-Factor/ba-p/715> (utolsó elérés: 2011. március 1.)

Varsányi György (1921–2010)



Varsányi György, mérnökök generációjának fizikai kémia professzora 2010. december 8-án elhunyt. 1948-ban a Szegedi Tudományegyetemen szerzett kémia bölcsészdoktori oklevelet, ettől az évtől egészen nyugdíjba vonulásáig, 1991-ig a Budapesti Műszaki Egyetem Fizikai Kémia Tanszékén dolgozott. 1960-ban nevezték ki egyetemi tanárnak. 1965-től 1986-ig ő vezette a tanszéket. 1959 és 1963 között a

Vegyésmérnöki Kar dékánja volt.

Varsányi professzor idejében a vegyésmérnöképzésben a fizikai kémiához három félév előadás, három félév számítási gyakorlat és két félév laboratóriumi gyakorlat tartozott, a végén szigorlattal. A számítási gyakorlatokat, ahol a diákok alkalmazzák az előadásokon tanult képleteket, ő kezdeményezte. Az előadásoknak mind a három kurzusát maga tartotta. A tananyagot elsősorban a terület klasszikussá vált kézikönyve, Erdey-Grúz Tibor és Schay Géza háromkötetes „Elméleti fizikai kémia”-ja nyomán állította össze. Az elméleti alapok mellett nagy súllyal

szerepeltek a mérnöki alkalmazások, előkészítve a technológiai tárgyak oktatását.

Briiliás előadásai, nemkülönben a nála letett vizsgák a hallgatóknak életre szóló élményt adtak. Óráira csak egy kis cédulát vitt magával, amin néhány (vég)képlet volt. Mindent fejből mondott és írt a táblára, beleértve a bonyolult levezetéseket is, és soha nem hibázott. (A cédula talán ellenőrzésül szolgált.) Mi, akik munkatársává váltunk, láttuk, hogy sok évtizedes oktatói múlttal is minden előadására nagy gonddal felkészült. Fegyelmezett volt, és másoktól is fegyelmet követelt. Az előadásáról ő soha nem késett, a későn jövő hallgatók csak a szünetben mehettek be. Egy vizsganapon legfeljebb tizenketten vizsgázhattak, ezt biztosítandó a jelentkezéshez egy műanyag rácsból és beleilleszkedő lécecskékből álló eszközt talált ki. Törekedett az igazságosságra – az évfolyamokat fizikai kémiából mindig egy kijelölt oktató vizsgáztatta, ezen belül a fizikai kémia III. vizsgát és a szigorlatot mindenkinek nála kellett letenni. Míg az előadásokon a részleteket is gondosan elmagyarázta, a vizsgán csak a lényeges dolgokat kérdezte. Ösztönözte, hogy a diákok maradandó tudást szerezzenek úgy, hogy az előadások anyagát félév közben is



átnézik. E célból a tananyagot a szorgalmi időszakban tartott vetélkedőkön kérdezte vissza, s a szerzett pontokat beszámította a vizsgába.

Tanszékvezetőként is nagy tekintélye volt. Jó szellemű tanszékét irányított, munkatársaival ritkán volt konfliktusa. A kutatómunkában hagyott teret egyéni ambícióknak.

Kutatóként a spektroszkópia – ezen belül a rezgési spektroszkópia – nemzetközileg hírvé vált. A Műegyetemre kerülve ő honosította meg az optikai spektroszkópiát, mint új kutatási területet. 1957-ben irányításával indultak meg a molekulaszpektroszkópiás kutatások az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetben, ahol a 70-es évekig részvételben dolgozott. Az 1980-as években szilárd anyagok felületének ionizációs spektroszkópiás (főként XPS) vizsgálatával foglalkozott, kapcsolódva az MTA Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriumának munkájába. 1968-tól 1990-ig az Anyag- és Molekulaszervezési Munkabizottság elnöke volt.

Tudományos eredményei maradandónak bizonyultak. Különösen jelentős a benzolszármazékok infravörös és Raman-színképekének elemzésére kidolgozott módszere, amelyről két könyvet írt (Vibrational Spectra of Benzene Derivatives, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1969; Assign-

ments for Vibrational Spectra of 700 Benzene Derivatives, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973). Ezekre a könyvekre a napjainkban megjelenő spektroszkópiás szakirodalomban is rendszeresen hivatkoznak.

Fiatalon – 39 évesen – megszerezte a kémiai tudomány doktora fokozatot. 1994-ben elsőként ő kapott Polányi-díjat, amelyet akkor alapítottak. 2001-ben a BME Vegyészmérnöki Kara emlékérmét hozott létre a 80. életbetöltő munkatársak köszöntésére. Varsányi professzor volt az első, akinek az érmet adományozták.

A természettudományok mellett a humán kultúra minden területén (irodalom, zene, képzőművészet, nyelvek, sport) is óriási műveltsége volt. A hallgatók rendszeresen felkérték a diáknapi keretében szervezett műveltségi vetélkedők vezetésére. Legenda lett, hogy egy spanyolországi konferencián spanyolul tartott előadást, a nyelvet néhány hét alatt megtanulva.

Égész életében optimista volt és boldog, ami a szakmai sikerek mellett szerető családjának köszönhető. A mérnök- és kémikusársadalom – közöttük több ezer egykori diákja – emlékében él tovább.

Kubinyi Miklós

Jedlovsky Pál (1938–2010)

A Műegyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karának egyetemi docense 1961-ben kapott vegyészmérnöki diplomát a Veszprémi Vegyipari Egyetemen.

Pályája kezdetén először az Egyesült Gyógyszer- és Tápszergyárban, majd a Péti Nitrogénműveknél, később a Vegytervben és 1968-tól 1975-ig az MTA Automatizálási Kutatóintézetében dolgozott. Ekkor kötelezte el magát a matematikai modellezés iránt, amelynek kiváló alkotója lett. Küldetésének érezte az objektum-orientált programozás elterjesztését, könyvet írt a SIMULA 67 alkalmazásáról.

1975-ben lett kandidátus, a rektifikáló kolonnák matematikai modellezésének megoldásával. Itt a problémát a komponensmérleg, az entalpiamérleg és a fázisegyensúlyi összefüggések együttes kezelése jelentette. Korábban ezt a három egyenletípust egyenként oldották meg, majd összehangolásukat iterációval végezték el. Az ő javaslata a háromból két egyenlet szimultán megoldása volt, amelyet a ma használatos módszer közvetlen elődjének tekinthetünk.

1975-ben került a BME vegyész kari Matematika Tanszékére, ahol 1995-ös nyugdíjazásáig főállásban dolgozott, majd a tanszék átalakulását követően a Kémiai Informatika Tanszéken számítástechnikát oktatott. Ebben az időszakban nemzedékek tanulták meg tőle a számítástechnika haladó módszereit és természetesen a matematikát is. Számos

hallgató tudományos diákköri tevékenységét indította el, és vezette sikerre. 1988/89-ben az Egyesült Államokban a Beward Community College, majd 1993/94-ben Koreában a Pusan National University vendég-tanára volt.

Nyugdíjazását követően a Gábor Dénes Főiskolán tanított. Új tantárgyat indított. Az interneten ma is az ő UNIX-könyve az alapmű, keresik, kínálják. A „UNIX lépésről lépésre” még ma is minden kezdő programozó számára a programozás sarokköve.

12 évig a főiskola Tudományos Diákköri Tanácsának elnökeként szervezte a TDK-mozgalmat, megtalálta és támogatta a kiváló hallgatókat.

1974-től tagja a Magyar Kémikusok Egyesületének. Kiemelkedő volt a tudományos közéleti aktivitása az Egyesületben, a nemzetközi szakmai szervezetekben. Hazai és nemzetközi konferenciákat szervezett nagy odaadással. Bárhol volt, hasznos alakja lett a szakmai életnek. Ő volt az, aki a MKE „rendszerelő”, alapvetően új szemléletű alapszabályát megalkotta. Az Intézőbizottság tagjaként jól ismert szókimondásával mindig előbbre vitte az ügyeket és mindig aktívan részt vett a döntések végrehajtásában is.

Mindannyiunk szomorúságára lendületet egyéniségét, széles körű tudását nélkülöznünk kell. Emlékét megőrizzük. Hiányozni fog!

Otrok Györgyné

Ménes András

■ Szent István Egyetem

Száztiz éve született Linus Pauling

Linus Pauling 1901. február 28-án született az oregoni Oswego-ban, Lucy Isabelle Darling és Herman William Pauling fiaként. Furcsa család volt Paulingéké, Linus egyik nagynénje közismert kasszafúró volt, egy másik rokona pedig spiritiszta. Apja gyógyszerész volt, 1910-ben gyomorfekélyben fiatalon halt meg. Nem sokkal halála előtt Herman Pauling levelet írt egy helyi hetilapnak azt kérdezve, hogyan fejlessze fia rendkívüli szellemi képességeit. Férjének halála után Belle Pauling panziót vezetett egy

Condon nevű oregoni helységben. Linus, aki apja életében nem érdeklődött a vegyészet iránt, tizenkét éves korában kísérletezni kezdett (öntöműhelyből ellopott) vegyi anyagokkal.

Noha 1917-ben érettségi nélkül távozott az iskolából – csak 1962-ben, második Nobel-díjának átvétele után nyilvánították érettnak –, sikerült beiratkozni az Oregoni Mezőgazdasági Főiskolára, ahol vegyészmérnöknek tanult. Főiskolai tanulmányait macacsságának köszönhetette, mert anyja jobban szerette volna,



ha dolgozni kezd, és anyagilag támogatja a családot. Miután 1922-ben lediplomázott, posztgraduális képzésben vett részt a Kaliforniai Műszaki Egyetemen. Pauling elsősorban a fizikai kémia iránt érdeklődött, és hamarosan Roscoe Dickinson hatása alá került, aki Max von Laue egy évtizedes tanulmányának, a röntgendiffrakciónak a segítségével tanulmányozta az összetett kristályok alkotóelemeit. Dickinsonnal közösen Pauling leírta a molibdenit ásvány szerkezetét, és több cikket jelentetett meg róla. Pauling 1925-ben doktorált.

Az 1920-as évek közepén a kvantumelmélet keletkezése lehetővé tette az atom jobb megértését, és a vegyészetben is új kilátásokkal kecsegtetett. Pauling 1926-ban Európába utazott, egy ideig Münchenben Arnold Sommerfelddel dolgozott, akit két éve ismert meg, Zürichben találkozott Erwin Schrödingerrel, Koppenhágában Niels Bohrral, Göttingenben Werner Heisenberggel és Max Bornnal. Amikor 1927-ben visszatért a Caltechre, a Kaliforniai Műszaki Egyetemre, egyike lehetett annak a kevés vegyésznek, akinek világos elképzelése volt a kvantumelméletről. 1931-ben a Caltech tanára lett, 1929-től 1934-ig a Berkley-n tanított.

1928-ban, túllépve a kristályokon végzett korábbi munkáin, a kvantumelméletet igyekezett alkalmazni a kémiai kötésre. Kimutatta, hogy a különböző atomok jellegzetes tulajdonságai milyen kapcsolatban vannak a hullámmechanikailag leírt elektronjaikkal. Pauling törvények sorozatát állította fel, amelyek módszeresen leírták a kémiai kötését. A matematikai formulák általánosításából kiinduló törvények az elektronpárokkal, a perdülettel foglalkoznak, és meghatározzák, hol található az elektronok az atom körüli orbitális pályákon. Az orbitális pályák kölcsönhatása határozza meg a fizikai kapcsolatot, átfogóbb értelemben a vegyi anyagok különböző tulajdonságait.

1931-ben jelent meg a Journal of the American Chemical Societyban, az Amerikai Kémiai Társaság közlönyében Pauling legnagyobb hatású és legfontosabb cikke, A kémia kötés természetéről – az első az 1930-as évek elején publikált, hét klasszikus dolgozatból. Teljesítménye nem maradt észrevétlen, tudományos körökben elterjedt a híre, a sajtóban ünnepelték mint felemelkedőben levő fiatal amerikai tudóst, a Nobel-díj várományosát. Pauling kitűnő szónok volt, aki szívesen magyarázta elméleteit, felfedezéseit, humorral lazítva a rendkívül bonyolult összefüggéseket. 1939-ben publikálta első kiadásban a huszadik század egyik legnagyobb vegyészeti munkáját, A kémiai kötés természetéről.

