

A TARTALOMBÓL:

Keverőmalmi őrlés
modellezése

Termodinamika
egyszerűen
és érthetően

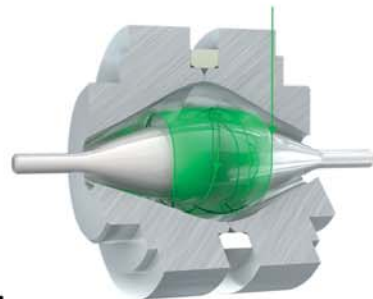
A derivatográfia
története



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXVII. ÉVFOLYAM • 2012. OKTÓBER • ÁRA: 850 FT





HR-AM LC/MS rendszerek OrbitrapTM technológiával:

Q Exactive asztali hibrid kvadrupol-Orbitrap LC-MS/MS

A Q Exactive ideális eszköz célvegyületek mennyiségi meghatározására és egyedülálló felbontása révén (> 140 000) ismeretlen vegyületek azonosítására is, kompromisszumok nélkül. Egyesíti a hármas kvadrupol készülékek érzékenységét a nagyfelbontású és nagy tömegpontosságú analizátorok azonosítási képességeivel.



Orbitrap Velos Pro hibrid LC/MSⁿ tömegspektrométer

Az Orbitrap Velos Pro a megbízható szerkezetmeghatározás etalonja, amelyben az Orbitrap analizátor a Thermo Scientific legújabb, megnövelt érzékenységet biztosító LTQ Velos Pro lineáris ioncsapda tömegspektrométeréhez kapcsolódik. Fragmentációs lehetőségek széles választéka: CID, HCD, ETD.



Orbitrap Elite hibrid LC/MSⁿ tömegspektrométer

A Thermo Scientific legújabb, a korábbinál magasabb feszültségen működő Orbitrap analizátora a jelenleg elérhető legnagyobb tömegfelbontást biztosítja (> 240 000). Az LTQ Velos Pro lineáris ioncsapdával kiegészülve az Orbitrap Elite a legsokoldalúbb kutató LC/MS, amely a proteomikai, lipidomikai, metabolomikai kutatások ideális eszköze.



További információ: www.planetorbitrap.com

Kizárólagos képviselő:

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

Telefon: 1-221-5536 • Fax: 1-221-5543

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



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXVII. évf., 10. szám, 2012. október



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, LENTE GÁBOR,
NAGY GÁBOR, PAP JÓZSEF SÁNDOR,
ZÉKÁNY ANDRÁS
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

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

Kapják az egyesület tagjai és a megrendelők
A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS
Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.
Tel.: 36-1-225-8777, 36-1-201-6883,
fax: 36-1-201-8056

E-mail: mkl@mke.org.hu

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete
Felelős kiadó: ANDROSITS BEÁTA
Nyomdai előkészítés: Planta-2000 Bt.
Nyomás és kötés: Mester Nyomda
Felelős vezető: ANDERLE LAMBERT
Tel./fax: 36-1-455-5050

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete
Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank
10700024-24764207-51100005 sz.
számlájára „MKL” megjelöléssel
Előfizetési díj egy évre 10 200 Ft
Egy szám ára: 850 Ft. Külföldön terjeszti
a Batthyany Kultur-Press Kft.,
H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.
1251 Budapest, Postafiók 30.
Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303
Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

Magyar Kémikusok Egyesülete,
1015 Budapest, Hattyú u. 16. Tel.: 36-1-201-6883,
fax: 36-1-201-8056, e-mail: mkl@mke.org.hu
Aktuális számaink tartalma,
az összefoglalók és egyesületi híreink,
illetve archivált számaink honlapunkon
(www.mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541

HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)

HU ISSN 1588-1199 (online)

A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap
támogatja



Nemzeti
Kulturális
Alap



Érdekes beszélgetést olvashatnak Keszei Ernővel, aki „könnyen tanulható” termodinamikát kínál az egyetemi hallgatóknak. Szeretném megszondáztatni a diákokat: ők is úgy gondolják-e, hogy könnyen sajátították el a termodinamika ismeretanyagát Keszei Ernő nemrég megjelent könyvéből?

Visszaemlékezve egyetemi tanulmányaimra, az 1970-es évek elejére, egy éven belül kétszer tanultunk fiz-kémet. Mindkétszer korszerű szemléletűt. Először fizikából Kedves Ferenc professzortól, aki egy éve került Debrecenbe, a Kossuth Lajos Tudományegyetemre, és új, a fizikát egységében kezelő, élvezetes előadásokat tartva tárta elénk a különböző rész-tudományok – a mechanika, a termodinamika, az elektromosságtan – egységes világképét. El voltunk bűvölve. Fél évvel később a Szegedről frissen Debrecenbe került akadémikus professzortól, Beck Mihálytól hallgattuk a fizikai kémiát. Új fizikai kémiát, amelyben a matematikai levezetések helyett a kémiára, a folyamatok kapcsolatára került a hangsúly. Azt is élveztük (talán nem mindenki), mert már a jelölésmód is más volt. Hat hónappal korábban megtanultuk a termodinamika 2. főtételével kapcsolatosan, hogy $F = U - TS$, és $G = I - TS$ (tessék összeolvasni, ennek van értelme), azután jött a Beck-féle fiz-kém, s elrontotta, amit már tudtunk: $G = H - TS$ (ennek semmi értelme). Ennek ellenére szerettem a termodinamikát, még ma is jórészt a kémiai egyensúlyok termodinamikai viszonyaival, azok befolyásolhatóságával foglalkozom, csak egy kicsit megbolondítva a dolgokat, biológiai rendszerekben.

Egyetemi oktatóként mindannyiunk legfőbb törekvése az, hogy szakterületünk ismereteit minél könnyebben, érthetőbben, élvezetesebben adjuk át a nálunk tanuló fiatalabb generációnak. Mindenképpen nagyon dicséretes törekvés, ha valaki egy egész diszciplína szemléletmódjának megváltoztatására képes ennek érdekében. Köszönjük és gratulálunk Keszei Ernő professzornak.

Rendhagyó módon a rendelkezésre álló néhány sorban hadd köszönjem meg szerzőinknek fáradhatatlanságukat – nem sorolnám fel őket, mert néhány sorral lentebb, a tartalomjegyzékben megtalálhatják nevüket cikkük címével. Tavasz, nyári napjaikat arra áldozták, hogy lapunkba írjanak – teljesen önzetlenül, mert ezért külön elismerést (hatástényezőjük javulását, honoráriumot) nem remélhettek; csak eredményeiket, gondolataikat oszthatták meg olvasóközönségünkkel. Mi, a lap szerkesztői úgy gondoljuk, ez nem olyan kis dolog. Továbbra is várjuk híreiket, szakmai ismeretterjesztő jellegű közleményeiket a kémia, a szakma egyes kérdéseiről (oktatás, kutatás, érdekvédelem, egyesület stb.). Ne habozzanak, sokkal több dolog érdekli az embereket, mint gondolnák.

Októberi számunkhoz jó olvasást kívánunk. Novemberben is itt leszünk!

2012. október

Kiss Tamás

Kiss Tamás
felelős szerkesztő

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

RÁCZ ÁDÁM: Nedves keverőalmi őrlés modellezésének alapjai 290

Bruckner-termi előadás

HERCZEG MIHÁLY: Antitrombotikus hatású szulfonátometil-csoportot tartalmazó, heparin-analóg pentaszacharidok szintézise 294

GÖRBE TAMÁS: Androsztánvázas 17-es helyzetű 5'-jód-triazolok regiospecifikus szintézise 298

KÖNYVISMERTETÉS

Termodinamika egyszerűen és érthetően.
Beszélgetés Keszei Ernővel új tankönyvéről 301

VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET

Vegyészkalendárium (Pap József Sándor rovata) 305

PRÓDER ISTVÁN, PÓKA TERÉZ: A derivatográfia története.
Az első derivatográf a Vegyészeti Múzeumban 306

ISMERETTERJESZTÉS

KISS TAMÁS: Tudományos előadások – mindenkinek 311

VEGYÉSZLELETEK

LENTE GÁBOR rovata 312

EGYESÜLETI ÉLET 314

A HÓNAP HÍREI 314



Címlap:

A péti Nitrogén-művek Zrt.-ben megőrizték azt a derivatográfot, amely az 1960-as évek végétől több mint 30 éven át működött (Próder István felvétele)



Rácz Ádám

■ Miskolci Egyetem, Nyersanyag-előkészítési és Környezeti Eljárástechnikai Intézet | ejtracz@uni-miskolc.hu

Nedves keverőmalmi őrlés modellezésének alapjai

A nagy finomságú, szubmikronos és nano-mérettartományú őrlmények előállítására leggyakrabban alkalmazott berendezések az ún. keverőmalmok. Az utóbbi években hazánkban is egyre elterjedtebbé válik a nedves üzemi keverőmalmok alkalmazása. Ilyen nagy finomságú termékek előállítására főként a gyógyszer-, a festék- és a vegyipar részéről jelentkeznek igények. A Miskolci Egyetem Nyersanyag-előkészítési és Környezeti Eljárástechnikai Intézetben Csőke Barnabás vezetésével jelen tématerület kutatása több mint tíz évvel ezelőtt elkezdődött. A kutatások fő irányvonalai: a keverőmalom száraz és nedves üzemmódja közötti különbségek, a termékminőség és az őrlési paraméterek közötti összefüggések feltárása. E kutatási munkába bekapcsolódva immár négy éve foglalkozom a keverőmalmi őrléssel, elsősorban a malom száraz üzemmódját vizsgálva. Ez idő alatt két magyar nyelvű hazai szakmai cikkem jelent meg a fenti témában, amelyekben ismertettem a keverőmalmok típusait, működési elvét, üzemeltetésüknek alapjait s ezekkel összefüggő méréseimet [1, 2].

Hazai viszonylatban elsősorban a keverőmalmok nedves üzemi alkalmazása válik egyre elterjedtebbé. A hazai szakirodalomban csak korlátozott számú cikk található a témáról, ezzel szemben a nemzetközi kutatási életben a keverőmalomban történő nedves őrlés az utóbbi tíz évben jól megkutatott területté vált, amely alapján átfogó képet kaphatunk a berendezések üzemeltetéséről, méretezéséről és modellezéséről. Látva a hiányosságot, szükségesnek ítélem egy olyan magyar nyelvű cikk megírását, amely a szakirodalomra támaszkodva tömören összefoglalja a nedves keverőmalmi őrlés modellezésének és tervezésének alapjait, ezzel segítve a hazai ipari szakemberek munkáját.

Kwade és szerzőtársai több munkában [3, 4, 5, 6, 7, 8] részletesen foglalkoztak a nedves keverőmalmi őrlés elméleti kérdéseivel, melynek keretében megalkották az úgynevezett igénybevételi modelleket. Véleményük szerint az őrlési eljárás leírását általánosságban kétféle szempontból közelíthetjük meg:

- 1) az anyagjellemzők oldaláról a feladási szemcsék tulajdonságait alapul véve,
- 2) a malomparamétereket figyelembe véve.

Az őrlés során elért finomságot alapvetően meghatározza, hogy

- az egyes szemcsék és a belőlük letörő egyes részecskék milyen gyakran vannak igénybevételnek kitéve (a szemcsére eső igénybevételek száma, SN_F);
- az egyes igénybevételek során (a szemcsét ért egyes igénybevételek) mekkora a fajlagos energia vagy fajlagos erő (igénybevétel intenzitása az egyes igénybevételek során, SI) [7].

Az SN_F és SI értéke az üzemeltetési paraméterektől függ. Mivel az őrlőtestek és termékszempcsék mozgása statisztikai jelen-

ség, ezért egy feladott szemcsére eső igénybevételek száma és az igénybevételek intenzitása eloszlással írható le [4]. Az igénybevételi szám (SN_F) eloszlásának szélességét a szemcsék őrlőtérbeli tartózkodási ideje határozza meg. Az SI igénybevétel-intenzitás eloszlásának szélességét főként az igénybevételi energiák hely és idő szerinti különbségei határozzák meg [7].

Ezek alapján megkülönböztetnek malomra vonatkoztatott igénybevétel-modellt és termékre vonatkoztatott igénybevétel-modellt.

Szemcsékre vonatkoztatott igénybevétel-modell

Az őrlendő anyag törési tulajdonságai szerint alapvetően két őrlési eljárás típust különböztethetünk meg:

1. Az agglomerátumok dezagglomerálása és a sejtek dezintegrálása.
2. Kristályos anyagok őrlése (egy kristály vagy kristályok aggregátuma) [5].

A termék minősége szempontjából az agglomerátumnak vagy a sejtnak csupán két állapotát különböztethetjük meg: az agglomerátum még egyben van (nem tört szét) vagy dezagglomerálódott (széttört) az alkotó szemcsékké. Sejt esetén a sértetlen vagy tönkrement állapotot különböztetjük meg. A valóságban e szélsőséges esetek között előfordulhatnak átmeneti állapotok, de azok csupán rövid ideig állnak fent. Kristályos anyagok őrlése esetén a szemcsé töréséhez a szükséges igénybevételi intenzitás általában nagyobb, mivel a szemcsét be kell fogni, majd jelentős mértékű normál erők hatására a két őrlőtest között kell széttörni. Ezáltal az igénybevételi intenzitás növelésével a feladási kristályból letört szemcsék mérete egészen nagy igénybevételi intenzitásértékekig csökken – mindaddig, míg a minimális szemcseméretet el nem érjük [5].

Szemcsére vonatkoztatott igénybevételi szám

Szakaszos üzemi őrléskor a feladásban lévő szemcsét érő igénybevételek körülbelüli száma (SN_F) meghatározható az őrlőtestek ütközésének számából (N_C), a szemcsé befogódásának és törésének valószínűségéből (P_S) és a feladásban lévő szemcsék számából (N_P) [8] (1).

$$SN_F = \frac{N_C \cdot P_S}{N_P} \quad (1)$$

ahol SN_F – a szemcsékre vonatkoztatott igénybevételi szám; P_S – a befogás és törés valószínűsége; N_C – az őrlőtestek ütközésének száma; N_P – a szemcsék száma az őrlőtérben.



Örlőtestek ütközési száma

Az örlőtestek ütközési számára következtethetünk a következő összefüggésből (2):

$$NC \propto n \cdot t \cdot N_{GM} \propto n \cdot t \cdot \frac{V_{GC} \cdot \varphi_{GM}(1 - \varepsilon)}{\frac{\pi}{6} \cdot d_{GM}^3}, \quad (2)$$

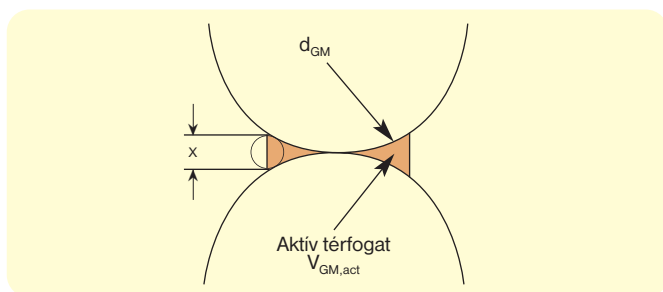
ahol n [1/s] – a keverő fordulatszáma; t [s] – örlési idő; V_{GC} [m³] – örlőtégely térfogata; φ_{GM} [–] – örlőtest töltési fok; ε [–] – örlőtestek halmaz-porozitása; d_{GM} [m] – örlőtestek átmérője; N_{GM} – örlőtestek száma az örlőtérben.

A fenti összefüggések érvényességének feltétele, hogy a keverő sebességének növelésével, az örlőtestek számának változtatásával és egyéb paraméterekkel az örlőtestek mozgásának módja ne változzon meg jelentősen. Kwade [10] és Becker [11] szerint mindez körülbelül addig áll fenn, amíg az örlőtest töltési fok szélsőségesen nem változik. Kwade [4] rámutatott, hogy az örlőtest-ütközések száma hatványozottan nő az örlőtest töltési fok növelésével. Továbbá az örlőtestek ütközésének száma változik a szuszpenzió viszkozitásával és ezáltal a termék finomságával.

Szemcsék befogásának és törésének valószínűsége

Stadler és munkatársai [12] és Bunge [13] nyomán dezagglomerálás és sejt-dezintegrálás esetén a szemcsék befogásának és törésének valószínűsége az örlőtestek felületével arányos (3), mert az örlőtestek között fellépő nyíróerők már elegendőek lehetnek a hatékony dezagglomeráláshoz és dezintegráláshoz:

$$P_s \propto d_{GM}^2. \quad (3)$$



1. ábra. Aktív térfogat két örlőtest között (A. Kwade [3])

Kristályos anyagok örlése esetén a valószínűség a két örlőtest közötti aktív térfogattal arányos (1. ábra), mely az örlőtestek átmérőjével arányos [5] (4):

$$P_s \propto d_{GM}. \quad (4)$$

Szemcsék száma

A feladásban lévő szemcsék száma arányos a feladás teljes térfogatával, mely a következők alapján határozható meg (5),

$$NP \propto V_{P,tot} = V_{GC} \{1 - \varphi_{GM}(1 - \varepsilon)\} \cdot c_v, \quad (5)$$

ahol c_v – a feladott szuszpenzió térfogati koncentrációja.

Igénybevételi szám

Ezáltal dezagglomerálás és dezintegrálás esetén (6):

$$SN_F \propto \frac{\varphi_{GM}(1 - \varepsilon)}{(1 - \varphi_{GM} \cdot (1 - \varepsilon)) \cdot C_V} \frac{n \cdot t}{d_{GM}} \propto C \cdot N_D. \quad (6)$$

Kristályos anyagok örlése esetén (7):

$$SN_F \propto \frac{\varphi_{GM}(1 - \varepsilon)}{(1 - \varphi_{GM} \cdot (1 - \varepsilon)) \cdot C_V} \frac{n \cdot t}{d_{GM}^2} \propto C \cdot N_G, \quad (7)$$

ahol (8):

$$C = \frac{\varphi_{GM}(1 - \varepsilon)}{(1 - \varphi_{GM}) \cdot (1 - \varepsilon)) \cdot c_v}. \quad (8)$$

Igénybevételi intenzitás

Schönert munkája [14] alapján az örlőtestek intenzitása az örlőtestet érő erővel vagy az örlőtest kinetikus energiájával jellemezhető. Kristályos szemcsék akkor törhetnek el a keverőmalomban, ha két örlőtest vagy egy örlőtest és a malom falazata között igénybevételnek tesszük ki. Mivel két örlőtest között igénybevétel jóval többször fordul elő, a következőkben a két örlőtest közötti befogódást fejtjük ki. A két örlőtest közötti igénybevételnek fontos feltétele, hogy az örlőtestek a szemcsét befogják, és a folyadékmozgás ne vigye ki a két örlőtest közül [14]. A befogott szemcsék számától függően három különböző eset állhat fenn:

A Csak egy szemcse fogódik be, mely az örlőtestek teljes energiájú vagy erejű igénybevételt szenved el.

B Több, mint egy szemcse fogódik be a két örlőtest között, minden szemcse érintkezik mindkét örlőtesttel az igénybevétel során, és így minden szemcse igénybevételt szenved egymástól függetlenül. Ebben az esetben az a szemcse, amelyik a legnagyobb, vagy az, amelyik a legközelebb helyezkedik el az örlőtestek középpontját összekötő egyeneshez, szenved el a legnagyobb energiájú vagy erejű igénybevételt. Azok a szemcsék, melyek az első követően kerülnek befogásra már csökkent intenzitású igénybevételt fognak elszervezni.

C Szemcséagy fogódik be és szenved igénybevételt két örlőtest között [8].

A kisebb szemcsék könnyebben követik a folyadék folyását, mint a nagyobbak, így minél kisebb a szemcse, annál nagyobb a valószínűsége, hogy a szemcsét elviszi magával a folyadék áramlása [8].

A keverőtárcsás malmokban három alapvető örlési mechanizmus lehetséges: a szemcsék igénybevételt szenvedhetnek azon örlőtestektől, melyek

A a keverő hatására a malomfalazat irányába gyorsulnak; ebben az esetben az igénybevétel intenzitását az örlőtest kinetikus energiája és a befogott szemcse térfogata határozza meg;

B a malomfalazathoz nyomódnak a centrifugális gyorsulás hatására; ebben az esetben az örlés a centrifugális erő miatt fellépő normál és nyíró irányú igénybevételek kombinációjaként jön létre;

C érintő irányban mozognak nagy sebességgel és ütköznek alacsonyabb sebességű örlőtestekkel [8].

Az igénybevételek intenzitásának becslése

Keverőmalmokban két örlőtest között nedves örléskor általában csak egy szemcse van igénybevételnek kitéve (mindaddig, míg a szemcse jelentősen nem kisebb, mint 1 µm vagy a szilárd anyag koncentrációja nem extrém magas). Ezáltal a két örlőtest között a szemcsére ható igénybevétel leírható a szemcse térfogatára vonatkoztatott energia mennyiségével vagy a szemcse keresztmetszeti területére vonatkoztatott erővel. A fentebb leírt mindhárom igénybevételi fajta arányos az örlőtest-átmérő harmadik és a rotor kerületi sebességének második hatványával. A különbséget az örlőtest sűrűsége adja: a térfogattal arányos energia és a területarányos igénybevételi erő arányos a szuszpenzió és az örlőtest sűrűségének különbségével, míg a térfogatarányos kinetikus energia az örlőtest sűrűségével arányos [8].



Első közelítésben azt lehet mondani, hogy az igénybevétel intenzitása az őrlőtest kinetikus energiájával arányos. Az igénybevétel intenzitásának meghatározásához a következő kitételek szükségesek. Az őrlőtestek között csak egy szemcse van hatékonyan igénybe véve, ezáltal az igénybevett szemcsetérfogat független az őrlőtest méretétől. Tekintsük úgy, hogy az őrlőtestek tangenciális sebessége a keverőtárcsa kerületi sebességével arányos, a tárcsák átmérője állandó értékű és a feladott anyag elaszticitása jóval kisebb, mint az őrlőtesté. Ebben az esetben az igénybevételek nagyságának meghatározására a következő összefüggés (9) adható meg [4]:

$$SI \propto SI_{GM} = d_{GM}^3 \cdot \rho_{GM} \cdot v_t^2. \quad (9)$$

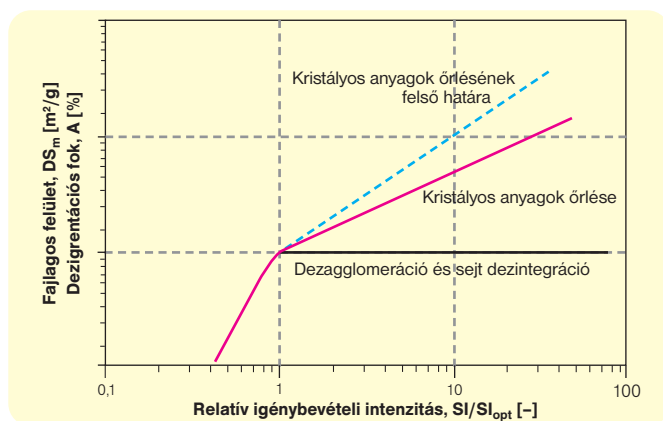
Amennyiben a feladási anyag elaszticitása közel azonos vagy nagyobb, mint az őrlőtest anyagáé, a feladási anyag rugalmassági modulusát (El_p) és az őrlőtestek anyagának rugalmassági modulusát is számításba kell venni (El_{GM}). Minél nagyobb a feladási anyag rugalmassági modulusa az őrlőtestek anyagának rugalmassági modulusához viszonyítva, annál nagyobb az őrlőtest deformációja minden egyes igénybevétel esetén, és így annál kisebb az őrlőtest által a termékszemcsének átadott ütközési energia. Becker és szerzőtársai [15] munkássága alapján az őrlőtestek deformálódása a következők szerint vehető figyelembe (10):

$$SI \propto SI_p = d_{GM}^3 \cdot \rho_{GM} \cdot v_t^2 \cdot \left[1 + \frac{El_p}{El_{GM}} \right]^{-1}. \quad (10)$$

A malomban kialakuló valós igénybevételi intenzitások csak eloszlással írhatók le. Továbbá, ezek szintén a szilárd anyag koncentrációjának és a malom geometriájának függvényei is. Mivel az igénybevételi intenzitás felfogható az igénybevételi események során felhasznált fajlagos őrlési energiaként, a malom összes fajlagosenergia-felhasználása jó mérőegység az igénybevételek számának és az igénybevételek intenzitásának eredményére. Ugyanakkor ezáltal állandó igénybevételi intenzitás mellett a termékinomság összefüggésbe hozható az igénybevételek számával vagy a befektetett fajlagos energiával [4].

Az igénybevételi intenzitás optimummal rendelkező érték, melyet a szemcsék eltöréséhez, vagy az agglomerátum vagy sejt széteséséhez szükséges értéként definiálhatunk. Ha az igénybevételi intenzitás kisebb, mint az optimális érték, akkor a termék finomsága az intenzitás növelésével mindhárom esetben nő (2. ábra). Ezzel szemben, amikor az intenzitás értéke az optimálisnál nagyobb, akkor a három eset eltér egymástól. Agglomerátumok és sejtek esetén, ha az intenzitás nagyobb, mint az optimum, akkor a fajlagos felület nem nő tovább, mert az agglomerátumok már szétestek vagy a sejtek dezintegrálódtak. Kristályos anyagok őrlése esetén a fajlagos felület tovább nő az intenzitás növelésével, de általában kisebb meredekséggel, mert az energiafelhasználás kisebb, mint az optimális intenzitás esetén. Minél nehezebben őrlhető egy anyag, az egyenes meredeksége annál nagyobb. Ezáltal két szélsőséges esetet különböztethetünk meg. A felső határ mentén a fajlagos felület az igénybevételi intenzitással arányosan nő, ebben az esetben a görbe meredeksége 1. Az alsó határ esetén, mely megegyezik a dezagglomerálási folyamattal, az egyenes meredeksége 0. Kristályos anyagok valós őrlése esetén e két határgörbe között mozog a kapott eredmény [5].

2. ábra. A keletkezett fajlagos felület a relatív intenzitás függvényében (A. Kwade [3])

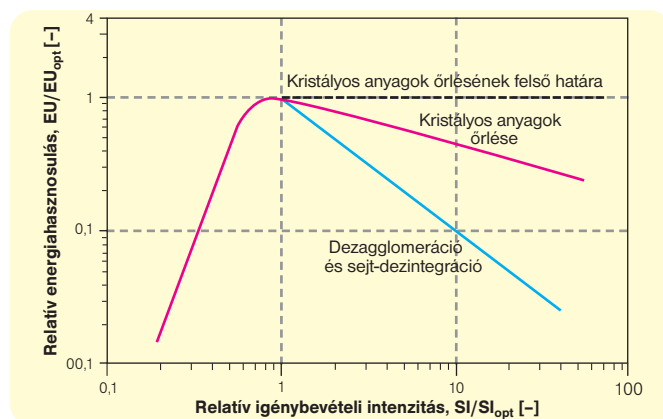


mok és sejtek esetén, ha az intenzitás nagyobb, mint az optimum, akkor a fajlagos felület nem nő tovább, mert az agglomerátumok már szétestek vagy a sejtek dezintegrálódtak. Kristályos anyagok őrlése esetén a fajlagos felület tovább nő az intenzitás növelésével, de általában kisebb meredekséggel, mert az energiafelhasználás kisebb, mint az optimális intenzitás esetén. Minél nehezebben őrlhető egy anyag, az egyenes meredeksége annál nagyobb. Ezáltal két szélsőséges esetet különböztethetünk meg. A felső határ mentén a fajlagos felület az igénybevételi intenzitással arányosan nő, ebben az esetben a görbe meredeksége 1. Az alsó határ esetén, mely megegyezik a dezagglomerálási folyamattal, az egyenes meredeksége 0. Kristályos anyagok valós őrlése esetén e két határgörbe között mozog a kapott eredmény [5].

$$\Delta S_m \propto \left[\frac{SI}{SI_{opt}} \right]^a. \quad (11)$$

Ha $a = 0$, dezagglomeráció/dezintegráció, ha $0 < a < 1$, kristályos anyagok őrlése játszódik le.

Az energiahasznosulás, EU az igénybevétel-intenzitás hatásának jellemzésére használható (3. ábra). Az EU az új keletkező fajlagos felület, ΔS_m és a felület előállításához szükséges fajlagos energia, E_m hányadosaként értelmezhető [7].



3. ábra. Energiahasznosulás a relatív igénybevételi intenzitás függvényében (A. Kwade [3])

Az optimális igénybevétel-intenzitás, SI_{opt} mellett az energiahasznosulás maximummal EU_{max} rendelkezik [7].

$$\frac{EU}{EU_{max}} \propto \left[\frac{SI}{SI_{max}} \right]. \quad (12)$$

Ha $a = 0$, dezagglomerálás/dezintegrálás, ha $0 < a < 1$, kristályos anyagok őrlése játszódik le.

Malomra vonatkoztatott igénybevétel-modell

A malmok működésének leírásában mindinkább fontos, hogy definiáljunk olyan számértékeket, melyek függetlenek a termék méretétől és egyéb jellemzőitől [8].

A malom őrlési tulajdonságát meghatározza

- a malomban időegység alatt bekövetkező igénybevételek száma (igénybevételi frekvencia, SF_M),
- a malom által kifejtett, az egyes igénybevételek során szemcsékre ható energia (igénybevételi energia, SE).

Az igénybevételi frekvencia, SF_M és az átlagos őrlési idő, t_c szorzatát az igénybevételek teljes számának nevezzük (13).



$$SN_m = t_c \cdot SF_M \quad (13)$$

Az igénybevételi frekvencia csak a malomra jellemző mutató, mely független a termék törési tulajdonságaitól.

Az igénybevételi energia, SE az egy igénybevétel során egy vagy több szemcsének átadott energiaként definiálható.

A fajlagos energia, $E_{m,p}$ a szemcséknek átadott energia és a termékek össztömegének hányadosaként határozható meg. A malom által felvett energia és a termékre vonatkoztatott energia nem egyenlő, a súrlódás és egyéb hatások miatt. Ha a veszteségeket energiaátadási tényezővel, v_E vesszük számításba, a két jellemző érték, az $SN_M = t_c \cdot SF_M$ összefüggésbe hozható a malom által felvett fajlagos energiával, a következők szerint (14):

$$\frac{\sum_{i=1}^{SN_m} SE_i}{m_{R,tot}} = \frac{\sum_{j=1}^n SE_j \cdot \Delta SF_{M,j}}{m_{R,tot}} \cdot t_c = \frac{SN_M \cdot \overline{SE}}{m_{R,tot}} = E_{m,p} = v_E \cdot E_{m,M} \quad (14)$$

ahol SE_i az i -edik igénybevételnél fellépő igénybevételi energia, SN_M az adott termékfinomság eléréséhez szükséges ütközések teljes száma, SE_j az igénybevételi energia átlagos értéke a j intervallumban, $\Delta SF_{M,j}$ az igénybevételek frekvenciája a j intervallumban, t_c az őrlési idő, $E_{m,p}$ a termék szemcséinek átadott fajlagos energia, v_E a malom energiaátadási tényezője és $E_{m,M}$ a malom teljes fajlagos energiafelhasználása.

