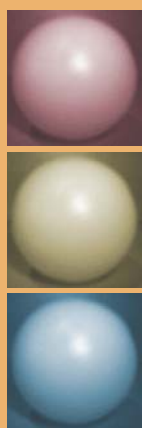


A TARTALOMBÓL:

Dízelgázolaj fluid
katalitikus krakkolás
könnyű ciklusolajából
3D nyomtatás

Egyszerű és motiváló
kísérletek

EuCheMS Newsletter,
2013. november



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXVIII. ÉVFOLYAM • 2013. NOVEMBER • ÁRA: 850 FT



A lap megjelenését
a Nemzeti Kulturális Alap
támogatja



Raman egyszerűen,

A Raman spektrometria, amely korábban a kémiai szerkezetkutatás eszköze volt, mára számos olyan alkalmazási területen is fontossá vált, ahol a felhasználók nem spektroszkópai szakértők (pl. műtárgyak restaurálása, igazságügy, geológia, vagy gyógyszergyártás). A Thermo Scientific DXR Raman™ spektrométereiben alkalmazott új műszaki megoldások azonban olyan jelentősen leegyszerűsítették a készülékek használatát, hogy a technika helyett elsősorban a kérdésekre és a kapott válaszokra lehet fókuszálni.

... de kompromisszumok nélkül.

• thermoscientific.com/raman



A Thermo Scientific DXR Raman™ mikroszkóp
Kutatói szintű teljesítmény
szabadalmaztatott adatfeldolgozási
eljárásokkal



A Thermo Scientific SmartRaman™ spektrométer
Makro minták egyszerű és automatizált
mérése

Kizárólagos képviselet:

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

Telefon: +36 1 221 5536 • Fax: +36 1 221 5543

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

20 éves

UNICAM
Magyarország Kft.



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXVIII. évf., 11. szám, 2013. november



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

Szerkesztőség:

Felölös szerkesztő: KISS TAMÁS
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA

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,
JANÁKY CSABA, JUHÁSZ JENŐNÉ,
KALÁSZ HUBA, KEGLEVICH GYÖRGY,
KOVÁCS ATTILA, KÖRTVÉLYESSY ZSOLT,
KÖRTVÉLYESSY GYULA,
LIPTAY GYÖRGY, MIZSEY PÉTER,
MÜLLER TIBOR, NEMES ANDRÁS,
RÁCZ LÁSZLÓ, SZABÓ ILONA,
SZEBÉNYI IMRE, TÖMPE PÉTER,
ZÉKÁNY ANDRÁS

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

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

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

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

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

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

Aktuális számaink tartalma,
az összefoglalók és egyesületi híreink,
illetve archivált számaink honlapunkon
(www.mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541
HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)
HU ISSN 1588-1199 (online)



A Magyar Kémikusok Lapja novemberi száma ismét sokszínű összeállítással jelenik meg. Ebben – az utóbbi két hónap gyakorlatának megfelelően – fontos szerepet kap a szénhidrogén-feldolgozó ipar. Az előző két szám közleményei olyan lehetőségeket ismertettek, amelyekkel hozzájárulhatunk a fenntartható mobilitáshoz: bemutatják, hogyan használhatók fel hulladék gumiabroncsok az útépitésben (ún. gumibitumenek formájában, aszfalt előállításához), és betekintést nyújtanak a műanyag vagy egyéb hulladékok krakolásával előállított szénhidrogénáramok kőolajipari alkalmazásába. Ezek a közlemények is ráirányítják a figyelmet a hulladékok újrahasznosításának szükségességére és jelentőségére, energetikai és más vegyipari célú felhasználására. A bemutatott kutatások és eredmények akkor is fontosak, ha az utóbbi néhány évben jelentős és gazdaságosan kitermelhető kőolaj- és földgázkészletek fedeztek fel. (Kb. 40 évvel ezelőtt nagyjából 45 évre elegendő készletet jósoltak, és még ma is 40–50 évre elegendő, kitermelhető szénhidrogénvagyon feltételeznek a 2012. évi felhasználással számolva.) Ebben a számban a MOL Csoport munkatársai viszonylag kis értékű kőolaj-finomítói termékből (fluid katalitikus krakolás kőmennyű ciklusolaja) kiváló minőségű dízelgázolaj keverőkomponens előállítása céljából végzett sikeres kísérletekről és hasznosítható eredményeiről számolnak be. Ezek is hozzájárulhatnak a fenntartható fejlődés egyik alappillére, a mobilitás alapanyag- és energiatakarékos, valamint környezetbarát megvalósításához.

A Vegyipar és kémia tudomány rovatban folytatódik a veszélyes termékek azonosításáról szóló ismertető, Körtvélyessy Gyula tollából.

Ez a szám külön hangsúlyt fektet – élvezetes és szakmailag megalapozott közleményeivel – a kémia egészségvédelemben betöltött szerepének megvilágítására és alátámasztására. Az SZTE kutatókollektívája röviden összefoglalja különböző vegyületek (kinunerinek és analógjaik) idegrendszeri betegségekben betöltött szerepét, továbbá áttekinti az eddigi kísérletes eredményeket és terápiás lehetőségeket. A Debreceni Egyetem munkatársainak összeállítása egy új kémiai reakció (tio-click, „katt” reakció) felhasználását tárgyalja és elemzi gyógyászati alkalmazásra használható anyagok előállítását során.

Tamulágos, útmutató és izgalmas a Csermely Péterrel, az MTA és az Academia Europaea új tagjával folytatott beszélgetés. Ebből kiragadva különös figyelmet érdemel a fehérjék szerkezeti hálózatainak dinamizmusára vonatkozó, a korábbinál átfogóbb konformációs szelekciós modell ismertetése.

A jelenlegi szám Kitekintés rovata fokozza a lap sokszínűségét; Braun Tibor gondolatai a 3D nyomtatás és nyomtatók lehetőségeit mutatja be. Ez a technika forradalmasíthatja életünket, hiszen – a fejlesztések dinamizmusa alapján – hamarosan megjelenhetnek a 3D nyomtatók olyan változatai is, amelyek különböző tárgyak (kezdetben műanyag, majd kerámia- és fémtárgyak) sajátkezü előállítását is szolgálhatják.

Újabb és alkalmazható ötleteket kínál a kémia tanításához Árus Dávid közleménye, és most is hasznos információkat tartalmaz – ezúttal Sir John Anthony Pople-ről és Lars Onsagerről – a Vegyészkalendárium.

Az előzők alapján tisztelettel és szívesen ajánljuk kedves olvasóinknak az MKL novemberi számát.

2013. november

Hancsók Jenő

Hancsók Jenő,
a szerkesztőbizottság tagja

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

Valkai István, Wahlné Horváth Ilona, Balassa Mária, Nagy Bence,

Sági Richárd: Fluid katalitikus krakk üzemi könnyű ciklusolaj feldolgozása a finomítói dízelgázolaj-hozam növelése érdekében 322

Körtvélyessy Gyula: Biztonsági adatlapok. Kilencedik rész.

A veszélyes termékek azonosítása az adatlapokban 329

Bohár Zsuzsanna, Fülöp Ferenc, Dékány Imre, Toldi József, Vécsei László:

A kinureninek és analógjaik: új terápiás célpontok idegrendszeri betegségekben 331

Csávás Magdolna, Lázár László, Hadházi Ádám, Demeter Tamás,

Nábrádi Péter, Herczeg Mihály, Eszenyi Dániel, Mező Erika, Herczegh Pál,
Borbás Anikó: Tiodiszacharidok és S-glikokonjugátumok szintézise tio-click módszerrel 334

KITEKINTÉS

Kreatív elemek. Beszélgetés Csermely Péterrel 336

Braun Tibor: Gutenbergtől egy új kémiáig? 3D nyomtatás és nyomtatók térben és időben 338

OKTATÁS

Árus Dávid: Egyszerű és motiváló kísérletek a kémia tanításához 344

VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET

Vegyészkalendárium (Pap József Sándor rovata) 346

VEGYÉSZLETEK

Lente Gábor rovata 348

EGYESÜLETI ÉLET

A HÓNAP HÍREI 352

EuCheMS Newsletter, 2013. november 355



Címlap:
A MOL Csoport
Dunai Finomítója



Valkai István¹–Wahlné Horváth Ilona²–Balassa Mária²–Nagy Bence² –
Sági Richárd³

■ ¹ MOL Csoport, DS Fejlesztés | ivalkai@mol.hu

■ ² MOL Nyrt., DS Fejlesztés | whi@mol.hu | mbalassa@mol.hu | bnagy@mol.hu

■ ³ MOL Csoport, DS Üzleti Támogatás | risagi@mol.hu

Fluid katalitikus krakk üzemi könnyű ciklusolaj feldolgozása a finomítói dízelgázolaj-hozam növelése érdekében^{*}

Bevezetés

Az elmúlt évtizedben egyre gyakrabban hallhattunk a dízelgázolaj-hiányról az európai kőolaj-finomítási, illetve üzemanyag-értékesítési (downstream) üzletágban. A közép- és kelet-európai finomítók először 2005-ben szembesültek a növekvő dízelgázolaj-igénnyel és ekkor tették meg az első lépéseket a motorbenzin-gyártásra optimált termelőüzemek átállítására, illetve átalakítására. A közismert eljárások (optimált kőolaj- és termékdesztillációs hozamok, vagy a katalitikus párlathidrokrakk-üzemek középdesztillátum-szelektív üzemeltetése) mellett új és gyorsan megvalósítható megoldásokra volt szükség, ugyanakkor a termékstruktúra jelentős javítása költséges és hosszú átutazási idejű beruházási projekteket igényelt egy komplex finomítóban.

A MOL Csoport Dunai Finomítója az elsők között volt a régióban, amely innovatív módszerrel járult hozzá a dízelgázolaj-igény kielégítéséhez. Ennek során a fluid katalitikus krakk (FCC – fluid catalytic cracking) üzemi könnyű ciklusolajat (LCO – light cycle oil) korszerű katalitikus eljárással EURO V minőségű (maximum 10 mg/kg kéntartalmú ULSD – Ultra Low Sulfur dízel) dízelgázolajjá alakítottuk a fűtőolajba keverés helyett. Az eltelt időben további lehetőségeket vizsgáltunk az LCO-hozam költség-hatékony növelésére és a termékminőség javítására. A közleményben a kapcsolódó fejlesztéseket, az általános technológiai megfontolásokat, a kutatási és üzemeltetési tapasztalatokat, illetve a különböző opciók gazdaságosságát foglaltuk össze.