Ezután érdeklődése kiterjedt az összetettebb szerves molekulákra is. Már 1929-ben foglalkoztatta a biológia, amikor Thomas Hunt Morgan genetikus megérkezett a Caltechre. Pauling ekkor ébredt tudatára, milyen fontos szerepet játszik a vegyészet az életfolyamatok megértésében.

Pauling biokémiai kutatásai számos különleges területre hatottak, beleértve az orvostudományt is. Először azt tanulmányozta, hogyan lehet felbontani a hemoglobinszerkezetét. Ez a fehérje szállítja az oxigént a vérben, ez okozza a vörös színt. Kezdetben nem járt sikerrel, de valamivel később, amikor egyszer a New York-i Century Klubban ebédelt, hirtelen megvilágosodással felfedezte a sarlósejtes vérszegénység kémiai alapjait. Hamarosan bebizonyosodott, hogy ez a vérbetegség molekuláris alapú, Mendel öröklődési törvényei érvényesek rá, tulajdonképpen genetikai védekezés a malária ellen, ezért olyan gyakori a feketék között.

A sarlósejtes vérszegénységgel kapcsolatos felfedezés mérföldkővet jelentett a biogenetikában, ez vezette rá Paulingot, hogy részletesebben tanulmányozni kezdje a szerológiai reakciókat, kapcsolatukat a támadó antigénekkal. A korszak legnagyobb immunológus kutatója, Karl Landsteiner ihletésével és bátorításával hatásos, noha végső soron helytelennek bizonyult elméletet dolgozott ki az antitest-antigén kapcsolatáról, és 1942-ben az első szintetikus antitestek gyártásában is részt vett.

Pauling legfontosabb biokémiai teljesítményei az aminosavakkal és fehérjékkel foglalkozó tanulmányok, amelyek sok tekintetben megalapozták a molekuláris biológia további haladását. A fehérjék mindenütt jelen vannak a biológiai mikrovilágban, és a huszadik század eleje óta úgy tartják, hogy a fehérjék jelentik a kulcsot az élő rendszerek megértéséhez, ám nagy számuk és bonyolultságuk miatt sokáig ellenálltak az elemzésnek. Pauling a hagyományos technikák mellett a mérhető molekuláris modell elkészítésének később híressé vált eljárását alkalmazta, amikor röntgendiffrakciós eljárással tanulmányozta a fehérjéket. 1937-ben kezdett el dolgozni, és az 1940-es évek végére ott tartott, hogy elvesse azt a gondolatot, miszerint a nagymolekulák ismételt kapcsolataik során valamiféle szimmetriának engedelmessé válnak. Rájött, hogy „két aszimmetrikus, de egyforma térbeli tárgyának inkább a csigavonal az általános kapcsolata”. A hosszú molekulák hajlamosak erre a formára. 1950-ben Pauling és Robert Corey igen fontos cikket jelentettek meg a csigavonalas formákról.

Pauling felismerésének leghíresebb áttörése a genetikai információkat tartalmazó, fehérjék szintézisét irányító DNS hosszú, kettős spirálja. Az lett volna a logikus, ha Pauling teszi a felfedezést, de közbeszólt az Egyesült Államok kormánya. Pauling, noha sokat dolgozott a problémán, nem férhetett hozzá az új, rendkívül jó minőségű röntgendiffrakciós fényképekhez, amelyeket Maurice Wilkins készített Cambridge-ben. Pauling azt tervezte, hogy 1952-es angliai útján megtekinti őket. Nem kapott útlevelet, és otthon maradt. 1953 elején megjelent cikkében leírta a DNS-molekula hármas spirálját, ami tévedésnek bizonyult. Két hónappal később James Watson és Francis Crick ismertette a valóságnak megfelelő kettős spirált.

Pauling 1954-ben kémiai Nobel-díjat kapott. Indoklás: „a kémiai kötések természetének kutatásáért és a bonyolult vegyületek szerkezetének meghatározásáért a kvantummechanika alapján”. Linus Pauling későbbi pályafutása elsősorban politikai aktivitása miatt ismert. A második világháború után energikusan tiltakozott a hidegháború ellen, és hatásos propagandát fejtett ki az atomfegyver-kísérletek ellen. Amikor megkapta az 1962-es béke Nobel-díjat, a New York Herald Tribune „békülékeny békeharcosnak” nevezte.

Mivel a Caltechen jóformán alig szenteltek figyelmet második Nobel-díjának, Pauling 1963-ban átment a Demokratikus Intézmények Tanulmányozására Alakult Központba, majd 1967-ben a San Diegó-i Kaliforniai Egyetemre, végül 1969 és 1974 között, nyugdíjba vonulásáig, a Stanford Egyetemen dolgozott. 1994. augusztus 19-én hunyt el.

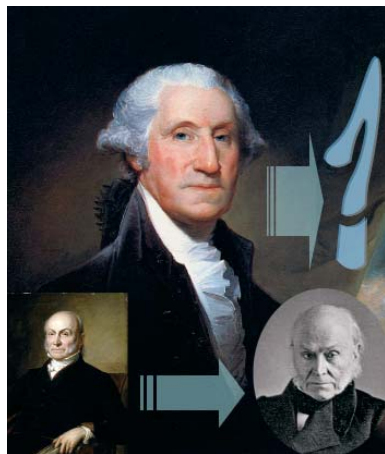




TÚL A KÉMIÁN

Elnökfestményből elnökfotó

Habár George Washington, az első amerikai elnök arcképe akár az egydolláros bankjegyen is megismerhető, igazából ez csak Gilbert Stuart festményéről ismert, amelyen a művész ecsetén át-szűrve látható a valóság. Sokaknak aligha okozott ez a probléma álmatlan éjszakákat, megoldására két amerikai szakember



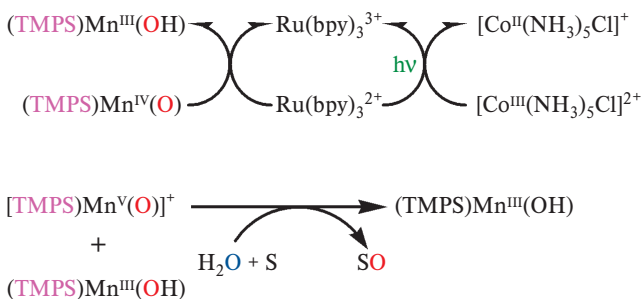
mégis számítógépes programot dolgozott ki. Az algoritmus azon alapul, hogy Gilbert Stuart portréalanyai közül összesen hatnak, köztük John Quincy Adamsnek, az Egyesült Államok hatodik elnökének fényképei is fennmaradtak. Így ezek felhasználásával meg lehetett tanítani a programot festmények alapján fotók rekonstrukciójára. Washington esetében a végeredmény azonban nem lett különösebben érdekesítő: az elnök minden bizonnyal majdnem pontosan ugyanúgy nézett ki, mint a festményen. Persze mindez még nem zárja ki azt a lehetőséget, hogy Gilbert Stuart a mai profi fotósok trükkjeihez hasonlóan politikai célokból az elnök idealizált arcképét festette meg.

Perception 40, 91. (2011)

Katalízis vízzel és fénnel

A napfény aktiváló hatására a víz oxigénjét felhasználó szerves kémiai átalakításokat valósítottak meg koreai tudósok. A több, már ismert részfolyamat kombinálásával létrehozott rendszerben fényelnyelés hatására először egy ruténium(II)-komplex redukál egy kobalt(III)kompleket. A keletkező ruténium(III)-tartalmú termék mangán-porfirin típusú oxigénátvivő katalizátorokkal reagál, s az így képződő aktív részecske szerves vegyületek, például *p*-sztirolszulfonsav oxidációjára képes. Összességében tehát a napfény energiájának hatására a víz oxigénje épül be egy szerves vegyületbe, ami több fontos felhasználás szempontjából is igen hasznos lehet.

Nature Chem. 3, 38. (2011)



CENTENÁRIUM

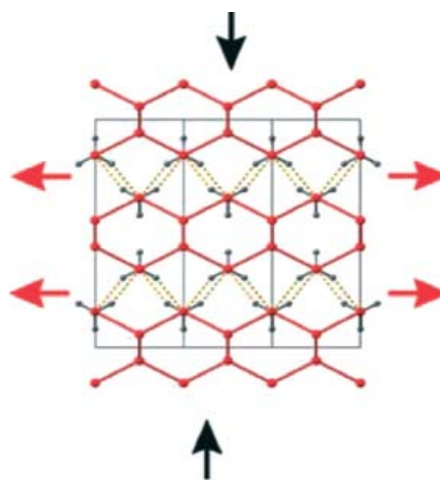
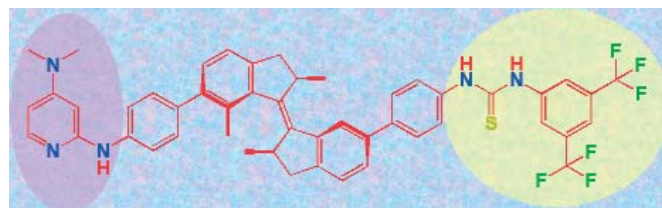
Charles Baskerville, W. A. Hamor: The Chemistry of Anaesthetics, I. Ethyl Ether. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, Vol. 3, pp. 301–317 (1911. május)

Charles Baskerville (1870–1922) a New York-i City College nagy hatású tanszékvezető professzora volt. Nevét viseli a mind a mai napig működő Baskerville Chemical Society. A sors ironiája, hogy manapság nem páratlanul széles körű kutatási eredményeit idézik fel leggyakrabban vele kapcsolatban, hanem a karolínium és berzélium elemek téves azonosítását (mindkettőről kiderült, hogy tórium).

Királis molekuláris motor

Holland tudósok olyan új katalizátormolekulát fejlesztettek ki, amelynek enantioszelektivitása fény hatására bekövetkező rotáció révén szabályozható. A molekula több, szisztematikusan tervezett részből áll. A fény hatására forgást végző egységhez egy dimetilamino-piridin egység kapcsolódik, amely a Brønsted-bázis, ugyanakkor egy tiokarbamid-alapú, hidrogénkötésben a donor szerepét játszani képes részlet is jelen van, így a Michael-addíció organokatalíziséhez éppen ideális a rendszer. Az aktiváláshoz 312 nm hullámhosszú fényre van szükség, s így kb. 50%-os enantiomerfelesleg érhető el a 2-metoxi-tiofenol és a ciklohexenon reakciójában.

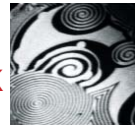
Science 331, 1429. (2011)



APRÓSÁG

A metanol-mono-hidrát kristályai egy kitüntetett irányban melegítés hatására zsugorodnak, nyomásnövelés hatására pedig kitégulnak.

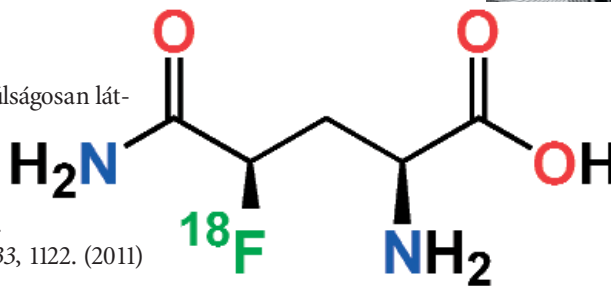
Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg@dragon.klte.hu.



A HÓNAP MOLEKULÁJA

A (2S,4R)-[¹⁸F]-4-fluorglutamin (C₅H₉¹⁸FN₂O₃) első ránézésre nem tűnik túlságosan látványos molekulának. Olyan daganatok pozitronemissziós tomográfiával (PET) való vizsgálatához fejlesztették ki, amelyek alternatív energiaforrásként glutamint is képesek hasznosítani. A szintézis igazi nehézségét az adja, hogy a fluor 18-as izotópjának felezési ideje mindössze 110 perc.

J. Am. Chem. Soc. 133, 1122. (2011)



Könnyek és tesztoszteron

A női könnyek ezentúl nemcsak pszichológiai, hanem biológiai fegyvernek is minősíthetők. Ez a következtetés is levonható egy nemrégiben közzétett tanulmány eredményeiből, amelyhez az alapanyagot szomorú filmeket néző hölgyek biztosították. A pusztán a szem nedvesítésére keletkező, valamint az érzelmeiket kifejező könnyek kémiai összetétele jelentősen eltér. Mindkettő szagtalan ugyan, de az utóbbiban valamilyen kémiai jelátvivő anyagnak, vagyis feromonnak kell jelen lennie.