Keverőmalomokban az őrlési eljárás során a befektetett energia csak egy kis része használdik fel ténylegesen a szemcsék aprítására. Az energia nagy része hővé alakul át, több folyamat következményében. Ezáltal különbséget kell tennünk a termék előállításához használt fajlagos energia ($E_{m,p}$) és a malom által felvett energia között ($E_{m,M}$). Az $E_{m,p}$ jelentősen kisebb, mint $E_{m,M}$. A két energiát az energia-hasznosulási koeficiens (v_E) köti össze (15).

$$E_{m,p} \propto v_E \cdot E_{m,M} \quad (15)$$

Kwade [9] alapján a következő öt folyamat a fő oka az energiavesztésnek:

- A A keverő jelentős mennyiségű energiát ad át a szuszpenzióknak, mely ily módon közvetlenül nem őrlésre használdik fel.
- B Az őrlőtestek energiája a malomfalazatnál történő dörzsölés során hővé alakul.
- C Két őrlőtest ütközésekor a szuszpenzió a két test közül eltávozik, ezáltal az energia a szuszpenzióknak adódik át, és nem őrlésre fordítódik.
- D Őrlőtestek ütközésekor, ha nincs a két test között szemcse, akkor az energia őrlőhatás nélkül vész el.
- E Az energia az őrlőtestek kopása és deformálódása során elnyelődik.

A malom igénybevételi frekvenciáján, SF_M felhasználva, hogy a két jellemző paraméter (SF_M és SE) összefüggésbe hozható a malom teljesítményfelvételével (16):

$$\sum_{j=1}^n SE_j \Delta SF_{M,j} = SF_M \cdot \overline{SE} = P_p = v_E \cdot P_M \quad (16)$$

ahol P_p a termék szemcséinek átadott teljesítmény, P_M a malomba bevitt teljes teljesítmény.

A malom energiasűrűsége a fentiekből adódóan a következőképpen számítható (17):

$$\frac{P_M}{V_{GC}} = \frac{P_p}{v_E \cdot V_{GC}} = \frac{SF_M \cdot SE}{v_E \cdot V_{GC}} \quad (17)$$

ahol V_{GC} az őrlőtégely térfogata.

Az előzőeket felhasználva a malom feldolgozóképségének számítása a következők szerint történhet (18):

$$m_p(x) = \frac{P_M}{E_{m,M}(x)} = \frac{P_p}{E_{m,p}(x)} = \frac{SF_M \cdot \overline{SE}}{E_{m,p}(x)} = \frac{v_E \cdot P_M}{E_{m,p}(x)} \quad (18)$$

Az üzemeltetési paraméterek optimalítása

(Kwade [8])

Ha ismert az optimális igénybevételi energia, akkor az üzemeltetési paraméterek, d_{GM} , v_t és ρ_{GM} beállíthatók, ezáltal a malom maximális feldolgozóképsége elérhető.

A maximális feldolgozóképség elérésének céljából a következő eljárást kell lefolytatni:

- 1) Az őrlőtestek anyagának a kopás és költség szempontjából történő kiválasztása.
→ Őrlőtest-sűrűség, ρ_{GM} és rugalmassági modulus
- 2) Az optimális igénybevételi energia meghatározása őrlési kísérletekkel.
→ Optimális igénybevételi energia, $SE_{GM,opt}$
- 3) A legmegfelelőbbnek tűnő őrlőtest-méret kiválasztása után a rotor kerületi sebességének meghatározása szükséges úgy, hogy a teljesítménybevitel a lehető legnagyobb legyen. Ugyanakkor figyelembe kell venni, hogy a termék hőmérséklete ne lépje túl a megengedett értéket, a gép és az őrlőtestek mechanikai igénybevétele ne legyen túlságosan nagy.
→ Rotor kerületi sebesség, v_t
- 4) Az optimális igénybevételi energia és a rotor maximális kerületi sebességének ismeretében az optimális őrlőtest-átmérő meghatározható a következő képlet segítségével (19):

$$D_{GM} = \sqrt[3]{\frac{SE_{GM,opt}}{v_t^2 \rho_{GM}}} \quad (19)$$

Ha az összefüggés szerinti őrlőtest-átmérő nem választható ki (mert például az őrlőtest-leválasztó nem alkalmas rá, vagy a szükséges őrlőtest nem elérhető), a lehetőségekhez mérten a legkisebb őrlőtest-átmérő választandó.

- 5) Egy iterációs lépcsőben ellenőrizni kell, hogy a 4. lépcsőben kiválasztott őrlőtest-átmérő mellett a teljesítménybevitel továbbra is a lehető legnagyobb-e. Ha ez nem áll fenn, akkor a 3. és 5. lépcsőt addig kell ismételni, amíg a teljesítménybevitel el nem éri a lehetséges legnagyobb értéket.
- 6) Meg kell még jegyezni, hogy a maximális teljesítménybevitel és optimális igénybevételi energia mellett további feltételeket is figyelembe kell venni. Ellenőrizni kell, hogy a kiválasztott üzemeltetési paraméterek elfogadhatók-e az őrlőtest-leválasztóra az őrlőtestek által gyakorolt nyomás szempontjából. Ha a termékminőséget a maximális szemcseméret határozza meg, az üzemeltetési paraméterek tartózkodási időre gyakorolt hatását kell figyelembe venni [8].

Összefoglalva a fenti eljárást, a malom maximális feldolgozóképségének elérésének céljából a rotor kerületi sebességét addig az értékig kell növelni, míg a teljesítményfelhasználás a lehető legnagyobb értékű nem lesz, de ugyanakkor az őrlőtest-átmérőt csökkenteni kell addig az értékig, míg az igénybevételi energia el nem éri az optimális értékét [8].

Az ismertetett igénybevételi modellek segítségével tehát átfogó képet kapunk a nedves keverőmalmi őrlést befolyásoló fő paraméterek jellegéről. Bevezettük az igénybevételi intenzitás és az igénybevételek számának fogalmát, melyek a keverőmalomban végbemenő folyamatok megértésének alapját képezik. A fentebb



leírt összefüggések segítségével a nedves keverőmalmi őrlés tervezésének alapjai adóttak, az optimális üzemeltetési paraméterek néhány őrlési kísérletet követően kiválaszthatók.



KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezúton szeretném köszönetemet nyilvánítani tudományos témavezetőimnek, Prof. Dr. Csőke Barnabásnak és Dr. Muci Gábornak áldozatos munkájukért, mellyel tudományos előrehaladásomat folyamatosan segítik. Köszönettel tartozom továbbá Dr. Böhm József intézetigazgató úrnak kutatási munkám háttérének biztosításáért. A tanulmány a TÁMOP-4.2.1.B-10/2/KONV-2010-0001 jelű projekt részeként – az Új Magyarország Fejlesztési Terv keretében – az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

IRODALOM

- [1] Rácz. Á., A szubmikronos száraz keverőmalmi őrlés lehetőségei és problémái, 1. rész. Építőanyag (2010) 61. évf. 2. szám, 34–38.
- [2] Rácz. Á., A szubmikronos száraz keverőmalmi őrlés lehetőségei és problémái, 2. rész. Építőanyag (2011) 63. évf. 3–4. szám, 68–71.
- [3] S. Breitunk-Faes, A. Kwade, Nano particle production in high-power-density mills, Chemical Engineering Research and Design (2008) Volume 86, Issue 4, 390–394.
- [4] A. Kwade, Wet comminution in stirred media mills – research and its practical application, Powder Technology (1999) Volume 105, Issues 1–3, 14–20.
- [5] A. Kwade, J. Schwedes, Breaking characteristic of different materials and their effect on stress intensity and stress number in stirred media mills, Powder Technology (2002) Volume 122, Issues 2–3, 109–121.
- [6] M. Becker, A. Kwade, J. Schwedes, Stress intensity in stirred media mills and its effect on specific energy requirement, International Journal of Mineral Processing (2001) 61.189–208.

- [7] A. Kwade, Mill selection and process optimization using a physical grinding model, International Journal of Mineral Processing (2004) 74, 93–101.
- [8] A. Kwade, Determination of the most important grinding mechanism in stirred media mills by calculation stress intensity and stress number, Powder Technology (1999) 105, 382–388.
- [9] Kwade, A., 1997. Wet Comminution in Stirred Media Mills. KONA 15, 91–101.
- [10] A. Kwade, Autogenzerkleinerung von Kalkstein in Rührwerksmühlen. Verlag Shaker, Aachen, 1997.
- [11] M. Becker, Dissertation, Technical University of Braunschweig, 1999.
- [12] N. Stadler, R. Polke, J. Schwedes, F. Vock, Chem.-Ing.-Tech. (1990) 62(11), 907.
- [13] F. Bunge, Dissertation, Technical University of Braunschweig, 1991.
- [14] K. Schönert, Aufbereitungstechnik (1991) 32, 487.
- [15] M. Becker, A. Kwade, J. Schwedes, Aufbereitungstechnik (1997) 38(8), 430.

ÖSSZEFOGLALÁS

Rácz Ádám: Nedves keverőmalmi őrlés modellezésének alapjai

Jelen munkában összefoglaltuk a nedves keverőmalmi őrlés modellezésének és tervezésének elméleti alapjait. A tanulmány a nemzetközi szakirodalom feldolgozásával készült azzal a céllal, hogy a témával foglalkozó hazai szakemberek számára megfelelő elméleti hátteret nyújtson. Tartalmazza az igénybevételi modellek leírását, kifejti a szemcsékre és malomra vonatkoztatott igénybevételi modell főbb paramétereit, továbbá ismerteti egy eljárást az üzemeltetési paraméterek optimalizálására.

Bruckner-termi előadás

Herczeg Mihály

■ MTA-DE Szénhidrátkémiai Kutatócsoport

Antitrombotikus hatású szulfonátometil-csoportot tartalmazó, heparin-analóg pentaszacharidok szintézise

Az állati eredetű heparin poliszacharidot 1937-től használják a klinikai gyakorlatban véralvadást gátló szerként. Hatását úgy fejt ki, hogy alloszterikusan aktívál egy enzim-inhibitor fehérjét, az antitrombin III-at (AT III), és ez az aktivált fehérje gátolja a véralvadási kaskád két proteázát, a trombin és a Xa faktort. A heparin-antitrombin kötődésben nagy szerepe van a poliszacharid anionos csoportjai (szulfát- és karboxilcsoportok) és a fehérje bázikus aminosavai (arginin, lizin) között kialakuló erős ionos kölcsönhatásoknak.

Az 1980-as években azonosították a heparin azon minimális egységét (**1. ábra**, **DEFGH** pentaszacharid, **1**) [1], amely az AT-III aktiválása révén képes véralvadást gátló hatást kifejteni. Francia és holland kutatók 55 lépéses kémiai szintézissel előállították a pentaszacharid módosított ana-

logját (**2**) [2], amely véralvadást gátló gyógyszerként 2002 óta van forgalomban Arixtra® néven.

A második generációs szintetikus antitrombotikumok vezérmolekulájának tekinthető a „nem glikozaminoglikán” típusú idraparinux (**3**) [3], amely nagyobb antikoaguláns aktivitással és hosszabb felezési idővel rendelkezik, mint az Arixtra, ugyanakkor az előállítása sokkal egyszerűbb.

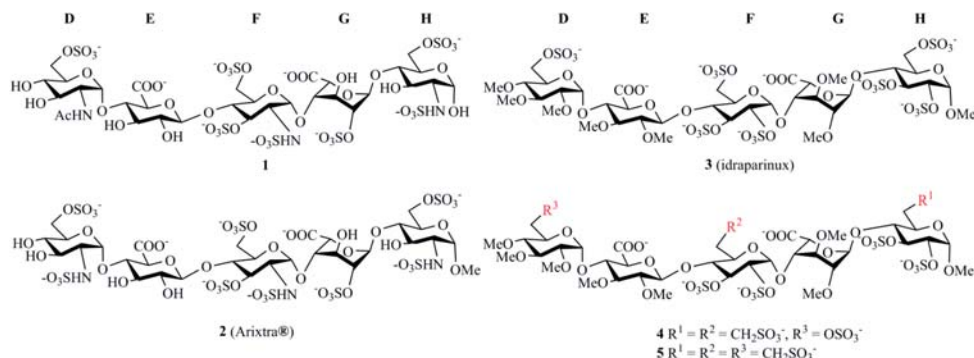
A Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszékén működő MTA Szénhidrátkémiai Kutatócsoportban az Idraparinux vezérmolekulából kiindulva új típusú antitrombotikumok szintézisét kutatjuk. Célunk a pentaszacharid-antitrombin kötődésben kulcsszerepet játszó szulfátészterek szisztematikus cseréjével szulfonsav típusú véralvadást gátlók előállítása. A szulfátészterek ($-\text{OSO}_3^-$) helyett bioizoszter

szulfonátometil-csoportot ($-\text{CH}_2\text{SO}_3^-$) tartalmazó célvegyületek ellenállnak az észterázok hidrolitikus hatásának, ezért stabilabbak, és valószínűleg hosszabb felezési idővel fejtik ki hatásukat, mint az eddig ismert származékok.

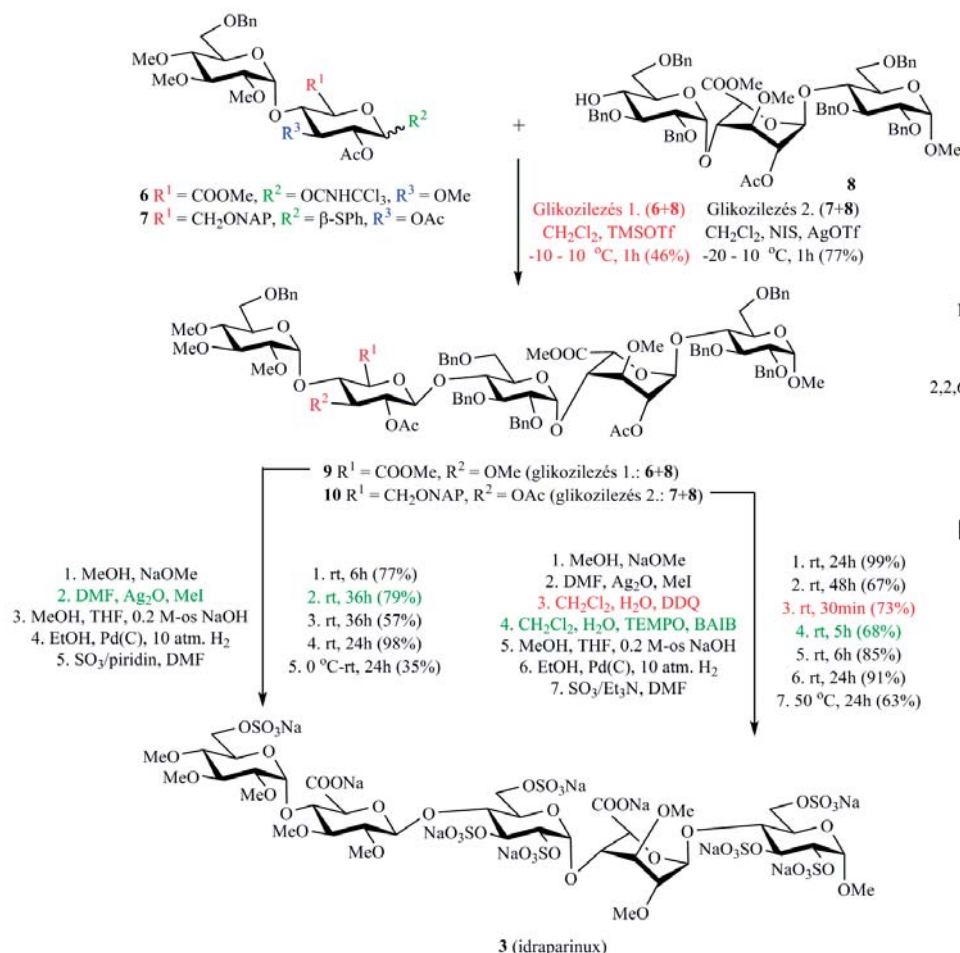
E kutatások keretében előállítottuk az idraparinux két szulfonsav-mimetikumát (**4**, **5**), amelyekben az **F**, **H** és a **D**, **F**, **H** glükózegységek 6-O-szulfát-csoportjait metánszulfonsav-csoportra cseréltük. A szulfonsav-mimetikumok szintézisével párhuzamosan az idraparinuxot (**3**) is előállítottuk, hogy a biológiai vizsgálatokhoz referenciamolekulaként alkalmazzassuk.

Az idraparinux előállítása

Az idraparinuxot két új úton is előállítottuk, mindkét esetben [2+3]-as blokkzin-



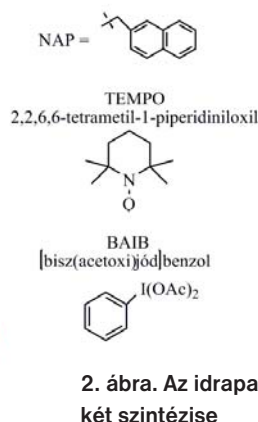
1. ábra. A véralvadásgátló hatású pentaszacharidok szerkezete



termékké. Az átalakítás során sikeresen hoztuk létre a glükuronsav funkciót oxidációval, pentaszacharid szinten.

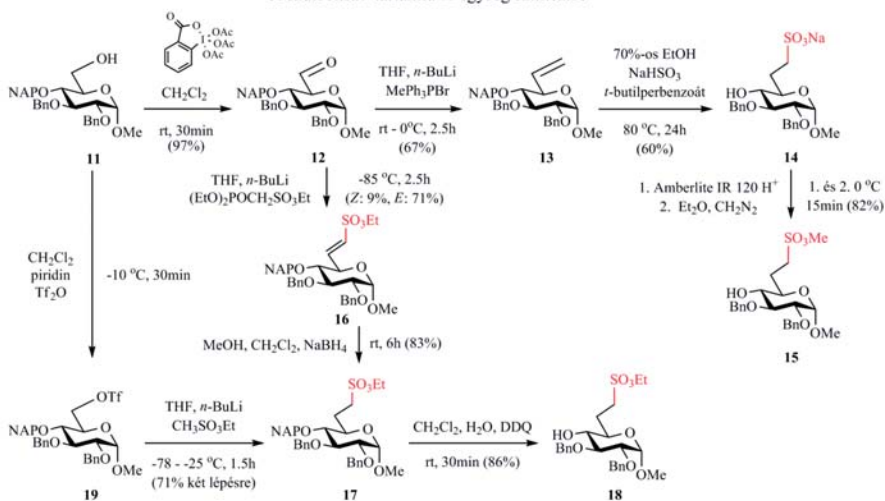
A szulfonsavtartalmú pentaszacharidok előállítása

A szulfonátometil-csoportok kialakítását monoszacharid szinten valósítottuk meg az idraparinux szintézisének előállítását szolgáló felhasználásával (3. ábra). A H egységet [6,7] 3, az F és D egységeket pedig 2-2 lehetséges úton is előállítottuk. Mind a három származék esetében a 6-OH-származékból kiinduló nukleofilcserés reakció bizonyult a leghatékonyabb módszernek a szulfonsav-etilészter-csoport bevitelére. A H egységet csak akceptorként, a D egységet csak donorként, az F egységet pedig mindkét szerepben sikeresen használtuk.



3. ábra. A szulfonsavtartalmú monoszacharidegységek előállítása

A szulfonsav-tartalmú H egység szintézise

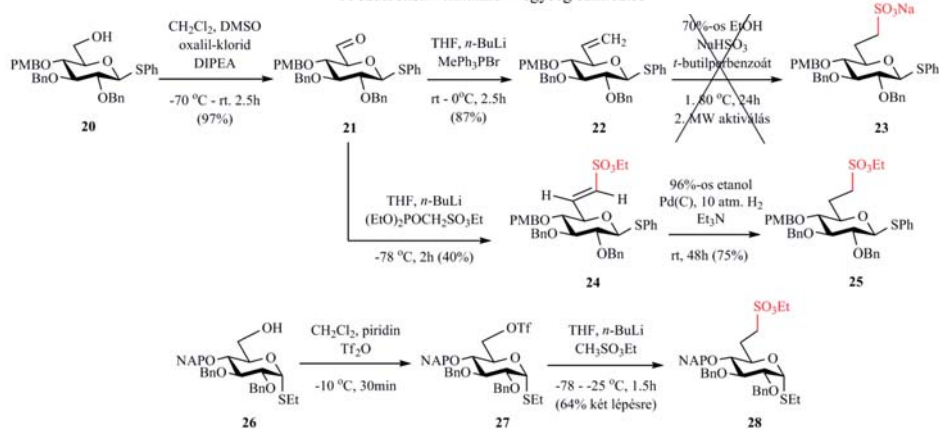


tézist alkalmaztunk. A 6 diszacharid donor [4,5] és a 8 triszacharid akceptor kapcsolásával sikeresen előállítottuk a várt pentaszacharidot (9), amelyből a metiléterek kialakítása és a védőcsoportok eltávolítása után 5 lépésben nyertük a 3 célvegyületet.

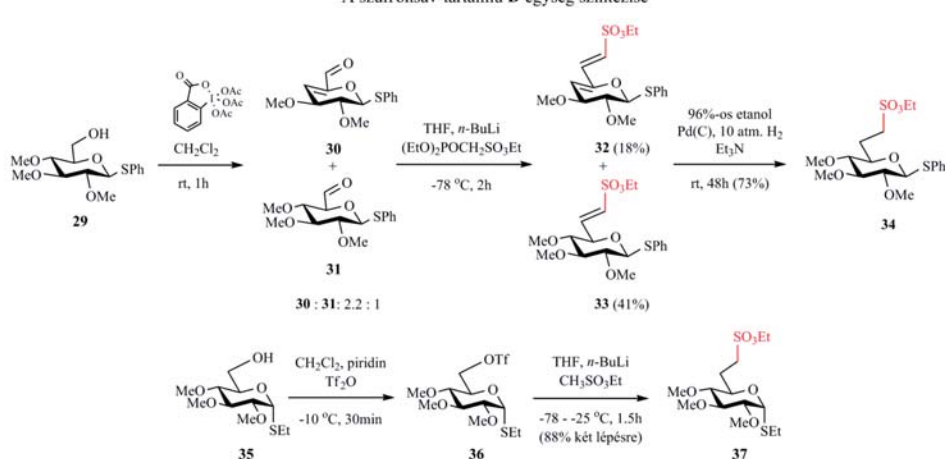
A glikozilezés alacsony hozama az uronsavtartalmú donor csökkent aktivitásával volt magyarázható, ezért a kapcsolást egy uronsavat nem tartalmazó donormolekulával is elvégeztük. Az előző szintézisben is felhasznált triszacharid akceptor (8) és a glükuronsavat nem tartalmazó donor (7) [4,5] reakciója kiváló hozammal eredményezte a védett pentaszacharidot (10), amit 7 lépésben alakítottunk át a 3 vég-



A szulfonsav-tartalmú F egység szintézise



A szulfonsav-tartalmú D egység szintézise

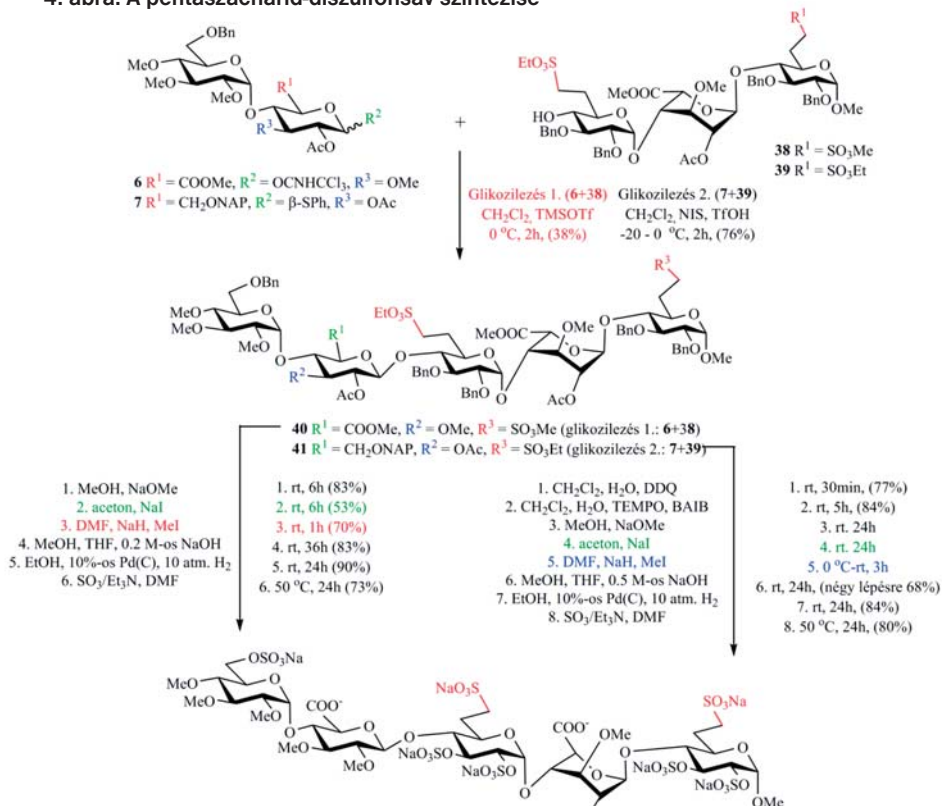


A pentaszacharid-diszulfonsav szintézise

Elsőként [2+3]-as blokk-szintézissel, glükuronsavtartalmú donor felhasználásával

állítottuk elő a védett pentaszacharidot. Ehhez a szintetizált 38 szulfonsavtartalmú triszacharidot glikozileztük a már korábban előállított 6 glükuronsavtartalmú di-

4. ábra. A pentaszacharid-diszulfonsav szintézise



szacharid donorral. A kapcsolás során a várt 40 pentaszacharid keletkezett, de csak alacsony hozammal, ezért a glikozilezést ebben az esetben is megismételtük egy uronsavat nem tartalmazó donormolekulával (7). Ez a reakció kiváló hozammal adta a védett pentaszacharidot (41). A továbbiakban a metiléterek kialakítása és a védőcsoportok eltávolítása után a 40 és a 41 származékából is jó hozammal nyertük az idraparinux első szulfonsav-analógját (4) [8].

A pentaszacharid-triszulfonsav előállítás

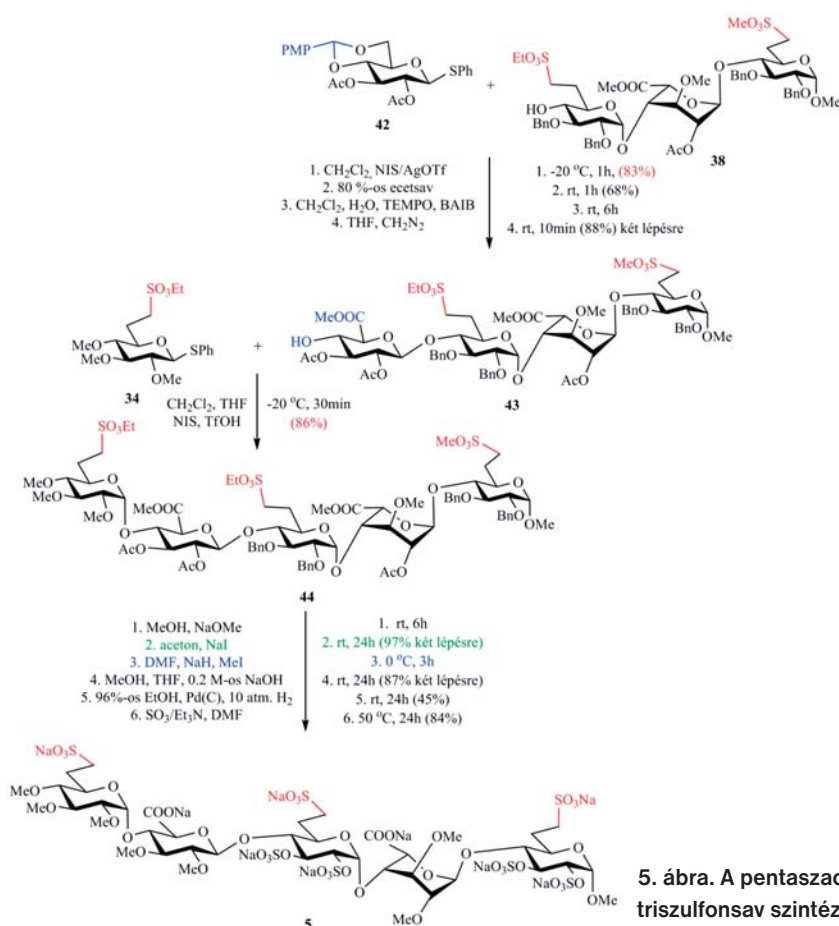
A triszulfonsavas mimetikum előállítását lépésenkénti szintézissel valósítottuk meg. Ehhez előállítottuk a 42 monoszacharid donort, melyet kapcsoltunk a már meglévő 38 triszacharid akceptorral. A képződött tetraszacharidról savas hidrolízissel eltávolítottuk a 4-metoxibenzilidén-csoportot, majd szelektív oxidációs reakcióban kialakítottuk a glükuronsav-funkciót. Az így előállított tetraszacharid akceptort (43) glikozileztük a 34 szulfonsavtartalmú monoszacharid donorral. A kapcsolási reakcióban jó hozammal és sztereoselektivitással kaptuk a védett pentaszacharidot. Végül a védőcsoportok szükséges átalakításával sikeresen előállítottuk az idraparinux triszulfonsav-analógját (5) [8].

Az előállított pentaszacharidok Xa faktor gátlása

Az előállított pentaszacharidok véralvadás-gátló hatásának vizsgálatát a DE Orvosi- és Egészségtudományi Centrumában végeztük el. Meghatároztuk az Arixtra® (2), az általunk előállított idraparinux (3) és a két szulfonsavtartalmú pentaszacharid (4, 5) heparinra vonatkoztatott anti-Xa aktivitását. A pentaszacharid-diszulfonsav kiváló Xa-gátló hatása bizonyítja, hogy az E és F egység 6-os helyzetében levő szulfátészter-csoportjai hatékonyan helyettesíthetők szulfonátometil-csoporttal. Ugyanakkor a D egységen kialakított újabb

1. táblázat. A pentaszacharidok anti-Xa aktivitása

	Anti Xa aktivitás (U/mg)
Arixtra® (2)	1195±189
idraparinux (3)	1911±193
pentaszacharid-diszulfonsav (4)	2153±153
pentaszacharid-triszulfonsav (5)	384±139



5. ábra. A pentaszacharid-triszulfonsav szintézise

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Ezúton szeretném köszönetemet kifejezni tudományos témavezetőmnnek, Prof. Dr. Lipták András akadémikus úrnak áldozatos munkájáért, mellyel tudományos előmeneteltemet segítette. Köszönettel tartozom továbbá Prof. Dr. Antus Sándor akadémikus úrnak és Dr. Borbás Anikó egyetemi docensnek, aki munkám során mindvégig segített, támogatott és tanított.

szulfonsav az inhibíciós hatást nagymértékben lerontotta.