Az LCO-termék ártértékelése a MOL Csoportban

Az FCC üzem a kőolajleparlásból származó nehéz vákuumgázolajból elsősorban motorbenzint, propilént és melléktermékként fűtőolaj-frakciókat (pl. LCO) állít elő. Az LCO feldolgozásával kapcsolatos fejlesztések 2005-ben kezdődtek, amikor a MOL Csoport két komplex, FCC üzemet is magában foglaló finomítóval rendelkezett (a MOL Dunai Finomító Százhalombattán és a Slovnaft Bratislava Finomító). Akkoriban az LCO-t Százhalombattán könnyű fűtőolajba keverték, a Slovnaft finomítójában pedig a maradékhidrokrakk üzemben dolgozták fel, illetve max. 10%-os részarányig a nehéz fűtőolaj hígítására alkalmazták. A Slovnaft-nak voltak tapasztalatai a nagynyomású párlathidrokrakk üzem-

1. ábra. Nagynyomású kísérleti reaktorrendszer a MOL DS Fejlesztésen



^{*} Az eredeti közlemény a MOL Group Scientific Magazine 2012/2. számában „LCO processing to improve refinery product value and diesel yield” címmel jelent meg.



ben történő – korlátozott részarányú – LCO feldolgozásról, de összességében az LCO-t kis értékű fűtőolaj-keverőkomponensnek tekintették, amelyet nehéz és költséges dízelgázolajjává alakítani hagyományos hidrogénező eljárással. Mindkét finomítóban egy új, nagynyomású gázolaj-kénmentesítő üzem épült 2005-re az ULSD-gyártás céljából, de egyiket sem tervezték közvetlen LCO-hidrogénezésre, mivel ehhez szükségesnek látszott egy addicionális aromástelítő lépés.

Az említett két FCC üzem tipikus LCO-hozama 10–12% volt, ami potenciálisan 250 kt/év gázolaj-keverőkomponenst jelentett a két finomítóban.

A Dunai Finomító DGHT3 jelű, nagynyomású (8 MPa) gázolaj-hidrogénező üzeme elegendő tervezési tartalékkal rendelkezett. A dízelgázolaj ismeretében a MOL DS Technológiafejlesztésen laboratóriumi reaktorkísérleteket végeztünk a DGHT3 üzemével megegyező műveleti paraméterekkel annak megállapítására, hogy az LCO hidrogénezése megvalósítható-e és melyek az optimális feltételek (1. ábra). A kezdeti kételyek ellenére a kísérletek során bebizonyosodott, hogy az LCO szabványos minőségű ULSD terméké alakítható a korszerű, nagynyomású hidrogénező technológia segítségével.

Üzemi kísérleti programot javasoltunk annak érdekében, hogy megerősítsük a laboratóriumi kísérletek eredményét valós üzemi körülmények között, és a Dunai Finomító DGHT3 üzemében 2006-ban megkezdődött az LCO hidrogénezése (2. ábra). A fej-

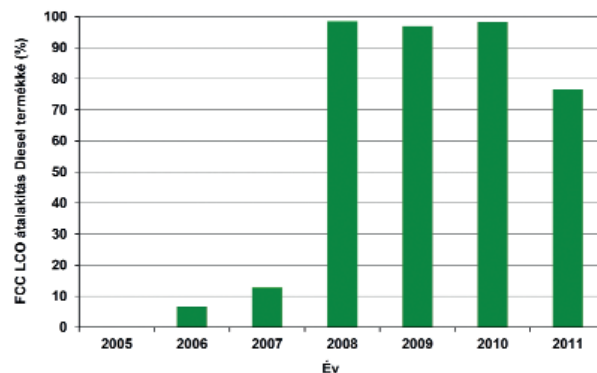


2. ábra. A Dunai Finomító DGHT3 üzeme

lesztést megelőzően a DGHT3 alapanyaga lepárlási gázolajokból, késleltetett koksizáló nehézbenzinből, könnyű koksizáló gázolajból és HDS-MHC (hydrodesulfurization-mild hydrocracking – kénmentesítő-enyhe hidrokrakkoló) üzemi gázolajból tevődött össze.

Az LCO maximum 7%-os részarányban történő DGHT3 üzemi hidrogénezése lehetővé tette, hogy a Finomító akár 120 kt/év mennyiségű fűtőolajat dízelgázolajjává alakítson, ami potenciálisan 25 M USD/év üzleti eredmény többletet jelentett a mai áron számolva. A folyamatos erőművi fűtőolajigény miatt az LCO-feldolgozás 2008-ig eleinte csak kismértékben nőtt, napjainkban azonban a finomítói hatékonyság érdekében feltétlenül ki kell használni ezt a lehetőséget (3. ábra).

A Slovaft továbbra is maradékhidrokrakk üzemében dolgozta fel az LCO-t. Ugyanakkor a DS Fejlesztésen a közvetlen gázolaj-kénmentesítő üzemi hidrogénezést is teszteltük a Bratislava Finomító HRP-7 jelű üzemére jellemző paraméterekkel, amely 2008-tól kezdődően folyamatosan fogad ciklusolajat. A maradékhidrokrakk üzemekben előnyösen keverik a vákuumdesztillációs maradék (gudron) alapanyagot nagy aromástartalmú aromakkal (pl. LCO), mivel azok segítenek megakadályozni az aszfalten vegyületek kiülepedését a berendezésekben és ezáltal hossz-



3. ábra. A dízelgázolajjává alakított LCO részaránya a Dunai Finomítóban 2005–2011 között

szabb folyamatos üzemvitelt tesznek lehetővé. A szigorú műveleti paraméterek (magas nyomás és hőmérséklet) miatt azonban az LCO jelentős része elkrakkolódik és benzinformáspont-tartományú, illetve alacsonyabb értékű könnyű szénhidrogén termékeket képez, ami a hidrogénfogyasztást is növeli. A maradékhidrokrakk üzemű közepdesztillátum termékek további hidrogénezést igényelnek nagy kén- és aromástartalmuk, illetve kis cetán-számuk miatt, ami tovább növeli az LCO-feldolgozás költségét.

A MOL Csoport Downstream divíziójának jelentős hatékonyságnövelést célzó akciója, az „Új Downstream Program” keretein belül javasoltuk az LCO-alapú, kénmentesítő üzemi, közvetlen hidrogénezéssel történő dízelgyártást az INA rijekai és sisaki finomítóiban is. A nagyobb üzemeltetési költségek ellenére a dízelgázolaj és fűtőolaj ára közötti különbség (200–300 USD/t) garantálja a jó üzleti eredményt.

Az LCO hidrogénezésekor sokkal nagyobb a kémiai hidrogénigény, mint a lepárlási gázolajok esetén, így ez a legjelentősebb költségtényező. Egy nagynyomású (6–8 MPa) gázolaj-hidrogénező üzemben az LCO feldolgozásakor háromszor több hidrogén fogy az orosz kőolajból származó lepárlási gázolajhoz képest, ami 20 USD/t-val nagyobb feldolgozási költséget jelent, ha a hidrogént földgáz vízgőzös reformálásával állítják elő.

A MOL DS Fejlesztésen célul tűztük ki költséghatékonyabb lehetőségek feltárását további kutatással. Az ULSD-korszak ellenére a legtöbb finomítóban még mindig rendelkezésre állnak a kisnyomású (3–4 MPa) hidrogénező üzemek petróleum és könnyűgázolaj kénmentesítésére. A 2009 és 2011 közötti időszakban először különböző katalizátorrendszerekkel laboratóriumi reaktorteszteket, majd a Dunai Finomító DGHT1 jelű petróleum- és könnyűgázolaj-hidrogénező üzemében sikeres üzemi kísérletet végeztünk. Az üzemkísérlet során az orosz könnyűgázolaj alapanyag LCO-tartalmát egészen 20%-ig növeltük, miközben 10 mg/kg-nál kisebb kén-tartalmú dízelgázolaj-keverőkomponenst sikerült előállítani. Az LCO-komponens hidrogénfogyasztása 3,3 MPa reaktornyomás esetén a kénmentesítő katalizátor adott aktivitása mellett csak 15%-a volt a nagynyomású hidrogénezésnél tapasztalt értéknek, ami nagyfokú rugalmasságot és költséghatékonyságot biztosít a finomító működésében.

Természetesen az LCO-feldolgozás tervezésekor további szempontokat is figyelembe kell venni, beleértve a technológiai korlátokat, az üzembiztonságot, a termékminőséget, a dízelgázolaj termék adalékolási igényét és a katalizátor-élettartamot. Ezeket a tényezőket részletesen tárgyaljuk a „Technológiai szempontok” fejezetben.

Amennyiben lehetséges az LCO gazdaságos átalakítása motorhajtóanyaggá, akkor joggal merül fel az igény az LCO-hozam nö-



velésére is. Az FCC üzemi LCO-hozamnövelés és minőségjavítás lehetőségei az elmúlt években szintén a MOL fejlesztéseinek közeppontjában álltak.

Lehetőségek az FCC üzemi LCO-hozam növelésére és minőségének javítására

A fluid katalitikus krakkolás során jellemzően nagy olefin- és aromástartalmú termékek keletkeznek, amelyek nem ideális dízelgázolaj-komponensek. A dízelforráspont-tartományba eső nyers LCO termék aromástartalma közel 80%, többgyűrűs aromástartalma 50% feletti és cetánindexe 24 alatti (**1. táblázat**). Az EN590:2009 +A1:2010 számú EU dízelgázolaj-szabvány előírása a többgyűrűs aromástartalomra legfeljebb 8%, a cetánindexre legalább 46 [1].

Jellemzők	Mértékegység	LCO	LLCO ¹	EN590 dízel-előírás
Hozam	%	14,5	20,3	
Sűrűség 15°C-on	kg/m ³	952,4	940,0	820–845
Desztillációs jellemzők, ASTM D86	–			
Kezdforrpont	°C	218	197	
10 v/v%	°C	236	211	
50 v/v%	°C	272	261	
90 v/v%	°C	321	330	
95 v/v%	°C	333	342	max. 360
Végforrpont	°C	339	348	
Zárttéri lobbanáspont	°C	113	96	min. 55
Törésmutató 20 °C-on	–	1,5572	1,5473	
Monoaromás	%	23,8	30,6	
Diaromás	%	51,1	40,8	
Három- és többgyűrűs	%	4,1	7,5	
Többgyűrűs aromás	%	55,2	48,3	max. 8
Összes aromás	%	79,0	78,9	
Kéntartalom	mg/kg	470	540	max. 10
Cetánindex	–	20,3	23,4	min. 46,0

¹ Könnyű (light) LCO: szélesebb forrásponttartományú LCO-frakció

1. táblázat. Tipikus FCC LCO- és LLCO-hozamok, illetve főbb termékjellemzők a Dunai Finomítóban

A technológiai liszenszorok, katalizátorgyártók és olajvállalatok folyamatos kutatásokat végeznek az FCC-technológia optimalizálása érdekében, hogy az minél inkább gázolaj- (LCO) szelektív legyen és az LCO minősége megközelítse a szokásos dízelgázolaj-keverőkomponensekét.