A síró nők látványától megkímélt, de a könnyek „illatát” érző férfiak ugyanis mind a szubjektív tesztkérdések, mind a mágneses rezonanciás képalkotás (MRI) módszerével végzett agyaktivitási vizsgálatok szerint kevésbé tartották szexuális szempont-



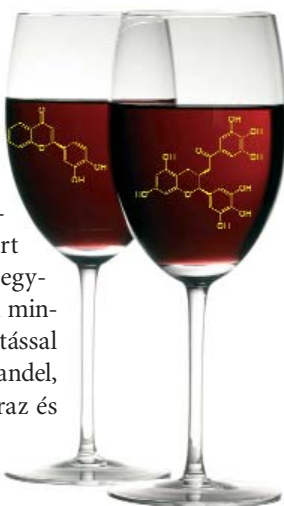
ból vonzóznak a női fényképeket, mint a sós vizet szagoló kontrollcsoport. Az első csoport esetében jelentős csökkenést tapasztaltak a tesztoszteronszintjükben is. Az emberi könny összetett keverék, és az élettani hatásért felelős komponens még nem sikerült izolálni. Egyéb hiányérzete is lehet az olvasónak: a kutatók azt nem vizsgálták, hogy a férfiak könnyei vannak-e hatással bárkire is.

Science 331, 226. (2011)

Vörösbor-ujjlenyomat

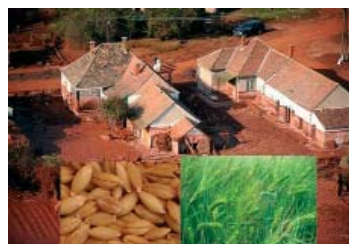
Kaliforniai tudósok speciális kémiai érzékelőt fejlesztettek ki, amely képes különböző csersavtípusok megkülönböztetésére, s így vörösborfélék azonosítására. Az eszköz olyan indikátorokat tartalmaz, amelyek egyes csersavmolekulák kötődésének hatására megváltoztatják a színüket. Ezért az egyes borfajtáknak az érzékelőn egyfajta színes ujjlenyomata alakul ki. A mintázatok alapján lényegében egy pillantással azonosítani lehetett a Pinot Noir, Zinfandel, Beaujolais, Cabernet Sauvignon, Shiraz és Merlot típusú vörösborokat.

Chem. Sci. 2, 439. (2011)



Növénytermesztési esélyek vörös iszapon

A 2010-es magyar vörösiszap-katasztrófa belga tudósokat is munkára készítetett. Egy leuveni tudóscsoport Magyarországról vett mintát vörös iszappal szennyezett talajból. Ezen a talajon árpát

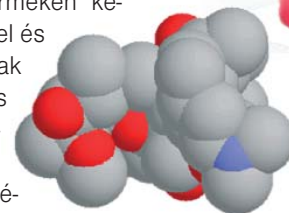


termesztettek: a hozam 5–25%-kal kisebb lett, mint hasonló összetételű, de szennyezéstől mentes talajon. Ugyanilyen csökkenést tapasztaltak, ha a vörös iszapban lévőhöz hasonló mennyiségű tiszta nátrium-hidroxidot adtak a szennyezésmentes talajhoz. Mindez azt bizonyította, hogy a fő környezeti kárt valószínűleg nem a mérgező, de kis mennyiségben jelen lévő anyagok okozzák, hanem pusztán a nátriumkoncentráció hatalmas növekedése.

Environ. Sci. Technol. 45, 1616. (2011)

Átkristályosítás széndioxiddal

Amerikai kutatók a közelmúltban kimutatták, hogy nagy nyomású széndioxid (CO₂) gyógyszer-molekulák különböző kristályszerkezetei közötti átalakulást lehet előidézni. A kristályok polimorfijának a gyógyszeriparban nem egyszer több százmillió dolláros következménye van, mert ennek révén változhat egy anyag oldhatósága, stabilitása, illetve más anyagokkal való keverhetősége. A klaritromicint általában 0-ásként emlegetett polimorfjaként állítják elő, amelyet aztán kétlépéses folyamatban, az I-es formának nevezett köztiterméken keresztül, jelentős melegítéssel és hosszabb idő alatt alakítanak át a gyógyszerként hasznos II-es formába. Az új eredmények szerint ugyanezt 24 bar CO₂-nyomáson egyetlen lépésben, szobahőmérsékleten, alig négy óra alatt el lehet érni. A lanszoprazol etanollal együtt kristályosodó módosulatát hasonló módszerrel oldószer-mentesíteni lehetett. Az átalakítások mechanizmusát egyelőre nem sikerült megérteni, de ettől még a módszer gazdasági jelentősége igen nagy lehet.



J. Am. Chem. Soc. 133, 1399. (2011)



TUDOMÁNYOS ÉLET

Nanotudományi iskola

Horvátországban, Dubrovnikban rendezték meg 2010 szeptemberében első alkalommal az Adriatic School on Nanoscience elnevezésű nemzetközi iskolát, amelyet elsősorban doktoránsok és fiatal kutatók számára hirdettek meg. Az esemény fő szervezői a horvát illetőségű Rudjer Boskovic Intézet, a finn Jyväskyläi Egyetem, illetve az osztrák Joanneum Research voltak.

A négynapos rendezvényen neves kutatók tartottak másfél óras angol nyelvű előadásokat: általában a délelőtti és a délutáni programba is két-két előadás került be. Mivel az iskola témaként a meglehetősen általános fogalomnak számító nanotudományt jelölték meg, nagyon változatos volt a tematika. A nanorészecskék, nanostruktúrák és szupramolekuláris rendszerek fizikai, biológiai és kolloidkémiai jellemzése mellett voltak átfogó jellegű előadások is (pl. a leggyakrabban használt vizsgálati módszerekről az anyagtudományban, vagy a különböző nanotechnológiai eszközök alkalmazási lehetőségeiről). Manapság növekvő jelentőségű témák is előkerültek, mint az önszerveződő rendszerek, a szénnanocsövek, a nanorészecskék alkalmazása a gyógyszeriparban.

Körülbelül hatvan fiatal vett részt az eseményen, döntő többségük Horvátországból vagy Szlovéniából érkezett, de más európai országokból is jöttek (pl. Lengyelország, Magyarország, Németország, Olaszország, Szerbia). A résztvevőknek az iskolát megelőzően posztert kellett készíteniük, amelyen saját kutatómunkájukat mutathatták be. Az iskola helyszínén összesen két poszterszekció keretében nyerhettünk betekintést egymás munkájába. A szekciók előtt mindenki tartott egy rövid (egy-két perces) bemutatkozó beszédet kutatásai és posztere témájáról.

Az előadások és a szakmai szempontból ugyancsak hasznos poszterszekció mellett a szervezők egy kirándulást is beiktattak a programba, ennek keretében Dubrovnik óvárosában tölthettünk egy délutánt. Az utolsó estén pedig díszvacsorát rendeztek egy közeli étteremben.

A szervezők mindent megtettek annak érdekében, hogy a rendezvény jól sikerüljön: színvonalas szakmai programot biztosítottak, gondoskodtak a résztvevők ellátásáról és kényelméről is, amihez a kivételes szépségű Dubrovnik remek háttérrel nyújtott. Ezért is örülök, hogy részt vehettem ezen a rendezvényen, köszönhetően a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem és a Magyar Kémikusok Egyesülete anyagi támogatásának.

Detrich Ádám

HÍREK AZ IPARBÓL

A Fukusima atomerőműben kialakult helyzetet elemezték a Magyar Nukleáris Társaság rendkívüli elnökségi ülésén

Rendkívüli elnökségi ülést tartott a Magyar Nukleáris Társaság vezetősége 2011. március 18-án. A résztvevők egyetértettek abban, hogy az eseményeket szakmai-tudományos szempontok alapján elemezni kell, fel kell deríteni az okokat, és le kell vonni a tanulságokat.

Ugyan a földrengés és a szökőár jelentős károkat okozott az atomerőműben, ezeket nagyságrendekkel meghaladják az országot ért emberi és gazdasági veszteségek.

A szakemberek egyetértettek abban, hogy hazánkban a következő évtizedekben is szükség van az atomenergia alkalmazására. A paksi atomerőmű nélkül csak nagyobb környezetterhelés mellett és magasabb áron lenne lehetséges a villamosenergia-termelés.

A fiatal nukleáris szakemberek által szerkesztett, rendszeresen frissülő nukleraj.blog.hu oldalon további, részletes információk mellett a legfrissebb hírek és sugárzási adatok is rendelkezésre állnak.

H. E.

INEX-4 nemzetközi nukleárisbaleset-elhárítási gyakorlat Budapestén

Az OECD Nukleáris Energia Ügynöksége (OECD NEA) 5–6 évente nemzetközi nukleárisbaleset-elhárítási gyakorlatot (INEX) szervez a tagállamok részére. A negyedik sorozatban előkészített gy-

akorlaton ezúttal egy piszkos bomba felrobbantása következményeinek kezelését és a helyreállítás előkészítését helyezték a középpontba.

A gyakorlatot előkészítő bizottságot az Országos Atomenergia Hivatal vezette, a bizottságban 21 hazai szerv 53 képviselője működött közre. A kétnapos gyakorlatra 2011. február 23-án és 24-én a Fővárosi Tűzoltóparancsnokságon, a nukleáris veszélyhelyzet kezelésében érintett szervek részvételével került sor. A feltételezések szerint terroristák egy sugárzó, cézium-137 izotópot tartalmazó piszkos bombát robbantottak fel csúcsgazdálkodási időszakban az Üllői út és a Könyves Kálmán körút kereszteződésében, miközben az Albert Flórián stadionban labdarúgó mérkőzés zajlott. A kezdeti beállításban a robbantás utáni helyzet kezelését a rendőrség, a tűzoltók és a mentők a katasztrófavédelem és a Terrorelhárítási Központ bevonásával már elvégezték, a sérülteket kórházba szállították, a közelben tartózkodókat biztonságba helyezték és a korai nyomozati tevékenységeket lezárták. A gyakorlat során az így kialakult helyzet további kezelését kapták feladatul a részt vevő szervezetek. Döntést kellett hozniuk többek között a sérültek kórházi kezeléséről, a kimenekített lakosság el látásáról, a felajánlott nemzetközi segítség koordinálásáról, a helyszín hosszú távú biztosításáról, a közlekedési problémák megoldásáról, a terület sugármentesítéséről és a keletkező radioaktív hulladékok elhelyezéséről. Hangsúlyos feladat volt az egyes döntésekkel kapcsolatos hazai és nemzetközi tájékoztatási stratégia kialakítása és végrehajtása is.

Említést érdemel a gyakorlat témájának újszerűsége: a terrorista cselekmények és ezen belül a radiológiai károkozás elleni felkészülést világszerte nagy figyelem övezi. Magyarországon ilyen eseményen alapuló gyakorlatot korábban még nem rendeztünk, így az INEX-4 jó alkalmat teremtett arra, hogy a felkészülésünk ebben az irányban is lendületet vehessen a legújabb kihívásokkal szemben is.

A gyakorlaton kulcsfontosságú szerep jutott a Budapest Fővárosi Védelmi Bizottságnak, hiszen a szcenárió szerinti esemény a



fővárosban történt. A felkészítő jellegű gyakorlaton részt vett az OAH főigazgatója által vezetett Nukleárisbaleset-elhárítási Védekezési Munkabizottság, valamint az Országos Katasztrófavédelmi Főigazgatóság által irányított Operatív Törzs és Lakosság Tájékoztatási Csoport is.

A résztvevők a gyakorlat eredményes végrehajtásával bizonyították, hogy Magyarország polgárainak biztonsága érdekében még egy ilyen nem várt és reményeink szerint soha be nem követhető veszélyhelyzetre is felkészültünk.

Petőfi Gábor

A TargetEx új projektje

A TargetEx Kft. a Nemzeti Fejlesztési Ügynökség KMOP 1.1.1 programja keretében elnyert támogatással új integrált kutatási projektet indított.