Összegzőként elmondható, hogy két új hatékony reakcióutat dolgoztunk ki az id-raparinix referenciavegyület előállítására. Úttörő munkát végeztünk szulfonsavtartalmú glikozil építőelemek szintézisében és elsőként szintetizáltunk olyan oligoszacharidokat, melyek egyszerre tartalmaznak karbonsav- és szulfonsavcsoportokat. Az előállított molekulák véralvadást gátló hatásának vizsgálatával bebizonyítottuk, hogy a szulfátészter-csoportok helyettesíthetők szulfonsav-csoportokkal, de az anti-Xa aktivitás mértékének szempontjából lényeges, hogy a helyettesített csoportok melyik pozícióban vannak. További szulfonsav-mimetikumok szintézise és részletes hatás-szerkezet összefüggésük vizsgálata folyamatban van laboratóriumunkban.

IRODALOM

- [1] C. A. A. van Boeckel, M. Petitou, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. (1993) 32, 1671.
- [2] P. Westerduin et al., Bioorg. Med. Chem. (1994) 11, 1267.
- [3] M. Petitou, C. A. A. van Boeckel, Angew. Chem. Int. Ed. (2004) 43, 3118.
- [4] L. Lázár, M. Herczeg, A. Fekete, A. Borbás, A. Lipták, S. Antus, Tetrahedron Lett. (2010) 51, 6711.
- [5] L. Lázár, E. Mező, M. Herczeg, A. Lipták, S. Antus, A. Borbás, Tetrahedron (2012) 68, 7386.
- [6] M. Herczeg, L. Lázár, A. Borbás, A. Lipták, S. Antus, Org. Lett. (2009) 12, 2619.
- [7] M. Herczeg, L. Lázár, A. Mándi, A. Borbás, I. Komáromi, A. Lipták, S. Antus, Carbohydr. Res. (2011) 346, 1827.
- [8] M. Herczeg, L. Lázár, Zs. Bereczky, K. E. Kövér, I. Timári, J. Kappelmayer, A. Lipták, S. Antus, A. Borbás, Chem. Eur. J. (2012) 18, 10643.

GÁBOR DÉNES-DÍJ – 2012 általános felterjesztési felhívás

A NOVOFER Alapítvány Kuratóriuma kéri a gazdasági tevékenységet folytató társaságok, a kutatókkal, fejlesztéssel, oktatással foglalkozó intézmények, a kamarák, a műszaki és természettudományi egyesületek, a szakmai vagy érdekvédelmi szervezetek, ill. szövetségek vezetőit, továbbá a Gábor Dénes-díjjal korábban kitüntetett szakembereket, hogy jelöljék Gábor Dénes-díjra azokat az általuk szakmailag ismert, kreatív, innovatív, *jelenleg is tevékeny, az innovációt aktívan művelő* (kutató, fejlesztő, feltaláló, műszaki-gazdasági vezető) szakembereket, akik a műszaki szakterületen:

- kiemelkedő tudományos, kutatási-fejlesztési tevékenységet folytatnak,
- jelentős, a gyakorlatban az elmúlt 5 évben bevezetett, konkrét tudományos és/vagy műszaki-szellemi alkotást hoztak létre,
- megvalósult tudományos, kutatási-fejlesztési, innovatív tevékenységükkel hozzájárultak a környezeti értékek megőrzéséhez, a fenntartható fejlődéshez,
- személyes közreműködésükkel megalapozták és fenntartották intézményük innovációs készségét és képességét.

A díjak odaítéléséről a Kuratórium dönt. A kuratórium döntése végleges, az ellen fellebbezésnek helye nincs.

A hiányos (adatlapot, indoklást, szakmai életrajzot, vagy ajánló leveleket nem tartalmazó) jelöléseket a Kuratórium formai okból figyelmen kívül hagyja. Nem lehet jelölő vagy ajánló a NOVOFER Alapítvány Kuratóriumának vagy felügyelő bizottságának elnöke vagy tagja, az elbírálást segítő szakmai bizottság tagja, a jelölttel családi vagy alárendeltségi kapcsolatban álló személy.

A díjak személyre szólnak, így alkotó közösségek csoportosan nem jelölhetők.

A díjak csak egyetlen alkalommal nyerhetők el és a Kuratórium nem adományoz posztumusz díjat.

Az *ideális jelölt* teljesen új tudást létrehozó szakember, akinek műszaki-szellemi alkotását eredményesen hasznosítják, aki ismereteit a gyakorlatban alkalmazza, látóköre messze meghaladja a szűken vett szakterületet.

A Kuratórium fenntartja magának a jogot arra, hogy a tárgyévet megelőző évek jelöltje számára is adományozzon díjat, amennyiben a jelölt a tárgyévi felhívás minden kritériumának megfelel és a jelölők, valamint az ajánlók a kuratórium ez irányú megkeresése során fenntartják korábbi javaslatukat.

A felhívás, a jelöléshez szükséges adatlap és a jelöléssel (előterjesztéssel) kapcsolatos részletes tudnivalók a www.novofer.hu honlapról letölthetők.

A jelölést (előterjesztést) mind elektronikusan (alapitvany@novofer.hu), mind papíralapon (112 Budapest, Hegyalja út 86.) be kell nyújtani.

Az elektronikus jelölés beküldési, a papíralapú jelölés postára adási határideje **2012. október 10.**

Eredményhirdetés és díjátadás: 2012. december vége.

További felvilágosítás kérhető: Kosztolányi Tamás titkártól (Fax: 319-8916 tel: 30/4848-004, e-mail: alapitvany@novofer.hu).

Gyulai József
a Kuratórium elnöke

Görbe Tamás

SZTE TTIK Szerves Kémiai Tanszék, Szeged

Androsztánvázas 17-es helyzetű 5'-jód-triazolok regiospecifikus szintézise

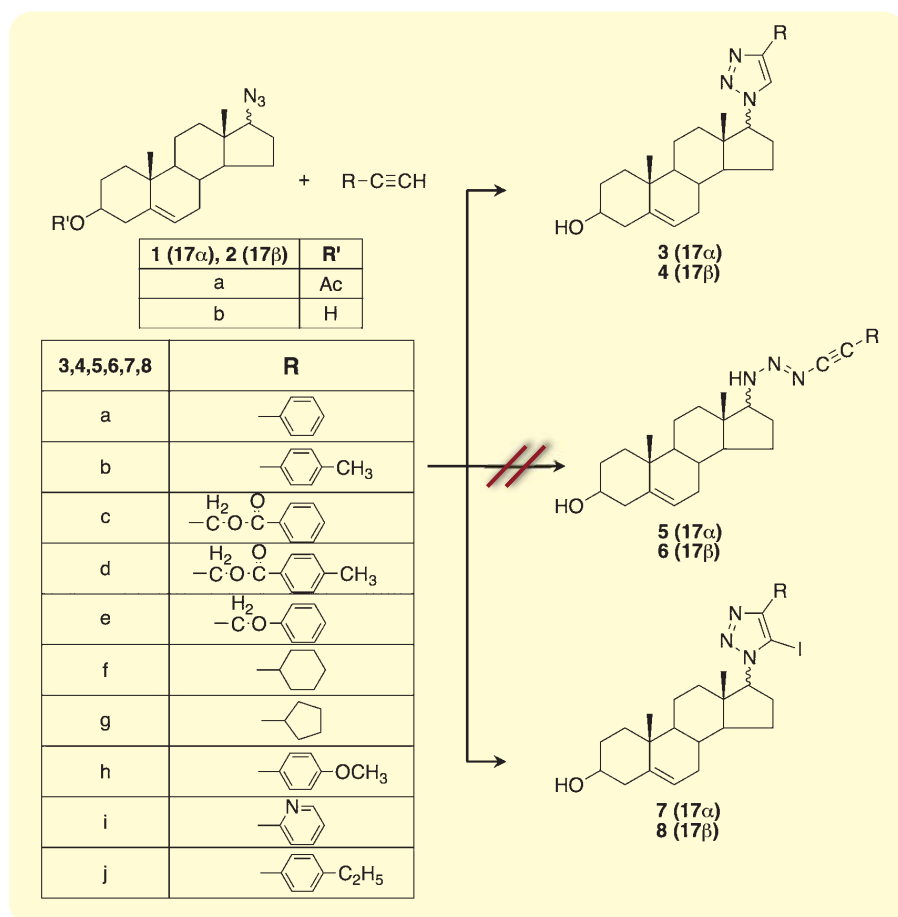
A C_{17} -es helyzetben *exo*-heterociklust tartalmazó szteroidok nem ismeretlenek a természetben. O-atomot tartalmazó képviselőik megtalálhatóak a szívre ható glikozidokban és a varangymérgekben. Az 5 és 6 tagú laktongyűrűt tartalmazó természetes vegyületek kardioprotéktív hatása igen jelentős, de a terápiás és a toxikus érték közötti különbség rendkívül kicsi. Emiatt a túlادagolás veszélye lép fel. Amennyiben a laktongyűrűben lévő O-atomot N-re cserélték, úgy ez a különbség jelentősen kiszélesedett, de a szívizomzatra gyakorolt kedvező hatás erőteljesen lecsökkent. A N-atomot tartalmazó *exo*-heterociklusos szteroidok ugyanakkor a csökkent kardioprotéktív hatás mellett figyelemre méltó enzimgátló tulajdonsággal tűntek ki [1]. A 3β -hidroxil-csoportot tartalmazók a 17α -hidroxiláz/ $C_{17,20}$ -liáz, míg a Δ^4 -3-ketoszteroidok az 5α -reduktáz enzimet gátolják. Ezek az enzimek a felelősek az olyan androgénfüggő betegségek kialakulásáért, mint a *benignus prostatic hyperplasia*, vagy a *prostatic carcinoma* [2]. A betegségek gyógyítására számos készítmény van forgalomban, amelyek közös jellemzője, hogy egy vagy több heteroatomot tartalmaznak.

A SZTE Szerves Kémiai Tanszék Szteroidkémiai Kutatócsoportjában korábban 17β -tetrahydrooxazinonil-, dihydrooxazinil-, oxazolidonil-, oxazolinil-, pirazolinil-szteroidokat állítottak elő, mely vegyületek oxigén- és nitrogén donor atomokat tartalmaztak. Az előállított vegyületek figyelemre méltó enzimgátló aktivitást mutattak [3–7].

A korábbi munkák folytatásaként célul tűztük ki a C_{17} -es helyzetben három N-atomot tartalmazó *exo*-heterociklusos szteroidok szintézisét. Korábban Njar és munkatársai foglalkoztak a két és három N-atomot tartalmazó szteroid heterociklusok szintézisével. Kiindulási anyaguk a 3β -acetoxi-16-formil-17-klór-androszt-5,16-dién volt, melyben a C_{17} -es klóratom cseréjekor imidazolt és triazolt használtak. Ezt köve-

tően a C_{16} -os formilcsoportot Ph_3RhCl -dal eltávolították. Így megkapták a 3β -hidroxil-17-(1*H*-imidazolil)androszt-5,16-diént, valamint a 3β -hidroxil-17-(1*H*-1,2,4-triazolil)androszt-5,16-diént. Az enzimvizsgálatkor mindkét vegyület aktívnak bizonyult. Amennyiben az emberi liáz-preparátumot ezekkel a vegyületekkel összekeverték, az UV-spektrumban jellegzetes maximumértéket tapasztaltak. Az eltolódást az enzim hemin

17 α - és 17 β -triazolil szteroidok szintézise



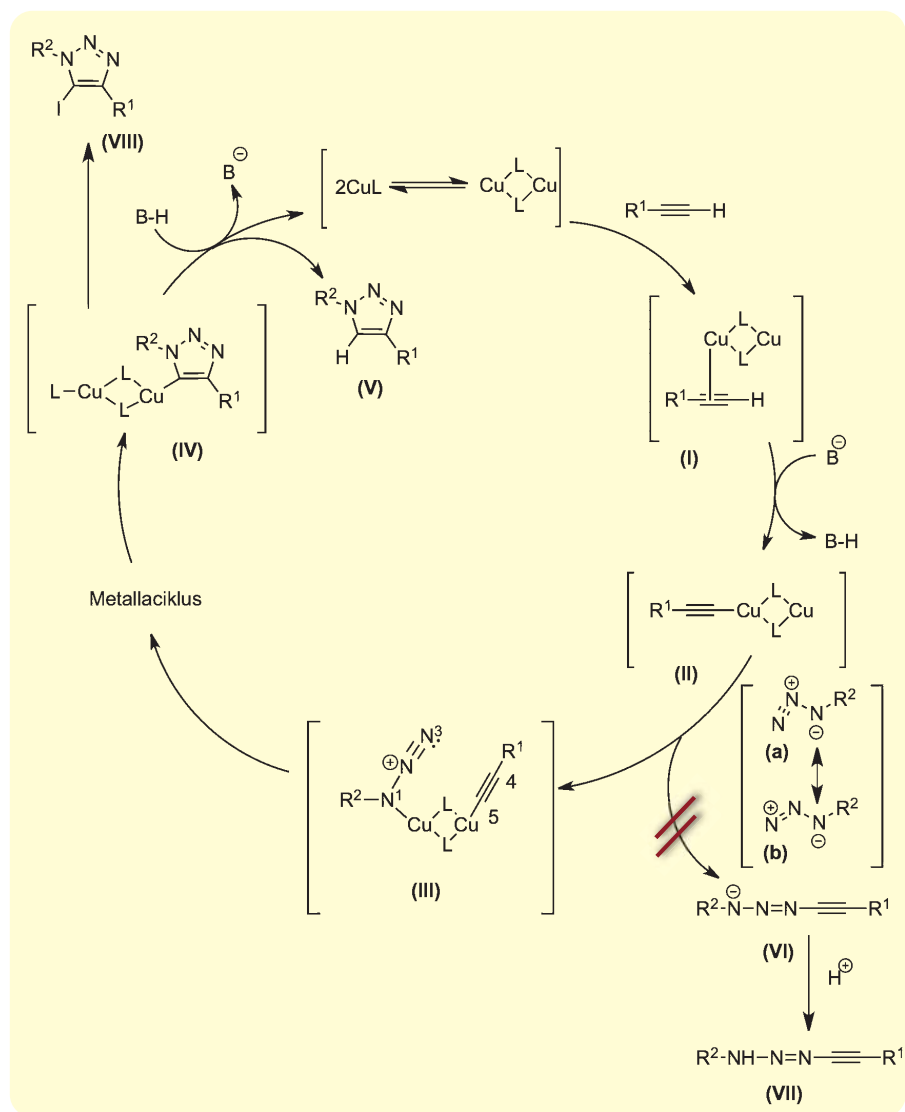
A Szegedi Ifjú Szerves Kémikusok Támogatásáért Alapítvány 12. tudományos előadóján elhangzott előadás.

résében lévő Fe-atom és a N-atom kölcsönhatásával magyarázzák [2].

Saját munkánk során arra kívántunk választ kapni, hogy amennyiben telítjük a C_{16,17}-es kettős kötést, és így epimer párhoz jutunk, mennyiben változik meg a biológiai hatás. Továbbá a 17 α - és a 17 β -helyzetű triazolil-epimerek farmakológiai hatásában mutatkozik-e különbség?

A triazolgyűrű kialakítására jó lehetőséget kínált az 1,3-dipoláris cikloaddíció. Huisgen és munkatársai 1963-ban írták le az alkil-azidok és a terminális acetilének 1,3-dipoláris cikloaddícióját. A reakció során 1,2,3-triazolok 1,4- és 1,5-regioizomereinek keveréke képződik [8]. Sharpless [9] és Meldal [10] közel egy időben számolt be arról a megfigyelésről, hogy a cikloaddíció a Cu(I)-sók jelenlétében regio szelektívvé tehető, miután az 1,4-regioizomer keletkezése 10⁷-szer gyorsabban játszódik le, mint az 1,5-izomeré. Esetünkben szteroid azidokat reagáltattunk különféleképpen szubsztituált terminális alkil- és arilacetilénekkel. Kiindulási vegyületeként a 17 α -azido-androszt-5-én-17 β -olt (**1b**) és a 17 β -azido-androszt-5-én-3 β -olt (**2b**) választottuk (**1. ábra**). Ezek előállításra közös kiindulási anyagból, a 3 β -acetoxi-androszt-5-én-17 β -olból történt. A 17 α -azido vegyület képzésére az inverzióval járó Mitsunobu-reakciót alkalmaztuk. Az azoimid toluolos oldattal, azo-dikarbonsav-dietilészter és Ph₃P hatására a reakció mérsékelt termeléssel szolgáltatva a célvegyületet (**1a**). A másik epimert, a 3 β -acetoxi-17 β -azido-androszt-5-ént (**2a**) két lépésben állítottuk elő. A közös kiindulási anyag toluolos oldatát az Appel-reakció kísérleti körülményei között, elemi jóddal, Ph₃P-nal és imidazollal reagáltattuk. A kapott 3 β -acetoxi-17 α -jód-androszt-5-ént nagy feleslegben vett NaN₃-dal, az S_N2 cserélődési folyamatot elősegítő *N,N*-dimetilformamidban 80 °C-on reagáltattuk. Az átalakítások során a kétszeres Walden-inverzióval keletkező 3 β -acetoxi-17 β -azido-androszt-5-ént (**2a**) mintegy 50%-os termeléssel sikerült izolálnunk. A cserélődési folyamat hatékony kivitelezéséhez több dipoláris-aprotikus oldószert is megvizsgáltunk. Így a dimetil-szulfoxid, a hexametil-foszforsav-triamid, az *N*-metil-pirrolidon, valamint az *N,N*-dimetil-formamid oldószerekben kivitelezett átalakítások azt mutatták, hogy az *N*-metilpirrolidon és az *N,N*-dimetil-formamid volt a legalkalmasabb. A 3 β -acetoxi-17 α - és 17 β -azido-vegyületeket (**1a**, **2a**) Zemlén szerinti átészterezéssel 3 β -OH szteroidokká (**1b**, **2b**) alakítottuk.

A kapott kiindulási anyagok (**1b**, **2b**)



2. ábra. Az 1,3-dipoláris cikloaddíció feltételezett reakciómechanizmusa

birtokában különféleképpen szubsztituált terminális alkil- és arilacetilénekkel elvégeztük az 1,3-dipoláris cikloaddíciót. A reakciót diklórmetánban, Cu(I) katalizátor jelenlétében, bázisként Ph₃P-t alkalmazva, hajtottuk végre. Az átalakítások során megkaptuk a várt 17 α - és 17 β -1',4'-regioizomer triazolil-szteroidokat (**3a-j**, **4a-j**), viszont a kitermelés jelentősen elmaradt a Click-reakciónál leírtaktól. Az irodalomban ismert, hogy a Ph₃P helyett deprotonálószerként erősebb szerves bázis is alkalmazható. Azt tapasztaltuk, hogy amennyiben a Ph₃P-t trietilaminnal helyettesítettük, a várt heterociklus mellett egy új, kevésbé poláris, számottevő mennyiségben képződő anyag is megjelent a vékonyréteg-kromatográfiás ellenőrzés során. A vegyületek a millimól nagyságrendű átalakítás során szilikagéloszlopon jól elválaszthatóak voltak. Az új vegyület mindkét epimernél közel azonos arányban keletkezett (**1. ábra**).

Az MS-mérések igazolták, hogy a három N-atom megtalálható a molekulában, továbbá, hogy a triazolilvegyület és az ismeretlen vegyület azonos tömeggel rendelkezik. Első feltételezésünk az volt, hogy az 1,4-regioizomer mellett az 1,5-regioizomer vegyületet is képződött. Ezt az elképzelésünket hamar elvetettük, mivel Sharpless és munkatársai megfigyeléseiből tudjuk, hogy az 1,4-regioizomer 10⁷-szer gyorsabban keletkezik, mint az 1,5-regioizomer [9].

A munkahipotézis másik feltételezése egy nyílt láncú vegyület, az aril-etinil-triazén-oldalláncot tartalmazó szteroid (**5a-j**, **6a-j**) képződése volt. Ennek a vegyületnek keletkezését be tudtuk illeszteni az 1,3-dipoláris cikloaddíció feltételezett reakciómechanizmusába (**2. ábra**). A kör folyamatban kialakult aril-acetilid-Cu π -komplex (**I**) az alkalmazott viszonylag erős bázis hatására deprotonálódik. Az elektrongazdag aril-acetilid a szteroid-azid po-

zitiv polározottságú N(3)-atomjával ion-asszociációval 17 α -N-(fenil-etinil)-triazén-aniont (**VI**) képez, majd protonálódással kialakul egy nyílt láncú vegyület (**5a-j**, **6a-j**). Az általunk feltételezett aril-etinil-triazén-oldalláncot tartalmazó szteroidvegyületeknek az általunk alkalmazott NMR-technikák nem mondtak ellent. A *p*-tolil-szubsztituenst tartalmazó vegyületnél (**3b**) a ¹H-NMR-spektrum aromás tartományát vizsgálva a normál triazolilterméknel öt jel található, melyek közül két-két jel a *p*-tolil-csoporthoz tartozó protonok jele, míg az ötödik jel a triazolilgyűrűhöz kapcsolódó proton jele. Az általunk izolált új vegyület (**5b**) NMR-spektrumából hiányzik a triazolilhoz kapcsolódó proton jele. Továbbá a ¹³C-NMR spektrumban a normál Click-terméknel (**3b**) a terciér 5'-C-atom az új vegyület (**5b**) esetében hiányzik, helyette viszont egy új, kvaterner C-atom jele látható.

A feltételezett nyílt láncú vegyület valódiságát az IR-spektrum vonta kétségbe. A nyílt láncú vegyület aril-etinil-triazén kötési rendszer etinilcsoportja nem volt egyértelműen kimutatható a spektrumban.

Végül a feltételezett nyílt láncú vegyület szerkezetfelfedését röntgenkristallográfiai felvétellel sikerült megoldani. A felvétellel a legnagyobb meglepetésünkre nem igazolta az NMR-technikával alátámasztott szerkezetet. A molekulában gyűrűs triazol van jelen, amelynek az 5'-C-atomjához egy jódatom kapcsolódik. A kapott szerkezet igazolja, hogy a molekulában valóban nincsen etinilcsoport, ahogy azt az IR-spektrum adatai kétségbe vonták. Az MS-mérésnél az ionizáció során a jód azonnal kihalad, és az alapváz tömege mutatkozik a spektrumban. A ¹H-NMR-spektrumban a **7b** vegyület 5'-C-atomjának jele azért hiányzik, mert jódatom épül be a helyére.

Az 1,3-dipoláris cikloaddíció során alkalmazott Cu(I)I katalizátor jódatomjának beépülési lehetősége csak a közelmúltban vált ismertté. Smith és munkatársai 2010-ben a Tetrahedron Lettersben leírták, hogy a benzilazid és a fenilacetilén Cu(I)I-dal, 4-dimetilamino-piridin jelenlétében vég-

zett átalakulásánál 19%-ban 5'-jód-triazol is képződik. Ugyanakkor egy erősebb bázis, így a diizopropil-etil-amin (Hünig-bázis) alkalmazásánál ez a típusú jódbeépülés elmarad, csak a normál triazolgyűrű képződik [11].

A heteroaromás rendszerek elektrofil szubsztitúciója ismert kémiai folyamat. Ahhoz, hogy ez lejátszódjék, I⁺-ra van szükség. A Cu(I)I katalizátor ezzel szemben I⁻-t szolgáltat, így ennek közvetlen beépülése nem következhet be. Smith és munkatársai hangsúlyozottan csak hipotézisként feltételezik, hogy az 1,3-dipoláris cikloaddíció körfolyamatának zárólépésénél (1. ábra) a **IV**. számú komplex bontásában egy, a Cu-ligandumból származó intramolekulás jód vesz részt, és vezet a 5'-jód-triazolhoz (**VIII**). Wu és munkatársai 2005-ben feltételezték, hogy a cikloaddíciós körfolyamat **IV**. számú komplexének bontása alkalmasan választott elektrofilekkel lejátszódik, és a megfelelő 5'-szubsztituált triazol képződik [12]. Li és munkatársai 2008-ban az 5'-jód-triazol kialakításához az 1,3-dipoláris cikloaddíció kísérleti körülményeit úgy változtatták, hogy ekvivalens mennyiségű Cu(I)I katalizátort alkalmaztak, amelyhez ekvivalens N-bróm-szukcinimidet adtak. A reakció jelentős mennyiségű 5'-jód-triazolt eredményezett. A folyamat úgy értelmezhető, hogy az NBS a katalizátor I⁻-anionját I⁺-kationná oxidálja, amely már részt tud venni egy elektrofil szubsztitúciós folyamatban [13].

A jódatom beépülésére vonatkozó elméletek igazolására több kísérletet végeztünk. A Smith és munkatársai által feltételezett reakciómechanizmus szerint a jódatom beépülése a triazolképzés zárólépéseként felírható **IV**. számú komplex intramolekulás jód hasításával értelmezhető. A katalizátor mennyiségének változtatásával kísérletsort is végeztünk. A normál 1,3-dipoláris cikloaddícióban használt 0,1 mmol katalizátor mennyiségét csökkentettük 0,05 mmol-ra, majd növeltük 0,5 és 1,0 mmol-ra. Ez utóbbi mennyiség a szteroid-aziddal ekvimoláris mennyiséget jelentett. Az 1. táblázat adataiból ugyanakkor látszik, hogy a Cu(I)I katalizátor mennyisé-

gének a változtatásától csak kismértékben függ az 5'-jód-triazolil-szteroid képződése. Valószínűsíthető, hogy a Cu-komplex szerkezete, térállása és sztereokémiai okok befolyásolják az elektrofil jód-kation keletkezését a reakció során. A kutatócsoport tapasztalata szerint a szteránváz egyéb helyzetében, így az 1, 3, 6, 16 helyen kiépített azidocsoport Click-reakciója hasonló szerkezetű 5'-jód-triazol képződését nem mutatta.

Az átalakításaink során keletkezett 5'-jód-triazolil-vegyület (**7**) szerkezetét szintézisével igazoltuk. Az 1,3-dipoláris cikloaddíciót ekvimoláris mennyiségben vett Cu(I)I katalizátor és ugyancsak ekvimoláris mennyiségű jód-monoklorid (ICl) felhasználásával végeztük. A reakcióelegyben jelen lévő I⁺ eredményeként 98%-ban képződött az 5'-jód-triazolil vegyület, (**7**), míg a normál triazolil (**3**) csupán nyomokban volt jelen.

A halogénatomot tartalmazó szteroid-vegyületek nem ismeretlenek a gyógyaszatban. A gyulladáscsökkentő hatású szteroidok sorában a klór- és fluortartalmúak ismert készítmények.

Az irodalomban a 3 β -jód-koleszterin-származékokon kívül a szteroid kvaterner aminok jodidsói ismertek [14, 15].

Az általunk előállított, jódatomot tartalmazó *exo*-heterociklusok keresztkapcsolási, illetve cserélődési folyamatoknak lehetnek kiindulási anyagai.

IRODALOM

- [1] Gy. Schneider, J. Wölfling, Curr. Org. Chem. (2004) 8, 1381.
- [2] V.C.O. Njar, K. Kato, I.P. Nnane, D.N. Grogoryev, B.J. Long, A.M.H. Brodie, J. Med. Chem. (1998) 41, 902.
- [3] J. Wölfling, L. Hackler, E. Mernyák, G. Schneider, I. Tóth, M. Szécsi, J. Julez, P. Sohár, A. Csámpai, Steroids, (2004) 69, 451.
- [4] J. Wölfling, E. A. Oravec, D. Ondré, E. Mernyák, G. Schneider, I. Tóth, M. Szécsi, J. Julez, Steroids (2006) 71, 809.
- [5] D. Ondré, J. Wölfling, Z. Iványi, G. Schneider, I. Tóth, M. Szécsi, J. Julez, Steroids (2008) 73, 1375.
- [6] D. Ondré, J. Wölfling, I. Tóth, M. Szécsi, J. Julez, G. Schneider, Steroids (2009) 74, 1025.
- [7] Z. Iványi, J. Wölfling, T. Görbe, M. Szécsi, T. Wittmann, G. Schneider, Steroids (2010) 75, 450.
- [8] R. Huisgen, Angew. Chem. (1963) 75, 604.
- [9] V.V. Rostovtsev, L.G. Green, V.V. Fokin, K.B. Sharpless, Angew. Chem. Int. Ed. (2002) 41, 2596.
- [10] C.W. Tornoe, C. Christiansen, M. Meldal, J. Org. Chem. (2002) 67, 3057.
- [11] N.W. Smith, B.P. Polenz, S.B. Johnson, S.V. Dzyuba, Tetrahedron Letters (2010) 51, 550.
- [12] Y.-M. Wu, J. Deng, Y. Li, Q.-Y. Chen, Synthesis, (2005) 1314.
- [13] L. Li, G. Zhang, A. Zhu, L. Zhang, J. Org. Chem., (2008) 73, 3630.
- [14] G.A. Olah, S.C. Narang, B.G.B Gupta, R. Malhotra, J. Org. Chem., (1979) 44, 1247.
- [15] D.G. Bamford, D.F. Biggs, M. Davis, E.W. Darnell, J. Pharm. Pharmacol., (1971) 23, 595.

1. táblázat. Az 1,3-dipoláris cikloaddíció Cu(I)I katalizátortól való függése

Cu(I)I	(3)	(7)
0,05 mmol	96%	4%
0,1 mmol	83%	17%
0,5 mmol	80%	20%
1,0 mmol	77%	23%



Termodinamika egyszerűen és érthetően

Beszélgetés Keszei Ernővel új tankönyvéről



A cím az interjú főszereplőjétől származik: így hirdette meg könyvbemutató előadását az Akadémia Kémiai Osztályán. Keszei Ernő az ELTE Fizikai Kémiai Tanszékének egyetemi tanára, 2010-től az ELTE tudományos, kutatási és innovációs rektorhelyettese. A Springer kiadó nemrégiben jelentette meg a „Chemical Thermodynamics. An Introduction” című munkáját, amely magyarul „Bevezetés a kémiai termodinamikába” címmel mindenki számára elérhető: <http://keszei.chem.elte.hu/fizkem1/Tankonyv.pdf>. A könyv axiomatikus alapon nyugszik; bemutatáshoz segítségül hívjuk a korábban említett előadás kivonatát is: „A klasszikus felépítés szerint a hőerőgépekkel kapcsolatos tapasztalatokból kiindulva, munkát és hőt tekintve alapmennyiségeknek, hosszadalmas érveléssel és a legtöbb tankönyvben nem túl meggyőző matematikai szigorúsággal eljutunk a termodinamikai potenciálfüggvényekhez; entrópiához, belső energiához, valamint ezekkel kapcsolatos további hasznos függvényekhez. Ez a felépítés jobbra követi a történeti fejleményeket, és a főtételekből származtatja a termodinamikai mennyiségeket. Például az (elsőként felfedezett) második főtétel két tipikus megfogalmazása: Hő spontán nem folyhat alacsonyabb hőmérsékletű helyről magasabb hőmérsékletűre (Clausius). Körfolyamatban lehetetlen hőt teljesen munkává

alakítani (Lord Kelvin). Másik hátránya a legtöbb klasszikus felépítésű tankönyvnek az, hogy azt a benyomást keltik az olvasóban, mintha a termodinamika ideális gázokkal lenne csak megalapozható – reális anyagokra csak toldozni-foldozni lehet.