A MOL szintén részt vett ilyen együttműködésben, amelynek során a megfelelő titoktartási szerződések keretében előzetesen értékelte a korai fejlesztések eredményeit. Ha az új ipari technológiák fejlesztése sikerrel jár, a gázolajszelektív FCC üzemi jelentősen különbözni fog napjaink üzemétől és az LCO minősége, beleértve az aromástartalmát és cetánszámát, nagymértékben javulni fog.

A jelenleg kereskedelmi forgalomban kapható, ún. LCO-szelektív katalizátorok alkalmazásával jelentős hozamváltozás, míg a termékminőségben kismértékű javulás érhető el a meglévő FCC üzemekben, bár a hozamstruktúra elsősorban a reaktor hőmérsékletével és a hozzá tartozó reaktor-regenerátor technológiai paraméterekkel szabályozható [2].

A benzinszelektív krakkoló katalizátorokkal ellentétben a gázolajszelektív katalizátoroknál kisebb a zeolit/mátrix arány, vagyis az aktivitás elsősorban a mátrixban (alumínium-oxid-alapú hordozó) jelentkezik. Mivel a kis zeolittartalmú katalizátorok nemcsak kisebb benzin- és nagyobb LCO-hozamot eredményeznek, hanem kisebb konverziót is, célszerűen maradékrakkoló katalizátorral kombinálják azokat, hogy ellensúlyozzák a maradékhhozam növekedését.

Akár alkalmaznak LCO-szelektív katalizátort, akár nem, a nagyobb LCO-hozam eléréséhez csökkenteni kell az FCC reaktor hőmérsékletét, a katalizátor/olaj arányt és növelni kell a maradék- (MCB – main column bottom) recirkulációt egészen addig, amíg azt az aktuális technológiai korlátok megengedik. A kis szigorúság (konverzió) miatt azonban csökken a kokszhozam is, ami a reaktor-regenerátor hőmérsékletét kedvezőtlenül befolyásolja. A hőmérséklet egyensúlyának fenntartása érdekében általában növelni kell a betáplált alapanyag hőmérsékletét.

A maximális gázolaj-szelektivitás eléréséhez a katalizátor ún. MAT- (Micro Activity Test) aktivitását is csökkenteni kell. Ehhez vagy kisebb mértékű friss katalizátor adagolást vagy új típusú katalizátort kell alkalmazni. Az előbbi megoldás nemkívánatos mellékhatása lehet, hogy a rendszerben cirkuláló egyensúlyi katalizátoron nagyobb lesz az alapanyagból származó szennyező fémek (Ni, V) koncentrációja, ami kedvez a dehidrogéneződési reakcióknak, ezáltal a szükségesnél nagyobb mértékben nő a termékek aromástartalma, valamint a hidrogén- és kokszhozam is.

A Dunai Finomító FCC üze 1984-ben épült UOP liszensz alapján, a reaktor-regenerátor „side by side” típusú, a többszöri átalakítások eredményeként az üzem aktuális kapacitása 1,4 M tonna/év. Bár az üzemet mindig maximális oktántömeg (motorbenzinhozam és oktánszám) céljával üzemeltették, eredetileg kétféle üzemmódra tervezték. A gázolajszelektív módban a

tervezési LCO-hozam 40% feletti volt, míg a benzinszelektív módban 19% az akkori, hidrogéneztelen vákuumgázolaj alapanyagra.

Napjainkban az FCC üzem már kénmentesített, hidrogénezett és enyhén hidrokrakkolt alapanyagot dolgoz fel, és az eredetileg beépített berendezések közül néhány, például az alapanyag-előmelegítő csőke-mence már más feladatot lát el. Ezek miatt az elérhető LCO-hozam korlátozott. További korlátot jelent a recirkuláltható maradék (MCB) mennyisége, valamint az LCO-termékszűrő, és -kítároló rendszer.

Az elmúlt években számos újonnan fejlesztett gázolajszelektív FCC-katalizátort vizsgáltunk a DS Fejlesztés laboratóriumaiban (**4. ábra**) szoros együttműködésben a katalizátorgyártókkal, hogy feltárhassuk a technológia előnyeit a hagyományos benzinszelektív katalizátorokhoz képest. A DS Fejlesztés



4. ábra. A MOL DS Fejlesztés MicroDowner reaktora FCC-katalizátorok vizsgálatához



tés 2008-ban szerződést kötött a UOP LLC-vel (FCC liszenszor) megvalósíthatósági tanulmány elkészítésére, amelyben hozambecslés is szerepelt a maximális gázolaj-üzemmódra a korlátok figyelembevételével. A KBC (ipari tanácsadó és szoftvergyártó) FCC Sim programcsomagjával végzett szimulációs számításaink és laboratóriumi méréseink, valamint a tanulmány alapján várható hozamváltozásokat és főbb technológiai paramétereket a 2. táblázatban foglaltuk össze.

Jellemzők	Mértékegység	Változás LCO üzemmódban
Reaktor riser (Rx) hőmérséklete	°C	-28
Regenerátor (Rg) hőmérséklete	°C	+12
Alapanyag-előmelegítés hőmérséklete	°C	+20
Katalizátor/olaj arány	–	-2,5
Maradék- (MCB) recirkuláció	v/v%	+7
Katalizátor MAT-aktivitása	%	-5
Hozamok		
Fűtőgáz (C ₂ -)	%	-0,17
Propán	%	-0,47
Propilén	%	-1,12
n-Bután	%	-0,33
i-Bután	%	-2,45
Butilén	%	-0,02
Benzin (D86 95 v/v%, max. 195°C)	%	-2,70
LCO (D86 95 v/v%, max. 340°C)	%	+5,70
HCO (D86 95 v/v%, max. 390°C) ¹	%	+2,00
Maradék (MCB)	%	0,00
Koksz	%	-0,44
Konverzió	%	-8,0
Benzin KOSZ/MOSZ ²	–	-4,1/-3,8
LCO sűrűsége 15°C-on	kg/m ³	-28
LCO cetánindexe	–	+5,7

¹ HCO (heavy cycle oil): nehéz ciklusolaj; ² KOSZ: kísérleti-, és MOSZ: motoroktánszám

2. táblázat. FCC üzemi technológiai paraméterek, termék-hozamok és -minőségek várható változása a benzinszelektív üzemmódhoz képest

Természetesen egyszerűbb, gyorsabb és rugalmasabb lehetőség is rendelkezésre áll a finomítók számára, amely alkalmas az LCO-hozam növelésére. Az FCC benzin-LCO desztillációs vágási pont bármikor optimálható a piaci igényeknek megfelelően, illetve a helyi LCO-feldolgozó kapacitás függvényében. A katalizá-

tor és a reaktor-regenerátor paraméterek változtatásával ellentétben a vágási pont módosítása nem befolyásolja a C₃-C₄ hozamot, a termékek olefintartalmát vagy a reaktor-regenerátor hőmérlegét. A Dunai Finomító FCC üzemében 2012-ben üzemi kísérletet hajtottunk végre, amelynek során a két termék közötti desztillációs vágási pont változtatásával egy szélesebb forráspont-tartományú, könnyű LCO-frakciót (LLCO – light LCO) állítottunk elő. Az eredményeket az 1. táblázatban foglaltuk össze. Az így előállított LLCO terméket sikeresen feldolgoztuk a DGHT3 üzemben. Előreláthatóan az LCO-szelektív üzemmód és az optimált desztillációs vágás együttes alkalmazásával a százhalombattai FCC üzem LCO-hozamát 11,5%-kal lehet növelni mérsékelt beruházási költséggel, ami 160 kt/év többlet LCO-t jelent, míg 80 kt/év növekedés érhető el beruházás nélkül.

Technológiai szempontok

Az FCC üzem működése

Egy kereskedelmi forgalomban kapható LCO-szelektív és egy benzinszelektív katalizátor MAT-vizsgálati eredményeit összehasonlítva látható a katalizátor típus jelentősége azonos műveleti paraméterek mellett. Az 5. és 6. ábrákon összehasonlítottuk a vízgőzzel deaktivált friss katalizátormintákat azonos vizsgálati körülmények között, két különböző katalizátor/olaj aránynál.

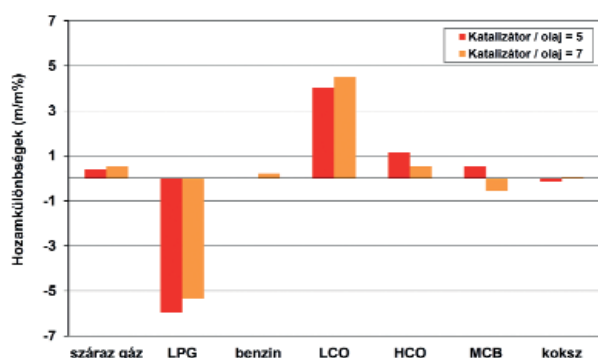
LCO-szelektív katalizátor alkalmazásakor, csakúgy, mint a konverzió és benzinhozam esetén, a C₃-C₄ frakció, a propilén és a C₄-olefinek hozamának csökkenése várható. Különösen a C₄-frakció kisebb olefintartalma és az FCC-benzin alacsonyabb oktánszáma befolyásolja az FCC üzemi blokkban előállított oktántömeget – beleértve az ETBE (etil-terc-butil-éter) és a Hidrogén-fluoridos Alkiláló (HFA) üzemeket, amelyek a C₄-frakcióból gyártanak magas oktánszámú motorbenzin-keverőkomponenseket.

Mind a propilénhozam csökkenése, mind az oktánszámvesztés kompenzálható ZSM-5 zeolit típusú katalizátoradalek alkalmazásával, bár ebben az esetben a propilénhozam, a C₄-hozam és olefintartalom, illetve a benzin-oktánszám megőrzése a friss katalizátorra vonatkoztatva közel 8% ZSM-5 adagolását igényelné.