„A támogatás elnyerése nagyon fontos a cég életében és lehetőséget nyújt egy olyan szakmai terület kiemelt fejlesztésére, amely a cég szolgáltatási portfólióját a gyógyszerkutatás egyik legkurrensebb irányába terjeszti ki – mondta Cseh Sándor, a magyar biotechnológiai kisvállalat ügyvezetője. – A TargetEx Kft. tevékenységének fókuszában két fő szolgáltató tevékenység áll. Az egyik terület a molekuláris biológia és a rekombináns fehérje expresszió, a másik olyan nagy áteresztőképességű szűrések alkalmazása a gyógyszerkutatás korai fázisában, mint a sejt- és targetalapú HTS-esszék. Az elnyert támogatás szorosan illeszkedik ebbe a két vonalba. Célul tűztük ki rekombináns GPCR-túltermelő sejt vonalak létrehozását és validált, nagy áteresztőképességű GPCR-esszék kifejlesztését modulátor kismolekulák szűrésére.”

A G-fehérje kapcsolt receptorok (GPCR) a humán genom egyik legnagyobb fehérjecsaldája. Elsődleges hírvivők, melyek hormon, neurotranszmitter vagy citokin/kemokin kismolekulák hatására aktiválódnak, ami elindítja a sejten belüli jelátviteli folyamatot. A GPCR-ok jelentősek a központi idegrendszer folyamatainak szabályozásában is, így lehetőséget adnak az abban kialakuló megbetegedések kezelésére (pl. depresszió, skizofrénia, Alzheimer- és Parkinson-kór).

„A projekt célja a kiválasztott G-fehérje kapcsolt receptorokhoz esszéportfólió és fókuszált könyvtárak kialakítása. Ezekkel a gyógyszerfejlesztésben hatóanyagjelöltek gyors azonosítására, profilizálására nyílik mód. A kiválasztott 6 receptor – az 5HT6 és 5HT7 (szerotonin), a H3R (hisztamin receptor 3), a CB1 és CB2 (kannabinoid) és a GLUR8 (glutamát) – idegrendszeri eredetű megbetegedésekben fontos gyógyszer-célpont – részletezte Lőrincz Zsolt, a TargetEx Kft. tudományos igazgatója. – A projekt végrehajtásának eredménye innovatív termék- és szolgáltatásportfólió a gyógyszerfejlesztési piac egy fontos szegmensén, hisz a GPCR-ok jelentik a gyógyszerek támadáspontjainak közel felét. Az idegrendszeri eredetű betegségek pedig a gyógyszerpiac kb. 15%-át teszik ki.”

„A GPCR-modulátor fókuszált könyvtárakat milliós nagyságrendű kereskedelmi adatbázisokból, a korábban hatásosnak talált ligandumok szerkezetéből kiindulva, hasonlósági kereséssel, a molekuláris váz módosításával, illetve bioizosztérikus fragmentumcserékkel választjuk ki” – tette hozzá Dormán György, a projekt gyógyszerkutatási szakértője.

„A közel 134 millió Ft összköltségű projekt 65%-át valósítjuk meg európai uniós forrásokból az Új Magyarország Fejlesztési Terv keretében. A projekt révén a cég számára közvetlen üzleti és

tudományos sikerek mellett másféle, új értékeket is teremtünk, ilyenek például az új munkahelyek, illetve az ezek, valamint a beszerzett eszközök révén a projekt utáni termelő-, szolgáltatáskapacitás növekedése. A projekt során társaságunk gondot fordít a környezetvédelemre és az esélyegyenlőség javításának horizontális szempontjaira is, amely szintén közvetett értékeket teremt” – egészítette ki Bágyi István, a TargetEx pályázati igazgatója.

Bágyi István

A Sanofi megveszi az amerikai Genzyme vállalatot

A francia–német Sanofi-Aventis gyógyszergyár újabb biotechnológiai részleggel bővül: 20,1 milliárd dollárért megveszi az amerikai Genzyme Corp. biotechnológiai vállalatot.

A gyár további kifizetést is vállalt a Genzyme szereinek sikerétől függően. Az amerikai cég elsősorban a szklerózis multiplex kezelésében aktív. A Sanofi-Aventis mind nagyobb összegekkel jelenik meg a biotechnológiában: előző ilyen szerzeménye, a szembetegségekkel foglalkozó francia Fovea Pharmaceuticals 370 millió euróba került 2009 végén. A Sanofi-Aventis csoporthoz Magyarországon a kutatás-fejlesztéssel és gyártással foglalkozó Chinoin Zrt. gyógyszergyár tartozik. A Sanofi-Aventis, a cég tudomása szerint, a magyar gyógyszerpiac mintegy 10 százalékát birtokolja, és magyarországi bevételének 17 százalékát költi kutatásra-fejlesztésre. 1991 óta több mint 500 millió eurót fektetett be Magyarországon. A Sanofi-Aventis tavaly 3,8 százalékkal 5,467 milliárd euróra növelte adózott eredményét (kisebbségi részesedések nélkül) a 3,7 százalékkal 30,384 milliárd euróra gyarapodott bevételéből. (A HVG.hu nyomán)

Zékány András

Vegyipari mozaik

Szükség van az innovációra. Az erős Európai Uniónak versenyképesnek kell lennie és ehhez szükség van az innovációra, ezen belül a biotechnológiára – kezdte köszöntőjét Bogsch Erik az uniós Biotechnológia konferencián, Budapesten. A Richter Geodeon Nyrt. vezérigazgatója a főbb eredményszámok bemutatásakor úgy fogalmazott, hogy továbbra is nyereséges a cég, így tudják fizetni az iparágat sújtó adókat.

Jól láthatóan nagyon érzékeny téma a gyógyszeriparban az adórendszer. Bogsch Erik, a Richter vezérigazgatója előadásában nem akarta kommentálni a gyógyszergyártókat sújtó adóterheket. Előadásában viszont hangsúlyozta, hogy a gyógyszergyártó önmagában mekkora mértékben járul hozzá a magyar gazdaság teljesítményéhez és a magyar államháztartáshoz. A kivetített számokból kiderült, hogy a Richter 2010-ben 24 milliárd forintnyi adót fizetett be a költségvetésbe, 26 milliárd forintos kutatás-fejlesztési kiadása volt, és emellett 16 milliárd forint értékű beruházást hajtott végre. 2010-ben a vállalat 66 milliárd forinttal járult hozzá a magyar gazdasághoz – jelezte Bogsch Erik, aki egyúttal arra is kitért, hogy nagyon magabiztos a cég jövőjével kapcsolatban. A kiváló szakembergárdának, innovatív tevékenységnek köszönhetően sikeres lesz a Richter, a sikeres Richter jó Magyarország számára, és egy sikeres Magyarország jó az



Európai Unió számára – zárta előadását a gyógyszergyártó első embere.

Nem beszélünk politikáról és nem beszélünk adózási kérdésekről – kezdte Matolcsy György előadását, reagálva a korábban elhangzottakra. A tárcavezető később azt is közölte, hogy a magyar kormány elkötelezett az innováció-központú politika mellett. Ebben kérjük az Önök segítségét, adózásról nem beszélünk. Felajánljuk az adórendszert, mint eszközt – jelezte a hallgatóság számára a miniszter.

Nem meglepő, hogy érzékeny kérdés a gyógyszergyártókat sújtó adóteher, kiváltépp a nemzetgazdasági miniszter jelenlétében, aki a Széll Kálmán Terv keretében két év alatt 120 milliárd forintot vonna ki az állami gyógyszerkasszából. A hírek szerint pedig ehhez a gyógyszergyártóknak is ki kell venniük a részüket, vélhetően az adóbefizetések növekedésével. A kormány ugyanis egyértelműen hangsúlyozza, hogy a megtakarítást a gyógyszerárak, vagyis a betegterhek emelkedése nélkül akarja elérni.

A gyógyszeripari befizetések rendszere 2003-ban indult: a gyártók és az állam által kötött szerződésen, azaz polgári jogviszonyon alapult. Ezt a rendszert váltotta fel 2007-től a 2006 decemberében elfogadott a Gyógyszer-gazdaságossági törvény, amely szabályozza az iparági különadókat és egyéb befizetéseket.

A gyógyszeripari befizetések négy lábra épülnek:

1. A társadalombiztosítás által támogatott készítmények forgalmának **12%-át** a gyógyszeripar vissza kell fizesse. Ez gyakorlatilag 12%-os árkedvezmény nyújtását jelenti a támogatott gyógyszerek forgalmazása esetében.

2. Ezenkívül a gyártóknak **orvoslátogatói díjat** kell fizetniük.

3. A gyógyszergyártói befizetések harmadik ága az árvolumen-megállapodás (**támogatás-volumen szerződések**) keretében történő befizetés.

4. A negyedik pillér pedig a **sávós befizetés**, ami a gyógyszerkassza év végi egyenlegétől függ: ha a kiadások túllépik az előirányzott szintet, akkor a gyártóknak plusz befizetési kötelezettsége keletkezik. (*A portfolio.hu nyomán*)



Hidrogénből energiát. Több mint 16 millió eurós beruházással a hidrogén energetikai célú hasznosítására készül a Borsodchem Zrt. Az erről szóló megállapodást a múlt év utolsó napjaiban írta alá a kivitelező Sinergy Energiaszolgáltató Beruházó és Tanácsadó Kft.-vel, valamint a finanszírozó UniCredit Bank Zrt.-vel. A hasznosítandó, évente mintegy 43 millió köbméter hidrogén a BorsodChemnél folyó gyártás során keletkezik. A gázt a vegyipari társaságnál a Sinergy által két éve telepített kazánban égetik majd el, az így termelt hőt pedig a BorsodChem fogja felhasználni. A megoldás révén évente mintegy 12 millió köbméterrel csökken a kazán földgázfelhasználása, és ezzel évi 23 ezer tonnával a szén-dioxid-kibocsátása is.

A beruházás a tervek szerint ez év őszére készül el. Akkortól a társaság nemcsak az eddiginél kedvezőbb feltételekkel jut hőenergiához, hanem – az üvegházhatású gázok kibocsátásának csökkentésével – jelentősen hozzájárul a fenntartható fejlődéshez is. (www.borsodchem-group.com)



Személyi és szervezeti változás a MOL-nál. Mosonyi György 2011. április 30-án távozik a MOL Nyrt. vezérigazgatói pozíciójá-

ról, lemond igazgatósági tisztségéről és a vállalat operatív irányításában nem vesz részt a jövőben. Mosonyi György döntését az Igazgatóság tudomásul vette, megköszönte az elmúlt 12 évben végzett kiemelkedő szakmai és vezetői munkáját, és felkérte, hogy non-executive pozícióban továbbra is segítse tapasztalatával és iparági tudásával a vállalatcsoportot.

A MOL Igazgatósága a társaság soron következő közgyűlésére javasolja a részvényeseknek, hogy Világi Oszkárt válassza meg új igazgatósági tagnak. Világi Oszkár a Slovnaft vezérigazgatója, a Slovnaft Igazgatóságának elnöke és a MOL ügyvezető testületének tagja. Kupa Mihály 2011. április 30-i hatállyal lemondott Felügyelő Bizottsági tagságáról.

A MOL Igazgatósága a társaság soron következő közgyűlésére javasolja a részvényeseknek, hogy Mosonyi Györgyöt válassza meg új felügyelő bizottsági tagnak.

A MOL Nyrt. új vezérigazgatója 2011. május 1-től Molnár József, aki 2004 óta a MOL-csoport pénzügyi vezérigazgató-helyettese, és több mint két évtizedes vezetői, pénzügyi és iparági tapasztalatra tett szert a MOL-csoport, a TVK és a Borsodchem különböző vezető pozícióiban.

Az Igazgatóság az alábbi új munkamegosztási rendben folytatja tevékenységét 2011. május 1-től: az új pénzügyi vezérigazgató-helyettes Simola József, aki 2006 óta tagja a MOL ügyvezető testületének. A Downstream üzletágat, mely magában foglalja a Termék-előállítás és Kereskedelem, a Kiskereskedelem és a Petrolkémia üzletágakat, Horváth Ferenc vezeti. A Kutatás és Termelés üzletágat továbbra is Áldott Zoltán vezeti, aki egyben az INA Igazgatóságának non-executive elnöke. A Stratégia üzletágat összevonják az Üzletfejlesztési divízióval, és Galács Ábel vezetése alá kerül. (*MOL*)

Banai Endre összeállítása

OKTATÁS

MOL Dialógus konferencia a természettudományos oktatás fejlesztéséért

Több mint 170 középiskolai és egyetemi oktató, üzleti és állami szereplő vett részt a MOL által szervezett Dialógus című konferencián.