A Tisza László által kidolgozott és Herbert B. Callen által leírt termodinamika ezzel szemben négy matematikailag egzakt axiómát mond ki, amelyek eleve termodinamikai potenciálfüggvényekre (belső energia és entrópia) vonatkoznak. Az axiómák kimondják ezek egzisztenciáját és fontos alaptulajdonságait. Az axiómák alapján már minden termodinamikai probléma könnyen megoldható, és közben nincs kihasználva az ideális gázok semmilyen tulajdonsága sem. (Kivéve az elegyek formalizmusának sajátos voltát, ami pont az ideális gázokból származtatható.)”

– Százötven évvel ezelőtt még azon vitakoztak, hogy különbözik-e a kémiai és a fizikai atom. Ennek a könyvnek a tárgya a kémiai termodinamika. Van külön kémiai, biológiai, fizikai termodinamika?

– A kémiai termodinamikát mindenképpen érdemes megkülönböztetni. A „fizikusi” termodinamikai tárgyalásmódban az összetélt változó nem változik, mert majdnem mindig zárt rendszerekről van szó. Na, ebben különbözik a kémiai termodinamika a fizikaitól. Ez két szempontból is nagy különbség. Egyrészt minden más kölcsönhatásban van egy extenzív és egy intenzív változó, amelyek a kölcsönhatást jellemzi, és elegendő, hogy ez az egy intenzív változó azonos legyen egy egyensúlyi rendszer minden részében. A kémiai kölcsönhatással – amikor valamely komponens anyagmennyisége változik meg – nem ez a helyzet. Ha húsz komponens jár szabadon a rendszerben, akkor mind a húsz kémiai potenciáljának azonosnak kell lennie egyensúlyban. Hány szabadsági foka van egy rendszernek? $K + 2$ vagy $K + \text{néhány}$ – és a K , a komponensek száma, sokkal nagyobb lehet, mint a mellette álló szám. Emiatt okvetlenül más a kémiai termodinamika, mint a „fizikai”.

De ez csak a könnyebbik rész, mert lineáris algebrai technikával lehet írni a sok változót. A kémiai potenciál megadása viszont már nem egyszerű, ugyanis minden komponensre más és más összefü-

gést kell használni, és az összefüggések alakjának százötven éves múltra visszatekintő hagyományai vannak. Ezek már megcsontosodtak, noha számítási szempontból nem mindig optimálisak. Még tovább megyek: ha a többkomponensű elegyen összetétel-függés is van – amivel sem a mérnökök, sem a fizikusok nem szeretnek foglalkozni –, akkor ez a hagyományos leírás még bonyolultabb, hiszen egy komponens kémiai potenciálja nemcsak az adott komponens összetételének változása miatt változik, hanem a többi komponens összetételének változása miatt is. Ennek leírásában szerepel egy vonatkoztatási rendszer is, amiből pedig nem egyféle van, hanem minimum négy. Itt a legkitartóbb fizikusok is elveszítik a fonalat, ha nincsenek rákényszerítve, hogy beleássák magukat a problémába. Ettől „kémiai” a termodinamika-könyv. A legnagyobb fejezet talán a fázisátalakulásoknak jutott, de a következő leghosszabb az elegyek termodinamikája, ahol az említett problémák részletesen ki vannak fejtve.

– Ez a könyv szakít ugyan a hagyományos tárgyalással, de egy másik, újabb hagyomány mentén indul el, aminek a kezdeteit Tisza Lászlóhoz kötném.

– A régi meg az új megítélése relatív, mert az „új hagyományt” Gibbstől lehet számítani, és bizony ez is idősebb száz évnél. A „régibb hagyomány” annál csak negyven-ötven évvel idősebb. Az igaz, hogy



korábban a termodinamikát kémiai egyszerű rendszerekre alkalmazták elsősorban – a biológiáról most ne is beszéljünk. Ez az oka annak, hogy a Gibbs előtti ötletek tovább éltek, és egészen a 20. század harmincas-nyolcvanas éveig meghatározók voltak. És mindannyian tudjuk – Planck nyomán –, hogy a régi felfogás hívei kihalnak, nem pedig a véleményüket változtatják meg.

– *A fizikai kémiai tankönyvek a termodinamikát még mindig a „régifelfogásban” tárgyalják.*

– Annak is jó oka van: kevesen veszik maguknak a fáradságot a kémikus szerzők közül, hogy igazán alaposan megértsék a termodinamikát. Egyszerűbb átvenni a régit – de azért vannak kivételek. Gibbsen kívül Denbigh nevét említeném. Beke Gyulától kaptam kölcsön a könyvét, aki még személyesen ismerte Denbighet. Ez a könyv a kémiai egyensúlyok terén olyan felfogású, mint az enyém, pontosabban szólva inkább megfordítva; sokat merítettem belőle. Mégsem Denbigh volt a meghatározó a tankönyvkiadásban, mert nem az okos emberek a meghatározók, hanem azok, akik nagy példányszámmal érnek el.

– *Tisza László és tanítványa, Herbert Callen is népszerű könyveket írt. Egy ideje kerületjük a forró kását: szeretném, ha élőszóban is megfogalmazná a kétféle felfogás közötti különbséget.*

– Ha tehetek egy kis kitérőt, szívesen elmesélek egy anekdotát. Egy vegyészmérnök tervezett egy olyan gépet, amelyik a Carnot-ciklusnál nagyobb hatásfokot ér el. Nem vettem volna komolyan, ha nem találkozom az egyik műegyetemi kollégájával, aki elmesélte, hogy megmutatta nekik a számításokat, és azok jók. Na, erre már kíváncsi lettem, elmentem a kémikus egyesületi sajtótájékoztatóra. Utána beszélgettünk is, mert minden, amit a mérnök mondott, rendben volt – a hatásfok kivételével. Szabadalmaztatni akarta a találmányát, amihez szakvélemény kellett volna, azt pedig senkitől sem kapott. Mondtam, hogy én elvállalom, de beszéljessünk még a gépéről. Azzal kezdtem, hogy egy körfolyamatban megmarad az entrópia és megmarad az energia. Ebből kijön a maximális hatásfok. Mire ő: Varsányi professzornál azt tanulta, még senki sem mért

olyat, hogy a hatásfok nagyobb lett volna a Carnot-ciklusénál – de miért ne lehetne nagyobb?

Hát ez a különbség a két felfogás között. Ha az ember abból indult ki, hogy „még senki sem mért olyat”, és nem tudja matematikailag végigvezetni, hogy milyen posztulátumból vagy főtételből és hogyan származtatja az entrópiát meg az energiát, amiből belátná, hogy annak kutya kötelessége megmaradni a körfolyamatban, akkor nem érti az egészet. Az új felfogás azt mondja, hogy minek veszködünk itt hőerőgépekkel, munkával, hővel, amelyek nem is a termodinamikai rendszer jellemzői, nem is állapotfüggvények, hanem koncentrálnunk inkább a rendszerre meg az állapotfüggvényekre.

Annak, aki a régi felfogást tanulta, fel kell adnia, hogy ő is azt „mondja vissza”, és azzal az igénnyel kell fellépnie, hogy megértse, miről van szó. Tehát aki nem akar a végére járni a dolgoknak, az nem fog eljutni addig, hogy értékelni tudja az újat – ami idestova már százötven- százhatvan éves.

– *Azért az sem buta, aki a főtételekben gondolkodik.*

– Azt nem mondom, hogy buta, csak a termodinamika megértésének az igénye hiányzik belőle – vagy olyan szinten műveli a matematikát, hogy nem fárasztja ki a hosszú, bonyolult érvelés-rendszer, amiből kijön a termodinamika alkalmazható szerkezete.

– *Őn is idézte korábban Sommerfeldet, a neves fizikust: „A termodinamika igen furcsa tudomány. Amikor az ember először tanulja, egyáltalán nem érti. Emiatt másodszor is áttanulmányozza, amikor rájön, hogy már érti, kivéve egy-két dolgot. Ezért harmadszor is nekiáll. Eközben rájön, hogy ezt nem is lehet érteni, viszont ekkorra úgy megszokja, amit olvas, hogy ez már egyáltalán nem zavarja.”*

– Valószínűleg Sommerfeld is a hagyományos felépítés szerint tanulta a termodinamikát. Ismerjük Tisza László esetét: ő elmondta, hogy Landaunál jött rá, hogy világosabban, tisztábban kellene kezelni a termodinamikát.

– *Tisza visszaemlékezése alapján úgy gondolom, Landau inkább a statisztikus fizikai és kvantummechanikai aspektusokat kérhette tőle*

Kétféle felfogás

A termodinamika axiómái

1. Léteznek olyan állapotok, amelyeket egyensúlyi állapotnak nevezünk, és amelyeket egyszerű rendszerekben makroszkopikusan egyértelműen meghatároz azok U belső energiája, V térfogata, valamint a rendszert alkotó K anyagfajta $n_1, n_2, \dots, n_K$ anyagmennyisége.
2. Létezik az extenzív paramétereknek egy entrópiának nevezett, S -sel jelölt függvénye, amely minden egyensúlyi állapotra értelmezhető. Egy izolált összetett rendszerben adott belső kényszerfeltétel hiányában az extenzív változók olyan egyensúlyi értékeket vesznek fel, amelyek maximalizálják az entrópiát az összes lehetséges olyan egyensúlyi rendszer felett, amelyben az adott belső kényszerfeltétel fennáll.
3. Egy összetett rendszer entrópiája additív a rendszer részei fölött. Az entrópia folytonos, differenciálható, és a belső energiának szigorúan monoton növekvő függvénye.

4. Bármely rendszer entrópiája zérus abban az állapotában, amelyben a $\left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,n}$ derivált értéke zérus.

(Keszey Ernő: Bevezetés a kémiai termodinamikába)

A termodinamika főtételei

0. Ha A termikus egyensúlyban van B-vel, és B termikus egyensúlyban van C-vel, akkor C is termikus egyensúlyban van A-val.
1. A rendszer belső energiája mindaddig állandó, míg azt munkavégzés, vagy hőcseré meg nem változtatja.
(Ha w jelöli a rendszeren végzett munkát, q azt az energiát, amely hő formájában áramlott a rendszerbe, akkor a ΔU belsőenergia-változást a következő összefüggés adja meg: $\Delta U = q + w$.)
2. Egy izolált rendszer entrópiája valamely spontán, önként lejátszódó folyamat során növekszik: $\Delta S_{\text{tot}} > 0$, ahol S_{tot} az izolált rendszer valamennyi részletének teljes entrópiája.
3. Ha minden elem entrópiáját $T = 0$ -n stabilis állapotban nullának vesszük, akkor minden anyagnak pozitív az entrópiája, ami $T = 0$ -nál nullává válhat, és biztosan nulla lesz valamennyi tökéletes kristályos anyagra, beleértve a vegyületeket is.

(P. W. Atkins „Fizikai kémia” c. könyve nyomán)



számon. Amikor már ő tanított termodinamikát, többféle módon próbálta bevezetni az entrópiát; végül posztulálta.¹

– De ez már a Landauval eltöltött évek után volt.

– Igen, jóval.

– Azt az igényt, hogy minden kristálytisza, világos legyen, Landau fejlesztette ki Tiszában is. Szóval fontos, hogy ez az igény meglegyen. Ha engem nem zavart volna egyetemista koromban, hogy nem értem a termodinamikát, és történetesen nem egy évvel előttem járó fizikusok a szobatársaim a kollégiumban, akkor nem biztos, hogy hamar tovább léptem volna.

– Mi a különbség a főtételeken alapuló és az axiomatikus felépítés között?

– A klasszikus főtételektől egy matematikusnak égne állna a haja. Amikor Carathéodory matematikusként „hozzányúlt” a termodinamikához, azzal kezdte, hogy a hőt hagyjuk ki, mert nem jól kezelhető. A munkát azonban meghagyta. Az ő tevékenysége nyomán nagyon elegáns előrelépés bontakozott ki a fenomenologikus termodinamikában. De mint tudjuk, a matematikusok később elővették, szétszedték ezt a konstrukciót, és azt mondták, hogy körülbelül tizenöt axiómára van szükség. Az axióma a matematikusok számára csak egyetlen állítás lehet. A főtételek több állítást tömörítenek, ennek mintájára a Callen-féle, vagy inkább a Tisza-féle axiómák is több állítást tartalmaznak. Tisza, illetve a tankönyvíró Callen úgy fogalmazták meg ezeket, hogy alkalmazkodjanak a négy főtételhez, ezért van pont négy axiómájuk.

De a hagyománnyal radikálisan szakítani kellett, és a nagy különbség az, hogy az axiómák csak a rendszerre jellemző állapotfüggvényekkel foglalkoznak. Ami pedig nem jellemző a rendszerre, azzal nem foglalkoznak. Ilyen például a hő meg a munka. Ez a nagy koncepcióbeli különbség a két felfogás között.

Beke Gyula azt szokta mondani, hogy egy vegyész minnek szenvedje végig a hőerőgépektől a reagáló rendszerekig elvezető hosszú és tekervényes utat, amit ráadásul – mint Sommerfeld megfogalmazta – nem is lehet érteni. Miért nem mutatjuk meg neki, hogyan ér könnyebben célba, és így nem is esik abba a hibába, mint az előbb idézett vegyész-mérnök, aki a Carnot-körfolyamatnál hatékonyabbat keresett, mert még senki sem talált olyat. Amúgy a hibája abból eredt, hogy a kritikus ponthoz közeli állapotokkal számolt, ahol rosszak voltak a táblázatok adatai a mérések pontatlansága miatt.

– A főtételek nem azt állítják, hogy még senki nem talált nagyobb hatásfokú gépet...

– Azért majdnem így fogalmaznak: például hogy nem létezik olyan gép, amelyik egy hőtartály hőtartalmát teljes egészében mechanikai munkává alakítja át. És ezt honnan tudjuk? A különbség picit emlékeztet a newtoni axiómák és a lagrange–hamiltoni axiómák esetéhez. A newtoni axiómákban fura mennyiségek vannak. Ilyen például az erő, és keletkezik egy állandó az egyik differenciálegyenletben – ez vektoriális mennyiségekre vonatkozó differenciálegyenlet –, amit aztán elnevezünk elegánsan tömegnek. Ezzel szemben a hamiltoni legkisebb hatás elve egyszerű, könnyen érthető.

– A fizika, kémia „levelezhető” lenne axiómákból? Mondjuk, az elektrokémia is?

■

¹ „Egy elméleti fizikus vándorútja Budapesttől Bostonig.” Tisza Lászlóval Frenkel Andor beszélgetett. A többrészes interjú megjelent a Természet Világa 2007-es számaiban, megtalálható a www.termeszetvilaga.hu honlapon.

² Hraskó Péter: A fizika axiomatizálásáról, Fizikai Szemle, 2009. július–augusztus, <http://www.kfki.hu/fszemle/archivum/fsz090708/hrasko0907.html>

– Ez érdekes dolog, mert a termodinamikában például csak a töltéshordozó részecskét tekintjük „létezőnek”.

– És a töltés?

– Az a töltéshordozó részecske egyik tulajdonsága, ami a részecske nélkül nem létezik. Az anyagi részecskék viselkedésére pedig a kémiai termodinamika érvényes.

Az elektrosztatika axiómái alapján kizárólag olyan helyzeteket tudunk kezelni, amelyekben absztrakt töltés szerepel. Mihelyt felteszünk, hogy különböző töltéshordozók léteznek, és azok másfajta egyensúlyokban is részt vesznek, akkor már nem használható az elektrosztatika. A termodinamika beláttatja velünk, hogy ha ugyanabból az anyagból van az egész rendszer, akkor az elektrosztatika alkalmazható. Különben elő kell venni a termodinamikai tárgyalást, ami igazából elektrokémia.

– De a termodinamika nem mondja meg, hogyan vonzzák egymást a töltések.

– Azt nem, azt az elektrosztatikából kell beleírni a termodinamikába. De ha beírjuk, akkor a termodinamika már tudja tárgyalni a galváncella működését is.

– Most olvastam egy cikket a fizika axiomatizálásáról, amelyben az a megállapítás ragadott meg a legjobban, hogy a fizikusnak mindig mérlegelnie kell, mi a fontos.²

– Így van. Éppen ezért nem az elektrosztatikából indulok ki, ha egy galváncellát akarok leírni, mert az nem vezet eredményre. A matematikusok könnyebb helyzetben vannak: ők találják ki az objektumaikat. Kimondják azok tulajdonságait, on-

nantól minden világos. A körülöttünk lévő világ minket sajnos folyton zavar abban, hogy ilyen békésen, egyszerűen dolgozhassunk.

– Hogyan fogadják a könyv alapjául szolgáló kurzust a hallgatók?

– Tetszik nekik. Amikor még innen-onnan kellett összeszednem az előadások részleteit, nagy szerencsém volt, mert angolul tanítottam fizikai kémiát, vállalkozó magyar hallgatóknak is. Ez talán húsz évig is eltartott. Az órákra nem járt sok hallgató, de ők régebben a legjobbak közül kerültek ki, amikor az angoltudás még jól korrelált a felkészültséggel, a szorgalommal meg a tehetséggel. Akkor alaposan elmondtam az összefüggéseket – és a hallgatók nagyon élveztek.

Amikor viszont elindult az osztott képzés, a megnövekedett létszámú és szerényebb előképzettséggel rendelkező hallgatókkal ez a megoldás tarthatatlanná vált. Jegyzetet kellett írni, ebből lett aztán ez a tankönyv. A tankönyvet olvasva viszont megint csak örülnek a hallgatók, mert ebben minden benne van, amit a vizsgára tudni kell. Néhány hallgatótól eltekintve a többség azt mondja, hogy meg is lehet érteni. De az a gyanúm, hogy nem a tankönyv hibái okozzák a nehézséget azoknak, akik nem igazán értik.

– Hogyan jutott el a Springer kiadóhoz?

– Régen úgy kerültek ki Magyarországról angol tankönyvek, hogy lefordították, ami az Akadémiai vagy a Műszaki Kiadónál magyarul megjelent. Később közvetlenül külföldi kiadónál is jelentek meg könyvek – az elsők között például Hargittai István a Springer-nél publikálta egy molekulaszervezetről szóló könyvét. Inzelt György kollégám az egyik társszerzője annak az elektrokémiai lexikonnak, amit ugyancsak a Springer adott ki. Néhány évvel ezelőtt még létezett a Springer Hungarica kiadó, ők szerzőket is toboroztak az egyetemen. Akkor nem jutott eszembe, hogy jelentkezsem, de ezek a momentumok is arra felé tereltek, hogy először a Springernek küldjem el a tervezetemet. Nagyon pozitív visszhangot váltott ki a kiadónál.

– Csak úgy, „az utcáról” jelentkezett?



– Igen. Amikor megvolt a mostani tizenegyből nyolc fejezet magyarul, folyamatosan feltettem őket a hálóra a hallgatóimnak. Elküldtem a Springernek egy szinopszist, valamint egy kétoldalas összefoglalót arról, hogy mi fán terem az axiomatikus termodinamika. Azt a meglepő választ kaptam a kémiai szerkesztőtől, hogy a dolog nagyon érdekli, és bár alap-tankönyveket nem szoktak kiadni, megkérdezi a főnököket. Egy héten belül jött a válasz, hogy kiadnák, de nem lévén angolul hozzáférhető fejezet, tudok-e valakit, aki ért magyarul és lektori véleményt küldene nekik. Az ismerősök között keresve rátaláltam a newporti Salve Regina Egyetemen tanító Kádár Sándorra, aki lelkesen elvállalta a feladatot. Mint később megtudtam, a kiadó még a recenzió megérkezése előtt megkötötte velem a szerződést.

– Ezután lefordította a kész fejezeteket?

– Nem. Azt a nyolc fejezetet, ami már megvolt magyarul, elkezdtem angolul írni. Nem fordítottam, hanem újra megírtam angolul. A hiányzó három és fél fejezetet eleve angolul írtam – a mostani magyar verzióban egy fejezet még mindig angolul van. Azt még le kell fordítanom magyarra.

– Milyen az itthoni szakmai visszhang?

– Fiatal kollégáimnak általában nagyon tetszett a könyv, az idősebbek között volt, aki azt mondta: jó ez, de jó a régi is. Amikor már elkészültem néhány fejezettel, elküldtem őket debreceni, szegedi, veszprémi kollégáimnak is. Debrecenből nagyon kedvező véleményt kaptam Gáspár Vilmostól, a Fizikai Kémiai Tanszék mostani vezetőjétől. Azt mondta, ő is jól tudja használni ezt a fajta tárgyalást. A Springerrel kötött szerződésbe részben ezért került bele, hogy a magyar változat hozzáférhető az Interneten.

– Megváltozott attól a tanári attitűdjé, hogy rektorhelyettesként több „hegyet-völgyet” lát, mint a Kémiai Intézetből, és a történések hátterét is jobban ismeri?

– A rektorhelyettesi munka sok időt, energiát von el. Már rég lefordítottam volna a hiányzó fejezetet, és rendesebben gondoznám – úgy, mint régen – a kurzusom weboldalát, ahol mindig naprakész infók vannak. A nagyobb áttekintés abból a szempontból fontos, hogy teljesen meggyőződtem róla: egy olyan egyetemen, amilyen az ELTE, vagy amilyen az ELTE fejlődni akar, kulcsfontosságú tankönyveket írni a hallgatóinknak. Ha pedig nemzetközivé akarjuk tenni az egyetemet – ami most nagyon aktuális célkitűzés –, talán még ennél is fontosabb, hogy ilyen könyveket írjunk; világpiacra, angol nyelven. Ahhoz, hogy áradjanak hozzánk a külföldi hallgatók, szintén angol nyelvű tankönyvek kellenek.

– Miért nem jó az, ami mindenhol kapható?

– Mert többségük olyan, mint amiről korábban beszélünk. Úgy gondolom, hogy nem szolgálják a könnyű, egyszerű megértést.

– Nem a termodinamikára gondoltam.

– Ez – azt hiszem – mindenre érvényes. A régi, osztatlan képzésben, amikor a korosztálynak csak a hat százaléká jutott el egyetemre, akármit taníthattunk, megtanulták, vagy ha kellett, meg is szokták, hogy miről van itt szó. Ez most nem megy. A képzési rendszer átalakult. Az alapszak azért jó, mert a hallgató tanul valamit, három év múlva kap egy diplomát, és utána már nem nézik részleteiben, hogy mit tanult, hanem bárhol az európai felsőoktatási térségben folytathatja a tanulmányait mester szakon. Ebbe a rendszerbe viszont nem fér bele a régi, elmélyült tanulás. Következésképp új eszközöket kell a hallgatóknak adni, amelyek segítségével könnyen megérthetik az összefüggéseket. És nem elég, hogy ezek oktatástechnológiai eszközök legyenek a szó fizikai értelmében, hanem újfajta, hallgatóközpontú tananyag-közelítésre, módszerekre is szükség van. Én azt gondolom, hogy ez a tankönyv megfelel ezeknek az elvárásoknak, és remélem, akadnak követőim egyetemi kollégáim között.

Silberer Vera

Részlet Tisza László visszaemlékezéséből¹

– Ahogy mondtam, az MIT-n elsősorban másodéveseknek kellett feladatmegoldó gyakorlatot tartanom. Ez nem volt nehéz, a nyelvet leszámítva. Nekem azonban a termodinamika oktatására szóló megbízás volt a legfontosabb. Kinevezésem után két hét állt rendelkezésemre a tananyag felvázolásához. Slater a saját könyvéből tanított, az „Introduction to Chemical Physics”-ből. Rám bízta, hogy én is ezt használom-e. Úgy döntöttem, nem egyetlen könyvet választok. Három fogásból állítottam össze a menüt: Slater könyvéből, Landau és Lifsic „Statistikus fizika”-jából, amelynek első kiadását 1938-ban jelentette meg az Oxford University Press angolul, valamint göttingeni jegyzeteimből, amelyeket Max Born előadásán készítettem. Mindhárom forrás tartalmazott olyan részeket, amelyek összhangban voltak egymással és az én programommal. Főként a bevezető lépésben, az entrópia definíciójában különböztek.

1941-ben a termodinamikai megközelítéssel kezdtem, de az entrópiát klasszikus statisztikus mechanikai úton definiáltam. Ebben Landaut és Lifsicet követtem. Másodjára azonban nem tetszett ez a megoldás, és már 1942-ben lemondtam a statisztikus kezdésről. Helyette Carathéodory megalkotását választottam, ahogyan Borntól hallottam, de ez még kevésbé volt a kedvemre. El is vetettem, de valamit megtartottam Born előadásai-ból: azt a mnemotechnikai eszközt, amely segít eligazodni az alapvető termodinamikai változókat tartalmazó parciális deriváltak útvesztőjében.

Az entrópiával kapcsolatos patthelyzetet elpanaszoltam egy barátomnak, a doktori disszertációja védéséhez közeledő Roland Lichtensteinnek. „Miért nem posztulárod?” – kérdezte. Ezt tettem, és ma is zavarban vagyok, hogy rendszerem egyik sarokkövét egy kívülálló megjegyzése szolgáltatta. Igaz, az entrópia létezését maga Gibbs is posztulálta, de az eljárást nem nevezték néven.

Az entrópia posztulálásával és a statisztikus definíció elhagyásával teljesen fenomenologikus tárgyalást vezettem be. Ezt a kissé egyedi építményt később a „Makroszkopikus termodinamikai egyensúly” elméletének neveztem el, röviden MTE-nek. Valójában a Gibbs-féle termodinamika modernizált változata volt.

– Hogyan posztuláltad az entrópiát?

– Létezik az energiának és a térfogatnak egy függvénye, amelynek maximuma a termodinamikai egyensúlyi állapotokat jellemzi; ezt a függvényt entrópiának nevezzük. Az energia-egyensúly megadja a rendszer hőmérsékletének homogenitását; hasonlóan, a térfogat-egyensúly a nyomás, a tömeg-egyensúly pedig a kémiai potenciál homogenitására vezet. Ez az egységes módszer ma már széles körben – vagy talán általánosan is – használatos. Fontos megjegyezni, hogy a termodinamika ilyen elegáns tárgyalásához egy összetett rendszert kell tekintenünk, például egy alkalmas rendszert és egy tartályt. Kezdetben el vannak szigetelve egymástól, azután termikusan érintkeznek. Azt, hogy a szélsőértékhez vezető állapotok pontos definíciójához ez a megközelítés szükséges, Planck ismerte fel, Landau már magától értetődően használta. Az entrópia létezését valószínűleg én kezeltem először explicit posztulátumként.



Vegyészkalendárium

Pap József Sándor rovata

ILOSVAY LAJOS (1851. OKTÓBER 31.), „AZ APOSTOLOK EREJÉVEL”

DOLGOZÓ TERMÉSZETTUDÓS. Dési születésű, ahol édesapja fogházfelügyelőként dolgozik. A helyi református elemi elvégzése után a kolozsvári Református Kollégiumba kerül. Mivel a gyógyszerészet vonzza, egy patikában gyakornokoskodik, de a természettudomány iránti szeretete továbbhajtja, így végül az Unitárius Gimnáziumban leérettségizik. A budapesti tudományegyetemen gyógyszerész diplomát (1874), vegyész-növendékként doktorátust (1875), később pedig tanári oklevelet szerez, utóbbit kémia és fizika szakon (1878).



Nagy hatású tanítómesterei Lengyel Béla és Than Károly, akik mellett gyakornokként, illetve tanársegédként dolgozik. Thanról így emlékezik: „Egyenlően tekintettük benne a tudóst és a hazafit, a magyar tudósnak mindenfelé sugárzó világítótoronyak kell lennie.” Ezen örökséget méltó módon viszi tovább, saját életével is példát állítva.

Than mellett kezdi tudományos kutatói munkásságát a karbonil-szulfid, valamint ásványvizeink tanulmányozásával. Teljesítményét hamar elismerik, és 1880-ban külföldi tanulmányutakra indulhat. Egy szemesztert tölt Heidelbergben, ahol Bunsen laboratóriumában dolgozik és emellett Bernsthen előadásait hallgatja. Innen Münchenbe vezet útja, ahol von Baeyer segédje lesz, de Hermann Emil Fischer nagyszerű előadásait is élvezheti. Párizst is útba ejti, itt Berthelot, a szerves kémia „apostola” a mestere. Innen hívják haza a budapesti Műegyetemre, hogy a Kémia Tanszéket vezesse, s teszi is több mint fél évszázadon át. Jelentős egyetemi karriert fut be: 1883-tól az általános kémia rendes tanára, 1886-tól 1893-ig a kar dékánja, 1901-től 1903-ig az egyetem rektora. További külföldi tanulmányutak várnak még rá Svájcban, Ausztriában, Belgiumban, Angliában és Hollandiában.

1887-ben „A kémia alapelvei” címmel előadás-sorozatot tart, majd könyve jelenik meg. Jelentős tudomány-népszerűsítő írással a tömegekre is próbál hatni, az emberek műveltségét boldogulásuk kulcsának tartja. Ezekből az írásokból jól körvonalazódik a természettudományokhoz való viszonya, ars poeticának is tekinthetők következő sorai: „Az apostolok erejével szeretnék izgatni a természettudományok szeretetére, művelésére és megbecsülésére, mert én csak szépségüket, igazságukat és az emberi sorsára gyakorolt jótékony hatásukat látom.”

Tudományszervező, népszerűsítő és oktatói tevékenysége mellett jelentős hatású kutatásokat is folytat, főképp a szervetlen és analitikai kémia terén. Többek között vizsgálja kettős sók előállítását, termokémiai sajátságait, az égés során keletkező gázokat. Nevéhez fűződik a nitrit kimutatására alkalmazott Griess-féle módszer továbbfejlesztése, érzékenyítése a Griess-Ilosvay-reagens segítségével (a reagens szulfanilsav ($\text{HSO}_3\text{-C}_6\text{H}_4\text{-NH}_2$) és α -naftilamin ($\text{C}_{10}\text{H}_7\text{-NH}_2$) oldatok elegye, amely nitritek savas oldatához adva vörös színeződést okoz, mivel azo-kapcsolás ját-

szódik le). Saját kísérletei alapján cáfolja Carius elméletét az ózon keletkezéséről, mely szerint az villámlás során történne. Ilosvay úgy gondolja, ilyenkor nem ózon, hanem nitrogén-oxidok keletkeznek. Ő az első, aki réz(I)só oldatát használja acetilén kimutatására.

A budapesti Műegyetemről 1917-ben vonul nyugdíjba, de a gondjaira bízott tanszék irányítását egészen 1934-ig folytatja. Megírja az első magyar nyelvű szerves kémia tankönyvet (Bevezetés a szerves chemiába, 1905), ebben az évben választja rendes tagjai közé az Akadémia. Elsőként ismerteti magyarul a radioaktivitás elvét. A Magyar Chemiai Folyóiratnak egészen a kezdetektől (1895) szerkesztőbizottsági elnöke, de szerkesztője a Természettudományi Közlönynek is. Számos elismerésben részesül, többek között Eötvös Loránd után (húsz év elteltével) másodikként a Szily Kálmán-érmet is elnyeri (1932). A Magyar Chemikusok Egyesületének tiszteletbeli elnöke. A politikai életben is részt vesz, kormánypárti országgyűlési képviselő, majd a Vallás- és Közoktatásügyi Minisztérium államtitkára, 1927-től felsőházi képviselő.

1936. szeptember 30-án éri a halál, Budapesten, a Kerepesi úti temetőben helyezik végső nyugalomba.

(Forrás: Szőkefalvy-Nagy Zoltán: Ilosvay Lajos (A múlt magyar tudósai sorozat) Akadémiai Kiadó, 1978.)