A konferencia célja a hazai közép- és felsőfokú természettudományos oktatás fejlesztése, illetve egy erről szóló rendszeres, nívós szakmai dialógus elindítása. Az eseményt Pálkás József, az MTA elnöke nyitotta meg, aki egyben az esemény védnöke is, és felszólaltak a köz- és versenyszféra szereplői, illetve a természettudomány területén dolgozó szakemberek. A 2010-es Nemzetközi Matematika, Kémia és Fizika Diákolimpiák magyar dobogósa, a TUDOK (Tudományos Diákkörök Országos Konferenciája) különdíjasai és nyertesei, valamint felkészítő tanáraik, illetve a nemzetközi Ifjúsági Tudományos Fenntarthatósági Olimpia aranyérmese nyilvános kerekasztal-beszélgetésen osztották meg sikerük titkát a közönséggel. Végül a résztvevőknek is lehetőségük nyílt a tapasztalatcserére, illetve aktív részvételre munkacsoportok keretében, melyeken többek között arra is keresték a választ, hogy a gazdaság szereplői miként tudnak részt venni a természettudomány-tanulás és a természettudományos pályák népszerűsítésében.



Kiemelkedően népszerű a MOL a pályakezdők körében



Több rangos elismerésben részesült a MOL a pályakezdők véleményét vizsgáló Aon Hewitt hazai vállalatokat vizsgáló kutatása alapján. A felmérés kimutatta, hogy a MOL a második legvonzóbb munkahely ma Magyarországon a diplomás pályakezdők körében.

A MOL Magyarország legnagyobb vállalata, a régió egyik legjelentősebb gazdasági szereplője, különböző tevékenységeivel több mint 40 országban 32 000 munkatársat foglalkoztat. Az utánpótlás támogatására nagy hangsúlyt fektet, a középiskolától az egyetemekig indít programokat, versenyeket azzal a céllal, hogy a társaság közép- és hosszú távú erőforrás-szükségleteit magas szinten kielégítse. Ennek egyik eleme a MOL által szervezett, egyetemistáknak szóló Freshhh vetélkedő. A Freshhh sikere adta az ötletet arra, hogy a MOL a középiskolásoknak is megadja a lehetőséget a bizonyításra. Így indult el 2010-ben a Junior Freshhh. Ezt a vetélkedőt is hatalmas érdeklődés övezte. A MOL fiatal pályakezdőket megcélzó Growww Friss Diplomás programja is az utánpótlás-támogatás lényeges eleme.

A MOL-csoport népszerűsége a diplomások körében folyamatosan erősödik. Bár a MOL profiljából adódóan elsősorban műszaki végzettségű pályakezdőknél indít programokat, a felmérés kimutatta, hogy a pénzügyi területeken tanulók is szívesen választják a vállalatot. A kutatásból egyértelműen kiderül például, hogy a Budapesti Corvinus Egyetemen végzettek között a MOL a legnépszerűbb munkahely. Ennek oka valószínűleg az, hogy a pénzügyi terület iránt érdeklődő pályakezdőkben pozitív benyomást kelthetnek a vállalattal kapcsolatos tőzsdei hírek, illetve általánosságban a csoport prosperitása.

A „Bor és tudomány” ünnepe a Magyar Műszaki és Közlekedési Múzeum Tanulmánytárában

A Magyar Kémikusok Egyesülete és a Magyar Műszaki és Közlekedési Múzeum (MMKM) közös népszerűsítő tudományos rendezvénye – a Kémia Nemzetközi Éve alkalmából – április 2-án délelőtt 10-től délután 5-ig folyamatosan tartott. A délelőtti kísérletes bemutatón Ziegler Gábor és Schiller Vilmos restaurátor beszélt arról, hogy a kémia milyen szerepet tölt be a műszaki műtárgyak restaurálásában. „Félvezető tárlatvezető” címmel Képes Gábor, a Tanulmánytár osztályvezetője kalauzolta a vendégeket az informatikai gyűjteményben a félvezetők kémiájának előtérbe helyezésével. Délben „Háztartás és kémia” címmel tartott tárlatvezetést Vámos Éva tudományos titkár.

A „Bor és tudomány” ünnepének leglátványosabb részét Európa-szerte ismert, hazai kísérletbemutató professzorok előadásai adták. Ezt a sorozatot Liptay György, az MKE alelnöke nyitotta meg, aki hangsúlyozta, hogy a Múzeum az Egyesület igen jó partnere a fiatal utánpótlás-kémikusok toborzásában. Murányi Zoltán tanszékvezető főiskolai tanár és Oldal Vince docens (egri Eszterházy Főiskola Kémiai, Borászati Kémiai és Borászati Tanszék) kevés szakszóval és sok humorral mutatta be a kémiai reakciók csodáit. Sarkadi Livia egyetemi tanár és tanítványa, Simon Péter (BME Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszer-tudományi Tanszék) az élelmiszer-színezékekről és az „E” élelmiszer-adalékokról tartott előadást, a kísérletekbe pedig bevonták a gyerekeket is. Végül a várva várt „tudományos” borkóstolóra került sor. Pálinkó István, a Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékének docense magyarázta el közérthetően, miért olyan zamatosak boraink.

A nap végén tárlatvezetéssel búcsúztak a szervezők abban a reményben, hogy az MKE és az MMKM együttműködésében szervezett előadások folytatásához találunk szponzorokat még a kémia évében.

Vámos Éva



Szerves Kémia Problémamegoldó Verseny



Minden szerves kémia iránt érdeklődő B.Sc.-s és M.Sc.-s hallgatót szeretettel várunk!

A versenyre jelentkezni lehet az elte.szokpv@gmail.com címen.
A verseny időpontja: 2011.05.06. (péntek) 15 - 18 óra
A verseny helyszíne: ELTE Lágymányosi Campus, Déli tömb - Mogyoródi József terem (0-822)






A várható témakörök: alap szerves kémiai-, laboratóriumi- és spektroszkópiai ismeretek, valamint természetes szénvegyületek kémiája.

A feladatok megoldásához bármilyen írott vagy nyomtatott segédlet használható, de elektronikus nem!

Kajtar Márton Alapítvány
Pázmány Péter Természettudományi Információs Alapítvány
Vegyész Oktatásért Alapítvány





MKE-HÍREK

Konferenciák

MKE I. Nemzeti Konferencia

2011. május 22–25. Liszt Ferenc Konferenciaközpont, Sopron
 Online jelentkezés: <http://www.mkenk2011.mke.org.hu>
 Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
 A konferenciára eddig már csaknem 410 fő jelentkezett, és 132 szóbeli, valamint 121 poszter-előadást fogadott el a konferencia tudományos szervezőbizottsága.
 TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kőröspataky Panna és Bondár Mónika, mkenk2011@mke.org.hu

Biztonságtechnika Szeminárium

2011. június 1–3. Hotel Magistern, Siófok, Beszédes József sétány 72.
 Online jelentkezés a www.mke.org.hu honlapon, a rendezvények menüpont alatt.
 Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
 TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Körtvélyessy Eszter, eszter.kortvelyessy@mke.org.hu

4th European Conference on Chemistry for Life Science

2011. augusztus 31. – szeptember 3.
 ELTE Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A
 Online regisztráció: <http://www.4eccls.mke.org.hu/>
 Korai regisztráció és fizetés: 2011. június 15.
 Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
 TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika, 4eccls@mke.org.hu

Conferentia Chemometrica 2011

2011. szeptember 18–21. Sümeg, Hotel Kapitány (Tóth Tivadar u. 19.)
 Online regisztráció: <http://www.cc2011.mke.org.hu/>
 Előadás-beküldési határidő: 2011. május 31.
 Korai regisztráció és fizetés: 2011. július 31.
 Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
 TOVÁBBI INFORMÁCIÓ: Kőröspataky Panna, cc2011@mke.org.hu

Interfaces '11

2011. szeptember 28–30. Hotel Sopron, Sopron, Fővényverem u. 7.
 Online regisztráció: <http://www.interfaces11.hu/>
 Korai regisztráció és fizetés: 2011. június 15.
 Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
 TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika, interfaces11@mke.org.hu

X. Környezetvédelmi, Analitikai és Technológiai Konferencia

2011. október 5–7. Sümeg, Hotel Kapitány (Tóth Tivadar u. 19.)
 Online regisztráció: <http://www.kat2011.mke.org.hu/>
 Előadás-feltöltés határideje: 2011. június 15.
 Korai regisztráció és fizetés: 2011. szeptember 1.
 Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
 TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kőröspataky Panna, korispataky@mke.org.hu

54. Spektrokémiai Vándorgyűlés és XVI. Italian–Hungarian Symposium on Spectrochemistry

2011. október 5–7. Sümeg, Hotel Kapitány (Tóth Tivadar u. 19.)
 Online regisztráció: <http://www.spektrokemia.mke.org.hu/>
 Előadás-feltöltés határideje: 2011. június 15.
 Korai regisztráció és fizetés: 2011. szeptember 1.
 Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!
 TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kőröspataky Panna, korispataky@mke.org.hu

Az Országos Műszaki Múzeum Vegyészeti Múzeumát Támogató Alapítvány

országos rajzpályázatot hirdet

ÉLETÜNK ÉS A JÖVŐNK A KÉMIA címmel

a Kémia Nemzetközi Éve programsorozat
 részeként.

- Pályaművek: A/3-as méretben, bármilyen technikával készíthetők paszpartozva.
- Pályázók köre: 14–18 éves korosztály, személyenként csak egy pályaművet fogadunk el.
- Beadási határidő: **2011. augusztus 31.**
- Szakmai zsűri bírálata alapján az 1. díjas pályamunka 30 000 Ft-ot, a 2. díjas 20 000 Ft-ot és a 3. díjas 10 000 Ft-ot nyer el. A kiírók a felkészítő szaktanárokat is jutalmazták. A díjkiosztón megjelenő pályázók oklevelet vehetnek át.
- Ünneplés eredményhirdetés: **2011. október 21-én**, a Földünkért világnapon.

Cím: OMM Vegyészeti Múzeumát Támogató Alapítvány
(8100 Várpalota, Thury-vár)

Kérjük, mellékeljék a pályázó nevét, életkorát, iskolája pontos címét, felkészítő szaktanára nevét.

Emlékeztető

a 2011. március 10-én megtartott GB-ülésről

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

1. A GB-ülés napirendjén első helyen a 2010-es évre szóló Közhasznúsági jelentés értékelése szerepelt.

A titkárság által elkészített jelentés részletesen összefoglalja az Egyesület szervezésében az elmúlt évben lezajlott rendezvények legfontosabb jellemzőit. Számszerű, táblázatos értékeléssel bemutatja a közhasznú tevékenységünkhöz rendelt támogatások összetételét. A korábbi évek gyakorlatának megfelelően a működési, ill. célzott támogatások többsége tagvállalatainktól származik. A központi költségvetéstől a pályázati források szűkösebb lehetőségei miatt ebben az évben kevesebb pénz folyt be.

2. A 2011-es gazdálkodási terv a korábbi évek költségadatainak figyelembevételével került a GB elé. A terv szerint a rendezvények számának növekedésével és 2 nagy létszámú konferencia szervezésével ismét pozitív eredménnyel zárul a 2011-es esztendő.

A GB a következő ülésén tárgyalja az átdolgozott tervváltozatokat.

3. Egyéb napirendi kérdések: A GB meghallgatta és tudomásul vette az ügyvezető igazgató bérkompenzációs javaslatát az apparátus alkalmazottaira vonatkozóan azzal, hogy a 2011-es év gazdálkodási tervszámainak tükrözniük kell a megváltozott feltételeket.

Kovács Attila főtítkárral összefoglalta a Kémia Éve alkalmából készült új weblap szponzorációs összetételét, amit a GB tudomásul vett.

A következő GB-ülés időpontja: 2011. márc. 21. 13:00 óra.

Az emlékeztetőt készítette: **Bognár János** GB-elnök

Celebrating chemistry in 2011



Under the official United Nations banner of the International Year of Chemistry 2011, chemists across the world are celebrating the achievements of chemistry and its contributions to the well-being of humankind. Under the unifying theme "Chemistry – our life, our future", a wide range of activities is under way, intending to reach across the globe, with opportunities for public participation at the local, regional and national levels. EuCheMS has been extremely active in supporting IUPAC and promoting a European dimension to the International Year of Chemistry at two levels, being a catalyst for member societies and a task force for European actions.

The official launch ceremony for the International Year of Chemistry took place at UNESCO headquarters in Paris on 27 and 28 January, incorporating an international seminar, an exhibition and other related social and cultural events.

Well over 1,000 delegates from more than 60 countries were present in Paris and EuCheMS and most European chemical societies attended this important event.

This celebration also marks the 100th anniversary of Marie Curie receiving the Nobel Prize in Chemistry for her discovery of radium and polonium. In this context EuCheMS is delighted to announce the publication of the book *European Women in Chemistry*.

Edited by Jan Apotheker and Livia Sarkadi and with a foreword by Nicole Moreau, the book is a collection of lively stories about remarkable European female chemists through the centuries, including Marie Curie. This book, presented at the Paris ceremony, addresses one of the main topics of the International Year of Chemistry and is a tribute to all European women in chemistry.

This year is also an excellent occasion to bring to light hidden contributions to science and society at large, emphasizing that chemistry is a creative science essential for sustainability and improvements to our way of life; it presents a unique opportunity to promote, celebrate and advance chemistry in all of its beneficial aspects.

The story of modern chemistry is a human adventure of both mind and action mainly pioneered by European chemists. I certainly believe that European chemistry has a rich past but, more importantly, it has a brilliant future. Thus, the role of European chemical societies, many of them with more than one hundred years of existence, and the catalytic role of EuCheMS will be key elements in the development of chemistry in the future.

Luis Oro
EuCheMS President
oro@unizar.es

International Year of Chemistry launched in Paris

The official launch ceremony of the International Year of Chemistry was a great event – wasn't it? The UNESCO, IUPAC and SCF organisers arranged an excellent mix which dealt with the essentials, showing the capability of solving problems using in-depth chemical knowledge. This was demonstrated e.g. by solar energy conversion used for cooking at night in Indian areas that had not had electricity up to now. It was also impressive to see the huge efforts and success to desalinate water for the use of everyone in deserts e.g. in Arabian countries.

Outstanding people joined the celebration and everybody loved it. Some of our colleagues took their students to the event and it was amazing to see people of every age group from petrol companies, energy deliverers, traditional chemical industry to worldwide cosmetics producers. Academia was also present.

The Palais des Affaires Étrangères, Quai d'Orsay is the center of the communication of the French people to the world. Usually diplomacy is resident there. For the reception evening it hosted representatives of the chemistry community, invited to contribute to mutual understanding too. Many tools were presented to explain and to make visible the service that chemistry offers to our planet.

Don't forget to visit www.chemistry2011.org and the local sites, to participate. In particular, promote the global water experiment and actively approach the press and the public to make this year an extraordinary success.

Erich Leitner, office@elc.at



Launch ceremony for the International Year of Chemistry in Paris.



A roadmap for the chemical sciences

On 10th February, the European Commission hosted a conference on the implementation of the High Level Group (HLG) on the Competitiveness of the Chemicals Industry recommendations. Luis Oro, President of EuCheMS, called for a renewed commitment to the recommendations made by the HLG. He pointed to some of the contributions EuCheMS has made, including the awarding of the European Sustainable Chemistry Award, EuCheMS work in the field of education and the role played in supporting the International Year of Chemistry. These contributions have been recognised in the Commission's final report of the HLG.

Luis Oro announced that, "Europe must ensure that it has the right skills and investment structure to take research from the lab to the economy. In order to do this, we will need to see more support for fundamental chemistry research. We also need more chemists and a greater understanding of chemistry for all scientists, engineers and product designers."

Oro also announced that EuCheMS would be addressing one of the main recommendations made by the HLG, i.e. the need for "a road mapping exercise". He emphasized that EuCheMS was uniquely positioned to provide insight, analysis, expertise and foresight in the creation of such a roadmap, identifying critical gaps in knowledge and research that are limiting technological progress. The roadmap will address six key themes: breakthrough science, energy, food, health, water and resource efficiency.

In the afternoon session on human resources, Pavel Drasar presented the work of the European Chemistry Thematic Network Association. Drasar provided information on the progress made on the Eurobachelor and Euomaster quality awards.

Evelyn McEwan, Catherine Feore
catherine.feore@chemistryeurope.eu
http://ec.europa.eu/enterprise/sectors/chemicals/competitiveness/hlg_conference_en.htm

Women sharing a chemical moment

As part of the International Year of Chemistry, EuCheMS invited three women MEPs to participate in the global handshake "Women sharing a chemical moment in time", a networking breakfast including video conferencing and live web feeds. At the EuCheMS breakfast on 18 January in Strasbourg Edit Herczog (Hungary), Maria da Graça Carvalho (Portugal) and Britta Thomsen (Denmark) answered questions sent in from Hungary, Spain and Sweden. Each of the MEPs was very familiar with the issues of women in science and all are members of the European Parliament's Committee on Industry, Research and Energy.

Maria da Graça Carvalho, who has also been a Full Professor at the University of Lisbon and Principal Adviser to the President of the European Commission, said that much more use could be made of technology to allow women to work from home.

Edit Herczog, who was a research fellow with the Hungarian Academy of Sciences and who has worked in both Unilever and ICI Hungary, commented on the low presence of women in private research, estimated at around 18%. Herczog said that companies that had more involvement of women were more successful in the global market.

Britta Thomsen is the author of the European Parliament report "Women and Science" identifying and suggesting solutions for the social, cultural and other barriers



*Breakfast meeting in Barrow upon Soar, UK.
(Photo: Humphrey Perkins High School)*

that account for the under-representation of women in science. She pointed out the positive trend of more women choosing science; however, this has not yet resulted in enough women as science managers or full professors.

The event was part of a global initiative which brought women from 37 countries together for breakfast meetings on 18 January. The approach highlighted the interest for the advancement of women in science and demonstrated that women from Addis Ababa to El Paso are active in chemistry.

Catherine Feore
catherine.feore@chemistryeurope.eu
More information incl. a 30 min video of this event: www.chemistryeurope.eu

EuCheMS identified key areas in European research

With the support of experts from its member societies, EuCheMS has identified six key areas that should be priorities in the EU Research Framework Programme 8: breakthrough science, food, energy, health, water and resource efficiency. There is a clear overlap with the "Grand Challenges" identified in the Lund Declaration.

The EuCheMS report "Chemistry – finding solutions in a changing world" has been submitted to Commissioner Máire Geoghegan-Quinn as preliminary input on the fu-

ture of the EU Research Framework Programme. Over the next few months EuCheMS will continue to develop a roadmap for the chemical sciences (see left), to identify the critical areas where gaps in knowledge are limiting technological progress and where the chemical sciences have a role to play in bridging these gaps. The roadmap will inform EuCheMS input to the expected consultation on Framework Programme 8.

www.euchems.org/News/FP8Cons.asp

Electrochemistry: Matysik delivered honorary lecture

The Heyrovský-Ilkovic-Nernst lecture was founded in 2002 by the Czech, Slovak and German chemical societies. The aim was to strengthen the scientific exchange among the participating countries in the field of electroanalytical chemistry.

In 2010, Frank-Michael Matysik was entrusted with delivering this honorary lecture in recognition of his contribution in the field of electroanalytical chemistry.

Frank-Michael Matysik graduated with a PhD from the University of Leipzig in 1994. Since 2008 he is Professor at the Institute of Analytical Chemistry, Chemo- and Biosensors of the University of Regensburg. He has made a number of research visits at foreign universities and has a record of long and useful cooperation with electroanalytical chemists both in the Czech and Slovak Republics, resulting in student exchanges, joint research projects and joint student conferences.

During his visit of Czech Republic and Slovakia in December 2010 he delivered three outstanding lectures covering his broad research interest. At the Charles University in Prague, he talked about nonconventional hy-



Jiri Berek (right) presents the lecture certificate to Frank-Michael Matysik.

drodynamic electroanalytical systems, at the Academy of Sciences of the Czech republic in Brno he delivered a lecture on bioanalytical studies using advanced electrochemical systems and at the Slovak Technical University in Bratislava his topic was microfluidic systems in conjunction with electrochemical and MS detection. Rich and useful discussions resulted in the suggestion to further broaden and strengthen the existing cooperation. We thank Wolfram Koch and Barbara Köhler from the GDCh headquarters for their kind help in arranging this tour.

*Jiri Berek, barek@prfdec.natur.cuni.cz
Jan Labuda, jan.labuda@stuba.sk*

How European young chemists promote chemistry

In 2011, together with the commemoration of the International Year of Chemistry, the European Young Chemists' Network (EYCN) celebrates its five years of existence. We have high goals for this year, and spreading the beauty of chemistry and material sciences to everyone's everyday life is one of them.

We are very proud to announce the creation of the EYCN Poster Award, an idea introduced by our communications delegate, Dan Dumitrescu from Romania. During 2011, EYCN will be present in many national meetings and symposia, rewarding exceptional and outstanding posters, enlarge our network and promoting the International Year of Chemistry.

Moreover, our national societies have engaged in innovative ways for an extensive promotion of chemistry and contribute to a truly international event. Spain, Portugal, France, Switzerland, The Netherlands, Germany, Russia and Poland will organise a rich variety of activities: experimental demonstrations in schools, recognition ceremonies, student symposia, young researchers meetings, career days, video competitions and TV series. We warmly encourage you to follow the activities in our news section at www.eycn.eu. And don't forget, the "Everything is chemistry" calendar is still available on our website.

Viviana Fluxa, viviana.fluxa@eycn.eu

Analytical chemistry: Tribute to Ernst-Heiner Korte

It was the privilege of the delegates, guests and observers at the annual meeting in Nuremberg to award the Tribute of the Division of Analytical Chemistry (DAC) to Ernst-Heiner Korte, who served as DAC Secretary for almost a decade until 2008. He played a major role in editing the DAC statutes, which provide an effective framework for the operation of the Division. His endeavours succeeded in establishing DAC as a major Division within EuCheMS, with a membership of 60,000.

During his time in office, Ernst-Heiner Korte established the Division's homepage (www.dac-euchems.org). He has always been a strong supporter of the Euroanalysis Conferences (www.euroanalysis2011.rs) and shared a vision of analytical chemistry uniting in an integrated conference serving all aspects of the subject. He also organised Euroanalysis 12 in Dortmund which attracted 450 participants. In 2004 Ernst-Heiner Korte promoted the introduction of the DAC Tribute and the Robert-Kellner-Lecture (RKL), which is awarded to scientists in analytical chemistry. The DAC Tribute and the RKL are now well established awards and contribute to achieving the DAC mission. Ernst-Heiner Korte is committed to maintaining contact with other Divisions, to supra-national boards and to linking with similar societies outside of Europe. Thanks to his efforts many guests and observers attend the annual meetings and get involved with DAC activities. Ernst-Heiner Korte represents the Deutsche Bunsengesellschaft, is the Editor of the scientific journal *Accreditation and Quality Assurance* and is networking with many scientists worldwide (www.anchem.su.se/euchems/countries.asp).

*Bo Karlberg, Paul Worsfold, Jens E.T. Andersen
jeta@dac-euchems.org*



Ernst-Heiner Korte (right) receiving the DAC Tribute from Bo Karlberg in Nuremberg.



Measurement science summer school in Poland

Measurement Science in Chemistry Euromaster (MSC) is a consortium of nine European universities that deliver a Master's Degree Programme offering education in the measurement science. The consortium was awarded the ECTNA (European Chemistry Thematic Network Association) Euromaster quality label in 2008.

An important activity of the MSC is the summer school, an intensive training course of the advanced topics of measurement science in chemistry, e.g. validation of chemical analysis procedures; traceability in chemistry; statistics and statistical basis of calibration; quantification of measurement uncertainty; ISO 17025 quality systems and laboratory assessment; sampling and sample preparation.

The volume of the summer school is 30 ECTS points and the teaching methods range from classical lectures to case studies and role playing. Students get follow-up assignments and their learning is evaluated afterwards. Summer schools have been organised in 2008 (Celje, Slovenia), 2009 (Blagoevgrad, Bulgaria) and 2010 (Lepanina, Estonia).

The summer schools are attended by Master students of the MSC partner universities. For the 2011 edition, a limited number of places are made available to persons who are not enrolled at one of these universities. The minimum requirement for the qualification of a person enrolling is to have a bachelor degree in chemistry. The next summer school will take place from 10 to 23 July at the University of Poznan in Poland.