GILBERT NEWTON LEWIS (1875. OKTÓBER 23.), ÉS A KÉMIAI KUTATÁS ELŐRETÖRÉSE AMERIKÁBAN. A massachusettsi Weymouthban látja meg a napvilágot, apja ügyvéd. Szülei az angol képzési rendszer elveihez igazodva otthon tanítják, már hároméves korában olvas. Kilencéves korától a nebraskai Lincoln város általános iskolájába jár, majd itt kezdi felsőbb tanulmányait is, 14 évesen. Három éven át a University of Nebraska növendéke, ezután átkerül a Harvard College-ba. Doktori fokozatát 1899-ben, 24 évesen



nyeri el, Theodore Richards témavezetésével. Itt sajátítja el a kísérleti technikákat és itt mélyed el a termodinamika kérdéseiben. Richards nézete, mely szerint a tények fontosabbak az elméleteknél, Lewis egész későbbi tudományos szemléletét meghatározza, mégis, amikor a kémiai kötés természetével kapcsolatban konfliktusba kerülnek, elhagyja a Harvardot (érdekes, hogy ez volt az egyetlen olyan időszak pályafutása során, amikor semmilyen közleménye nem jelent meg).

Az MIT-hez való csatlakozása előtt egy rövid esztendőt tölt a Fülöp-szigeteken, mint hivatalnok. Ezután azonban halála napjáig csak a tudománynak él. Az MIT-n rendkívül nyitott légkörű, fiatal tudóstársaságba csöppen, amelyet A. A. Noyes hoz létre. (Noyes egyébként Lewis korábbi témavezetőjéhez, Richardshoz hasonlóan Ostwald lipcsei műhelyében szerzte doktori fokozatát. Itt maga Lewis is megfordult a PhD-fokozat megszerzése után, ugyanúgy, mint Nernst műhelyében.) Hét évet tölt az MIT-n,



s ez az időszak rendkívül termékenynek bizonyul, hiszen elvégzi az elemek redoxpotenciáljának, konduktivitásának és szabad-energiájának szisztematikus vizsgálatát; az eredményeit összefoglaló táblázatok a mai napig használatosak. 1912-ben a kaliforniai Berkeley-i Egyetem kémia tanszékének vezetője lesz, amely tisztséget halála napjáig betölti. Ugyanebben az évben nőül, felesége Mary Sheldon, egy harvardi professzor lánya, akivel három gyermeket nevelnek fel.

Lewis elképzelése az, hogy a kémia tanszék feladata a hallgatók tanítása és a tudomány előrevitele egyszerre. A technikai alkalmazások helyett a hangsúlyt inkább az alapelvek ismertetésére helyezi és eszerint irányítja a Berkeley kémia tanszékének oktatását is. Tények tömkelege helyett a kémia elveinek magyarázata adja a tanszéki előadások anyagának nagy részét. Ő maga nem tart előadásokat, ugyanis nehezen beszél nagyobb tömeg előtt. Előszeretettel dolgozik a legjobb képességű hallgatókkal, kerüli a középszeret. Ugyanakkor ezek a fiatal munkatársak nagy szabadságot élvezhetnek, lehetőségük van például igény esetén témavezetőt váltani, főnökük nyitott mindenfajta megbeszélésre. Doktoranduszainak emellett az alsóbb évfolyamokban előadásokat kell tartaniuk, persze a kutatásban való aktív részvételüket is szigorúan elvárja (ez a rendszer nagyban hasonlít a mai gyakorlathoz). Ebben a légkörben a kooperáció különösen élénké válik, mindenki hajlandó a másikat segíteni kutatásaiban. Heti rendszerességgel tartanak kutatási beszámolókat vagy irodalmi ismertetéseket, a beosztottak, hallgatók és az éppen ott tartózkodó ismert kutatók aktív részvételével.

Nem csoda, hogy ebből a közegeből nem egy későbbi Nobel-díjas (Harold Urey például), akadémikus kerül ki. Természetesen mindehhez a kiemelkedő kutatási színvonal is elengedhetetlen.

Lewis ebben a tekintetben is a legnagyobbak közé sorolható: a kémiai egyensúlyok, a kémiai kötés elektronpár-elmélete, a sav-bázis elmélet kiterjesztése, az izotópok (ő izolál először nehézvizet) és az anyag kölcsönhatása fénnel egyaránt érdeklődése részét képezi. Rendszeri a termodinamika törvényeit, amellyel a fizikai kémia ezen ágát a ma ismert formájába önti. Véleménye szerint a fizikai kémia „mindaz, ami érdekes”.

A Lewis-féle kötőelektronpár-elmélet az első, amely magyarázatul szolgál a kovalens kötésre, vagyis átlépi az elektron átadásával járó töltésfelhalmozódás problémáját olyan esetekben, amikor bizonyíthatóan nincsenek jelen ionok. Úgy képzei, hogy az elektronok tetraéderes szimmetria szerint veszik körül az atommagot. Leginkább az nyugtalanítja, hogy vajon a kapcsolódó atomok között egyedi kötések alakulnak ki, vagy mindegyik elektronpárjukat megosztják. Könyve, a „Valence and the Structure of Atoms and Molecules” az egyik legjelentősebb kötéselméleti mű, amely valaha napvilágot látott.

Kutatásait váratlan haláláig folytatja: 1946. március 23-án a laborasztal mellett találunk rá élettelenül. Cseppfolyós hidrogénnel dolgozik és vélhetőleg az egyik cső repedése okozza a végzetes balesetet (később több vélemény is megjelenik, melyek szerint öngyilkosságot követhetett el). Bár számos kitüntetést, elismerést kap (például az I. világháború során a vegyvédelemmel kapcsolatos munkájáért még katonai kitüntetéseket is), a Nobel-díjat egyszer sem nyeri el (számtalanszor jelölik). Egyes vélekedések szerint ez arra vezethető vissza, hogy Nernsttel ellenséges viszonyban állt. Lewisnak köszönhetjük sok más mellett a fénykvantum foton elnevezését (bár ő nem erre javasolta) és a fugacitás fogalmát is.

(Forrás: encyclopedia.com és az ott sorolt további művek) ●●●

Próder István* – Póka Teréz**

* Magyar Műszaki és Közlekedési Múzeum Vegyészi Múzeuma, Várpalota

** MTA Csillagászati és Földtudományi Kutató Központ Földtani és Geokémiai Intézet, Budapest

A derivatográfia története

Az első derivatográf a Vegyészeti Múzeumban

A Magyarhoni Földtani Társulat Tudománytörténeti Szakosztálya és a Magyar Kémikusok Egyesülete Kémia- és Vegyiptörténeti Szakosztálya 2011. október 5-én „Magyar Geo- és Chemo-történettudományi Konferencia 2011” címen a Magyar Állami Földtani Intézetben közös előadóülést tartott. A két tudományág művelői és történetének kutatói a „Kémia Nemzetközi Éve” rendezvénysorozatokhoz kapcsolódva tartották összefüggésüket. Cikkünk az ülésen elhangzott előadásunk alapján készült.

A termikus vizsgálatok történetéből

A kémia területén a termoanalitika elméleti alapjainak felismerése H. L. Le Chatelier-től (1850–1936) származik, aki felfedezte, hogy különböző anyagok (az elsőként vizsgált különböző agyag-ásványok) hőhatásra eltérő hőmérsékleten alakulnak át, és átalakulásuk során diszkrét hőmérsékleten hőt nyelnek el, illetve hőt termelnek (1882). Ebből következett, hogy az egyes anyag-

fajtákra jellemző lehet a hőmérséklet hatására bekövetkező változások hőfoka. Később azt is észlelték, hogy ezek a változások gyakran az anyag tömegének megváltozásával járnak, tehát a hőmérsékletmérés mellett a folyamat során a tömegváltozás mérése is szükséges. Az elv analitikai felhasználáshoz azonban a mérési adatok egyidejű, pontos és gyors rögzítéséhez az elektrotechnika fejlődésére is szükség volt. A múlt század 40-es éveire már kezdetleges laboratóriumi műszereket is fejlesztettek a termoanalitikai módszer rutin alkalmazására. Az Egyesült Államokban az 50-es és 60-as években folyamatosan kifejlesztették a Mettler-mérleget, amely a hőmérséklet és a súlyváltozás szimultán mérésére volt alkalmas.

Magyar termoanalitikai iskola

A magyar termoanalitikai kutatások és az azzal kapcsolatos műszerfejlesztések a Budapesti Műszaki Egyetem Általános és Ana-



1. ábra. Erdey László 2. ábra. Paulik Ferenc 3. ábra. Paulik Jenő

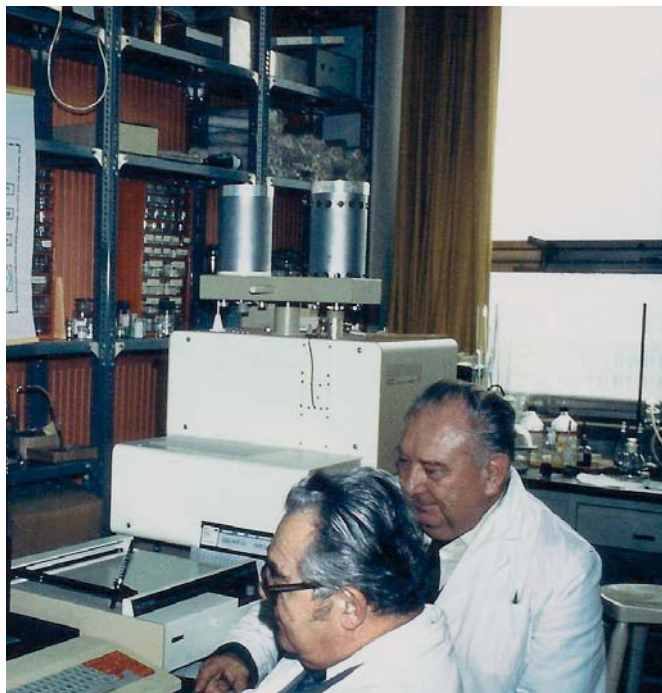
litikai Kémia Tanszékén *Erdey László* (1910–1970) akadémikus, korának nemzetközi híró vegyészprofesszora kezdeményezésére az 1950-es évek elején indultak el. Közel 10 év leforgása alatt önálló magyar termoanalitikai tudományos iskola alakult, amely célkitűzésének tekintette a műszeres termoanalitika fejlesztését és gyors ipari bevezetését Magyarországon.

Termoanalitikai készülékük a derivatográf, *Erdey László* akadémikus, egyetemi tanár (1. ábra), *Paulik Ferenc*, a kémiai tudomány doktora, egyetemi tanár (1922–2005) (2. ábra) és *Paulik Jenő*, a kémiai tudomány doktora, egyetemi kutatócsoportvezető (1927–1988) (3. ábra) több szabadalommal védett találmányaként az anyagok hő hatására bekövetkező változásainak komplex vizsgálatára alkalmas [1,2]. A világszabadalmat nyert analitikai műszer a vizsgálandó minta hőmérsékletének mérése mellett ugyanennek a mintának egyidejűleg méri a tömegváltozást, a tömegváltozási sebességét és az entalpiaváltozást is. Az Erdey–Paulik-féle szabadalmak bejelentéséig, 1954–1955-ig, a korábbi módszerekkel a termikus jelenségeket csak egymástól elszigetelten vizsgálhatták. A szabadalmaztatott műszer szerkezeti megoldásával a feltalálók az addigi készülékek külön-külön felvett adatai között természetszerűen adódó eltéréseket tökéletesen kiküszöbölték (4. ábra).

A derivatográfhoz vezető kutatómunkáról tájékoztat az alábbi interjúrészlet, amelyet *Szöllősi Melinda* 1999-ben *Paulik Ferenc*-cel készített, amikor a professzort Eötvös-koszorúval tüntették ki: „A magunkfajta kutatónak a laboratóriumban rendszerint csak a különféle változók (súly, hőmérséklet, elektromos feszültség, ellenállás) mérésére alkalmas mérőeszköz állt rendelkezésére, az ezen felül szükséges bonyolultabb berendezéseket ebből állították össze. Ilyen körülmények között került sor arra, hogy Jenő fivérémmel egy termomérleget építettünk analitikai mérlegből, galvanométerből, termoelemekből. Amikor ez elkészült, rendre megvizsgáltuk a kollégáink által előállított sok száz csapadékat... Megismertük a termoanalitika minden előnyét, de hibáit, gyenge pontjait is megtapasztaltuk.

Elhatároztuk, hogy megkíséreljük kiküszöbölni a hibákat és továbbfejlesztjük a készülékünket. Az előzmények szerint a legkedvezőbb időpontban jelentettünk be két találmányt fivérémmel és professzorunkkal közösen, mégpedig nemcsak itthon, hanem az Egyesült Államok, Franciaország, Németország és Nagy-Britannia szabadalmi hivatalainál is.

Az első találmány, a termogravimetriás (TG) görbe deriválására ajánlott műszeres megoldás, a görbe felvételére mágnesetekercs-rendszerből álló, úgynevezett deriválóberendezés. Találmányunk azon a megfigyelésen alapult, hogy a folyamat differenciálhányados-függvénye (jelen esetben a DTG-görbe) sokkal érzékenyebben mutatja ki a folyamat sebességében beálló legkisebb változást is, mint maga az alapfüggvény. Így a TG- és DTG-görbék egyidejű felvételével elértük azt, hogy pontosabban tudtuk értel-



4. ábra. Paulik Jenő és Ferenc

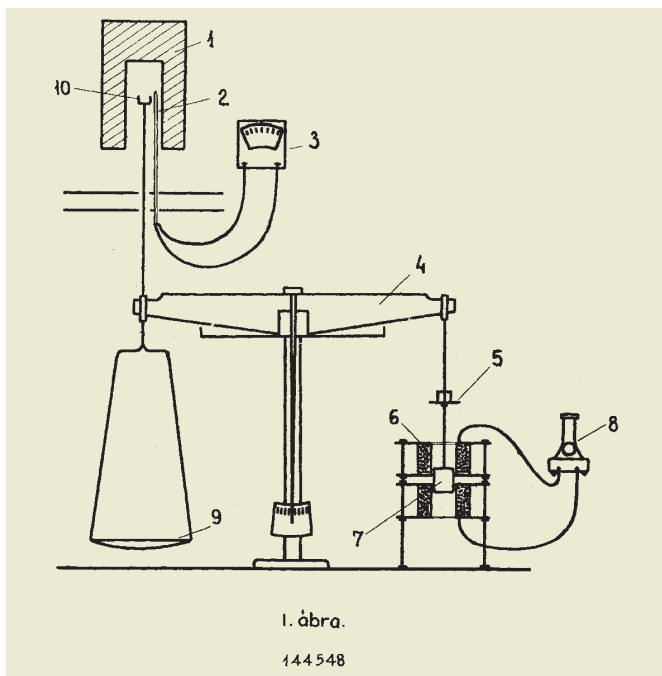
mezni és értékelni a TG-görbét, azaz a minta hőbomlásának folyamatát.”

Az első találmányt „Készülék anyagok derivatív-termogravimetriás és egyidejű termogravimetriás vizsgálatára” címmel 1954. december 31-én jelentették be [1].

A készülék részegységeit (1 kemence, 2 termoelem, 4,9 termomérleg, 6,7 deriváló berendezés) a 144.548 sz. szabadalom rajza alapján az 5. ábra, mutatja be. Valóságos kivitelét a Magyar Műszaki és Közlekedési Múzeum Vegyészeti Múzeumában őrzött derivatográf részleteként a 6. ábra ábrázolja.

A másik találmányuk, a 145.369 számú szabadalom szerint kialakított berendezés differenciál termikus elemzés, termogravi-

5. ábra. DTG- és TG-készülék vázlata





metriás és derivatív termogravimetriás vizsgálatok egyidejű elvégzésére és regisztrálására volt alkalmas [2]. A termoanalitikában ez volt az első szimultán készülék. A második szabadalom szerint a differenciál termikus elemzéshez a készüléket úgy alakították át, hogy a vizsgálandó mintát tartalmazó tégely mellett egy másik, inert anyagot tartalmazó tégelyt is elhelyeztek a kemencében. A minta és az inert anyag termoelemeit egymással szembekapcsolva, az áramkörbe galvanométert, hőmérsékletre kalibrált millivoltmérőt és ellenállást iktatva, a minta és az inert anyag közötti hőmérséklet-különbség a minta hőmérséklet-változásának függvényében mérhető.



6. ábra. Készülék részlete

Az első derivatográf, az „ősderivatográf” a Vegyészet Múzeumban

A szabadalmakban leírtak alapján szerkesztett készülékről, a derivatográfról *Paulik Ferenc* a következőket mondta: „A két találmányt a derivatográf nevű berendezés ötvözi, amit először házi-

7. ábra. Ősderivatográf



lagos kivitelben állítottunk össze. Az eredeti deszkapéldány jelenleg a várpalotai Magyar Vegyészet Múzeumban található. Gyári kivitelben a Magyar Optikai Művek valósította meg, a mi útmutatásunk alapján és tevékeny közreműködésünkkel. A vállalat 1960 és 1990 között tizenhat országba mintegy négyezer készüléket exportált, mai áron számítva csaknem 150 milliárd forint értékben.”

Az említett készüléket, a „deszkapéldányt” maguk a feltalálók állították össze. A 7. ábrán már múzeumi kiállítási tárgyként látható. A derivatográf vázlatos szerkezetét a 8. ábra mutatja [3]. (A vázlaton: 1 kemence, 2 mérlegkar, 3 a mérleg mutatója, 4 rés, 5 regisztrálóhenger, 6 mágnes, 7 tekercs, 8 az inert anyag tégelye, 9 mintatartó tégely, 10 porceláncső, 11 a minta termoeleme, 12 az

inert anyag termoeleme, 13, 14, 15 galvanométerek, 16–20 lámpák, 21 sablon.)

Az ősderivatográf – mint első és egyetlen példány – egyik legmegbecsültebb darabja a múzeum tárgyi gyűjteményének. A tárgyleíró kartonján feltüntetett adatok alapján tervezői és alkotói: *Paulik Ferenc*, *Paulik Jenő* és *Erdey László*. Készítésének és felhasználásának helyszíne a Budapesti Műszaki Egyetem Általános és Analitikai Kémia Tanszéke. Készítésének időpontjaként az 1954-es év adható meg, mert ez a dátum szerepel *Paulik Ferenc*nek a J. Thermal. Anal. 1996. évi 47. kötetében megjelent cikkében [4]. Főbb méretei: 2000×1000×950 mm. A múzeumi gyűjteménybe 1971-ben került és 1971. 5. 1–9. gyarapodási számon vették nyilvántartásba. Az évszám utáni első szám az adott évi tételszám, az 1–9 számok pedig a készülék kilenc részegységére utalnak. Ezek: tégelyizzító kemence, analitikai mérleg, óraszerkezet, elektromotorok (szabályozószervezetek működtetéséhez), toroid transzformátor, három galvanométer. Az analitikai mérleg maga is múzeumi érték. (*Zier Károly* mérlegkészítő mester műhelyéből került ki, ahonnan 1903-tól kezdődően folyamatosan szállítottak mérlegeket oktatási intézményekbe, üzemekbe, gyógyszerárakba.)

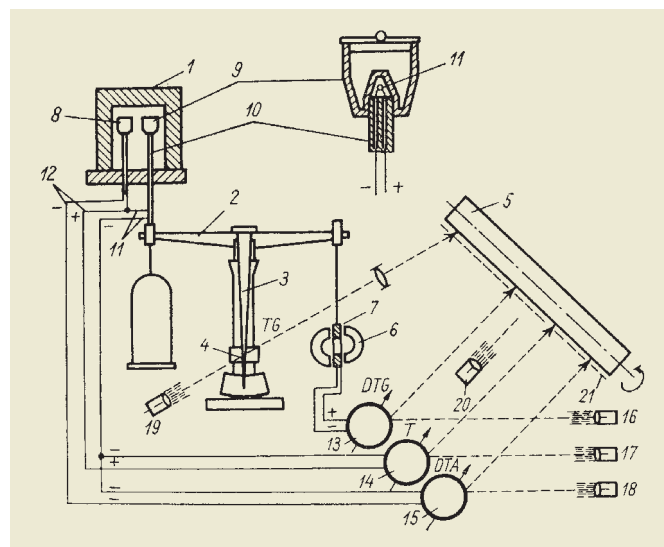
Egyedi gyártású derivatográf a Vegyészet Múzeumban

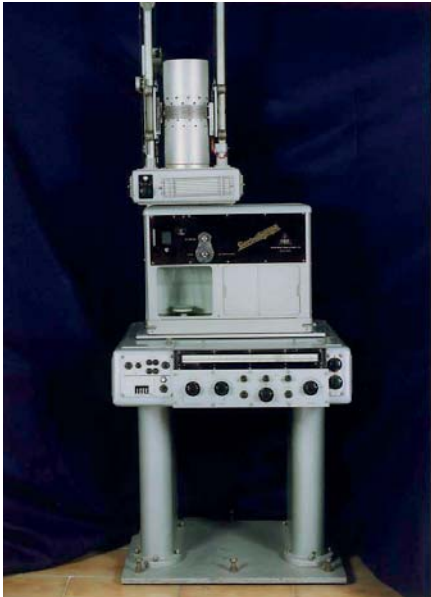
Az ősderivatográfon kívül egy másik figyelemre méltó készülék, az első önálló gyártású készülék is a múzeum birtokába került. Ezt a derivatográfot a Műanyagipari Kutató Intézet Poliészter Osztálya ajándékozta a múzeumnak 1973-ban. Érdekessége, hogy nem a Magyar Optikai Művekben készült, hanem még az ottani gyártás megindítása előtt, a Gyengeáramú Műszerjavító Ktsz. egyedi darabként, megrendelésre készítette 1960-ban. Valójában ez a 9. ábrán látható berendezés kísérleti célokat szolgált, a „sorozatgyártás” azonban már a MOM-ban indult. Így a Vegyészet Múzeum két olyan készülékkel rendelkezik, amelyeknek páratlan tudomány- és ipartörténeti jelentősége van.

A derivatográf világsikere

A műszer megvalósítója és később – a Paulik testvérek részvételével – továbbfejlesztője a világhírű Magyar Optikai Művek

8. ábra. Derivatográf vázlata





9. ábra. Egyedi gyártású készülék



10. ábra. Derivatográf, 1970



11. ábra. Derivatográf, II. generáció

(1848–1995) volt. A MOM elődjét, a Kolozsvári Egyetemen működő Optikai Műhelyt 1848-ban *Süss Nándor* alapította. 1918-ban ennek utódjaként jött létre a Süss-féle Precíziós Mechanikai Rt. Budapesten. 1938 és 1995 között ebből alakult ki a Magyar Optikai Művek (MOM) és a MOM Kalibergyár (számos vidéki leányvállalattal). A gyárnak virágkorában, 1979-ben már 8000 alkalmazottja volt.

A derivatográfot 1964-ben vezették be a világcipiacra és 1995-ig, 31 év alatt 4000 készüléket exportáltak, valamint a magyar kutatóhálózatot és számos ipari laboratóriumot is ellátták a műszerrel. Közben két új műszergenerációt is fejlesztettek. A második generáció kváziizoterm módon működött, és gáztitriméert is lehetett hozzá illeszteni. Az utolsó generáció már mikroprocesszoros, és számítógépes értékelésre ad lehetőséget, saját fejlesztésű kiváló szoftverekkel (10., 11., 12. ábra).

A műszer hazánkban egyetemi tanszékek, akadémiai kutatóintézetek mellett az ipari fejlesztő és minőségvizsgáló laboratóriumok termoeanalitikai célra szinte kizárólagosan használták. Kiterjedt piaccal rendelkezett a Szovjetunióban, az akkori szocialista országokban, valamint Afrika és Ázsia számos országában. A világpiac jelentős átalakulása, valamint a magyar iparban bekövetkezett irányváltás oda vezetett, hogy először a MOM számos részlegét privatizálták, majd megszüntették, és 1995-re az egész struktúra fokozatosan felbomlott. A derivatográfgyártó részleg kiváló mérnök- és technikusgárdával rendelkezett. A belföldön és külföldön egyaránt még működő sok ezer műszer szervizelésére megalakult a *MOM Szerviz Kft.*, amelynek feladata lett a szervizszolgáltatáson kívül a szoftverfejlesztés és a laboratóriumi akkreditációs tevékenység is (a Budapest, XI. ker. Diószegi út 37-ben jelenleg is működő telephelyen).

A derivatográf alkalmazása

A derivatográfot világszerte és hazánkban is számos kutatási, ipari fejlesztési és minőség-ellenőrzési területen alkalmazzák. A kémiai analitikai és technológiai fejlesztéseket végző intézményekben, a kohászat számos területén, a cement-, zománc-, üveg-, fémvezető-, gumi- és műanyaggyártásban, valamint a gyógyszeriparban nélkülözhetetlen. Az orvostudományi kutatásokban is alkal-



12. ábra. Derivatográf, III. generáció

mazást nyert (vesekő-, epekövizsgálatok). A termoeanalitikai módszerek szilárd tüzelőanyagok vizsgálatára is alkalmasak. A műszer segítségével megválaszolhatók a műanyagok feldolgozásával és felhasználásával kapcsolatban gyakran felmerülő kérdések: például az anyagban hő hatására milyen átalakulások mennek végbe; hő vagy esetleg levegő együttes hatásával szemben mennyire ellenálló; az alkalmazott stabilizátorok mennyire hatásosak.

A gyógyszerporok tablettázhatóságának vizsgálatát, valamint a katalizátorok tulajdonságainak ellenőrzését szintén a termikus módszerek segítségével végezhetik.

A földtudományok szinte összes diszciplínájában, de főként az ásvány-kőzettan, geokémia, őslénytan anyagvizsgálatában előszeretettel alkalmazzák, mint gyors és olcsó mérési lehetőséget. Az összes geológiai nyersanyag kutatásának, kitermelésének és felhasználásának folyamatában fontos láncszemmé vált a derivatográfias mérés. Kiemelkedő jelentősége van az agyagásványok, a zeolitok, a bauxit, a cementipari nyersanyagok, a téglagyártás, a szénbányászat és a szénhidrogénipar területén. Ezt már a módszer- és műszerfejlesztés kezdetén felismerték a kutatók, így már az 50-es évek elejétől megkezdődött a kísérleti munka a földtani



13. ábra. Földváriné (Kliburszkyné) Vogl Mária



15. ábra. Földvári Mária



16. ábra. 50 éves a derivatográf

nyersanyagok termikus sajátosságainak sokoldalú megismerése céljából. A kutatást elsősorban a Magyar Állami Földtani Intézetben és az Eötvös Loránd Tudományegyetem Ásványtani és Kőzettan-geokémiai Tanszékén, valamint az 1955-ben alapított MTA Geokémiai Kutatólaboratóriumban végezték.

A Földtani Intézetben ennek a kutatásnak élén állt és rövid idő alatt jelentős sikereket ért el *Földváriné Vogl Mária* (1912–1996) (1972 után *Kliburszkyné Vogl Mária* néven) vegyész kutató, osztályvezető, később akadémikus (13. ábra), akinek legfőbb munkatársa ebben a munkában *Kliburszky Béla* (1909–1982) elektromérnök volt. Szinte minden jelentős földtani nyersanyagon végeztek próbaméréseket, így amikor a derivatográf az ipari üzemek laboratóriumaiba került, már jelentős ismeretekkel rendelkeztek a hazai nyersanyagok termikus tulajdonságairól [5]. Az ELTE TTK Kőzettan-geokémiai Tanszékén *Pécsiné Donáth Éva* adjunktus, később a földtudományok kandidátusa a hazai zeolitok kutatásában kezdte alkalmazni a módszert, kezdetben a Kliburszky Béla által megépített, házilagos mérőműszeren, majd a MOM-derivatográfon.

A geológus-, geofizikus- és vegyészhallgatók ásványtani kurzusaiban a termoanalitika, később a derivatográfia kötelező tananyagként szerepelt már az 50-es évek közepétől. Az első publikációk a magyar földtani irodalomban 1954-től jelentek meg és a későbbiekben szinte nem voltak olyan ásvány-kőzettani, alkalmazott földtani cikkek, amelyekben nem mutattak be derivatográfiai eredményeket. *Stefanovics Pál* kezdeményezésére a talajok

vizsgálatának korszerűsítése is ezen az analitikai lehetőségen alapult [6]. A talajok és az agyagásványok kutatásában azért volt különleges jelentősége a derivatográfiának, mert ezekben a képződményekben a kristályos anyag gyakran nanoméretben jelenik meg, aminek vizsgálatához a röntgenanalitika bevezetése előtt hazánkban nem állt rendelkezésre műszeres mérés, illetve még ma is idő- és költségigényes nagyműszeres analízis szükséges. Példaként bemutatunk egy szintén nanokristályos bauxitról készített, kiértékelt derivatogramot (14. ábra).

A Paulik testvérek a derivatográf földtudományi alkalmazásának fejlesztésében közvetlenül együttműködtek *Földvári Mária* geológussal, a Magyar Állami Földtani Intézet főosztályvezetőjével (15. ábra), aki több évtizeden át a hazai nyersanyagok vizsgálata során irányította a derivatográfiai kutatásokat. A MÁFI laboratóriumában a hazai szakemberek továbbképzése mellett számos külföldi szakember is megfordult tapasztalatszerzés céljából. A munkáról megjelent nagyszámú tanulmány mellett legújabbban egy kiváló összefoglaló kiadvány is napvilágot látott, amely tömören magában foglalja a derivatográf földtudományi alkalmazásának hazai tapasztalatait [7].

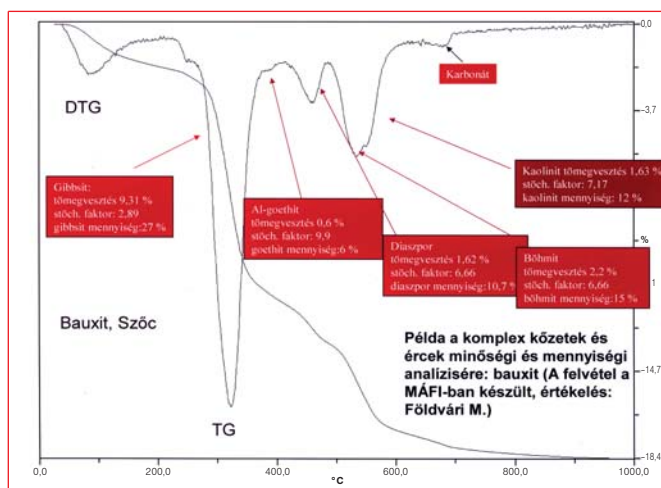
A bemutatott technikátörténeti feldolgozás egyrészt tanúsítja, hogy a magyar tudósok nehéz körülmények között, egyszerű eszközökkel is képesek voltak nemzetközileg is kimagasló eredmények elérésére és azok gyakorlati hasznosítására, másrészt a tudományos eredményekre alapozva a magyar ipar is alkalmas volt világszínvonalú termékek előállítására. A derivatográf jelentőségét méltatták a Termoanalitikai Bizottság 2004. évi ünnepi ülésén is, amikor megemlékeztek e fontos analitikai eszköz születésének ötvenedik évfordulójáról (16. ábra).