Philip Taylor, Philip.TAYLOR@ec.europa.eu
www.msc-euromaster.eu

For details on the summer school contact
Danuta Baralkiewicz, danutaba@amu.edu.pl

Events

2 – 4 June 2011, Berlin, Germany

110th Bunsentagung (Annual German Conference on Physical Chemistry), www.bunsentagung.de

21 – 24 June 2011, Paris, France

Symposium of the Commission on the History of Modern Chemistry (CHMC), www.chmc2011.fr

3 – 7 July 2011, Brighton, UK

6th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry, www.ISMSC2011.org

3 – 7 July 2011, Toulouse, France

19th EuCheMS Conference on Organometallic Chemistry, www.eucomc2011.org

6 – 8 July 2011, Gdansk, Poland

Euro Food Chem XVI – Translating food chemistry to health benefits, www.eurofoodchemxvi.eu

10 – 15 July 2011, Crete, Greece

European Symposium of Organic Chemistry (ESOC) www.esoc2011.com

21 – 23 July 2011, Graz, Austria

In Vino Analytica Scientia 2011, www.invino2011.at

27 – 31 August 2011, Camerino, Italy

8th International School of Organometallic Chemistry www.unicam.it/discichi/isoc/isoc2009/index.html

31 August – 3 September 2011, Budapest, Hungary

4th European Conference on Chemistry for Life Sciences (4th ECCLS), www.4eccls.mke.org.hu

4 – 7 September 2011, Bremen, Germany

GDCh Science Forum Chemistry www.gdch.de/vas/tagungen/tg/5076.htm

4 – 8 September 2011, Granada, Spain

5th EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands www.ugr.es/local/nligands

11 – 15 September 2011, Belgrade, Serbia

Euroanalysis XVI, www.euroanalysis2011.rs

11 – 15 September 2011, Zurich, Switzerland

EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment (ICCE2011), www.icce2011.org

13 – 16 September 2011, Novara, Italy

First International Congress on Cocoa, Coffee and Tea, www.cocotea2011.org

14 – 16 September 2011, Madrid, Spain

9th Green Chemistry Conference, www.iuct.net

5 – 7 October 2011, Milan, Italy

CHEM-MED 2011, www.chem-med.eu

International Year of Chemistry in Hungary

In Hungary, the International Year of Chemistry 2011 opened on 26 January. "Fire with water – water with fire" was the slogan of the event initiated by the Hungarian Chemical Society based on the global experiment "Water – a chemical solution".

Several thousand primary and secondary school students participated from 285 schools of 145 municipalities, and carried out

experiments related to water and fire on the same day and in parallel. The best photos and videos can be viewed at a special website (www.kemia-eve-2011.mke.org.hu). In the Hungarian Museum for Science, Technology and Transportation in Budapest special exhibits are waiting for visitors to explore the beauties of chemistry at first hand.

Agota Toth, atoth@chem.u-szeged.hu

EuCheMS Newsletter



Newsletter coordinator: Karin Schmitz

Please send all correspondence and manuscripts to k.schmitz@gdch.de

Editors: Wolfram Koch (responsible), Uta Neubauer, Frankfurt am Main
Advisory board: Wolfram Koch (Chair, Germany), Luis Oro (Spain), Giovanni Natile (Italy), Evelyn McEwan (EuCheMS Secretariat), Marie-Claude Vitorge (France), Paola Turano (Italy), Viktor Milata (Slovakia).

Layout: Jürgen Bugler, Frankfurt am Main
Production: *Nachrichten aus der Chemie*

Publisher: Gesellschaft Deutscher Chemiker on behalf of EuCheMS
Postfach 900440, D-60444 Frankfurt am Main
euchems@gdch.de

EuCheMS General Secretary:
Evelyn McEwan, c/o RSC, Burlington House, Piccadilly, London W1J 0BA, UK
secretariat@euchems.org
www.euchems.org

EuCheMS is registered as "Association internationale sans but lucratif" (AISBL, international non-profit association)
AISBL-Registered office: Avenue E. Van Nieuwenhuysse 4, B-1160 Brussels



1%

Ismét támogathatja személyi jövedelemadója 1 százalékaival a Magyar Kémikusok Egyesületének közhasznú céljait.

Tájékoztatjuk tisztelt tagtársainkat, hogy személyi jövedelemadójuk 1 százalékának felajánlásából idén 1 574 559 forintot utal át az APEH Egyesületünknek.

Köszönjük felajánlásait, köszönjük, hogy egyetértenek a kémia oktatásáért és népszerűsítéséért kifejtett munkánkkal. A felajánlott összeget ismételten a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, valamint a Kémiatanári Konferencia és a 2010-ben másodszor megszervezett Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használtuk fel, valamint arra a célra, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő, határon túli honfitársunkhoz.

Ezúton is kérjük, hogy a 2010. évi SZJA bevállalásakor – értékelve törekvéseinket – éljenek a lehetőséggel és személyi jövedelemadójuk 1%-át ajánlják fel az erre vonatkozó Rendelkező nyilatkozat kitöltésével.

Az MKE adószáma: 19815819-2-41.

Jegyzőkönyv

az MKE Intézőbizottság (IB) 2011. március 21-i üléséről

Jelen vannak:

IB-tagok: Bognár János, Hermeicz István, Kalaus György, Kiss Tamás, Liptay György, Mátyus Péter, Wölfling János, Záray Gyula

Kimentette magát: Kovács Attila, Greiner István, Tömpe Péter és Pápayné Sár Cecília IB-tagok

Tanácskozási jogú állandó meghívott: Androsits Beáta ügyvezető ig., Bíró Géza FB-elnök

Meghívott résztvevő: Banai Endre GB-tag

NAPIREND

1. „Havi tájékoztató” szerinti áttekintés (állandó napirend)
2. A 2010. évi mérleg és eredménykimutatás és az MKE közhasznúsági jelentésének elfogadása (Androsits Beáta és Bognár János)
3. A 2011. évi gazdálkodási terv elfogadása (Androsits Beáta és Bognár János)
4. Az MKE Titkárság rendezvényeihez kapcsolódó személyi kifizetések (Mátyus Péter)
5. MKE: hol tartunk, merre tovább? (Mátyus Péter)
6. Egyéb

1. Havi tájékoztató szerinti áttekintés

- Határozatok helyzete: A *Határozatok könyve* naprakészen van vezetve. Határidőn túli teljesítésre váró határozat nincs.
- Gazdasági helyzet: A 2010. évi mérlegbeszámoló megvitatása kapcsán részletesen megvitatásra kerül a következő pontban.
- Taglétszám, tagdíjfizetés: A 2011. márciusi állapot alapján az alapszabály szerinti taglétszám 2174 fő, amelyből eddig 1717 fő tagdíj rendezett.
- Rendezvények: A részvételi díjas „MKE rendezvényterv 2011” listán 12 esemény szerepel.

2. A 2010. évi mérleg és eredménykimutatás és az MKE közhasznúsági jelentésének elfogadása

A GB előterjesztésében folytatott vita legfőbb eleme az volt, hogy az éves bevétel visszaesésének oka a kevesebb rendezvény és ezen belül is a központi költségvetés pályázati alapjának drasztikusan lecsökkent támogatása. Emiatt az Egyesület 2010-ben kénytelen az elmúlt évek-

ben felhalmozott pénzügyi tartalékaihoz hozzányúlni. Minthogy az Egyesület gazdálkodása jelenleg jelentős mértékben áll vagy bukik a rendezvények sikerén, azok költségeinek alakulását a szervezőknek folyamatosan elemezniük és szükség esetén korrigálniuk kell, hogy a tervezett és a tényleges eredmény egyensúlya drasztikusan ne borulhasson fel.

A vitát követően az IB határozatot hozott a Mérlegbeszámoló és a Közhasznúsági jelentés elfogadásáról.

3/2011. IB-határozat:

Az MKE Intézőbizottság **egyhangú döntéssel elfogadta az Egyesület 2010. évi Mérlegbeszámolóját és Közhasznúsági jelentését.**

3. A 2011. évi gazdálkodási terv elfogadása

Bognár János néhány kísérő magyarázattal bemutatta az IB tagjainak a korábban kiosztott 2011-es gazdálkodási terv legfontosabb számszerű célkitűzéseit.

Mátyus Péter jónak és elfogadhatónak minősítette a tervet, de szóvá tette, hogy a tervben szereplő, és a rendezvényekhez köthető támogatások szintje túlságosan optimistának tűnik. Hasonló aggályainak adott hangot több IB-tag a hozzászólásában. *Banai Endre* és a többi előterjesztő hangsúlyozta, hogy az Egyesület jövőjének elengedhetetlen feltétele, hogy pénzügyi tartalékai ne csökkenjenek. Ehhez sikeres rendezvényekre, kiszámítható támogatói körre és takarékos gazdálkodásra van szükség. Az előterjesztett terv elfogadásáról és a 2012. évre javasolt változatlan, azaz 7000 Ft/fő éves tagdíjról az IB határozatot hozott.

4/2011. IB-határozat:

Az MKE Intézőbizottsága **egyhangú döntés alapján elfogadta az előterjesztett 2011. évi Gazdálkodási tervet**, a tervben szereplő 149 417 eFt-os árbevétellel és 4388 eFt-os eredménnyel. Egyúttal **7000 Ft/évben határozta meg a 2012. évi teljes tagdíj mértékét** az alapszabály szerinti kedvezmények változatlan tartása mellett.

4. Az MKE Titkárság rendezvényeihez kapcsolódó személyi kifizetések

Mátyus Péter beszámolt arról, hogy a személyekhez köthető egyesületi kifizetések átláthatósága, a kifizetési normák egységesítése érdekében kezdeményezte a személyi kifizetések átvizsgálását.

Bognár János az előterjesztőnek adott válaszában beszámolt arról, hogy a GB napirendre tűzte és megvizsgálta az elnök úr felvetését. A Bizottság szabálytalanságot, a számviteli előírásokkal nem összeegyeztethető, ill. az egyesületi szabályzatokkal ellentétes kifizetést nem tapasztalt.

A GB tagjai egyetértettek abban, hogy az igazgató döntési, szerződéskötési szabadságát a személyi kifizetések kapcsán nem szükséges a jelenlegi szabályokban foglaltaknál jobban korlátozni. Ugyanakkor célszerű az Egyesületi életben aktív szerepet játszók, a rendezvények szervezésében közreműködő tagok részére kifizetésre kerülő díjak, elismerések odaítélési rendjét a nívódíjak bevált rendszerének megfelelően egységesíteni.

Végül az IB egységesen elfogadta azt a javaslatot, hogy a GB dolgozza ki a rendezvények szervezésében, ill. a kiadványok szerkesztésében közreműködő MKE-tagokra a jutalmazás egységes rendszerét.

5. MKE: hol tartunk, merre tovább?

Mátyus Péter javasolt napirendi pontjának megtárgyalására idő hiányában nem került sor. Az IB még a választások előtt sort kerít ennek a fontos témának a megvitatására.



6. Egyéb

Mátyus Péter és Androsits Beáta beszámolt arról, hogy az **MKE 1. Nemzeti Konferencia szervezése** jól halad. Jó lenne meghaladni a 450 fős részvételi létszámot.

Mátyus Péter tájékoztatta az IB tagjait arról, hogy a Kémia tanári Szakosztálynál vezetőségváltás történt. Idő hiányában elektronikusan fogja továbbítani a szakosztály-vezetés levelét, amelyben számos kérdéssel fordul az elnök úrhoz és az IB-hez.

Következő IB-ülés: 2011. május 16. (hétfő) 15:30 órakor

Bognár János

Emlékeztető

a 2011. március 21-én megtartott GB-ülésről

Jelen vannak: Androsits Beáta, Banai Endre és Bognár János

Kimentette magát: Kovács Attila

1. A GB-ülés napirendjén első helyen a 2011-es év gazdálkodási tervének megvitatása szerepelt.

A titkárság által elkészített változatok közül a GB a magasabb árbevételi tervvel készült összeállítást fogadta el. Ennek legfontosabb teljesítési feltételei:

- a tervezett rendezvényeken való részvételi hajlandóság erősítése;
- a rendezvények árbevétel/költség arányának javítása – irreális igény a részvételi díjakban foglalt olykor 50–60%-os étkezési és szállásköltség;
- a vállalkozási tevékenység részét képező hirdetési felületek jelentősebb értékesítése;
- a központi költségvetésből pályázati úton elnyerhető támogatások beérkezése;
- iparvállalataink elengedhetetlen eszmei és pénzügyi támogatása és
- az MKE-tagoktól származó tagdíjbevételek emelkedése.

Természetesen a sikeres működéshez változatlanul hozzátartozik a takarékos gazdálkodás.

2. Az Egyesület gazdasági tevékenységét szabályozó Ügyrend (GTÜ) megfelelő passzusainak áttekintése, javaslat megvitatása a személyi jellegű kifizetések szabályainak szükség szerinti módosítására.

A GB foglalkozott a fenti témával és a következő ülésére halasztotta végleges álláspontja kialakítását.

A következő GB-ülés várható időpontja előreláthatóan 2011. május 16., 13:30 óra.

Az emlékeztetőt készítette: **Bognár János** GB-elnök

Tisztújítási útmutató

1. A négyévenként esedékes, következő tisztújításokra 2011-ben kerül sor. A tisztújítások során megválasztásra kerülnek az Egyesület tisztségviselői és vezető tisztségviselői (kivéve ügyvezető igazgató).
2. A tisztújításban érintett vezető tisztségviselők: az *elnök*; a két *alelnök*; a *főtitkár*; a két *főtitkárhelyettes* (egyik egyben a *Műszaki Tudományos Bizottság elnöke*, a másik egyben a *Gazdasági Bizottság elnöke*); az *Intézőbizottság 7 tagja*; a *Felügyelő Bizottság elnöke*, 2 tagja és 2 pótagja; az *Etikai Bizottság elnöke*, 2 tagja és 2 pótagja. Őket a tisztújító Küldöttközgyűlés választja meg 4 évi időtartamra.
3. A tisztújításban érintett egyesületi tisztségviselők: az *állandó bizott-*

ságok elnökei; a szakosztályok (szakcsoportok), területi szervezetek elnökei és titkárai; a munkahelyi csoportok elnökei és/vagy titkárai. Az állandó bizottságok elnökeit a tisztújító Küldöttközgyűlés, a többi egyesületi tisztségviselőt az adott egyesületi szervezet tisztújító taggyűlése választja meg 4 évi időtartamra.

4. Meghatározott tisztségre egy személy legfeljebb háromszor 4 évi időtartamra választható. A lelépő tisztségviselő más funkcióba teljes jogú hatáskörrel választható.
5. **Egyesületi tisztségre csak MKE-tag választható meg! Egyesületi tagnak tekinthető, aki a tárgyévi tagdíjat (új belépő), de legalább a tárgyévet megelőző évi tagdíjat már befizette. Az egyesületi tisztségre megválasztandó személytől elvárt, hogy a választás előtt a tárgyévi MKE-tagdíjat befizesse.**
6. Tisztújító taggyűlések a szakosztályoknál (szakcsoportoknál), területi szervezeteknél és munkahelyi csoportoknál:
 - **A tisztújító taggyűlésekre az MKE tisztújító Küldöttközgyűlést megelőző időszakban kerül sor** (az MKE tisztújító Küldöttközgyűlése várhatóan 2011. júniusban lesz).
 - A szakosztály (szakcsoport) és a területi szervezet tisztújító taggyűlése titkosan (a munkahelyi szervezet tisztújító taggyűlése nem feltétlenül titkosan) választ vezetőséget.
 - A szakosztály (szakcsoport), területi szervezet és munkahelyi csoport 4 évre elnököt, vezetőséget, valamint a Küldöttközgyűlésre küldöttet/küldötteket választ. A szakosztályhoz tartozó szakcsoport(ok) nem, csak a szakosztály választ küldöttet. Adott egyesületi szervezet küldötteinek számára vonatkozó szabály, hogy minden megkezdett 100 tag után 1 fő küldött választható.
 - A szakosztály (szakcsoport), területi szervezet és munkahelyi csoport vezetősége a tagjai köréből titkárt és más tisztségviselőket választhat.
 - A szakosztály (szakcsoport) és területi szervezet tisztújító taggyűlésének helyét és időpontját az MKE-honlapon (www.mke.org.hu) meg kell jelentetni. A munkahelyi csoportok tisztújító taggyűléseire nézve ez nem kötelező.
7. A tisztújító Küldöttközgyűlésen a már előzetesen megválasztott küldött/küldöttek képviselik az egyesületi szervezetet.

Kovács Attila főtitkár

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXVI. No. 5. May 2011

CONTENTS

László Rácz: Chemical companies' Responsible Care® initiative launched a quarter of a century ago	142
Gyöngyi Endrész: Teaching chemistry at Földes Ferenc High School, Miskolc	147
Ernő Keszei, Balázs Kovács: Efficient deconvolution of experimental femtosecond kinetic data using genetic and evolution algorithms	152
Kinetics and chembits. An interview with Gábor Lente	158
Obituaries. György Varsányi (1921–2010), Pál Jedlovsky (1938–2010)	161
András Ménes: Linus Pauling was born 110 years ago	162
Chembits (Edited by Gábor Lente)	164
The Society's Life	166
News of the Month	166
EuCheMS Newsletter, May 2011	171



Díjak, kitüntetések

Széchenyi-díj

Oláh György Nobel-díjas kémikus, az Akadémia tiszteleti tagja részesült idén a Széchenyi Nagydíjban. Széchenyi-díjat további tizennégy kutató kapott a március 15-i nemzeti ünnep alkalmából, köztük *Inzelt György* kémikus.

Oláh György a világszerte számon tartott és nagyra becsült tudós kémiai kutatásaiért és eredményeiért, azoknak ma már klasszikusnak számító tanulmányokban és könyvekben való közzétételéért, a kémiai tudományok fejlesztése, eredményessége, a kutatási eredmények gyakorlati hasznosítása érdekében végzett tudományos munkásságáért, az új tudósnemzedékek számára példaképpül szolgáló életművéért részesült az elismerésben.

Inzelt György, az ELTE Kémiai Intézet Elektrokémiai és Elektroanalitikai Laboratórium vezetője a vezető polimerok fejlesztésében elért eredményeiért, illetve a hidrogén tüzelőanyag-cellák hatásfokának növelése terén elért eredményeikért részesült a kitüntetésben. Inzelt György és tanítványai két hidrogén-meghajtású járművet is készítettek. Az alternatív járművek Széchenyi Futamán 2009-ben és 2010-ben is elnyerték a prototípus kategória első díját, valamint a leginnovatívabb nevezőknek járó díjat.

Arany Érdemkereszt

Környei József, az Izotóp Intézet Kft. kutatás-fejlesztési igazgatója, a radioaktív izotópot tartalmazó gyógyszerek és diagnosztikumok előállításai és alkalmazási módszereinek kidolgozása, termelése, bevezetése és oktatása területén 35 éve végzett kiemelkedő színvonalú, az alap- és az alkalmazott kutatást egyaránt magában foglaló, eredményes tevékenységéért a Magyar Köztársasági Arany Érdemkereszt kitüntetésben részesült.

Varga József Díjak

A 2010. évi Varga József Díjakat, méltatás mellett, Markó László akadémikus adta át.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem *Varga József Egyetemi Díját* *Benkő Tamás*, a Vegyipari Műveletek Tanszék munkatársa vehette át.

Benkő Tamás biomérnöki oklevelet 2003-ban, PhD-fokozatot 2008-ban szerzett a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán. Aktívan részt vesz a tanszék alap- és mesterfokú oktatási munkájában, diplomamunkák, szakdolgozatok vezetésében. Kutatási tevékenysége kiterjed hulladékoldószer-kezelési eljárások, bioüzemanyag-előállítás és -hasznosítás környezetközpontú vizsgálatára, fűtési alternatívák, füstgáztisztítás kérdéseire.

A díjátadáson tartott előadásának címe: „Az életciklus-elemzés integrálása a környezettudatos folyamattervezés gyakorlatába.” Benkő Tamás összehasonlító elemzéssel vizsgált különböző életciklus-elemző eljárások (Eco-indicator 99 és az Európai Unió CAFA CBA költséghaszon-elemző eljárása) közötti hasonló-

ságokat és különbségeket. A két eljárás között felfedezett egyértelmű kapcsolat kölcsönösen bizonyította ezek alkalmasságát és érdemeit, és segíti jövőbeni kutatásukat és fejlesztésüket is. Esettanulmányon keresztül bemutatta, hogyan lehet kibocsátási adatok alapján a környezetkárosításért leginkább felelős légszennyező anyagokat és azok forrásait azonosítani az életciklus-elemzés segítségével. Példát mutatott környezettudatos technológiaválasztásra ipari füstgáz kénmentesítő eljárások összehasonlításával. A gazdaságosság- és a környezetorientált folyamattervezés közötti különbséget egy erősen nemideális ipari hulladék oldószer-kezelési problémán keresztül mutatta be, amely egyértelműen szemléltette a két megközelítés közötti különbséget. A gazdaságossági elemzés minden vizsgált esetben az oldószer regenerálását részesítette előnyben az égetéssel szemben, míg az életciklus-elemzés kimutatta, hogy egy korszerűtlen, alacsony hatékonyságú regenerálási technika még az elégetésnél is jobban károsítja környezetünket.

A Pannon Egyetem *Varga József Egyetemi Díját* *Rippelné Pethő Dóra*, a Mérnöki Kar Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézetének tanársegédje kapta.

Rippelné Pethő Dóra 2006-ban szerzett vegyészmérnöki oklevelet az Egyetem finomkémiai műveleti szakán, 2010-ben sikeresen védte meg PhD-disszertációját. Aktívan részt vesz a Vegyipari Műveleti Intézet Tanszék oktató- és kutatómunkájában, 2010 óta a Tiszta Világ Kémiai Vizsgáló Laboratórium minőségügyi vezetője.

A díj átvétele után „Alkáli-újrahasznosítás határreteg szeparációs módszerrel” című előadása hangzott el. A ipari hulladék nagy része közismerten veszélyes, ezekre egyre szigorúbb környezetvédelmi előírások vonatkoznak. A törvények betartása érdekében környezetkímélő, ha lehetséges, hulladékszegény gyártási eljárásokra van szükség. Ha keletkezik hulladék, kezelésének egyik legcélravezetőbb technológiai megoldása az újrahasznosítás.

Kutatásuk célja a lúgos ipari szennyvizek nátriumion-tartalmának csökkentése és környezetbe jutásának megakadályozása. Az ipari szennyvizek kezelésére új megoldást dolgoztak ki, melyet határreteg-szeparációs módszernek neveztek el. Ennek lényege, hogy egy elektromosan töltött elektród felületén kialakult, ionokban gazdag réteg jól megválasztott sebességgel kiemelhető a szennyvízből és recirkuláltható. Az eljárás alkalmazása során az ionok mennyisége egy másik rendszerben felhasználható, illetve dúsítható, csökkentve a károsanyag-kibocsátást.

Két nagy felületű nikkelelektrodát állítottak elő, ezeket vizsgálták és minősítették. Meghatározták az elektrolitikus kettős réteg kapacitását, valamint az elektroszorpció, a fizikai adszorpció és a hidrodinamikai tapadóréteg relatív szerepét az iontranszportban. Megvizsgálták az elektrokémiai folyamatok sebességét és a szükséges műveleti időket. A kísérletekhez automata elektroszorpció berendezést és egy kaszkád rendszerű készüléket terveztek és építettek.

A Tiszai Vegyi Kombinát a Pannon Egyetemmel találmányi bejelentést tett a Magyar Szabadalmi Hivatalnál „Eljárás és automata berendezés vizek alkálifémion-tartalmának csökkentésére feszültségváltó elektroszorpcióval” címmel 2009-ben.

KÉRJE Ön is a magyarnyelvű katalógusunkat !

PF-12 FOTOMÉTER

VÍZANALITIKA



AKTIVIT Kft.
1145 Budapest, Pétervárad u. 14.
Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865.
Levél: 1581 Budapest 146, PF.: 104.
Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web: www.aktivit.hu
Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök

Az újfajta sokoldalúság felfedezése

PF-12 kompakt fotométer

- Több mint 100 előre programozott mérési módszer
- Saját módszerek tárolhatósága
- Automatikus hullámhossz-állítás
- Háttérvilágított grafikus LCD, magyar segítő menü
- Adattárolás GLP szerint
- USB adatátvitel, frissítés és tápellátás
- Víz- és porvédett, zárt készülékház (IP 67)

MACHEREY-NAGEL

MN