Szerzők köszönetet mondanak Dr. Paulik Jenőnek és Bessenyei Paulik Editnek a cikkhez küldött történeti értékű fényképfelvételekért, amelyekkel a szöveget anyagot kiegészíthettük.

IRODALOM

- [1] Paulik E, Paulik J, Erdely L., Készülék anyagok derivatív-termogravimetriás és egyidejű termogravimetriás vizsgálatára, Magyar Szabadalom, 144.548. sz., 1954.
- [2] Paulik E, Paulik J, Erdely L., Készülék differenciál-termikus elemzés, termogravimetriás és derivatív termogravimetriás vizsgálatok egyidejű elvégzésére és regisztrálására, Magyar Szabadalom, 145.369 sz., 1955.
- [3] Paulik Ferenc, Paulik Jenő, Termoanalízis, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1963.
- [4] Paulik E, Forty Years of Thermal Analysis in Hungary, Journal of Thermal Analysis (1996) 47, 659–671.
- [5] Földváriné Vogl M., A differenciáltermikus elemzés szerepe az ásványtanban és a földtani nyersanyagkutatásban, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1958.
- [6] Stefanovits Pál, A talajok humuszanyagai, Akadémiai Kiadó, 1958.
- [7] Földvári M., Handbook of thermogravimetric system of minerals and its use in geological practice, MÁFI Alkalmi Kiadvány, 2011, 213.

14. ábra. Bauxit derivatogramja





Tudományos előadások – mindenkinek

Alkímia ma

**Az anyagról mai szemmel, a régiek megszállottságával
Előadás-sorozat nem csak középiskolások számára**

(http://www.chem.elte.hu/pr/alkimia_ma.html)

Az előadásokat csütörtökönként, 17 órai kezdettel tartjuk az ELTE Pázmány Péter sétány 1/A épületében, a 0.83-as számú Eötvös-előadóban.

Az előadás-sorozat akkreditált, 30 órá, térítésmentes pedagógus-továbbképző programként is működik.

A 2012/2013-as tanév tervezett programja

Szeptember 27.	Kotschy András: Intelligens molekulákkal a rák ellen
Október 11.	Barkács Katalin: Az ivóvíztől a szennyvízig
Október 25.	Mátyus Edit: Molekulaszerkezet: kép és képzelet összjátéka
November 15.	Nemes László: Égi szerves kémiai laboratórium: a Szaturnusz Titán holdja
November 29.	Kovács Krisztina: Radioaktív elemek környezetünkben – természetes és mesterséges háttérsugárzás
December 13.	Császár Attila: Kémiai hálózatok
Január. 17.	Eke Zsuzsanna: Válogatás nélkül nem megy!
Január 31.	Rohonczy János: A hőmérsékleti skála rejtelmek
Február 14.	Szepes László: Szárnyaló molekulák – felületi rétegek
Február 28.	Bodor Andrea: Fehérjék mágnesekben
Március 14.	Riedel Miklós: Görgey, a vegyésztábornok
Április 4.	Zsély István: Amitől az autók gurulnak: a belső égésű motorok kémiaja
Április 18.	Mihucz Viktor: A borivás előnyei és hátrányai egy kromatográfus szemével

Az előadásokat *kísérleti bemutatók, kvíz* és egyéb meglepetések kísérik. A program még változhat. Minden második csütörtökön ugyanebben a teremben és időben rendezik meg a népszerű *Atomoktól a csillagokig* fizikai előadás-sorozatot.

A felsőoktatási intézmények sokat tesznek azért, hogy tudásukat, szellemi kapacitásukat környezetüknek, városuk lakóinak, a középiskolai pedagógusoknak, a fiataloknak átadják. Ezért rendszeresen szerveznek előadás-sorozatokat az érdeklődők szűkebb vagy tágabb körének. Csak példaképpen említhetem itt a Szegedi Tudományegyetemen már kilencedik szemesztere nagy sikerrel folyó, a Mindentudás Egyeteme mintájára szervezett Szabadegyetem-sorozatát, melyet a városi televízió is sugároz. A programok az egyetem honlapján visszamenőleg megnézhetők (www.u-szeged.hu/szabadegyetem). Hasonlóképpen sikeres a Debreceni Egyetem Kémiai Intézete által szervezett előadás-sorozat (www.chem.science.unideb.hu), mely az egyetemi (szak)hallgatóságon kívül szélesebb körű népszerűségnek örvend.

Még nem is beszéltem a középiskolák diákjainak indított, beiskolázást segítő szakmai előadás-sorozatokról, mint amilyen az SZTE Kémiai Tanszékcsoportja által évek óta szervezett *Vegyülj Velünk!* program.

Most az Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézetének 6. évébe lépő, igen színvonalas és népszerű *Alkímia ma* sorozatára hívjuk fel olvasóink figyelmét. Jó szívvel ajánljuk az előadásokat idősebbnek, fiatalnak – mindenkinek, aki a kémia érdekességei iránt vonzalmat érez. Nem fognak csalódní!

Kiss Tamás



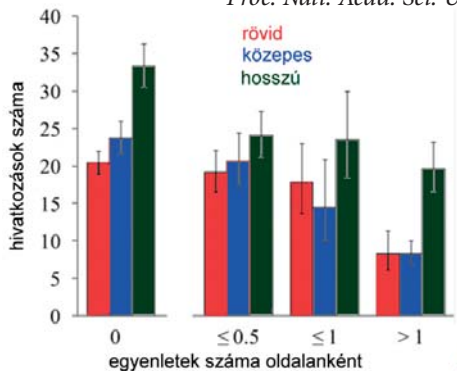


TÚL A KÉMIÁN

Egyenletes hivatkozások

Mielőtt Stephen Hawking híres, *Az idő rövid története* című könyvét elkezdte írni, egy jó barátja arra figyelmeztette, hogy a szövegben szereplő minden egyes egyenlet felére csökkenti a könyv olvasóinak a számát. Ezt a hatást tesztelte tudományos igényű két angol szakember a biológiai szakirodalomban: evolúciós és ökológiai témákban 650 darab, 1998-ban publikált cikket dolgoztak fel. A szövegekben szereplő egyenletek száma és a későbbi hivatkozások gyakorisága valóban negatívan korrelált: oldalankénti egy egyenlet átlagban 28%-kal csökkentette az idézettséget. Már-már közhely, hogy a tudomány nyelve a matematika, de úgy tűnik, a tudósok jelentős része nem kimondottan kedveli ezt a tényt. A szerzők tanácsa a cikkek íróinak az, hogy ha lehet, az egyenleteket függelékben közöljék, mert ennek semmiféle hatása nincs a munka idézettségére, illetve ha muszáj a szövegbe illeszteni, akkor sok szóbeli magyarázat kövesse. Stephen Hawking jól tette hát, hogy megfogadta a baráti tanácsot: a könyvében szereplő egyetlen egyenlet Einstein híres $E = mc^2$ képlete.

Proc. Natl. Acad. Sci. USA 109, 11735. (2012)



Tintás napelem



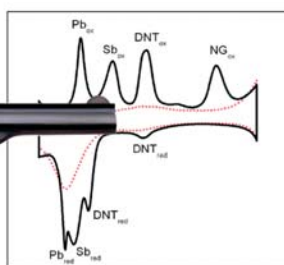
A festékekkel érzékenyített fotocellákat már régóta ígéretes energiaforrásként tartják számon. Ez különösen igaz lehet arra a kínai tudósok által kidolgozott technológiára, amelynél a golyóstollakban használt tintának központi szerepe van. Az alapötletet a papír újabb keletű elektronikai felhasználása adta: ha ilyesmi lehetséges, akkor miért ne lehetne az apró szénszemcséket tartalmazó tolltintából elektródot készíteni? Az újonnan elkészített napelem festékekkel érzékenyített TiO_2 -ot tartalmaz, s ennek elenelektrodja egy nagyjából 3 mikrométer vastagságú tintaréteg. Az első ilyen eszközök hatékonysága kb. 6%, ami meg egyezik a mintegy 1000-szer drágább platinaalapú napelemkével.

J. Mater. Chem. 22, 9639. (2012)



Elektrokémikus helyszínelők

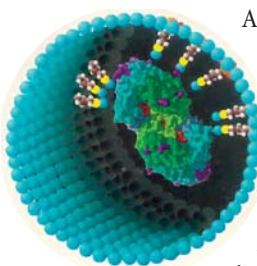
Amerikai tudósok a különféle lőfegyverek használatakor keletkező maradványok elemzésére dolgoztak ki új módszert. Ezzel a bűnügyi szakértők a korábbi eljárásokkal szemben mind a szervetlen (pl. antimon és ólom), mind a szerves (pl. nitroglicerín és dinitrotoluol) komponenseket képesek egyszerre elemezni, s a



teszt nemcsak laboratóriumban, hanem a helyszínen is elvégezhető. A módszer lényege a ciklikus voltammetria alkalmazása: ebből minőségi és mennyiségi információ egyaránt nyerhető, és megfelelő geometriájú elektródokkal a vizsgálat mintagigénye is mikrométerekig csökkenthető. Habár a módszer még nincs készen a gyakorlati felhasználásra, megfelelő validálás után akár a bűnügyi helyszínelők mindennapi eszköztárába is bekerülhet.

Analyst 137, 3265. (2012)

Felületi enzimkatalízis



A *Brevundimonas diminuta* proteobaktériumban megtalálható organofoszforhidroláz (OPH) enzim élő szervezetekben a nagyon erősen mérgező foszforalapú idegmérgek és növényvédőszer lebontására alkalmas. A közelmúltban amerikai tudósok ezt a biomolekulát ammóniumionokkal előfunckionalizált mezopórusos szilikagél felületéhez kötötték hozzá. A művelet célja az enzim egyébként viszonylag szűk optimális működési tartományának kiterjesztése volt, s a használt eljárás váratlanul nagy sikert hozott. A felülethez kötött enzim aktivitása kicsit meghaladta az oldott formáét, a hőstabilitás pedig nagymértékben javult: 65 °C-on még hosszabb idő alatt sem tapasztaltak jelentős bomlást.

Adv. Healthcare Mater. 1, 183. (2012)

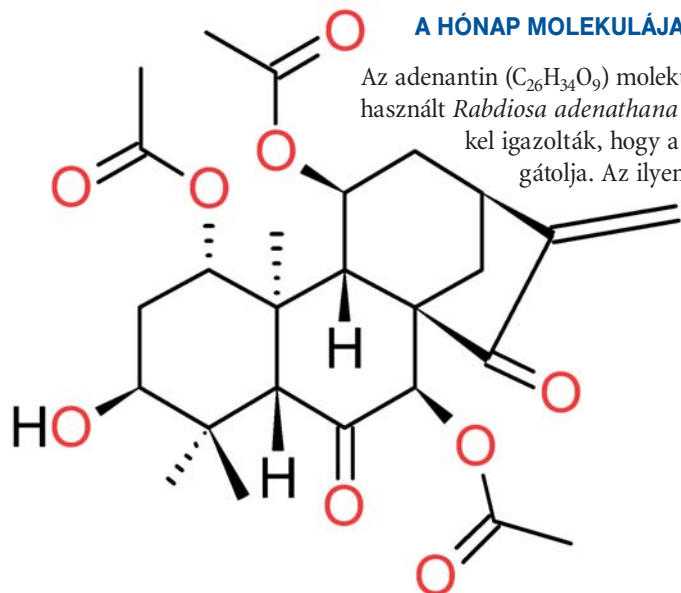
Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt
Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg@dragon.klte.hu.



A HÓNAP MOLEKULÁJA

Az adenantin ($C_{26}H_{34}O_9$) molekuláját először a hagyományos kínai gyógykészítmények alapanyagaként használt *Rabdirosa adenathana* növényből izolálták. Azt viszont már modern tudományos módszerekkel igazolták, hogy a vegyület leukémiás sejtekben két peroxidáz-fehérje működését is gátolja. Az ilyen módon megnövekedett sejten belüli H_2O_2 -koncentráció elősegíti a rákos sejtek ártalmatlanítását, így az adenantin gyógyszerek hatóanyaga is lehet.

Nat. Chem. Biol. 8, 486. (2012)



Papírsárgulás

A régi, eredetileg fehér színű papírok sárgulását a cellulóz oxidációja okozza. Egy nemrég megjelent munkában a látványt



okozó funkciók csoportokat is sikerült azonosítani. A papír tömegének több mint 90%-a cellulóz, amely jelentős részben kristályos. A tizenötödik századból származó francia és olasz papírmintákon végzett kísérletek összehasonlítása kvantummechanikai számításokkal azt mutatta, hogy a sárgulásban megnyilvánuló fényelnyelés fő oka az oxidáció során létrejövő, két karbonilcsoportot egymás mellett tartalmazó molekularészlet lehet.

Az eredmények alapján az is nyilvánvaló, hogy a papír ilyen öregedése elősegíthető a hőmérséklet és a páratartalom növelésével, vagyis a környezeti paraméterek megfelelő megválasztásával a folyamat akár lassítható is.

Phys. Rev. Lett. 108, 158301. (2012)



A gombák barlangja

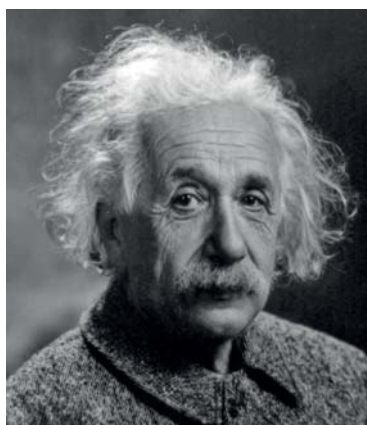
A barlangfestményeiről nevezetes francia Lascaux-barlangot 2001-ben mikrobiológiai támadás érte: fehér *Fusarium solani* gombák kezdtek elszaporodni benne. A probléma megoldására modern gombaölő szerek kezelését kísérelték meg elsősorban benzalkónium-kloriddal; ennek hatására a fehér gombák eltűntek ugyan, de a falakon új, nagyobb méretű, fekete színű gombatelepek jelentek meg. 2008-ban ebben egy új fajt fedeztek fel, amely a barlang után az *Ochroconis lascauxensis* nevet kapta. 2011-re azonban ismét megváltozott a kép: ekkorra a *Herpotrichiellaceae* családba tartozó fekete élesztőgombák vették át a vezető szerepet, s a telep biodiverzitása is jelentősen megnövekedett. Igen valószínű, hogy az új fajok megjelenéséhez és elterjedéséhez a gombaölő szerek használata is hozzájárult, így aztán a barlang értékeinek védelme sokkal összetettebb feladattá vált.

Environ. Sci. Technol. 46, 3762. (2012)

Látható patinásodás

Belga kutatók a rézfelületeken képződő patina egyik lényeges komponense, a $CuCl$ (kristálytani nevén nantokit) képződését valós időben követték szinkrotronsugárzás segítségével. A patinakristályokat úgy állították elő, hogy telített $CuCl_2$ -oldatot juttattak fémrézre; ez egy rézfelületek kezelésére használt házi trükk módosított változata. A patinaképződés gyakorlatilag független volt az oxigén jelenlététől. Azonban a reakció után a szokásos vizes mosás vörös színű kuprit (Cu_2O) és zöldes árnyalatú paratakamit ($Cu_2(OH)_3Cl$) keletkezését okozta, így az eredmények mindenki számára hasznosak lesznek, akik réztárgyaik látszólagos korát akarják megnövelni rövid idő alatt.

Anal. Chem. 84, 4866. (2012)



APRÓSÁG

Albert Einstein néhány újonnan megtalált, 1947-es keltezésű, Jacob Landaunak írt levele a Sotheby's árverésén 34 375 dollárért kelt el.





TUDOMÁNYOS ÉLET

14th International Conference on Organized Molecular Films (ICOMF)

Párizs, 2012. július 10–13.

Idén Párizsban rendezték meg a 14. International Conference on Organized Molecular Films (ICOMF) elnevezésű konferenciát a rendezett molekuláris filmekkel kapcsolatos kutatásokról. A konferencia interdiszciplináris témát ölel fel a nanoléptékű határfelületi filmekhez (önrendeződő filmek, Langmuir–Blodgett-technika), illetve alkalmazásaikhoz kapcsolódóan (pl. bioszenzorok, felületi kezelés, membránok és bioinspirált rendszerek). Az ezekhez kapcsolódó nanotudományi és nanotechnológiai aspektusok is szerves részét képezték a konferencia témájának. A konferencia egy szűkebb tudományterületre fókuszált, ezzel lehetőséget biztosítva az azonos területen dolgozó kutatók elmélyültebb szakmai tapasztalatcseréjére.



A konferencia helyszíne

A rendezvény szakmai színvonalát jelzi a nagyfokú érdeklődés: nagyjából 300 résztvevő volt a világ minden részéből (Európa, Amerika, Ázsia). A konferencián plenáris és számos szekcióelőadás mellett nagyszámú poszterelőadásnak is biztosítottak lehetőséget. Az előadások közül számomra legérdekesebb, legrelevánsabb munkák azok voltak, amelyekben a Langmuir-technikát alkalmazták különböző foszfolipidekből felépített modellmembránok létrehozására, azok jellemzésére különböző technikákkal, illetve fehérjékkel és nanorészecskéikkel való kölcsönhatásaik kimutatására, elemzésére.

Az MTA–SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoportjában Dékány Imre vezetésével kutatási témám a Langmuir- és Langmuir–Blodgett-technika alkalmazása biológiai membránok modellezésére. Ezzel kapcsolatos eredményeimet az „Interaction of biofunctionalized gold nanoparticles with model lipid membranes” című poszterelőadáson mutattam be.

Első alkalommal vehettem részt ezen a konferencián, ahol számos érdekes előadást hallgathattam meg nemzetközileg is elismert szakemberektől. Ezúton szeretném megköszönni az MKE támogatását, amellyel hozzájárult a konferencián való részvételemhez.

Ábrahám Nóra

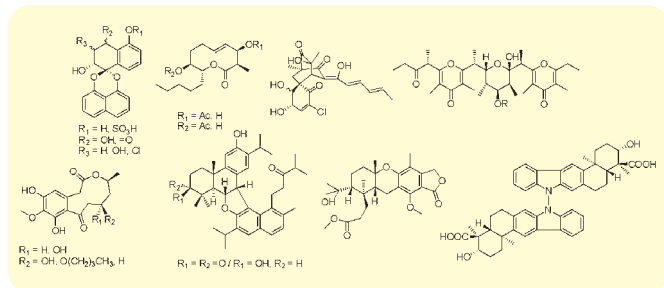
A Heterociklusos és Elemorganikus Kémiai Munkabizottság ülése

Balatonszemes, 2012. június 6–8.

Az MKE támogatásával részt vettem a Szerves és Biomolekuláris Kémiai Bizottság leglátogatottabb munkabizottsági ülésén, a Heterociklusos és Elemorganikus Kémiai Munkabizottság 2012. évi ülésén Balatonszemesen. A 3 napos előadás-sorozaton 39 előadás hangzott el, a résztvevők száma pedig 145 fő volt. Az előadók és a résztvevők képviselték Magyarország heterociklusos és elemorganikus kémiában érdekelt felsőoktatási intézményeit és gyógy-

szergyárait. Az előadások nagy része a szintetikus szerves kémia területéről került ki, de elhangzottak műszeres és elméleti előadások is.

Előadásom (Mándi Attila, Antus Sándor, Guo Yue-Wei, Ye Yang, Zhang Wen, Li Dehai, Proksch Peter, Kurtán Tibor: Természetes vegyületek sztereokémiai vizsgálata oldat- és szilárd fázisú ECD számítások segítségével) a címének megfelelően az ECD-spektroszkópia abszolút konfiguráció-meghatározásban történő felhasználását mutatta be, melynek során kitért néhány, az alkalmazás során előforduló problémára is. Bemutatta az oldat- és a



Az előadásban példaként bemutatott természetes származékok

szilárd módszer előnyeit és korlátait. Az előadásban elhangzott példák kínai és német kooperációban végzett tanulmányokból származtak [1–9].

IRODALOM

- [1] Y. S. Cai, T. Kurtán, Z. H. Miao, A. Mándi, I. Komáromi, H. L. Liu, J. Ding, Y. W. Guo, J. Org. Chem. (2011) 76, 1821.
- [2] S. Lu, T. Kurtán, G. Yang, P. Sun, A. Mándi, K. Krohn, S. Draeger, B. Schulz, Y. Yi, L. Li, W. Zhang, Eur. J. Org. Chem. (2011) 5452.
- [3] S. Lu, P. Sun, T. Li, T. Kurtán, A. Mándi, S. Antus, K. Krohn, S. Draeger, B. Schulz, Y. Yi, L. Li, W. Zhang, J. Org. Chem. (2011) 76, 9699.
- [4] D. Li, L. Chen, T. Zhu, T. Kurtán, A. Mándi, Z. Zhao, J. Li, Q. Gu, Tetrahedron (2011) 67, 7913.
- [5] J. R. Wang, M. Carbone, M. Gavagnin, A. Mándi, S. Antus, L. G. Yao, G. Cimino, T. Kurtán, Y. W. Guo, Eur. J. Org. Chem. (2012) 1107.
- [6] W. Ebrahim, A. H. Aly, A. Mándi, F. Totzke, M. H. G. Kubbutat, V. Wray, W. H. Lin, H. Dai, P. Proksch, T. Kurtán, A. Debbab, Eur. J. Org. Chem. (2012) 3476.
- [7] X. F. Hou, S. Yao, A. Mándi, T. Kurtán, C. P. Tang, C. Q. Ke, X. Q. Li, Y. Ye, Org. Lett. (2012) 14, 460.
- [8] Y. Zhou, A. Mándi, A. Debbab, V. Wray, B. Schulz, W. E. G. Müller, W. H. Lin, P. Proksch, T. Kurtán, A. H. Aly, Eur. J. Org. Chem. (2011) 6009.
- [9] Q. Zhang, A. Mándi, S. Li, Y. Chen, W. Zhang, X. Tian, H. Zhang, H. Li, W. Zhang, S. Zhang, J. Ju, T. Kurtán, C. Zhang, Eur. J. Org. Chem. (2012) 5256.

Mándi Attila

TUDOMÁNYOS ÉLET

Gyógyászat, anyagtudomány, építészet és művészet – a nanotechnológia kitör a laborok világából

A II. Virtuális Nanotechnológiai Poszter Konferenciát 2012. szeptember 10–14-én bonyolították le az idén ötödik születésnapját ünneplő NanoTudomány Nemzetközi Közössége (The International NanoScience Community) weboldalán. Az angol nyelvű posztere-

The International NanoScience Community
www.nanopaprika.eu
 "Spicy world of NanoScience"

ken közérthető formában mutatják be a kutatók a laboratóriumokban folyó

munka eredményeit, az iparba kikerült termékeket, módszereket. A kémiához, fizikához és biológiához köthető kísérletek mellett területekre kerül például az építészet és a művészet is.

Angol, maláj és osztrák szakemberektől hallhatunk az áttetsző élőlények tulajdonságainak felhasználásáról az építkezések terén [1]. A globális felmelegedés és a nanoépítészet összefüggéseibe egyiptomi mérnökök vezetnek be [2].



NANOPAPRIKA-POSTER 2012

2nd Virtual Nanotechnology Poster Conference
 10–14 September 2012

A grafén és a szénnanocsövek különleges tulajdonságairól svéd, ukrán [3] és indiai [4] kutatásokból tájékozódhatunk. A módosított felületű nanocsövek biokompatibilitásáról hazai szakemberek munkájából szerezhetünk ismereteket [5]. A számos külföldi résztvevő mellett magyarországi kémikusok és fizikusok számolnak be a szenzorok [6], a kvantumkommunikáció [7] és az átlátszó felületi rétegek optikai tulajdonságainak vizsgálatáról [8].

A gyógyászat terén iráni kutatóktól megtudhatjuk, hogyan vehetik fel az aranynanorészecskék a harcot a rákkal [9]. A színek varázslatos művészi világába kalauzsolnak el bécsi művésznővendékek, akik a nanotudományok segítségével igyekeznek új, eddig kiaknázatlan dimenziókra rátalálni [10].

További negyven poszter a tudomány legkülönbözőbb alfejezeteiből közvetlenül elérhető a tudományos közösségi hálózat nyitó oldaláról (www.nanopaprika.eu).

Az egyes poszterek linkjei:

- [1] Nanoscale functionalities in transparent animals inspiring novel approaches in architecture – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-35>
- [2] Nanoarchitecture and global warming – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-41>
- [3] Quantum and dimensional effects in carbon nanomaterials – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-13>
- [4] Synthesis and characterisation of TiO₂/graphene nanocomposite – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-32>
- [5] Functionalization of Carbon Nanotubes does not necessarily improve their biocompatibility – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-07>
- [6] The preparation and characterization of different functional headgroup containing alkylthiol stabilized gold nanoparticles and investigations for possible applications in the sensorics – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-49>
- [7] An Analysis of the Secure Key Distribution in Space Based Quantum Communication – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-10>
- [8] Spectroscopic Ellipsometry measurements on transparent substrates – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-44>
- [9] Calculating Extinction of Gold Nanorods and Nanosphere in Cancer Nanotechnology by Discrete Dipole Approximation (DDA) – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-09>
- [10] Bionic-Art Structure.makes.Colors – <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2012/page/p12-43>

Paszternák András

A környezetvédelmi mérés és mintavétel aktuális kérdései

Budapest, 2012. május 22.

A Környezetvédelmi Szolgáltatók és Gyártók Szövetségének (KSZGYSZ) Mérés, Mintavétel Munkacsoportja nagy sikerű konferenciát tartott a környezetvédelmi mintavételek és mérések témakörben. A konferencia célja volt, hogy mérés technikai kérdéseket a gyakorlatban történő alkalmazás/alkalmazhatóság szempontjából világítson meg, közérthető módon. A felmerülő kérdések megvitatásába a laboratóriumi szakemberek mellett a szervezők bevonták az érintett jogalkotókat, a környezetvédelmi hatóságok szakembereit és a környezetvédelmi analitikai szakmával kapcsolatban álló más szakterületek képviselőit is. A konferencia kiemelt célja volt, hogy kapcsolatot teremtsen a környezetvédelmi célú mintavételeket és vizsgálatokat végzők, a környezetvédelmi célú vizsgálatok eredményeit felhasználók és a szakterületre vonatkozó jogszabályi háttér megalkotói-gondozói között, új mintavételi, vizsgálati innovációk kerüljenek bemutatásra, hangsúlyozottan a gyakorlati alkalmazás szempontjából.

A több mint 200 fő részvételével lezajlott, a Magyar Mérnöki Kamara által akkreditált konferencia egyrészt plenáris előadások, másrészt szekció-előadások keretében folytatta munkáját, a programot kiállítások tették teljessé. A programot az alábbiakban összegezzük.

Plenáris előadások: Kovács Péter (képviselőként Kerekesné Steindl Zsuzsanna), Vidékfejlesztési Minisztérium: Bevezető előadás a környezetvédelmi mérésekről; Bibók Zsuzsanna, szakértő: A levegőtisztaság-védelmi mérésekkel kapcsolatos szabályok aktuális változásai; Ágoston Csaba, KVI-Plusz Kft.: A hulladék alapjellemzés során nyert vizsgálati eredmények értelmezési kérdései; Gondi Ferenc, BGT Hungária Kft.: Szennyezett talajok felmérése, értékelése; Bálint Mária, Bálint Analitika Kft.: A felszín alatti víz mintavételének problémái; Palotai Zoltán, Wessling Hungary Kft.: Felszíni vizek üledékének és altalajának zavartalan mintavétele vízkizárással; a minták különböző Hg-formáinak vizsgálata.

A „Hulladék és víz” szekció előadásai: Skriba Tamás, Recylab Hungary Kft.: Műanyag hulladékok mintavétele és vizsgálata; Deák Attila, Bakos Vince, Szentgyörgyi Péter, BKSZT Kft.: A mintavétel, az online mérések és a laboratóriumi analízis egymásra épülő rendszere a Budapesti Központi Szennyvíztisztító Telepen; Ritz Ferenc, Richter Nyrt.: Veszélyes hulladékok minősítése – in memoriam 102/1996; Nagy László, Aktivit Kft.: A víz- és hulladék-analitikai mérések új eszközei: a helyszíni mobil eszközöktől a felügyelet nélkül működő automata víz- és hulladék-analizátorokig; Sebestyén Ágnes, Borsányi Mátyás, OKI Vízbiztonsági Osztály: A magyarországi csapvizek ólomtartalmának felmérésére szolgáló monitoring rendszer kidolgozása; Kórhé Orsolya, UNICAM Magyarország Kft.: Célvagyületek és ismeretlen szennyezők ultraérzékenységű kimutatása környezeti vízmintákból on-line minta-előkészítővel kapcsolt LC/MS rendszerekkel; Bozsai Gábor, BPS Kft.: Új alternatíva a vizek korszerű elemanalitikai vizsgálatára: nagy felbontású, folytonos fényforrású AAS.

A „Levegőtisztaság-védelmi mérések” szekció előadásai: Pusztai Krisztina, Béres András, KVI-PLUSZ Kft.: A levegőtisztaság-védelem aktuális kérdései, a levegő terheltségi szint vizsgálata, a zavaró környezeti szaghatás értékelése; Filep Zoltán, Wessling Hungary Kft.: A munkahelyektől az óvodákig: korszerű mintavételi és vizsgálati módszerek a bennünket körülvevő leve-



gő minőségének vizsgálatára; Márton László, Hyo-Taek Chon, Manfred S., MTA ATK Talajtani és Agrokémiai Kutatóintézet: A levegőből kiülepedett útmenti porok mintavételének és mérésének tapasztalatai; Posta József, Tóth Imre, Baranyai Edina, Nagy Dávid, Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék: Erőművi porminták kémiai és morfológiai vizsgálata; Kmezc Ildikó, Kőmíves József, Devecser Eszter, Sándor Tamás, BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék: Telepített emissziómérő rendszerek kalibrálásának tapasztalatai; Iga Benedek, Encotech Kft.: Alap levegőterheltség és annak meghatározása mérésével, ill. modellezéssel; Imre Kornélia, MTA PE Levegőkémiai Kutatócsoport: A vízfelvétel és -visszatartás (histerézis) szerepe a PM10 szabványos mérésében.

Kiállítók voltak: Aktivit Kft., Blautech Kft., BPS Kft., dr. Wéber Consulting Kft., KVI-PLUSZ Kft., MESSER Hungarogáz Kft., UNICAM Kft.

Az előadók által rendelkezésre bocsátott előadási anyagok megtalálhatók a Környezetvédelmi Szolgáltatók és Gyártók Szövetségének honlapján (www.kszgyysz.hu) mind a „Rendezvényeink”, mind az „Előadások” címek alatt.

Buzás Ilona

OKTATÁS

Dr. Kónya Józsefné Emlékpályázat

A Magyar Kémikusok Egyesületének Hajdú-Bihar Megyei Szervezete és a Debrecen Megyei Jogú Város Polgármesteri Hivatal Oktatási Osztálya által immár 18. alkalommal megszervezett kémiai pályázat eredményhirdetésére 2012. június 14-én került sor. A pályázatnak negyedik éve Dr. Kónya Józsefné Emlékpályázat a neve. A szervezők ezzel tisztelegnek az öt évvel ezelőtt elhunyt kiváló debreceni kémiatanár emlékének.

A pályázati felhívásra 24 általános iskolai és 28 középiskolai pályamű érkezett, amelyeket egyetemi oktatókból és ipari szakemberekből álló zsűri értékelt. A legjobb dolgozatok szerzőit és

felkészítő tanáraikat ünnepélyes díjkiosztáson jutalmazták a debreceni MTESZ Új Technika Házában. A pályázatot anyagilag támogatta a Magyar Kémikusok Egyesülete, a Teva Gyógyszergyár Zrt., az AB Hungária Kft., Dr. Kónya Józsefné családja és volt tanítványai.

A pályaművekben feldolgozták a regionális vegyi (üzemi és kutatóhelyi) laborok kiemelkedő és példaképpül szolgáló tudósainak tevékenységét, kémiai és energetikai érdekességeket boncolgattak, aktuális, fiatalokat érdeklő kémiai témákról írtak. Nem utolsósorban említendő, hogy a pályázók megkísérelték ecsetelni, miért is szeretik a kémiát.

Kiemelt I. díjban részesült az általános iskolások között Csajkos Norbert (Hunyadi János Általános Iskola, Debrecen) Irinyi Jánosról és a gyufáról szóló dolgozata, valamint a középiskolás kategóriában Bujdosó Réka (DE Kossuth Lajos Gyakorló Gimnáziuma) dolgozata, amelyben a szerző arról számol be, hogy miként tartott óvodásoknak kémiai kísérletekkel kapcsolatos foglalkozást. A legjobb dolgozatokat szakmai folyóiratokban fogják megjelentetni.

Díjat kaptak még az általános iskolások kategóriájában: Handari Dániel (Ady Endre Gimnázium), Ecsedi Zoárd (Ibolya utcai Általános Iskola), Hajdu Sándor Bence (Hunyadi János Általános Iskola), Sebők Vivien és Takács Gréta (Thököly Imre Kéttannyelvű Általános Iskola, Hajdúszoboszló), Kovács Sára (Irinyi János Általános Iskola és Városi Könyvtár, Létavértes); a középiskolások kategóriájában: Új Eszter Dorottya, Barta Réka, Montlika Leila és Gyermán Anna (DE Kossuth Lajos Gyakorló Gimnáziuma), Kalászi Marianna és Hotzi Judit (Tóth Árpád Gimnázium), Mitala Nikolett (DRK Dóczy Gimnáziuma), valamint Hajagos Emese (Hőgyes Endre Gimnázium, Hajdúszoboszló).

18 pályamű szerzői részesültek dicséretben. 12 felkészítő tanár kapta meg a Teva Gyógyszergyár Zrt. ajándécsomagját.

Zékány András

HÍREK AZ IPARBÓL

Fukusimai tanulságok

Bécsben befejeződött a második soron kívüli felülvizsgálati értekezlet

Bécsben a Nukleáris Biztonsági Egyezmény második soron kívüli felülvizsgálati konferenciáján az egyezményben részt vevő 60 tagállam képviselői a fukusimai baleset tanulságairól tanácskoztak 2012. augusztus 27. és 31. között. (Az egyezményt az 1986-os csernobili katasztrófát követően hozták létre és 1996-ban lépett életbe.)

A Nemzetközi Atomenergia Ügynökség tavaly szeptemberben akcióttervet fogadott el a nukleáris biztonság javításáról. Yukiya Amano, a NAÜ főigazgatója a konferencián egyrészt méltatta az eddig elért eredményeket, másrészt megemlítette: „sok még a tennivaló és éberségünk nem lankadhat”.

A konferencián a részes országok jelentései alapján áttekintették, hogy milyen intézkedéseket tettek a fukusimai atomerőmű-baleset tanulságainak elemzése, a tanulságok hasznosítása terén. Hat szakterületen (természeti hatások, tervezési kérdések, súlyos balesetek kezelése, baleset-elhárítási felkészülés, nemzeti szervezetek, nemzetközi együttműködés) részletesen elemezték a tagállamok munkáját. Ajánlásokat fogadtak el az atomerőművek biztonságának további javítása érdekében. A 60 tagországot kép-

Sikeres diákok – sikeres tanárok





viselő 300 szakértő ajánlásokat adott arra vonatkozóan is, hogy az egyezmény keretében 2014-ben tartandó következő konferen-

cián milyen egységes elvek mentén számoljanak be a résztvevők a fukusimai esemény tapasztalatainak további hasznosításáról.

A konferencia nem értékelte és nem hasonlította össze külön-külön az egyes országokat, de megállapítható – akár csak az Európai Unió stressz-

tesztjét követően –, hogy a Paksi Atomerőmű állapota nem igényel azonnali hatósági beavatkozást, a tervezett javító intézkedések összhangban vannak a nemzetközi gyakorlattal.

A konferencia résztvevői egyetértettek abban, hogy a biztonságot érintő műszaki fejlesztések végrehajtása mellett a nukleáris biztonsági hatóságok működését is felül kell vizsgálni, biztosítani kell függetlenségüket és növelni kell kompetenciájukat a szükséges emberi és anyagi erőforrások révén.

A rendezvény összefoglaló jelentése a Nemzetközi Atomenergia Ügynökség és az OAH honlapján elérhető (<http://www.iaea.org/newscenter/news/2012/cnsconcludes.html>).

Gyógyszeripari körkép

Gyógyszerkutatás új alapokon a Richternél

A kismolekulás gyógyszerkutatás válságáról szokás manapság beszélni, ha az új gyógyszerek kerülnek szóba.

Ennek a válságnak a markáns megnyilvánulása az, hogy a gyógyszerkutatással foglalkozó vállalatok a kutatói kapacitásokat drasztikusan csökkentik, vagy akár meg is szüntetik. Valóban, a horrorális költségek árán a klinikai fázisba jutott gyógyszerjelöltek túlnyomó része soha nem lesz gyógyszer, mivel a humán vizsgálatokban vagy nem hatásosak, vagy nem eléggé hatásosak, illetve elfogadhatatlan mellékhatások jelentkeznek. A követelmények egy modern gyógyszerrel szemben igen magas mércét állítanak. Manapság már szakmai közhellyé vált, hogy a kísérleti állatokon végzett kutatások eredményeinek a humán kutatásban, az emberen történő alkalmazhatóságban jelentős korlátai vannak. Általában a hagyományos állat- és betegségmodellek nagyon kevésbé alkalmasak arra, hogy a kapott eredményeket emberre alkalmazzuk. A preklinikai kutatási eredményeknek a klinikai gyakorlatban használható készítménnyé való átfordítása tehát igen rossz hatásokkal lehetséges. Ennek a problémának a kezelésére fogalmazódott meg egy új kutatási irány, a *transzlációs medicina*. Ez a tudományág sok új eszközt és megközelítést tartalmaz. Célja pedig az, hogy a biológiai kutatási eredményeket emberben hasznosítható tudássá alakítsa.

Ehhez a felismeréshez csatlakozva a Richter Gedeon Nyrt. 2009 tavaszán létrehozta a Preklinikai Képző és Metabonómiai Biomarker Centrumot azzal a céllal, hogy a kutatási eredmények emberben történő hasznosíthatóságát elősegítse. A cent-

rum létrehozása közel 25%-os EU-forrás bevonásával, sikeres Új Magyarország Fejlesztési Terv pályázat révén vált lehetségessé

A képző eljárásokat mint humán diagnosztikus eszközöket ismeri a nagyközönség. Azt azonban kevesen tudják, hogy a képző eszközök egyúttal a transzlációs medicina eszközei is, amióta olyan berendezések is léteznek, amelyekben állatok, kisállatok vizsgálhatók. A képző eljárások közül kiemelkedő jelentőségű a környezetbarát MRI, amely nem alkalmaz radioaktív molekulákat a képző feladatokhoz. Egy ilyen kisállat-MRI berendezés került beszerzésre és kiépítésre a Richterben végzett kutatás eredményeként. A nagy értékű készülék és a megfelelő műszaki háttér az Új Magyarország Fejlesztési Terv (mai nevén Új Széchenyi Terv) pályázat révén vált lehetségessé. A humán és a kisállat-képző kapcsolata révén a gyógyszerjelöltek hatásosságának korai markereit lehetséges mérni, ami jelentősen csök-

kenti a bizonytalanságot. A 9,4 tesla erősségű berendezést a Richter Gedeon Nyrt. a Varian cégtől (most már Agilent) szerezte be. A készülék alkalmas arra is, hogy élő állat központi idegrendszerében funkcionális méréseket végezzenek anélkül, hogy az állatot invazív módon kezelni kelljen. Ilyen berendezés legközelebb a londoni King's College-ban, a stockholmi Karolinska egyetemen és a szingapúri biomarker központban működik.

A funkcionális MRI által nyert eredmények egyrészt a napi farmakológiai munka döntéseit teszik megalapozottabbá, másrészt pedig alkalmasak arra,

9,4 tesla kisállat-MRI berendezés



hogy korai képző biomarkereket azonosítsanak, amelyek aztán a humán vizsgálatok igen korai szakaszában bizonyíthatják egy-egy gyógyszerjelölt hatásosságát.

A biomarker-kutatás és a transzlációs medicina egyik sajátos ága a *metabonómia*. Az élő szervezetekben az anyagcsere során keletkező kismolekulákat, végtermékeket vizsgálja nagyműszeres eljárásokkal. A metabonómia – a kismolekulák összessége – jellegzetes változásokat mutat betegségekben, gyógyszeres kezelés hatására vagy környezeti változásokra. Ezért kiválóan alkalmas a gyógyszerjelöltek hatásosságának jelzésére is. A metabonómiai mérések első számú eszköze a tömegspektográf, amely drága berendezés, és a működtetése, valamint az eredmények értelmezése speciális szaktudást igényel. A pályázat keretein belül két LC-MS folyadékkromatográf-tömegspektográfot vásárolt a gyár. Az összes tervezett berendezést sikerült beszerezni és a hozzájuk kapcsolódó szakmai tevékenységet a Richterben végzett kutatások során magas szinten megvalósítani. (A Gazdasági Rádió nyomán)

Nagyot ugrott a Richter profitja

Az egy évvel korábbinál majdnem 30 százalékkal magasabb adózott eredményt ért el a Richter a második negyedévben – derül ki a 2012. augusztus 2-án nyilvánosságra hozott gyorsjelentésből. Az év első felében ennél is impozánsabb volt a növekedés, hiszen 40 százalékkal szerepelt jobban a gyógyszergyártó, mint a tavalyi év hasonló időszakában.



Összesen 84 milliárd forintos árbevételt ért el a második negyedévben a Richter, ez 11,9 százalékkal volt magasabb a tavalyi év hasonló időszakában tapasztalt forgalomnál. Ráadásul a bevétel kicsivel meghaladta az előző negyedév adatát is, hiszen január és március között még 82 milliárd forint volt a társaság bevétele. Az év első hat hónapjában összességében tehát 166 milliárd forint volt a Richter bevétele, ez 13,8 százalékkal volt magasabb a tavalyinál. Európában mérve már nem ilyen impozáns a szám, az 562,4 millió eurós bevétel 3,7 százalékkal haladta meg a tavalyi év első felének adatát. A fenti adatok jól jelzik, mennyit segített a gyógyszercéznek a gyengébb forint az idei év első felében.

Az árbevétel megoszlását tekintve az látszik, hogy Magyarországon és az Egyesült Államokban esett vissza a Richter forgalma, a többi piacon növekedés volt tapasztalható. Itthon a kormány gyógyszerkasszáát érintő reformjai (gyógyszármogatások csökkentése, a gyártói befizetések emelése, vaklicit bevezetése) miatt forintban számolva 10,8 százalékkal, euróban számolva pedig 18,7 százalékkal csökkent a forgalom. Az Egyesült Államokban forintban 21,5 százalékos, euróban pedig 28,5 százalékos volt a visszaesés. Azonban ez kevésbé volt meglepő, hiszen egy korábbi profitmegosztási szerződés miatt évek óta egyre csökken a cég amerikai forgalma.

A legjobb teljesítményt a FÁK-országokban mutatta fel az első félévben a Richter, ezekben az országokban a tapasztalt 25,7 százalékos bővülés elsősorban az ukrán piac 46,2 százalékos növekedésének volt köszönhető, míg az egyéb FÁK-országokban ennél is nagyobb mértékben, 53,1 százalékkal nőtt a forgalom. Az Európai Unióban 16,6 százalékos volt a gyógyszer cég forgalombővülése, ehhez a legnagyobb mértékben az EU kilenc új tagállama járult hozzá, melyekben 22,2 százalékkal több bevételt realizált a Richter, mint a tavalyi első félévben.

A fenti adatoknak köszönhetően az üzleti tevékenység eredménye 21,8 százalékkal emelkedett a magyar gyógyszergyártónál, így 28,5 milliárd forintot tett ki fél év alatt. Emellett a pénzügyi eredmény is jelentős javulást mutatott, hiszen a tavalyi első hat hónap 1,65 milliárd forintos vesztesége után 743 millió forintos nyereséget realizált a vállalat ezen a soron. Így az adózás előtti eredmény 29,7 milliárd forint volt a tavalyi 21,8 milliárd után, míg az adózott eredmény soron 28,1 milliárdos profit mutatkozik az év első felében.

Ha csak a második negyedévet vizsgáljuk az eredményesség szempontjából, akkor a 11,4 milliárd forintos profit ugyan 33,7 százalékkal magasabb volt a tavalyinál, viszont jelentősen elmaradt az előző negyedév 17,8 milliárd forintos nyereségétől. Ez nagyrészt a pénzügyi műveletek eredményének volt köszönhető, hiszen az első negyedév több mint 2,1 milliárd forintos pénzügyi nyeresége 1,4 milliárdos mínuszba fordult át a következő három hónapban. A kettő közti 3,5 milliárdos különbség pedig nagyrészt indokolja a profit bő ötmilliárd forintos csökkenését. Emellett az értékesítés és marketing költségek több mint 20 százalékos növekedése rontotta az eredményt, a bő négy milliárd forintos növekedés ezen a soron jórészt a tavaly megvett PregLem-portfóliónak volt köszönhető, mely jelentős orvoslátogatói hálózat kiépítését igényelte Nyugat-Európában. (A Menedzsment Fórum.hu nyomán)

Bogsch Erik: „A hazai piacon soha nem lehet feladni”

Sosem látott visszaesést szenvedett el a magyar piacon a Richter az idei év első felében, ezzel a harmadikról a hatodik helyre esett vissza piaci részesedése alapján – hangzott el a cég a 2012. augusztus 2-i sajtótájékoztatóján. A szakember kiemelte: nem meg-

oldás, ha a kieső bevételeket csak más piacokról pótolják, ugyanis egy cég soha nem adhatja fel a hazai piacát.

„Talán a számokon még annyira nem érződik, de semmilyen iparág nem lehet mentes azoktól a problémáktól, melyek a világ-gazdaságot jellemzik, és a közeljövőben várhatóan nem is fognak megoldódni” – kezdte borús hangulatban a Richter augusztus 2-i sajtótájékoztatóját Bogsch Erik, a társaság elnök-vezérigazgatója.

A szakember szerint most sokkal nagyobbak a bizonytalanságok, mint a korábbi években voltak. „Minden országban átvisszik a megszorításokat az egészségügyre, valamilyen módszerekkel próbálják lefelé nyomni az árakat vagy csökkenteni a támogatásokat. Emellett az új termékek befogadása sokkal lassabban és nehezebben megy, ami veszélybe sodorhatja a K+F költségek megtérülését” – vázolta fel Bogsch Erik.

A magyar piacon forintban 11 százalékkal, euróban pedig 18 százalékkal esett vissza a Richter bevétele az év első felében. „Erre még nem volt példa, hogy a cég szerepe ilyen mértékben visszaessen, hiszen a piaci részesedésünk a tavalyi első félévhez képest 5,8 százalékról 5,2 százalékra esett vissza, miközben a versenytársak egy része növelte részesedését, így a harmadikról az



ötödik helyre csúsztunk vissza a hazai piaci részesedést illetően” – mondta a gyógyszer cég elnök-vezérigazgatója. Szerinte abszurd dolog, hogy miközben néhány cég árbevétele csökken, mások akár 20 százalékos növekedést is el tudnak érni.

A problémákat látva adódik a kérdés, hogy a magyar piac visszaesését nem próbálja-e más piacokról pótolni a Richter. Ezzel kapcsolatban Bogsch elmondta: egyaránt céljuk a hazai piaci jelenlét visszaszerzése, illetve a külföldi piacokon realizált bevétel növelése. „Egy cég soha nem adhatja fel a hazai piacát” – jelentette ki ezzel kapcsolatban a cégvezető.

A Richter vezetése arra számított, hogy az év második felében a magyar piacon gyorsul majd a bevétel visszaesése, forintban számolva az első félév 11 százalékos csökkenése után éves szinten 15–20 százalékos lehet a mínusz, míg euróban számolva ez akár a 20 százalékot is meghaladhatja.

A kormányzati intézkedések, elsősorban a vaklicit bevezetése miatt az első félévben hat terméket vont ki Magyarországról a Richter, ez összesen egymilliárd forintos bevételkiesést jelent évente – hangzott el a sajtótájékoztatón. Bogsch Erik kiemelte: más országokban is vannak megszorítások a gyógyszerkasszában, de ilyen mértékű sehol nincs, mint itthon. „Eljutottunk arra a pontra, hogy már az ellátás biztonsága kerül veszélybe” – véli.

Az év elején a magyar piacot illetően 5–6 milliárd forintos bevételecsökkenést jelzett előre a Richter-menedzsment, Bogsch Erik szerint ez várhatóan meg is fog valósulni.

Az első félévben euróban számolva 3,7 százalékos bevétel-növekedést ért el a Richter, azonban a kedvező részadatok ellenére a menedzsment nem módosította év eleji előrejelzését, mely szerint az egész évben stagnálhat az euróban mért árbevétel.

Az év első felében egyértelműen az EU- és a FÁK-országok voltak a húzóerők az árbevételről. Az üzleti eredmény hat hónap alatt növekedett, de ebben jelentős mérföldkő-bevételek és árfolyamhatás is szerepet játszott. A cég értékesítési- és marketingköltségei jelentősen, 20 százalékkal növekedtek, és a teljes bevétel 20 százalékat tették ki, ehhez hozzájárult a nyugat-európai értékesítési hálózat kiépítése és az Esmya bevezetése.



Az első félévben Ukrajnában dollárban számolva 26 százalékkal nőtt a Richter bevétele, de ehhez jelentős előszállítások is hozzájárultak. A többi FÁK-ország is jól teljesített, csak Fehéroroszországban nem nőtt a cég bevétele. *(A Menedzsment Fórum nyomán)*

Az Egis várakozásai

Az Egis Gyógyszergyár a következő üzleti évében – változatlan árfolyamokat feltételezve – 4–6 százalékos forgalombővülést vár, míg a szeptember végén záruló idei üzleti évben 3–5 százalékos, forintban mért növekedéssel számol.

A hazai piacon az idei 8–10 százalékos csökkenés után jövőre is 5–10 százalékos lehet a visszaesés – mondta Poroszlai Csaba, a cég gazdasági igazgatója budapesti sajtótájékoztatóján. Hozzátette: a FÁK-országokban az idei 6–8 százalékos várható növekedés után jövőre még nagyobb, 8–12 százalékos lehet a bővülés, euróban számolva. Ezen belül az orosz piaci forgalom a mostani üzleti évben 5–7 százalékkal, a következőben 8–12 százalékkal emelkedhet.

Kelet-Európában az idén várt 10 százalékos csökkenés után a következő üzleti évben már 3–6 százalék közötti növekedést vár a társaság. A gazdasági igazgató a harmadik negyedév – az április–június közötti időszak – eredményeit ismertetve kiemelte, hogy az Egis árbevételének emelkedését az orosz és FÁK-piaci forgalom növekedése húzta, ami kompenzálta a hazai piac forgalmának csökkenését.



A magyar piaci helyzetet „drámainak” nevezte, kifejtve, hogy az egész hazai gyógyszerpiac szűkül. Úgy vélte, a gyógyszerpiaci intézkedések különösen a generikus gyártókat, így a hazai szereplőket sújtják. Megemlítette, hogy a tavaly ősszel bevezetett új támogatási szabályozás, az úgynevezett vaklicit következtében az Egis három terméke veszítette el a tb-támogatást, amelyek együttes éves forgalma 1,2 milliárd forintot tesz ki.

Elmondta, a kelet-európai kivitel tovább szűkült a harmadik negyedévben, de az előző negyedévekhez képest lassult a csökkenés üteme. E térségben a lengyel és a szlovák forgalom mutat csökkenést, a többi országba viszont nő a kivitel.

Az egyéb országokba irányuló gyógyszer- és hatóanyag-kivitel csökkenését átmenetinek és nem trendszerűnek tartja a cégvezető. Ebben a relációban az idén összességében nulla és plusz 5 százalék közötti forgalomemelkedésre számít az Egis. A hatóanyag-kivitel a következő üzleti évben várhatóan nulla és 5 százalék között bővül, míg a kész gyógyszerek kivitele 5–10 százalékkal emelkedhet.

Az Egis Gyógyszergyár a tavaly októberben kezdődött üzleti éve első kilenc hónapjában 98,57 milliárd forint konszolidált árbevételt és 16,89 milliárd forint adózott eredményt ért el, a bevétel 2,8 százalékkal, a profit 46,6 százalékkal nőtt az egy évvel korábbihoz képest. *(A ProfitLine nyomán)*

Duplázott az Egis a harmadik pénzügyi negyedévben

Az Egis Gyógyszergyár 5,11 milliárd forint konszolidált adózott eredményt ért el üzleti éve harmadik negyedévében – április–júniusban –, ez több mint duplája az előző év azonos időszakában elért 2,31 milliárd forintos profitnak – közölte a társaság 2012. augusztus 6-án a Budapesti Értéktőzsde honlapján.

A negyedévi 34,67 milliárd forint árbevétel 7,1 százalékkal haladja meg az egy évvel korábbi bázist. Az elemzők 5,17 milliárd forint negyedéves profitot és 34,08 milliárd forint árbevételt vártak. A nemzetközi számviteli sztenderdek (IFRS) alapján készült tőzsdei jelentés szerint a 2011. október 1-jén indult üzleti év első kilenc hónapjában 16,89 milliárd forint volt a társaság adózott eredménye, 46,6 százalékkal több a bázisidőszakinál. Az árbevétel ebben az időszakban 98,57 milliárd forintot tett ki, 2,8 százalékkal haladta meg az egy évvel korábbit. Az egy részvényre jutó nyereség a kilenc havi adatok alapján 2170 forint, míg egy évvel korábban 1480 forint volt.

A francia Servier-csoport többségi tulajdonában lévő gyógyszergyár magyarországi forgalma a harmadik negyedévben is csökkent, míg az exportpiacokon növelni tudta forgalmát, és az export forintértékét az árfolyamhatások is növelték. Az üzleti év első kilenc hónapjában a belföldi forgalom 9 százalékos visszaesést mutat, értéke 23,99 milliárd forint.

Az export árbevétel 250,7 millió eurót ért el kilenc hónap alatt, ez 2 százalékkal alacsonyabb az előző évi bázisnál. Forintban mérve 7,2 százalékkal 74,58 milliárd forintra nőtt a kivitel értéke, és a teljes árbevétel 76 százalékat tette ki. A FÁK-régió forgalma 8 százalékkal bővült, 121,2 millió eurót tett ki háromnegyed év alatt. Ezen belül az oroszországi kivitel 5 százalékkal, 87,2 millió euróra nőtt.

A kelet-európai piacon 10 százalékkal csökkent a forgalom 89,1 millió euróra. A régió legnagyobb piacán, Lengyelországban 19 százalékkal esett vissza a kivitel, ami így 39 millió eurót ért el. Az egyéb területeken a gyógyszerexport 15 százalékkal 12,4 millió euróra csökkent, a hatóanyag kivitel 8 százalékkal mérséklődött 28 millió euróra.

Az Egis kilenc havi üzleti eredménye 18,33 milliárd forint volt, 28,4 százalékkal haladta meg a bázist. A jelentés szerint a kedvező üzleti eredményhez az export teljesítménye, a devizaárfolyamok alakulása és a visszafogott költség-dinamika járult hozzá legnagyobb mértékben. Kedvezőtlenül befolyásolta ugyanakkor a hazai gyógyszerpiacon – döntően az erőteljes árcsökkenések miatt – bekövetkezett forgalomcsökkenés.

A pénzügyi eredmény szintén kedvezően alakult, 961 millió forint pozitívumot mutatott június végén, szemben az egy évvel korábbi mínusz 589 millió forinttal. A 7,786 milliárd forint jegyzett tőkéjű társaság konszolidált saját tőkéje 177,79 milliárd forint volt az időszak végén, egy év alatt 10 százalékkal emelkedett. Az Egis részvényeit a Budapesti Értéktőzsde „A” kategóriájában jegyzi. A papírok az augusztus 6-i kereskedést 1,5 százalékos emelkedéssel, 16 450 forinton zárták. Az előző 12 hónapban a papírok legmagasabb tőzsdei árfolyama 19 165 forint, a legalacsonyabb 13 550 forint volt. *(A ProfitLine nyomán)*

Zékány András összeállítása



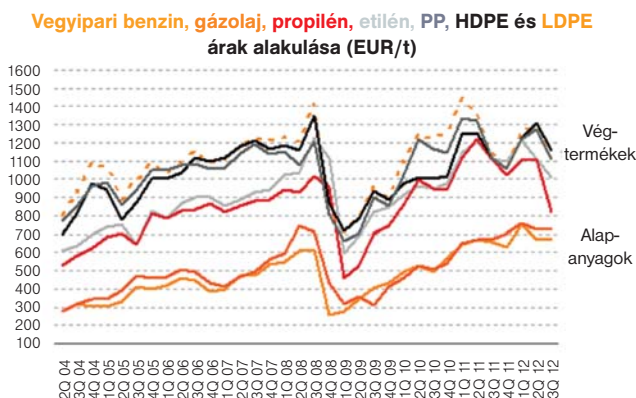
Vegyipari Mozaik

TVK. Az utóbbi negyedévekhez képest szebb gyorsjelentést közölt a TVK. A kedvezőtlen iparági trendek azonban a második negyedévben is éreztették hatásukat: a polimer-értékesítések a megelőző negyedévhez képest 8%-kal csökkentek, ráadásul a termelést lefele húzta a május végétől július végéig tartó tervezett nagyleállás is, miközben az árfolyamváltozás hatásai is negatívak voltak. Mindezek következtében bár a negyedév alapvetően javulást hozott, a 12 havi gördülő EBITDA értéke tovább esett, a 2000-es évek eleje óta nem látott módon veszteségre csúszva.

Az üzemi cash flow szépen visszaemelkedett (11 milliárd forint) az első negyedéves 15 mrd Ft-os mínusz után, amiben a főszerepet az játszotta, hogy a vállalat a második negyedéves átfogó leállás előtt jelentős készletezéssel készült.

Az első negyedévben az alábbi tényezők voltak a legfontosabbak a TVK számára:

1. Alapanyag- és végtermékek: kedvező folyamatok bontakoztak ki a negyedévben, hiszen miközben a TVK számára legfontosabb végtermékek (LDPE, HDPE, polipropilén) növekedni tudtak, az alapanyagárak (vegyipari benzin, gázolaj) valamelyest csökkentek. A harmadik negyedév eddig eltelt részében azonban a végtermékek ismét jelentősebb mértékben csökkentek, miközben az alapanyagárak szinten maradtak.



Forrás: TVK, Datastream, Portfolio.hu

A fenti tényezők eredőjeként a TVK számára legfontosabb polimer termékek teljes (monomertermelést is magába foglaló) árérései a második negyedéves tágulást követően mostanra megint az első negyedéves mélységeikig süllyedtek, ami kedvezőtlenül érinti a vállalat folyó negyedéves teljesítményét.

2. Dollár, forint: a dollár erősödő trendje továbbra is töretlen, ami kedvezőtlenül érinti a vegyipari részleget, hiszen az alapanyagok (vegyipari benzin, gázolaj) árai dollárban, míg a végtermékek árai euróban vannak meghatározva.

3. Kapacitáskihasználtság: a második negyedév során időszakos karbantartási nagyleállásra került sor május vége és július vége között az Olefin-1, LDPE-2, HDPE-1, PP-3 üzemekben. A polimertermelés a nagyleállás következtében a második negyedévben 24%-kal esett vissza az előző negyedévhez képest.

4. egyedi tényezők: Az energiaköltség 29%-kal lett magasabb döntően a gőz, földgáz és villamos energia árának emelkedése következtében.

Kilátások, tervek. A gyorsjelentésben Pethő Zsolt vezérigazgató az alábbiakkal foglalja össze a jövő kihívásait és a csoport terveit: „Második negyedéves üzleti teljesítményünket továbbra is alapvetően a kedvezőtlen gazdasági körülmények határozták meg. Az integrált petrokémiai fedezet a január-februári törté-

TVK eredménykimutatás, IAS m Ft	2Q 11	3Q 11	4Q 11	1Q 12	2Q 12	2Q 12/2Q 11
Értékesítés árbevétele	109 873	97 235	96 995	102 555	96 022	-13%
Egyéb árbevétele	173	831	2 197	572	201	16%
Összes működési bevétel	110 046	98 066	99 192	103 127	96 223	-13%
Anyagköltség	91 136	88 903	85 083	97 213	73 447	-19%
Igénybe vett a. J. Szolg.	3 913	3 620	4 129	3 589	3 294	-16%
ELABÉ	5 846	5 587	7 023	6 624	6 142	5%
Közvetített szolgáltatások	71	59	142	46	36	-49%
Anyagjellegű ráfordítások	100 966	98 169	96 377	107 472	82 919	-18%
Bérek	1 581	1 513	1 583	1 479	1 629	3%
Személyi jellegű kifizetések	262	268	304	369	104	-60%
Bérmunkások	501	437	496	450	552	10%
Személyi jellegű ráfordítások	2 344	2 218	2 383	2 298	2 285	-3%
Értéksökkenési leírás	3 287	3 314	3 459	3 390	3 462	5%
Egyéb működési költségek	1 299	-169	879	2 204	1 665	28%
STK átalányváltozása	-231	2 730	-3 458	7 821	-7 820	3285%
Saját előállítású eszközök akt. ért.	160	289	915	65	1 221	663%
Összes működési költség	107 967	100 513	105 641	107 478	96 930	-10%
EBITDA	5 366	867	-2 990	-961	2 755	-49%
Üzemi eredmény	2 079	-2 447	-6 449	-4 351	-707	-134%
Pénzügyi műveletek bevételei	-122	-1 072	157	1 079	1 734	n. a.
Pénzügyi műveletek ráfordításai	525	1 807	2 444	433	534	2%
Nettó pénzügyi eredmény	-647	-2 879	-2 287	646	1 200	n. a.
Adó előtti eredmény	1 432	-5 326	-8 736	-3 705	493	-66%
Adó	542	-270	-354	-691	300	-45%
Kisebbségi r. előtti eredmény	890	-5 056	-8 382	-3 014	193	-78%
Kisebbségi részesedés	0	0	0	0	0	n. a.
Nettó eredmény	890	-5 056	-8 382	-3 014	193	-78%
EPS	37	-209	-346	-124	8	-78%

Forrás: TVK, Datastream, Portfolio.hu

nelmi mélypontról a második negyedévben érzékelhetően emelkedett, azonban ez még mindig nem volt elegendő ahhoz, hogy a negyedév egészét, illetve az év első felének eredményeit akár csak a nullszaldó közelébe javítsa. Ezért különösen értékes számunkra, hogy terveink szerint időarányosan haladnak azok a hatékonyságjavító és költségcsökkentő programok, amelyeket a hároméves hatékonyságjavító projekt keretében tűztünk ki célul. Részben ennek is köszönhető, hogy a továbbra is alapvetően kedvezőtlen nemzetközi és hazai gazdasági körülmények ellenére második negyedéves teljesítményünkkel az első negyedévben még negatív EBITDA mutatót fél éves viszonylatban pozitívrá tudtuk változtatni. Egyes mutatóink kedvezőtlen alakulásában, így a cash flow adatunk első fél éves értékében részben az is közrejátszott, hogy az Olefin-1 üzem és három polimer üzemünket érintő, előre tervezett nagyleállási munkálatok miatt – melyeket május utolsó harmadában kezdtünk el – vevőink zavartalan kiszolgálása érdekében jelentős árukészleteket halmoztunk fel. Ez a hatás a második fél évben az üzemek tervezett időpontban végrehajtott újraindulásával megszűnik. *Örömmel számolhatok be arról, hogy a korábban már jóváhagyott butadién üzem beruházásának helyszínéről is megszületett a döntés. Így a nagyságrendjében 30 milliárd forint felhasználásával megépülő üzem helyszíne Tiszaújváros lesz. Az üzem építése 2013-ban megkezdődik és terveink szerint 2015 elejétől lép működésbe. Az évi 130 ezer tonna kapacitású üzem jelentősen javítja majd a TVK eredményességét.” (TVK, portfolio)*



MOL. Az elemzői várakozásoktól elmaradó második negyedéves számokat közölt a MOL. Az üzleti teljesítményeket tekintve az alábbi legfontosabb tényezőket érdemes kiemelni:

Az upstream szegmensben a csökkenő realizált szénhidrogénárak és a volumenek negatívan hatottak az eredményre, csakúgy mint a fajlagos kitermelési költségek emelkedése, vagy az INA-nál megjelenő egyszeri tételek. A szegmens üzemi eredménye mindezek miatt 19%-kal került lejjebb, a speciális tételektől tisztított érték azonban „csak” 7%-kal.

Az olajár hirtelen esését a downstream szegmens is megérezte, hiszen közel 40 milliárd forintnyi veszteség képződött a készletértékelések hatásán. A szegmens veszteségéhez a dunai és



Üzemi eredmény, INA-val konszolidált, egyszeri tételek nélkül mrd Ft	2Q 11	3Q 11	4Q 11	1Q 12	2Q 12	2Q 12/2Q 11
upstream	74,4	81,3	86,9	78,0	69,5	-7%
downstream	17,3	-17,0	-39,8	21,4	-37,0	-
ebből petrokémia	1,0	-6,0	-8,3	-10,5	-7,2	-
CCS downstream	15,4	-1,8	-27,7	-5,0	18,8	22%
gáz midstream	14,7	16,0	16,6	12,4	8,1	-45%
központ	-13,8	-7,9	-5,2	-11,6	-9,6	-31%
kiszűrés	-4,4	-8,0	4,7	0,9	-11,4	-160%
Összesen	88,2	64,5	63,2	101,1	19,6	-78%

Forrás: MOL, Portfolio.hu

pozsonyi finomítók karbantartása és egyéb nem várt leállások is hozzájárultak, melynek hatására bár volt már ennél nagyobb mínusz is a társaság történetében, a 12 havi gördülő üzemi eredmény (pontosabban most már veszteség) eddig nem látott mélységbe esett. Mivel azonban a külső környezet a második negyedévben olyan tekintetben jól alakult, hogy a finomítói marzs emelkedni tudott (a továbbra is kedvezőtlen keresleti trendek közepette), és a vállalat termékszerkezete is a kedvező irányba tolódott, a downstream üzemi eredmény 23%-os emelkedést mutatott.

A petrokémia szegmens vesztesége némileg csökkent a kedvező irányba mozgó termékáraknak köszönhetően, azonban a kulcsüzemek aktuális negyedévi nagyleállása miatt a polimer termékek értékesítése 10%-kal csökkent az első negyedévhez képest.

A gáz midstream (korábban gáz és energia) profitja esett, amiben a Prirodni Plin vesztesége és az FGSZ-nél jelentkező működési (energia, üzemeltetési és értékcsökkenési) költségek emelkedése játszhatta a főszerepet.

Összességében a MOL igen gyenge negyedévet tudhat maga mögött, a finomítás nagy, készletátértékelés okozta vesztesége miatt a vállalat üzemi eredménye még a 2008. negyedik negyedéves mélységnél is alacsonyabb. Nettó profit soron sem sikerült felfele lendíteni a gyenge üzemi teljesítményen.

A MOL-csoport nettó profitja
(speciális tételekkel és azok nélkül, mrd Ft)



Forrás: MOL, Portfolio.hu

Az alábbiakban a MOL egyes divízióinak második negyedéves teljesítményére ható legfontosabb iparági és vállalat specifikus tényezőit mutatjuk be.

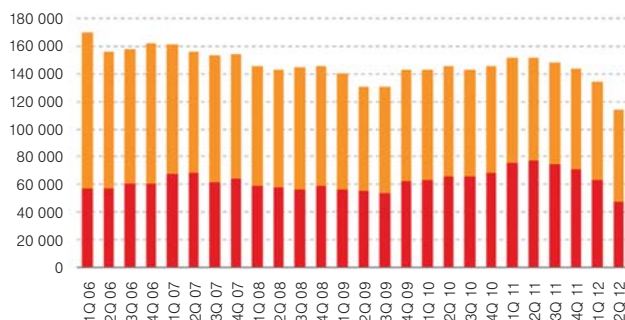
Kutatás-termelés (upstream)

1. Olajár: az olajár a második negyedévben már érezhető (7%-os) visszaesést mutatott, melyből az utóbbi hónapokban sem sikerült talpra állnia az árfolyamnak.

2. Kitermelés: nemcsak a csökkenő olajár, hanem a szénhidrogén-kitermelés első negyedévhez képest 15%-kal csökkenő volumene is negatívan hatott a vállalatra a második negyedévben. Ebben nagy szerepet játszott a szíriai kitermelés teljes kiesése, bár ezt a számot teljes egészében kiszűrve is 7%-os csökkenés mutatkozik. A mezők termelésének természetes csökkenése mel-

lett alacsonyabb volt az észak-adriai offshore földgáztermelés, amely visszaesés egyik oka, hogy a Termelés Megosztási Szerződés (PSA) feltételeivel összhangban csökkent a termelésből való részesedése az INA-nak, illetve vízbeáramlások is történtek.

A MOL-csoport szénhidrogén-kitermelésének alakulása
(hordó/nap, MOL és INA)



Forrás: MOL, Portfolio.hu

Mindemellett májusban és júniusban karbantartási munkákat végzett a MOL, ami különösen a magyarországi gázkitermelést érintette kedvezőtlenül (ez a hatás azonban később már nem jelentkezik). A vállalat várakozásai szerint az előttünk álló félévben az átlagos napi szénhidrogén-kitermelés szintje a második negyedéves érték felett fog majd alakulni.

3. Dollár: a hazai fizetőeszköz gyengült a dollárhoz képest, ami a bázisidőszakkal való összehasonlítás során igen sokat, az előző negyedévhez képest azonban már csak keveset tudott segíteni.

4. Kitermelési költség: a fajlagos kitermelési költségek a negyedévben nagyot emelkedtek, így a vállalatnál korábban nem látott hordónkénti 6,9 dolláros magasságot értek el.

5. Bányajáradék: az alacsonyabb szénhidrogénárak és kitermelt mennyiségek hatására csökkent a magyarországi bányajáradék összege 18%-kal, az orosz azonban szinten maradt.

6. Kutatási projektek: Bár egyelőre eredményhatása nincs, a MOL megnyerte az oroszországi Jerilkinszkij blokk aukcióját a Baitugan mező közelében. A minimális munkakötelezettségek között szerepel a 60 km-es, 2D szeizmikus mérések és egy kutatási kút fúrása. Ezen felül, kezdeti kutatási munkaprogramjuk 70 km²-es, 3D szeizmikus méréseket és egy további kutatási kút fúrását és befejezését irányozza elő 2015 végéig. A projektterv szerint mindkét kút 2015-ben kerül fúrásra és tesztelésre. Találat esetén a próbatermelés várhatóan 2016 elején kezdődhet, melyet gyors ütemű mezőfejlesztés követne 2017-től.

Finomítás-kereskedelem (downstream)

1. Készlet-átértékelés: a szegmens hatalmas mínusza az olajár esése miatti nagy (40 milliárd forint) készletátértékelési veszteségnek volt betudható. Amennyiben ezzel a hatással nem számolunk, a CCS downstream eredmény még a bázishoz képest is javulást mutat.

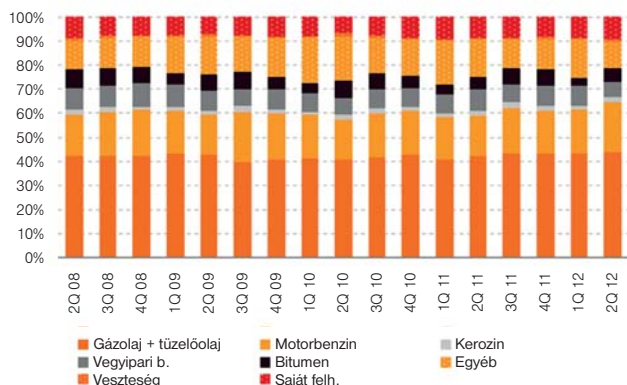
2. Termék-árresek: a korábbi meglehetősen nyomott szintekről tovább tárgult a benzin crack spread, miközben a gázolajé is tudott még emelkedni a fűtőolajon elszenvedett veszteség csökkenése közepette. A harmadik negyedév eddig látott számai a lendület megtorpanásáról árulkodnak, amiben az olajár ismételt emelkedése tehető felelőssé.

3. Termékszerkezet: a termékszerkezeten belül pozitív irányú változások következtek be (csúcson a benzin- és gázolaj-kihozatal részaránya!), miután a termelés-optimalizációval össz-



hangban az alacsonyabb fekete melléktermékkel járó alapanyagok magasabb arányban történő felhasználása erőteljesen csökkentette a fűtőolaj-kihozataalt.

A MOL finomítói termelésének megoszlása



Forrás: MOL, Portfolio.hu

Gáz

A szegmens üzemi eredménye 45%-kal esett. A Magyar Energia Hivatal 2012. május 9-én jóváhagyta az FGSZ Zrt. mint rendszerirányító által a jogszabályokkal összhangban benyújtott, a teljes együttműködő földgáz infrastruktúrára vonatkozó 10 éves fejlesztési javaslatot. A javaslat közel 240 kilométer vezeték és jelentős (5,7 MW) kompresszorlejtésmű beépítését irányozta elő.

Petrolkémia

A petrolkémiai üzletág üzleti vesztesége némileg csökkent az előző negyedévhez képest, de még mindig jelentős. A továbbra is rossz gazdasági környezetben nyomott kereslet és volatilis árvárakozások jellemezték a polimer termékek piacát. Egyrészt ezeknek a hatásoknak köszönhetően, másrészt pedig a kulcsüzemek aktuális negyedévi nagyleállása miatt a polimer termékértékesítés több mint 10%-kal csökkent 2012 első negyedévéhez képest. (A portfolio nyomán)



Szerkezetkész állapotban az MTA Természettudományi Kutatóközpont új épülete. A 2013 novemberére elkészülő épület együttes az interdiszciplináris anyag- és élettudományi kutatásokat folytató MTA Természettudományi Kutatóközpontnak biztosít világszínvonalú helyet.



Az akadémiai kutatóintézet-hálózat infrastrukturális megújításának részeként állami támogatással megvalósuló Természettudományi Kutatóközpont új épülete egyaránt szolgál akadémiai kutatási, felsőoktatási és innovációs célokat, és modellje lehet más hasonló fejlesztéseknek. A kutatóközpont hat intézetének helyet adó új, modern épület kivitelezési munkái két szakaszra oszthatók, miután az MTA kezdeményezte a korábbi PPP-konstrukció keretében megírsult épületkezdemény megmentését: az építmény az áttervezést, a részleges bontást és az újraépítést követően megfelel majd a korszerű kutatóintézetekkel szemben támasztott igényeknek. A beruházás I. szakaszának kivitelezési munkái 2012 márciusában kezdődtek. A munkálatok első szakaszában megerősítették az épület alapjait, a korábban elkészült földméretet, és az áttervezett épület terveinek megfelelően néhány megépített földszinti falat visszabontottak a funkcióváltásnak megfelelően. Ezt követte a földszinti és emeleti szintek, továbbá az épület aulájában helyet kapott 300 fős előadóterem szerkezetének megépítése.



Bejárati látványkép az épületről

Az I. szakasz – a legmagasabb pont elérését, a bokrétaünnepet követően – ez év novemberében zárul le a tetőszerkezettel, külső nyílászárókkal és külső hőszigeteléssel ellátott szél- és ázásmentes épületszerkezet elkészültével. Az ugyanebben a hónapban kezdődő II. szakasz, amely a belső építészeti, gépészeti munkálatokat, valamint az erős- és gyengeáramú villamos berendezések kivitelezését foglalja magában, 2013 novemberére fog lezárulni.

A kutatóház élettudományi, kémiai, biológiai, valamint műszeres laboratóriumoknak, dolgozószobáknak és közösségi helyiségeknek ad helyet. Az aulában egy étterem és nagyszámú hallgatószobát befogadni képes előadóterem üzemel majd. A beruházás egyes lépései, az építkezés előrehaladása az alábbi webkamerás képekkel ellátott honlapon nyomon követhető: <http://www.ttk.mta.hu/mta-q2>. (MTA)



Rákkutatás: rendezetlen fehérjékben a gyógymód? A rendezetlen fehérjék viselkedésének megismerése, illetve célzott gyógyászati felhasználásuk Fuxreiter Mónika szerint megoldást jelenthet olyan betegségek kezelésére, mint a Parkinson-kór vagy egyes tumoros elváltozások. A Cambridge-i Egyetemről hazatérő kutató a Lendület kiválósági programnak köszönhetően a Debreceni Egyetem Biokémiai és Molekuláris Biológiai Intézetében kezdheti meg munkáját nemzetközi, interdiszciplináris közegben. „Ha egy fehérje nem megfelelő helyen vagy módon fejeződik ki,



annak komoly következményei lehetnek” – hangsúlyozza Fuxreiter Mónika. Kutatásai tárgyát olyan fehérjék vizsgálata jelenti, amelyekre a rendezetlenség jellemző, épp ezért a „fuzzy”, vagyis bolyhos nevet kapták. Eddigi eredményeik arra utalnak, hogy ez a szerkezeti sajátosság számos biológiai aktivitáshoz, például a jelátvitelhez nélkülözhetetlen. Fuxreiter Mónika Tompa Péterrel alkotta meg, majd önállóan fejlesztette tovább az úgy-

nevezett „fuzzy komplexek” elméletét, amelynek köszönhetően átalakulhatnak a molekuláris biológia egyes területei. Eredményei nemzetközi szinten is kiemelkedőek (amit egy idén megjelent könyv is fémjelez), kutatási tevékenysége révén pedig új utak nyílnak meg a gyógyszerkutatásban.

A különböző fehérjék aminosavak láncából épülnek fel, amelyekre más-más háromdimenziós szerkezet jellemző. Amennyiben ez az alapstruktúra valamilyen külső hatásra megsérül vagy módosul, kóros elváltozások keletkezhetnek az emberi szervezetben, például különböző neurodegeneratív betegségek alakulhatnak ki. „Vannak olyan fehérjék is, amelyek természetes módon képesek többféle szerkezeti formát felvenni a szervezetben, amit konformációs sokaságnak hívunk – magyarázza a biokémikus. – Ez nem kóros elváltozás, számos nélkülözhetetlen élettani folyamathoz, többek között a fehérjék közötti kommunikációhoz is szükséges. Kutatásaink során kiderült, hogy a rendezetlen fehérjeszakaszok ki- és bekapcsolása fontos szabályozó funkciók változásához vezet, aminek következtében akár a szöveti specifikáció is megváltozhat, így például tumor alakulhat ki. A Lendület program keretében csoportommal szeretnénk minél jobban megismerni e rendezetlen fehérjeszakaszok tulajdonságait és működését, hogy a jövőben specifikus gyógyszerjelölteket tudjunk kötni hozzájuk, és így új gyógyszerek kifejlesztésének teremtsük meg a lehetőségét. Ezzel egy nagy fehérjecsalád válna hozzáférhetővé az orvoslás számára, amelynek segítségével különleges betegségek is gyógyíthatóvá válnának.” A kutató kísérletei során laboratóriumi evolúciós módszert alkalmaz: a fehérjét természetes, vagyis a valódi sejtek megfelelő környezeti hatások között vizsgálja. „Az alkalmazás során megfigyelhető, hogyan reagál a fehérje különböző környezeti változásokra, így pontosan lejegyezhető, hogy egyes megbetegedésekért az eredeti szerkezetben található motívum mely módosulása a felelős. Ezt egyfajta evolúciós skálán követjük nyomon, amelynek alapján az is megállapítható, hogy egy adott tulajdonság maradáno-e, vagy még változik” – ismerteti Fuxreiter Mónika.

A Lendület programmal megvalósul a kutató egyik álma: nemzetközileg elismert szellemi műhely hívhat életre. Számos rangos külföldi szakember már jelezte, hogy szeretne ellátogatni a Debreceni Egyetemen születő új laboratóriumba. A Cambridge-i Egyetemről hazatért biokémikus munkatársainak is lehetőséget kíván teremteni nemzetközi helyszíneken folyó kutatások megismerésére, saját csapatában is nemzetköziségre és interdiszciplinaritásra törekszik. (MTA)



„Adatbányászat” a bioinformatika eszközeivel. „Iskolateremtés” – ez Guttman András kulcsszava, aki kutatási tervét a Len-

dület program III., vagyis a már kiemelkedően sikeres vezetőként is bizonyított tudósok kategóriájában valósíthatja meg a veszprémi Pannon Egyetemen. A professzor a sejtfelszíni cukorszerkezetek minden részletre kiterjedő vizsgálatának minél jobb feltételeit szeretné kialakítani. Célja olyan módszerek kifejlesztése, amelyekkel nagyon kis mennyiségű mintából, akár pár ezer sejt-ből is következtetni lehet bizonyos betegségek valószínűségére. A nyers glikomikai adatokból modern bioinformatikai eszközökkel tárják majd fel a fontos biológiai vagy klinikai információt, és így azonosítják az egy-egy adott betegségre, például a rákra jellemző biológiai markereket. Azt remélik, hogy a módszer segítségével egy kezdődő rosszindulatú daganatot is idejekorán fel lehet ismerni. (MTA)



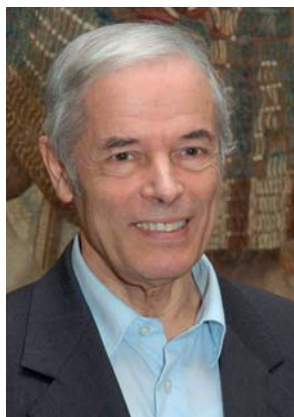
NIH: 100 milliárdnyi pályázati forrás áll rendelkezésre innovációs célokra. A kormány kiemelten kezeli a kutatás-fejlesztést és az innovációt, az ígéretes kezdeményezések támogatására csaknem 100 milliárd forint pályázati forrás áll rendelkezésre – jelentette ki Mészáros György, a Nemzeti Innovációs Hivatal (NIH) elnöke Szegeden.



Az anyagi támogatás mellett a NIH szolgáltatásokkal is segíti az innovatív vállalkozásokat: kiadványt állít össze, amely lehetőséget teremt a külföldi befektetők, gyártó- vagy kooperációs partnerek megtalálására, és működik az intézmény 1500 vállalkozást tartalmazó adatbázisa is – tudatta Mészáros György. A kisvállalati és a tételes kisadó jövő évi bevezetésével érdemes átgondolni, melyik adózási formával jár jobban a fizetendő adó tekintetében. Az mfor.hu kisvállalkozói adókalkulátorával mindenki könnyen kiszámolhatja, vállalkozása után melyik adózás hatálya alatt fizetheti a legkevesebb adót. (MTI)



Állami kitüntetések a nemzeti ünnep alkalmából. Öt akadémikus és az MTA több doktora is magas állami kitüntetéseket vehetett át Szent István napja alkalmából augusztus 20-án a



Náray-Szabó Gábor
(BÁTHORY PÉTER FELVÉTELE)

Parlamentben. Pálinkás József, az MTA elnöke augusztus 21-én az Akadémia székházában további tizenhét tudósaknak adta át az államalapításhoz kapcsolódó ünnepsorozat részeként a Magyar Érdemrend tiszti- és lovagkeresztjét, illetve Magyar Arany és Ezüst Érdemkeresztjét.

„Jólesik, hogy barátaimmal és kollégáimmal együtt örülhetek az elismerésnek” – fogalmazott Náray-Szabó Gábor kémikus, a Magyar Tudományos Akadémia rendes tagja, a Magyar Tudományos Akadémia Könyvtárának főigazgatója, egyetemi tanár, aki több évtizedes, az elméleti kémia, a számítógépes molekulatervezés, a szerkezeti biológia terén végzett nagy jelentőségű tudományos és kutatói munkásságáért, a magyar tudományosság nemzetközi tekintélyének növeléséhez való tevételes hozzájárulásáért, a felső-



oktatási rendszer megújításában játszott meghatározó szerepéért, közéleti tevékenységéért a Magyar Érdemrend középkeresztje polgári tagozatát vehette át. (MTA)

Banai Endre összeállítása

Jelölés a Náray-Szabó István tudományos díjra



A díj alapításának éve: 1994. Adományozható: a kémia tudományában kifejtett kiemelkedő munkásságért. Jelölést a szakosztályok elnökei és a területi csoportok elnökei nyújthatnak be.

Kérjük tehát a szakosztályok és a területi szervezetek, munkahelyi csoportok elnökeit, valamint az IB-tagokat, a Felügyelő és Etikai Bizottság elnökét és tagjait, hogy tegyék meg javaslatukat az ez évi Náray-Szabó-díjra, vagy erősítsék meg a már előzetesen bejelentett jelölést október 31-ig az Egyesület titkárságán.

A Náray-Szabó-díjra jelölést a javaslati lapon tehetik meg, melyet honlapunkon (www.mke.org.hu) az Egyesületről menüben, azon belül az egyéb szabályzatok, és azon belül az MKE-díjszabályzat 2. mellékletben találhatnak meg.

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

6. Central and Eastern European Proteomic Conference

2012. október 14-17., Budapest

Online jelentkezés: <http://www.chemres.hu/ms/6thcepc/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, proteomics@chemres.hu

Short course on Thermal Analysis

2012. október 15-17., Budapest

Online regisztráció: <http://www.thermanal.mke.org.hu/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: thermanal@mke.org.hu

A Magyar Kémikusok Egyesülete Kristályosítási és Gyógyszerformulálási Szakosztálya és az MKE Richter munkahelyi szervezete „Kristályosítási technológiák méretnövelése és hatásuk a gyógyszerformulálásra” címmel kerekasztal-konferenciát szervez.

Helyszín: Richter Gedeon Nyrt. Üdülő és Rendezvény Központ Balatonszemes, Munkácsy M. u. 1.

Időpont: 2012. október 26-27.

A konferencia kétnapos. Az első nap programja a fenti című „kerekasztal” két plenáris előadással: Dr. Nagy Zoltán (Loughborough University) és Dr. Nagy Tibor Pilot üzemvezető (Richter Gedeon Nyrt.). Ezt követi a „kerekasztal”-beszélgetés, kötetlen diskuszió a témáról.

A második napon szakmai előadások lesznek gyógyszerformulálás, továbbá az ezekhez tartozó szilárd fázisú analitika témaköréből.

A kollégáktól elsősorban új, érdekes módszerek, tudományos és gyakorlati eredmények bemutatását várjuk.

INFORMÁCIÓ: Farkas Béla Kristályosítási és Gyógyszerformulálási Szakosztály titkára, bfarkas@invitel.hu, +36/20/386-7945

Kozmetikai Szimpózium 2012

Budapest, Bara Hotel, 2012. november 22.

A kozmetikai tudományok aktuális kérdései

Témák:

- új ható- és segédanyagok
- természetes kozmetikumok
- öregedés elleni trendek
- technológiai és szerkezeti kérdések
- klinikai és hatékonysági vizsgálatok

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix,

beatrix.schenker@mke.org.hu

Online jelentkezés a www.mke.org.hu honlapon keresztül a rendezvényeknél

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXVII. No. 10. October 2012

CONTENTS

<i>Theoretical basis of modeling wet grinding in stirred media mills</i>	290
ÁDÁM RÁCZ	
Bruckner Room Lecture	
<i>Synthesis of heparin-analogue sulfonatomethyl group-containing pentasaccharides with antithrombotic activity</i>	294
MIHÁLY HERCZEG	
<i>Regiospecific synthesis of 5'-iodo-triazolyl at the 17th position of androstane compounds</i>	298
TAMÁS GÖRBE	
Bookreview	
<i>Chemical Thermodynamics: An Introduction.</i>	
<i>An author interview with Ernő Keszei</i>	301
<i>Chemistry calendar (Edited by JÓZSEF SÁNDOR PAP)</i>	305
<i>The history of derivatography</i>	306
ISTVÁN PRÓDER, TERÉZ PÓKA	
<i>Science communication</i>	311
TAMÁS KISS	
<i>Chembits (Edited by GÁBOR LENTE)</i>	312
<i>The Society's Life</i>	314
<i>News of the Month</i>	314

Kémiai diákolimpiák 2012-ben

Magyarország csapata az idén először vett részt két kémiai diákolimpián. Az ismert Nemzetközi Kémiai Diákolimpián (IChO) alapítóként 1968 óta résztvevők vagyunk. Elsőként kaptunk viszont meghívást a Mengyelejev Diákolimpiára, ami a volt össz-szovjet versenyek utóda. A két verseny nagyjából egyidős, de lebonyolításuk és elvárásaik eltérőek. Részletes beszámolóinkat későbbi számunkban olvashatják.

Az eredmények tekintetében egyik esetben sincs okunk panaszra, minden diákunk éremmel tért haza mindkét versenyről:

- **Sályi Gergő**, ELTE Apáczai Csere János Gimnázium, kémiatanára Villányi Attila, IChO-ezüstérem, Mengyelejev-aranyérem (abszolút 2. helyezétként)
- **Berta Dénes**, ELTE Apáczai Csere János Gimnázium, kémiatanára Villányi Attila, IChO-ezüstérem, Mengyelejev-bronzérem,
- **Bolgár Péter**, Eötvös József Gimnázium, Tiszaújváros, kémiatanára Kissné Ignáth Tünde és Czírók Ede, IChO-ezüstérem, Mengyelejev-ezüstérem,
- **Zwillinger Márton**, Földes Ferenc Gimnázium, Miskolc, kémiatanára Endrész Gyöngyi, IChO-ezüstérem, Mengyelejev-ezüstérem.

A nemzetek között egyik olimpián sem létezik hivatalos verseny, de persze a csapatok átlagpontszáma alapján kialakul egy sorrend.

A nemzetközi diákolimpia helyszíne az idén Washington volt, a szer-

vező Amerikai Kémiai Társaság (ACS) székhelye. A diákok a Marylandi Egyetemen laktak és dolgoztak a verseny július végi egy hete során. A versenyfelkészítés, részvétel és utazás költségeit, mint mindig, az oktatási kormányzat állta.

A washingtoni olimpián a magyarok 72-ből a 9. helyre kerültek, ami megfelel az utóbbi években szokásos eredményeinknek. Az első helyeken ázsiai országok: Tajvan, Korea, Kína, Japán, Szingapúr, India szerepelnek. Oroszország és az abszolút győztest adó Németország is elének került. Az ázsiai országok esetében a helyezésben nyilván szerepe van oktatási rendszerüknek és népességüknek is, de jócskán megalapozott az a gyanú is néhány ország esetén, hogy középiskolás versenyzőik a szabályokat megszegve bőséges egyetemi stílusú és szintű képzést is kapnak.

A Mengyelejev Diákolimpiát a részt vevő országok rotációban rendezik. 2012-ben a helyszín Kazahsztán újonnan épült fővárosa, Asztana volt. Itt 19 nemzet közül – átlagpontjaink alapján – csak a versenyfeladatokat adó Oroszország diákjai voltak nálunk jobbakk.

Mindkét diákolimpia esetében a verseny és a résztvevők ott-tartózkodásának költségeit elsősorban a szervezők állják. Az április végi asztanai versenyre való utazás komoly költségeit a Richter Gedeon Nyrt. és az Egis Nyrt. nagylelkű támogatása fedezte a Magyar Kémikusok Egyesülete közreműködésével.

Magyarfalvi Gábor

A csapat a Lomonoszov Egyetem dékánjával Asztanában (balról: Bolgár Péter, Zwillinger Márton, Valerij Lunyin, Berta Dénes, Sályi Gergő)



A diákok és a kísérő tanárok Washingtonban (balról: Sályi Gergő, Magyarfalvi Gábor, Bolgár Péter, Zwillinger Márton, Villányi Attila, Berta Dénes, Varga Szilárd)



Jubileum

2012. augusztus 3-án Zalaegerszegen, a Magyar Olajipari Múzeum szoborparkjában Vámos Endre halálának 25. évfordulója alkalmából ünnepséget tartottak, amelyet Tóth János, az intézmény igazgatója nyitott meg. A megemlékezést Liptay György, az MKE alelnöke tartotta.

Vámos Endre a magyar olajipar nemzetközileg is elismert személye volt. Széles körű munkálkodása során 650 publikációja jelent meg, amelyből 28 könyv, illetve jegyzet volt. Nemcsak az Egyesület tisztségviselőjeként, hanem lelkes aktívaként is dolgozott. 60 bel- és külföldi konferenciát szervezett. Munkáját több állami kitüntetéssel ismerték el. Az Egyesülettől Than Károly-emlékérmét és Pfeifer Ignác-díjat kapott.

Vámos Endre munkája ma is velünk van. Az Egyesület részben az ő ásványokról készített festményeivel nyitotta meg 2011-ben a Kémia Évét az Akadémián, és a záróünnepségen is bemutatott kiállítást élénk érdeklődés övezte.



Vámos Endre festményei



A koszorúzás után az elhunyt szakmai könyvtárát a család (felesége és lánya) a múzeumnak ajándékozta.

Liptay György

BIOGÁZ - BIODIESEL

előállításához és ellenőrzéshez

analizátorok és mérőeszközök



anaerob gázhozam mérők

biodiesel analizátorok

biogáz analizátorok

BOI és KOI mérők

elemanalizátorok

FOS-TAC mérők

fotométerek

gázballonok

gázórák, gázmérők

iszapanalizátorok

pH & multi mérők

pufferkapacitás mérők

szárítós mérlegek

titrálók

TOC + TN analizátorok

GYORSTESZTEK:

ammónia, összes-N,

foszfát, szerves savak

mérésére



AKTIVIT Kft.

1145 Budapest, Pétervárad u. 14.
Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865.

Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web: www.aktivit.hu
Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök