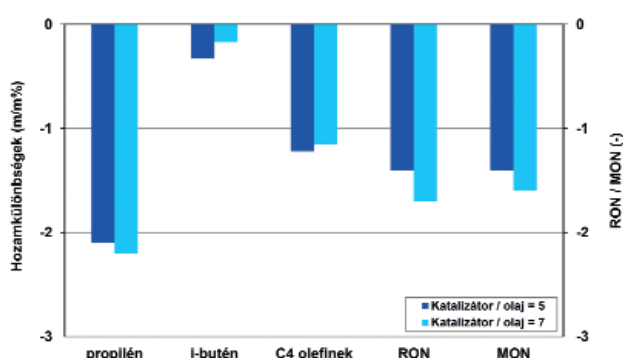
Fontos meghatározni a finomítók termékhozamra és oktántömegre vonatkozó igényét, és együttműködni a katalizátorgyártókkal az optimális FCC-katalizátorformula kiválasztása érdekében.

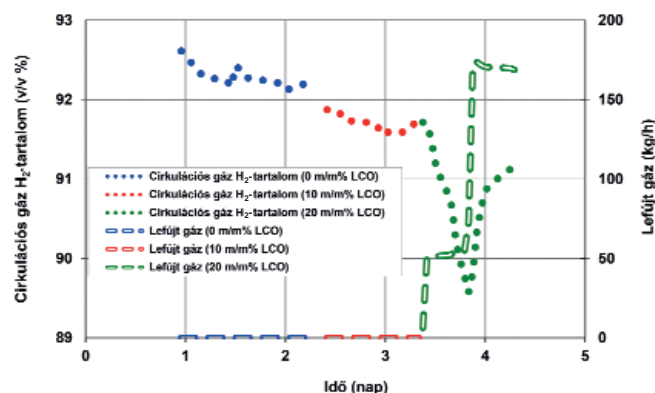
A maximális LCO-hozam nem érhető el az FCC reaktor hőmérsékletének csökkentése nélkül, ugyanakkor figyelembe kell venni a technológiai paraméterek alapvető elméleti korlátait. Az 500 °C-hoz közeli reaktor-hőmérsékletnél felmerül a kockázat, hogy az alapanyag nem megfelelő mértékű elpárolgása és az aromás ve-

5. ábra. A hozamok változása a MAT-tesztek során (LCO-szelektív vs. benzinszelektív katalizátor)



6. ábra. Az olefinvegyületek koncentrációjának és az FCC-benzin kísérleti (RON) és motoroktánszámának (MON) változása a MAT-tesztek során (LCO-szelektív vs. benzinszelektív katalizátor)





7. ábra. Az LCO-bedolgozás hatása a cirkulációs gáz hidrogén-tartalmára 3,3 MPa reaktornyomásnál

gyületek kondenzációja kokszképződéshez vezethet a berendezésekben [3]. A nagyobb maradék-recirkuláció miatt az alapanyagban megnő a nagy molekulatömegű, többgyűrűs aromások koncentrációja, ami tovább erősíti a kokszképzési hajlamot.

Mindezek ellenére a maximális gázolajhozam érdekében néhány finomítóban évekig sikeresen működtettek FCC üzemeket ebben a hőmérséklet-tartományban. Korszerű berendezések és tervezői eszközök állnak rendelkezésünkre, amelyekkel a kokszképződés kontrollálható.

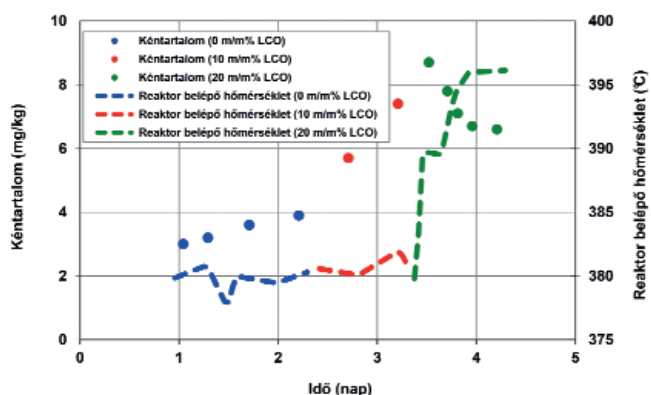
Ajánlott rendszeresen ellenőrizni az alapanyag forráspont-tartományát szimulált desztillációs gázkromatográfiával (SIMDIS) és az alapanyag elpárolgását egyensúlyi elgőzölögtetési számításokkal a reaktor-felszállóvezeték (riser) belépő körülményei mellett. A hidrokrakkolt alapanyagok kevésbé hajlamosak a kokszképzésre, továbbá a nagy mátrixaktivitású és kis ritkafelemtartalmú LCO-szelektív katalizátorok enyhítik a kockázatot azáltal, hogy a nehéz szénhidrogéneket aktívabban krakkolják. Fontos továbbá a megfelelő alapanyag-porlasztás és vízgőzbevezetés a reaktorba.

Az LCO hidrogénezése

Az üzemi kísérletek eredményei azt mutatták, hogy 15–20% feletti LCO-tartalom a gázolaj-hidrogénező üzem alapanyag-keverékében jelentősen növeli az exotermitást megfelelő direkt hűtés (kvencs) alkalmazása nélkül. A tényleges határ a reaktor kialakításától, az alkalmazott nyomástól, a katalizátor típusától és az alapanyagban lévő egyéb krakkolt komponensek részarányától függ.

Amikor megkezdjük az LCO-adagolást a hidrogénező üzem alapanyagába, akkor a kémiai hidrogénfogyás ugrásszerűen nő, és a reaktorkörben azonnal csökken a hidrogén parciális nyomása. Az LCO-részarány növelésének a hidrogén parciális nyomásra gyakorolt tranziens hatása a 7. ábrán látható. Ha a hidrogén parciális nyomását (cirkulációs hidrogén-tisztaság) nem szabályozzuk, a kénmentesítési reakció sebessége drasztikusan lecsökken, és a termék kénmentesítési tartalma megnő. Ez magasabb reaktor belépő hőmérsékletet igényel, ami gyorsítja a katalizátor öregedését (8. ábra). A hatás kevésbé szembetűnő a nagynyomású hidrogénezőkben főként akkor, ha az alapanyag nagy mennyiségű krakkolt komponenst tartalmaz. A kisnyomású kénmentesítés azonban különösen érzékeny a hidrogén parciális nyomására, és ezekben az üzemekben a hidrogénrendszert általában nem az LCO-feldolgozáshoz szükséges friss hidrogén, illetve lefújt és recirkulációs gázmennyiségekhez tervezték.

Fontos a cirkulációs gáz hidrogéntartalmának online elemzése. A hatékony hidrogénkaszád vagy visszanyerő rendszer elősegíti a működési költségek csökkentését.



8. ábra. Az LCO-bedolgozás hatása a hidrogénező katalizátor aktivitására 3,3 MPa reaktornyomásnál

Az LCO-feldolgozásra vonatkozó döntésnél általában meghatározó a katalizátor-élettartam, illetve a ciklusidővel kapcsolatos kockázat, bizonytalanság [4]. A katalizátorszállítók a katalizátor teljesítményére vonatkozó előrejelzéseikben az LCO-feldolgozást rendszerint magasabb átlagos ágyhőmérséklettel jellemzik az LCO nélküli üzememódhoz képest, amit a laboratóriumi tesztek is megerősítettek. Ez általában 5–10%-kal rövidebb ciklus-hossz-előrejelzést jelent, ha az alapanyag LCO-tartalmát 10%-ig növeljük. A valós működésben ugyanakkor nehéz ezt a különbséget kimutatni a kapacitás-kihasználtság és az alapanyag-minőség változásai, valamint különféle üzemzavarok miatt a tipikus katalizátor ciklusidő 1–4 éves időintervallumában.

Az üzemeltetők a nagynyomású kénmentesítőknél valójában nagyobb exotermitást tapasztaltak a reaktorok hossza mentén, ezáltal kisebb belépő hőmérséklet elegendő volt ugyanahhoz a termék-kéntartalomhoz, miközben az ágyhőmérsékletek a reaktor alja felé megemelkedtek. Ez felgyorsult katalizátoröregedéshez vezethet az alsóbb ágyakban, a felső rétegekben ugyanakkor marad tartalék aktivitás. Az átlagos ciklusidő valószínűleg nem változik jelentősen a tényleges üzemelés során, amennyiben megfelelő hidrogén parciális nyomás tartható fenn.

Hosszú ideig tartó feldolgozás alatt az LCO nagy többgyűrűs aromástartalma gyorsíthatja a kokszképződést a katalizátoron, amíg azonban az LCO aránya az alapanyagban 10% alatt van, jelentős hatás nem várható. Az LCO-arány növelését nagyobb valószínűséggel korlátozzák egyéb technológiai szűk keresztmetszetek, valamint a termék gázolaj minősége. Ennek ellenőrzése folyamatban van a Dunai Finomító DGHT3 üzemének jelenlegi katalizátorciklusa során, növelt LCO-feldolgozás mellett.

Tisztán LCO-alapanyag hidrogénezése a meglévő üzemekben a jelenlegi technológia, a hidrogénrendszer és a reaktorhőmérséklet-szabályozás alapvető átalakítása nélkül nem valósítható meg.

Termékminőség

A termékminőség szempontjából a feldolgozható LCO mennyiségét a dízelgázolaj sűrűsége, cetánszáma és többgyűrűs aromástartalma mint szabványban rögzített érték határozza meg. Az aromástelítés és azzal összefüggő sűrűségcsökkenés tekintetében a laboratóriumi és üzemi kísérletek eredményei nagy különbséget mutattak a NiMo és a CoMo típusú kénmentesítő katalizátorok teljesítménye között. A 6 MPa-nál nagyobb reaktornyomás tartományban, ahol a NiMo típusú katalizátorok aktívak, az LCO többgyűrűs aromástartalma csaknem teljesen (kb. 90%-ban) monoaromásokká alakult, de utóbbiak csak kismértékben (kb. 10%-ban) telítődtek. A tipikus sűrűségcsökkenés ezeken a



katalizátorokon az alapanyag sűrűségére vonatkoztatva 15–20 kg/m³.

A kisnyomású üzemekben a CoMo katalizátorok felülműlják a NiMo típus teljesítményét mind kénmentesítő, mind pedig aromástelítő aktivitás tekintetében, és stabilitásban (élettartam) is. A nagynyomású NiMo rendszerek által nyújtott aromástelítés azonban 3–4 MPa-on nem érhető el, ezért a termék többgyűrűs aromástartalma ilyen körülmények között meghaladhatja az EN 590 szabvány max. 8%-os előírását (3. táblázat).

A finomító fő dízelgázolaj-komponense többnyire a modern, nagynyomású hidrogénezőből vagy párlathidrokrakkból származó termék, ezért a keverő üzem a kisnyomású kénmentesítőben előállított gázolaj felhasználásával is tudja biztosítani a szabvány előírásainak megfelelő üzemanyagot.

A dízelgázolaj aromástartalmának növekedésével a cetánszámjavító adalékkal szembeni érzékenység csökken, amit az adalékköltség tervezésénél figyelembe kell venni.

A Slovnaft 2011-ben tesztelte az LCO-feldolgozást nagynyomású párlathidrokrakk üzemében, 14 MPa reaktor kilépő nyomáson. Az üzemet eredetileg max. 15% LCO-tartalmú alapanyagra tervezték. A hidrokrakk gázolajat kiváló minőségben állították elő, de a JET A1 sugárhajtómű üzemanyag füstölési pont (min. 19 mm) és aromástartalom (max. 20 v/v%) előírása legfeljebb 12% LCO-tartalmú alapanyag-feldolgozását tette lehetővé.

A finomítói termelésütemezésnek lehetőség szerint előnyben kell részesítenie az LCO gázolajkénmentesítő üzemi feldolgozását, a jobb hozamstruktúra és a kedvezőbb üzemeltetési költség érdekében.

Logisztika

Az LCO a nagy aromástartalom következtében hatékony oldószer, jól oldja a gyantákat és nehéz szénhidrogéneket, így a termékvezetékek és tárolótartályok belső felületéről felszabadítja a lerakódott szennyeződést. Ez a nemkívánatos tisztító hatás lerakódásokat és eltömődést okozhat a berendezésekben, az alapanyagszűrőn átjutva a feloldott gyanta meggyorsítja a katalizátor kokszolódását és deaktiválódását a hidrogénező üzemben. Az LCO tárolása és szállítása megköveteli a rendszeres csővezeték-

és tartálytisztítást, inertgáz-párna alkalmazását a tartályokban, hatékony alapanyagszűrést a feldolgozó üzemekben és körültekintő termelésütemezést. Figyelmet kell fordítani az LCO-t tartalmazó alapanyagok gyanta- és szilárd szennyező tartalmának rendszeres elemzésére.

Az LCO-feldolgozás gazdasági értékelése

A motorhajtóanyagok és a nehéz, illetve könnyű fűtőolajok közötti 200–300 USD/t árkülönbözet világos üzenetet hordoz azon finomítók számára, amelyek az LCO-t ma is fűtőolajként alkalmazzák. Az LCO-hidrogénezés jelentős eredményt ígér annak ellenére, hogy az üzemeltetési költsége viszonylag magas, 50–55 USD/t közötti, amennyiben a hidrogén előállítása földgáz vízgőzös reformálásával történik. A Dunai Finomító 2006 és 2011 között 368 kt LCO-t dolgozott fel dízelgázolajjára, ami 96 millió USD-ral növelte a nettó eredményt.

Az utóbbi évek jellemző tendenciája volt, hogy a finomítók nehézfűtőolaj-hozama csökkent, vagy a fűtőolaj teljesen eltűnt a termékpalettáról. A maradékok feldolgozása késleltetett kokszoló vagy maradékhidrokrakk technológiával jó megtérülést eredményezett. A fűtőolajigény egyes régiókban csökkent, mivel sok erőmű földgáztüzelésre váltott a kedvezőbb gázárak (palagáz) vagy a környezeti kibocsátások (SO_x- és CO₂-emisszió) csökkentése érdekében. Hosszú távon a környezetvédelmi előírások további szigorodásával valószínűleg csökken a fűtőolaj hajózási célú felhasználása is.

Azokban a finomítóknak, ahol a nehéz fűtőolaj viszkozitásának beállításához továbbra is szükség van hígító komponensre, az LCO helyettesítésére a következő lehetőségek állnak rendelkezésre:

- Mivel a motorbenzinigény csökken és az aromás oldószereket is egyre inkább vízbázisú oldószerek váltják fel, a C₉⁺-aromások feleslegben vannak, bár ezek felhasználását a fűtőolaj-lobbanáspont előírása korlátozza.
- Olefingyári pirolízisolaj.
- FCC nehéz ciklusolaj (HCO).

Ha az LCO tüzelése a saját vízgőzszükséglet fedezése miatt

3. táblázat. Az alapanyagok és a termékek jellemzői az LLCO hidrogénezésekor a DGHT1 üzemben

Jellemzők	Mértékegység	Kevert alapanyagok			Termékek		
		0% LCO	10% LCO	20% LCO	0% LCO	10% LCO	20% LCO
Sűrűség 15°C-on	kg/m ³	835,8	847,7	858,2	831,0	843,1	853,9
Desztillációs jellemzők, ASTM D86							
Kezdforrpont	°C	190	191	192	220	219	220
5 v/v%	°C	223	224	225	235	233	234
10 v/v%	°C	234	235	234	240	239	239
50 v/v%	°C	266	267	268	265	265	267
90 v/v%	°C	299	302	305	298	300	304
95 v/v%	°C	307	311	316	306	310	314
Végforrpont	°C	317	324	330	317	324	332
Monoaromás	%	19,7	19,8	21,2	23,3	24,3	26,0
Többgyűrűs aromás	%	8,1	13,0	17,1	5,2	9,0	13,5
Összes aromás	%	27,8	32,8	38,2	28,4	33,3	39,5
Kéntartalom	mg/kg	6533	6108	5729	3,4	6,6	7,4
Nitrogéntartalom	mg/kg	33,8	92,0	139,0	6,8	52,3	92,0
Cetánindex	–	53,4	48,5	44,7	55,9	50,7	46,5
Cetánszám	–	–	–	–	54,1	49,1	44,9



szükséges, akkor érdemes megvizsgálni, hogy a gőzvásárlás egy közeli erőműből életképes lehetőség-e. Megtérülési számításaink feltételezik, hogy a fűtőolaj-keverés és a finomító hőenergia-ellátása LCO nélkül is megvalósítható, az LCO értékét fűtőolaj-áron vettük figyelembe.

Ha az FCC üzem működését optimalizáljuk nagyobb LCO-hozam elérése érdekében, akkor a feladat bonyolultabb, mivel az eredmény függ a fűtőolaj és dízelgázolaj, motorbenzin, PB, propilén közötti árkülönbségtől, illetve az oxigenát (ETBE) és alkiláló (HFA) üzemek működési költségétől is. A gazdasági számításoknál figyelembe vett termékértékeket a nehéz fűtőolajhoz viszonyítva a **4. táblázatban** foglaltuk össze. Az **5. táblázatban** három lehetséges esetet ismertettünk, melyekben a Dunai Finomító FCC üzeme maximális LCO-üzemmódban működik. Az 1. esetben csak az FCC benzin-LCO desztillációs vágási pontot és e két termék hozamát változtattuk. A 2. eset optimált reaktor-regenerátor működést és kisebb propilén-, illetve C₄-olefinhozamokat feltételez, ZSM-5 katalizátor adalékolás nélkül. A 3. példa hasonló a másodikhoz, de a C₃-C₄ hozam csökkenését ZSM-5 adalékolással kompenzáljuk, így az FCC benzin oktánszáma sem csökken. Az

4. táblázat. A gazdasági számításokhoz használt termékértékek a nehéz fűtőolajhoz képest, USD/t

Termékek	Árkülönbség
Fűtőgáz	-16
Propilén	826
PB	281
Vegyipari benzin	204
Motorbenzin	214
Dízelgázolaj	314
Etanol	759

5. táblázat. Az FCC üzemi LCO-szelektív üzemmód hatása a finomítói termékmennyiségekre és gazdaságosságra a benzin-szelektív alapesethez képest

Jellemzők	1. eset	2. eset	3. eset
Termékmennyiségek változása, kt/év			
Fűtőgáz	+0,8	-4,8	+0,8
Propilén	0	-17,2	0
PB	0	-10,5	0
Vegyipari benzin	+0,8	+0,8	+0,8
Motorbenzin	-81,2	-72,8	-103,6
Dízelgázolaj	+79,6	+78,2	+78,2
Fűtőolaj	0	+30,8	+30,8
FCC koks	0	-7,0	-7,0
Gazdaságosság, M USD/év			
Termékek értéke	+7,8	-5,1	+7,0
Változó költség	+3,5	-1,9	+3,3
Nettó eredmény	+4,3	-3,2	+3,7

5. táblázatban ismertettük a finomítói termékmennyiségek változását és a gazdasági számítások eredményeit.

Az FCC-ETBE-HFA-DGHT3 üzemek komplex anyagmérlegét és működési költségét mindhárom esetben meghatároztuk. A többlet-alapanyagigényt (hidrogén, etanol, izobután) a változó

költség tartalmazza. A motorbenzin-keverés költségeit és esetleges szűk keresztmetszeteit nem elemeztük. A jelenlegi változó-kony piaci környezetben az egyszerűsített vizsgálat azt mutatta, hogy az LCO-szelektív FCC üzemmód gazdaságossága még 100 USD/t dízelgázolaj-motorbenzin árkülönbözöt esetén is kérdéses.

A legtöbb esetben a katalizátorrendszert optimalizálni kell, hogy a propiléntermelés fenntartható legyen, a maradékhozam ne növekedjen és a motorbenzin-keveréshez szükséges oktántömeget biztosíthassuk.

Ha azonban a gazdaságosságot a finomítói optimalizáció összefüggésében szemléljük, eltérő következtetésre juthatunk. Ha van lehetőség a katalitikus benzinreformáló üzem kapacitásának, szigorúságának vagy a hidrogénkinyerés hatékonyságának változtatására, és így módon a hidrogén-előállítás költségének csökkentésére, eltérő minőségű kőolajok feldolgozására, vagy ha a kedvezőbb hozamstruktúra kisebb kőolaj-feldolgozást tesz lehetővé, akkor az LCO-üzemmód gazdaságossága változni fog. A finomítói rendszerek bonyolultsága miatt azonban ezeket a lehetőségeket csak részletes LP-modellezéssel (a kőolajipari termelés optimalizáláshoz alkalmazott lineáris programozási módszer) lehet feltárni, és így a valódi optimumot megállapítani.

A kutatók, fejlesztők és technológusok feladata és felelőssége, hogy az LCO-gyártással, -feldolgozással kapcsolatos tudásanyagot megismerjék és az LP-modelleket részletes, megbízható adatokkal töltsék fel, ami lehetővé teszi, hogy a MOL Csoport Downstream divíziója ezt a technológiát eredményesen alkalmazza.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS. A szerzők ezúton is szeretnék kifejezni köszönetüket a MOL Csoportban dolgozó kutatóknak, technológusoknak és üzemi személyzetnek, akik aktívan részt vettek a cikkben ismertett fejlesztési munkában és hozzájárultak annak sikeréhez.

IRODALOM

- [1] Vasant P. Thakkar, Suheil F. Abdo, Visnja A. Gembicki, James F. Mc Gehee, LCO upgrading, a novel approach for greater added value and improved returns, UOP LLC, 2012. augusztus.
- [2] Phillip K. Niccum, KBR: Maximizing diesel production in the FCC centered refinery, 12th International Down-stream Technology&Strategy Conference, Rome, 22–25 May 2012.
- [3] FCCU reactor and transfer line coking. The Catalyst Reports, BASF Corp. http://www.refiningonline.com/engelhardkb/crep/TCR5_45.htm, 2012. augusztus.
- [4] Roberto Galiasso Tailleir, Catalyst deactivation during LCO upgrade to high quality diesel, Proceedings of European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6), Copenhagen, 16–20 September 2007.

ÖSSZEFOGLALÁS

Valkai István, Wahné Horváth Ilona, Balassa Mária, Nagy Bence, Sági Richárd: **Fluid katalitikus krakk üzemi könnyű ciklusolaj feldolgozása a finomítói dízelgázolaj-hozam növelése érdekében**

A régióban tapasztalható növekvő dízelgázolaj-igény kielégítése céljából a MOL Downstream (DS) Technológiafejlesztés az elmúlt években jelentős erőfeszítéseket tett olyan új eljárások kutatására és megvalósítására, amelyek alkalmasak jó minőségű középdesztillátum (gázolaj, petróleum és sugárhajtómű üzemanyagok) előállítására kisebb értékű finomítói anyagáramokból. A nemzetközi finomítói trendekkel összhangban a fluid katalitikus krakk (FCC) üzemi könnyű ciklusolaj (LCO) hozamnövelése és minőségjavítása volt a fókuszban. A MOL Dunai Finomítójában évi 120 kt LCO hidrogénezésével, azaz fűtőolaj célú felhasználás helyett dízelgázolajjá alakításával az üzleti eredmény évi 25 M USD-ral növelhető. A közleményben a kapcsolódó kutatásokat, fejlesztéseket, üzemeltetési tapasztalatokat és a gazdaságosságot foglaltuk össze.



Körtvélyessy Gyula

■ Email: gyula@kortvelyessy.hu

Biztonsági adatlapok. Kilencedik rész

A veszélyes termékek azonosítása az adatlapokban

Bevezetés

Az elkövetkező közleményekben részletesen bemutatom, hogy az új 453/2010/EU rendelet (az ún. adatlap-rendelet [1]) milyen tartalmi követelményeket ad meg a biztonsági adatlap egyes szakaszaiban és alpontjaiban. Nem annyira a nyilvánvaló adatokról kívánok itt szólni, hanem azokról a praktikus kérdésekről és problémákról, amelyek egy adatlap elkészítésénél, vagy akár egy beérkező értékelésénél felmerülhetnek.

Az adatlap szakaszain, illetve alpontjain megyek sorban végig, kivéve azon eseteket, melyek egyszerre több helyet érintenek. A most tárgyalt kérdés is ilyen. A termékek azonosítása az 1.1 alpontban és a 3. szakaszban kerül előtérbe, de fontos kérdés akkor is, amikor a 8. szakaszban (Az expozíció ellenőrzése/egyéni védelem) vagy a 15. szakaszban (Szabályozással kapcsolatos információk) az anyagot egyrészt azonosítani kell, másrészt meg kell állapítanunk, hogy azonos-e a munkahelyi határértékek vagy a kibocsátási határértékek listáiban szerepelő anyagokkal a saját anyagunk. (A megfelelő limite(ke)t is persze közölnünk kell az adatlapban.) A 9., 11. és 12. szakaszban keverékek esetén gyakran előfordul, hogy az anyagkomponensek fizikai-kémiai, toxikológiai és ökotoxikológiai adatait lehet csak megadni, ekkor is azonosítani szükséges ezeket a komponenseket.

A termékünk anyag-e vagy keverék?

Az első és alapvető kérdés annak eldöntése, hogy a veszélyes termék, amiről az adatlap szól, anyag-e vagy keverék. Mivel régen is és most is sok függ ettől, az ipar hajlamos volt a régi adatlapokban nem megválaszolni ezt a kérdést. Sajnos, az adatlap-rendeletben sem szerepel kifejezett követelmény ennek megadására. Az iránymutatás sem teszi ezt kötelezővé. Nyilvánvalóan több olyan hely van az új adatlapban, ahonnan ez kiderülhetne, de az ipar már több „elkerülő” módszert is kitalált, hogy ezt az információt elrejtse:

- a tiszta anyagoknak is márkanévet adnak meg,
- egy összetevőjüket adják meg a 3. szakaszban (MDI izocianátnál pl. a 4,4'-izomert),
- összevonják a 2. szakaszban az osztályozási és címkézési információt,
- keverékeket is már most a CLP szerint osztályoznak.

Elvben pedig a 3.1. és a 3.2. alpontok kitöltésénél erre a kérdésre egyértelmű választ kellene adni: itt ugyanis a címben szerepel, hogy anyagról (3.1.) vagy keverékről (3.2.) van-e szó. Csak azt az alpontot kellene az adatlapba beírni, ahova a termékünk tartozik. Az adatlap-iránymutatás lábjegyzetben ugyanis megjegyzi, hogy ez az egyetlen „lehetőség”, hogy egy alpont kitöltetlenül maradjon. Nemigen találkoztam ezzel a megoldással, sokkal inkább azzal, hogy az alpontokat itt kihagyják, vagy összevonják, hogy itt se kelljen megadni, hogy anyagról vagy keverékről van-e szó.

Két előforduló hibát szeretnék itt említeni. Keverékek esetén a 3.2. pontban a komponensek megadásán belül is felsorolnak egy vagy több keveréket. Nyilván ebből készült az adatlapból leírt keverék is, de ilyenkor kötelező az elkészült keverék adatlapjának 3.2. pontjában felsorolni a kiindulási keverék(ek) mindazon komponenseit is, melyek koncentrációja a végső keverékben eléri azt a határt, mikortól azokat fel kell sorolni.

A másik hiba inkább tudatos döntés: amikor a gyártó el akarja titkolni, hogy mi is a termék, annak valamilyen ismert összetevőjét adja csak meg. Egy példával szeretném megmutatni, hogy miről van szó. Izocianát prepolimereknél nagyon fontos a gyártó számára, hogy ne derüljön ki, mivel reagáltatta például a kiindulási MDI-t (metilén-difenil-diizocianát). Ilyenkor a 3. pontban egyszerűen megadja a – termékben is bennmaradó – 4,4'-metilén-difenil-diizocianátot, annak százalékával, mint az ismert, a veszélyességet okozó összetevőt, ahelyett, hogy azonosítaná a prepolimert (melyben megmaradt kiindulási anyagként a 4,4' izomer egy része).

Bizalmasként kezelt anyagnevek

Jogilag továbbra is működik az a lehetőség, hogy titokban tartuk az anyagunk azonosságát. Ezt az OKBI-től kell kérvényeznünk. Alig két ilyen esetről tudok az elmúlt évtizedben, pedig rengeteg eltitkolással találkoztam (ezek szerint törvénytelenül). A 44/2000 EüM rendelet megadja, hogy milyen veszélyességű anyagok esetén lehetséges ez, de csak akkor, ha még nem térünk át a keverékünkkel a CLP osztályozásra. Ha igen, akkor már csak az Ügynökségtől kérhetjük ezt az anonimitást, nagyságrenddel nagyobb összegért. Ilyen engedély birtokában természetesen a címkén se kell megadnunk a veszélyes anyag(komponenst).



Az anyagok elnevezése

Az adatlap-rendelet a CLP rendelet [2] 16. cikkére hivatkozik, mikor az anyagok azonosítására használt adatokat megadja. Ebben egy olyan leírás van, melyet bonyolultsága miatt senki nem vesz figyelembe. Számunkra három fontos üzenete van:

- Amennyiben a CLP rendelet VI. mellékletében szerepel az anyagunk, tehát harmonizált (Európában kötelező) osztályozás vonatkozik rá, akkor az ott megadott elnevezést (és persze az osztályozást) kell elsősorban alkalmaznunk. Ott sajnos csak angol nevek vannak, még a magyar szövegverzióban is (a fordítók nem vállalták a kémiai nevek fordítását). Az iránymutatás a JRC honlapját ajánlja [3] a nemzeti elnevezésekre. Elvben a harmonizált lista szerepel az ANTSZ honlapján is [4], ahol a harmonizált anyagokat tartalmazó, ún. EU-lista mellett láthatók a régi rendszerben magyar cégek által bejelentett anyagok is, az osztályozásokkal együtt. A baj ott van, hogy a két lista köszönő viszonyban sincs egymással, ami a kémiai elnevezések változatosságát ismerve nem is csodálható. A problémát úgy javasolom áthidalni, hogy mindenhol az angol elnevezéseket használjuk. Ez nagyon előnyös annyiban is, hogy a címkére is ugyanez kerül, és a többnyelvű címkénél is elég egy kémiai név, az angol. A hatóság még nem reklamálta ezt a bejelentésre beadott adatlapjainnál.
- Az angol nevekkal megoldható a másik, nagyon fontos kérdés: minden kémiai biztonsági tevékenységünkben ugyanazon azonosítókat használjuk! Az (elő)regisztrációban, a CLP bejelentésben, az adatlapban, a címkén. Nagyon praktikus, ha a márkaneveket vagy rövid helyi neveket, amire a cégnél gyakran hivatkozunk, minden ilyen hivatalos tevékenységünkben a megadott helyekre beírjuk: ezáltal jól bizonyítható az ellenőr számára, hogy például ugyanazt az anyagot jelentettük be, mint amiből a gyárudvaron több hordó található, de azokon csak a helyi rövid elnevezés látható.
- Nagyon fontos és gyakran elmarad (talán mert nem kötelező), hogy a VI. mellékletben megadott sorszámot, az ún. indexszámot is szerepeltessük azonosítóként az adatlapban. Ez jól mutatja az olvasónak, hogy itt harmonizált osztályozású anyagról van szó, tehát az kötelező. Létezik azonban néhány olyan anyagcsoport, melyre összevont indexszám van. Ezek gyakran sók (pl. bárium sók, dinoseb sók és észterek, vagy hidrazin és sói), mikor a megadott vegyületrész hordozza a veszély forrását, függetlenül a kiegészítő cso-

portoktól. De ilyenek lehetnek homológok is, például a dialkil-cink, vagy izomerek, például a klórdinitrobenzol. Nyilvánvaló, hogy ilyenkor az adott csoporton belül a konkrét vegyületünket adjuk meg akár az adatlapon, akár a címkén (pl. hidrazin-szulfát), persze megjelölve, hogy van ilyen csoportazonosító indexszáma is.

A biztonsági adatlap és a regisztrációban közzétett adatlap információk

Az adatlapot csak a veszélyes terméket átvevő kapja meg (egyre kevésbé szokás, hogy kirakják az Internetre). Azonban a REACH lehetőséget ad az Ügynökség számára, hogy az ún. adatlap-információkat a regisztráció közzétételénél szintén közzétegye, kivéve, ha külön nem kérjük a titkosítást. Idetartozik a regisztrációs szám, a regisztráló neve, a termék felhasználásaira vonatkozó információ és más, kevésbé érzékeny adatok. A részletekről az Ügynökség külön kérdés-felelet anyagot készített [5].

IRODALOM

- [1] A BIZOTTSÁG 453/2010/EU RENDELETE (2010. május 20.) a vegyi anyagok regisztrálásáról, értékeléséről, engedélyezéséről és korlátozásáról (REACH) szóló 1907/2006/EK rendelet módosításáról. <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2010:133:0001:0043:HU:PDF>
- [2] AZ EURÓPAI PARLAMENT ÉS A TANÁCS 1272/2008/EK RENDELETE (2008. december 16.) az anyagok és keverékek osztályozásáról, címkézéséről és csomagolásáról, a 67/548/EGK és az 1999/45/EK irányelv módosításáról és hatályon kívül helyezéséről, valamint az 1907/2006/EK rendelet módosításáról (konszolidált verzió). <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CONSLEG:2008R1272:2011-0419:HU:PDF>
- [3] <http://esis.jrc.ec.europa.eu/index.php?PGM=cla> A legördülő menüből a Search VI. Annex-et választva megjelenik a keresőablak, ahol felül kiválasztható a magyar (HU).
- [4] https://www.antsz.hu/data/cms25802/II_18_veszelyes_anyagok_mo_jegyzeke_2012-0323.pdf
- [5] <http://echa.europa.eu/hu/support/qas-support/qas>

ÖSSZEFOGLALÁS

Körtvélyessy Gyula: Biztonsági adatlapok. Kilencedik rész. A veszélyes termékek azonosítása az adatlapokban

A veszélyes termékről az eltérő jogi következmények miatt fontos megtudni, hogy anyag-e vagy keverék. Az adatlap 3. szakasza alkalmas ennek megadására, de a gyakorlatban – pont a jogi következmények miatt – ez gyakorta elmarad. Lehetőség van keverékekben az anyagkomponensek azonosításának eltitkolására (mind az adatlapban, mind a címkén), ha ezt az OKBI-tól kérjük.

Tisztelt Pedagógusok!

Idén ismét a **Junior Freshhh**-re, őszi természettudományos vetélkedőnkre invitáljuk a középiskolás diákokat. Az idei kalandos történetbe foglalt feladatok többnyire ismét a *kémia, a fizika és a matematikai logika világából érkeznek, de lesz biológiát, illetve földrajzot érintő feladat is.*

A verseny egyben az iskolák versenye is, hisz a legeredményesebb csapatok mellett *idén is díjazzuk a legeredményesebb iskolákat is.*

Hogyan játszhatnak?

Szerezzenek maguk mellé a diákok két hasonló érdeklődésű középiskolás barátot, és regisztráljatok a www.junior.freshhh.net oldalon!

Miből áll a verseny?

1. online vetélkedő **november 4-től**,

2. az **élő döntő december első hetében** a MOL százhalombattai Dunai Finomítójának területén.

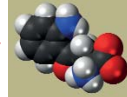
Bővebb információ, jelentkezési feltételek és regisztráció: www.juni-or.freshhh.net.

Leveleket az alábbi címen olvasunk: junior@freshhh.net.

Kérjük, továbbítsák ezt a felhívást kollégáiknak, diákjaiknak, hogy minél több diák vehessen részt ebben a különleges természettudományos vetélkedőben!



Üdvözlettel:
Molli és Frisco,
valamint a Junior Freshhh
Támogató Csapata



Bohár Zsuzsanna¹–Fülöp Ferenc²–Dékány Imre³–Toldi József^{1,4}–
Vécsei László^{1,5}

¹ MTA–SZTE Idegtudományi Kutatócsoport

² SZTE GYTK Gyógyszerkémiai Intézet és MTA–SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

³ SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézet és MTA–SZTE Szupramolekuláris és Nanoszerkezetű Anyagok Kutatócsoport

⁴ SZTE TTIK Élettani, Szervezettani és Idegtudományi Tanszék

⁵ SZTE ÁOK Szent-Györgyi Albert Klinikai Központ, Neurológiai Klinika

zsuzsanna.bohar@gmail.com | fulop@pharm.u-szeged.hu | i.dekany@chem.u-szeged.hu | toldi@bio.u-szeged.hu | vecsei.laszlo@med.u-szeged.hu

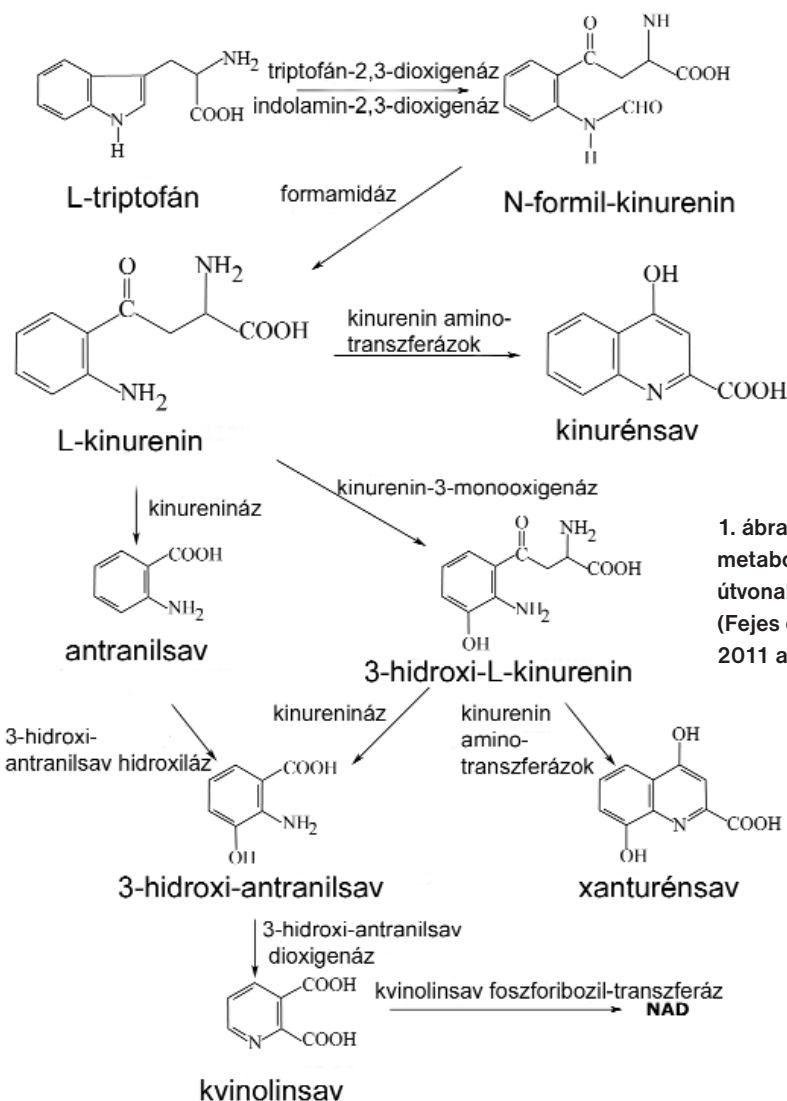
A kinureninek és analógjaik: új terápiás célpontok idegrendszeri betegségekben

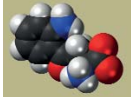
Napjainkban intenzív érdeklődés tárgyát képezi a triptofán fő metabolikus útvonalából, a kinurenin útvonalból származó, idegrendszeri hatásokkal bíró köztitermékek vizsgálata. Munkánkban a kinureninek idegrendszeri betegségekben betöltött szerepét kívánjuk röviden összefoglalni, továbbá áttekintjük a vegyületek nyújtotta eddigi kísérletes eredményeket és terápiás lehetőségeket.

A triptofán mellett, hogy esszenciális aminosavként a szervezet fehérjéinek építőköve, számos más metabolikus folyamatban is kiindulási vegyület. Triptofánból képződik a fontos transzmitter szerepet betöltő szerotonin, de a központi idegrendszerben a triptofán 95%-a a kinurenin útvonalon keresztül metabolizálódik [1], amelynek végterméke a nikotinamid-adenin-dinukleotid (NAD⁺) és a nikotinamid-adenin-dinukleotid-foszfát (NADP⁺). A kinurenin metabolizmus napjainkban intenzív kutatások tárgyát képezi, mivel több idegrendszeri betegség kialakulásában is felmerült a szerepe.

A kinurenin metabolizmus

A kinurenin útvonal első lépéseként felnyílik a triptofán indolgyűrűje, az indolamin-2,3-dioxigenáz vagy a triptofán-2,3-dioxigenáz enzimek segítségével. A reakció





eredménye az N-formil-kinurenin, amely a formamidáz enzim segítségével L-kinureninné (L-KYN) alakul tovább. Az L-KYN központi szerepet játszik ebben az útvonalban, belőle három irányban mehetnek tovább a folyamatok. A kinurenináz enzim segítségével antranilsav, majd kvinolinsav (piridin-2,3-dikarbonsav, QUIN) képződik, amiből az anyagcsere-folyamat végén NAD^+ jön létre. A második útvonalon az L-kinureninből a kinurenin aminotranszferázok (KAT) irreverzibilis transzaminációval kinurénsavat (4-hidroxikinolin-2-karbonsav, KYNA) állítanak elő, míg a harmadik útvonalon a kinurenin-monooxigenáz enzim segítségével előbb 3-hidroxi-L-kinurenin (3-HK), majd KAT segítségével xanturénsav képződik (1. ábra).

A kinureninek hatásai

A kinurenin útvonal köztitermékei közül több vegyület is képes a neuronok működését befolyásolni, neuroaktív tulajdonságokkal rendelkezik. Ilyen vegyület a KYNA, a QUIN és a 3-HK, amelyeket együttesen „kinurenineknek” neveznek.

A KYNA ezek közül talán a legfontosabb, mivel máig ez az egyetlen ismert endogén glutamát receptor antagonistája. Több receptor típuson is bizonyították hatását. A KYNA kompetitív antagonistaként viselkedik az NMDA receptorok glicin koagonista helyéhez kötődve [3], ezáltal képes befolyásolni az idegi jelátvitelben kitüntetett szerepet betöltő receptorok működését. Ezen felül gyenge antagonistája hatása van a kainát és az AMPA típusú glutamát receptorokon is. Azonban érdekes módon az AMPA receptorokon alacsony koncentrációban serkentő hatása van, és csak magasabb (mikromoláris) koncentrációban rendelkezik gátló hatással. A KYNA az $\alpha 7$ nikotinos acetilkolin receptorokon ($\alpha 7\text{nAChR}$) is gátló hatást fejt ki, ezáltal nemcsak a már felszabadult glutamát effektusát, de magát a glutamát felszabadulását is képes befolyásolni [4]. Valószínűleg a glutamát és $\alpha 7\text{nAChR}$ receptorok gátlásán keresztül is képes az excitotoxikus állapotok következtében kialakuló neuronpusztulás megelőzésére, neuroprotekcióna.

A QUIN az NMDA receptorokon agonista hatást fejt ki [5], valamint toxikus szabadgyökök képződését okozza [6], növelve ezzel az excitotoxikus károsodás mértékét.

A 3-HK szintén szabadgyök-képző vegyület, és ezáltal toxikus hatású, de az immunfolyamatok szabályozásában is szerepet játszik [7].

Kinureninek idegrendszeri betegségeknél

Több idegrendszeri betegség esetén is felmerült, hogy a kinurenin rendszernek szerepe lehet az adott kórkép kialakulásában. Az Alzheimer-kór krónikus neurodegeneratív betegség. Fő tünete az egyre súlyosbodó demencia, amelyet a neuronok pusztulása okoz. Kimutatták, hogy a KYNA szintje csökken Alzheimer-kórban szenvedő betegek vérében és agy-gerincvelői folyadékában, de megemelkedik a betegek striátumában [8].

Huntington-kór esetén, amely autoszomális dominánsan öröklődő neurodegeneratív betegség, csökkent KYNA-szintet mértek a betegek agykérgében, striátumában és agy-gerincvelői folyadékában, valamint emelkedést mutattak ki a 3-HK szintjében [9].

A QUIN agykamrába juttatva egerekben rohamokat indukál [10], valamint a striátumba injektálva képes a Huntington-kór tüneteit modellezni [11].

Ezek alapján valószínűsíthető, hogy több idegrendszeri betegség kialakulásában szerepet játszhat a kinurenin rendszer, illetve a KYNA és a QUIN arányának eltolódása. Nem meglepő tehát, hogy a kinurenin rendszer, az egyes metabolitok mennyiségének befolyásolásának lehetősége számos betegség terápiás célpontjaként felmerült.

A kinurenin útvonal módosításának lehetőségei

A beavatkozások célja a neuroprotektív KYNA hatásainak irányába eltolni a folyamatokat.

A KYNA poláros struktúrájának köszönhetően csak igen kis mennyiségben képes átmenni a vér-agy gáton [12], ezért terápiás célokra való alkalmazása nem kivitelezhető.

Kísérletes körülmények között kedvező eredmények születtek a KYNA előanyagának, az L-KYN-nek és egy, a KYNA agyból való kiürülését gátló anyagnak, a probenecidnek kombinált alkalmazásából. Az L-KYN a KYNA-val ellentétben könnyen átjut a vér-agy gáton a neutrális aminosav-transzporterek segítségével. Probeneciddel kombinálva képes a kinurénsav szintjét az agyban jelentősen növelni [13, 14]. A pentiléntetrazol egy γ -amino-vajsav A receptorhoz (GABAA) kötődő vegyület, amely epilepsziás rohamokat indukál kísérleti állatokban, így az epilepszia kísérletes modellezésére alkalmazzák. Ebben a modell-

ben az L-KYN-probenecid kombináció képes volt megelőzni az epileptiform rohamok kialakulását és jelentősen csökkentette az állatok halálozását is [15].

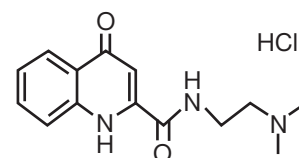
A migrén szintén sokakat érintő megbetegedés, amelynek kialakulásában bizonyítottan fontos szerepet játszik a főként a hámosztatú agyideg (nervus trigeminus) által beidegzett trigemino-vascularis rendszer. A migrén modellezésére alkalmazott egyik kísérletes modell a trigeminális ganglion elektromos ingerlése, amely során a trigeminális rendszer neuronjai aktiválódnak. Az L-KYN-probenecid kombinált kezelése képes volt az elektromos ingerlés hatására létrejövő aktiváció mértékét csökkenteni [16].

Az agyi KYNA-szint emelésének egy közvetlen módja a triptofán metabolizmusának kinurénsav irányába való eltolása. E célból számos enzim inhibitor fejlesztettek, amelyek a kinurenin-monooxigenáz, kinurenináz és a 3-hidroxiantranilsav oxidáz enzimek működésének befolyásolását célozták [9].

A harmadik kutatás-fejlesztési irány a KYNA analógjainak előállítás, vizsgálata.

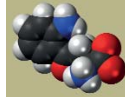
Korábbi tanulmányokból ismert, hogy a KYNA halogénezett származékainak, mint a 7-klórkinurénsav és az 5,7-diklórkinurénsav, NMDA antagonisták potenciálja magasabb a KYNA-nál [17]. A 7-klórkinurénsav előanyaga, a 4-klórkinurenin sikeresnek bizonyult fázis I-es klinikai vizsgálatban.

A Szegedi Tudományegyetemen több éve folynak kutatások különböző KYNA-analógokkal. A vizsgálatok fő célja a KYNA-nál jobb penetranciájú, vízoldható és jó biológiai hozzáférésű vegyület előállítása. A KYNA 4-es szénatomján lévő hidroxilcsoportja és a 2-es szénatomon lévő karboxil-



2. ábra. Az N-(2-N,N-dimetilaminoetil)-4-oxo-1H-kinolin-2-karboxamid-hidroklorid (KYNA-A) szerkezeti képlete

csoport kínál kézenfekvő módosítási lehetőségeket észter- vagy amidvegyületek irányába. Az utóbbi években olyan KYNA-amidok szintézise zajlott, amelyek rendelkeznek a fent említett, KYNA-nál kedvezőbb tulajdonságokkal [18–20]. Ezek közül az N-(2-N,N-dimetilaminoetil)-4-oxo-1H-kinolin-2-karboxamid-hidroklorid (KYNA-A, 2. ábra) nevű vegyület kiemelkedően jó tulajdonságokkal rendelkezik.



Elektrofiziológiai vizsgálatokban a KYNA-A a KYNA-hoz hasonlóan viselkedett, azonban az eredmények arra utalnak, hogy a vér-agy gáton való átjutása jobb, mint a KYNA-é [21].

A KYNA-A neuroprotektív hatásokat mutatott a stroke következtében kialakuló ischémiás folyamatok modellezésére alkalmas négyér-elzárásos modellben. Ebben a modellben patkányok mindkét oldali arteria carotis communisát és arteria vertebralisát elzárják a véráram elől, ezáltal teljes agyi oxigénhiányt váltanak ki. Az így előidézett állapot jól modellezi a stroke következtében kialakuló változásokat, az excitotoxicitást és oxidatív stressz következtében megfigyelhető sejtpusztulást. A sejtpusztulás csökkentése alapvető fontosságú humán vonatkozásban, mivel minél kevesebb sejt károsodik, annál kevesebb tünete marad vissza a betegnek a szélütés után. A KYNA-A képes volt csökkenteni a sejtpusztulást, valamint az agyi jelátviteli folyamatok károsodásának mértékét is [22].

A migrén nitroglicerinnel indukálta modelljében a KYNA-A csökkentette a c-Fos protein és a neuronális nitrogén-monoxid szintáz enzim szintjét. [23, 24]. Ezek az eredmények arra utalnak, hogy a KYNA-A képes mérsékelni a trigeminális rendszer aktiválódását és szenzitizációját, amely folyamatok a migrénes fejfájás kialakulásában is fontos szerepet játszanak.

A Huntington-kór egyik állatmodelljében a KYNA-A szignifikánsan megnövelte az állatok túlélését és javította motoros teljesítményüket is [25]. Erre a betegségre napjainkban még nem áll rendelkezésre gyógy mód, így minden, a tüneteket mérséklő és a betegek életét esetlegesen meghosszabbító terápiás lehetőség nagy figyelmet érdemel.

A glutamáterg rendszerre ható vegyületek, gyógyszerek kapcsán az alkalmazhatóságnak gyakran gátat szab súlyos mellékhatások megjelenése. Ezért megvizsgálták, hogy a KYNA-A milyen hatással van a tanulási és memória folyamatokra. A KYNA-A azon dózisa, amely neuroprotektívnek bizonyult, nem rontotta a kísérleti állatok teljesítményét a magatartási tesztekben [26]. A KYNA molekulák beépíthetők 10–20 nm átmérőjű micelláris rendszerekbe, illetve 100–200 nm átmérőjű mag-héj szerkezetű nanokapszulákba. Ezek a rendszerek fiziológiai körülmények között stabilak és az *in vitro*, illetve *in vivo* előkísérletek szerint képesek áthaladni a vér-agy gáton [27].

A fentiekben részletezett kísérleti ered-

mények arra utalnak, hogy a KYNA amid-analógjainak fejlesztése terápiás lehetőséget nyújthat számos idegrendszeri betegség kezelésében, ezért tervezzük a KYNA-A és más újonnan szintetizált KYNA-származékok tesztelését.



IRODALOM

- [1] H. Wolf, Scand J Clin Lab Invest Suppl. (1974) 136, 1.
- [2] A. Fejes, Á. Párdutz, J. Toldi, L. Vécsei, Curr Neuropharmacol. (2011) 9, 376.
- [3] M. Kessler, T. Terramani, G. Lynch, M. Baudry, J Neurochem. (1989) 52, 1319.
- [4] C. Hilmas, E.F. Pereira, M. Alkondon, A. Rassoulpour, R. Schwarcz, E.X. Albuquerque, J Neurosci. (2001) 21, 7463.
- [5] T.W. Stone, M.N. Perkins, Eur J Pharmacol. (1981) 72, 411.
- [6] C. Rios, A. Santamaria, Neurochem Res. (1991) 16, 1139.
- [7] P. Terness, T.M. Bauer, L. Rose, C. Dufter, A. Watzlik, H. Simon, G. Opelz, J Exp Med. (2002) 196, 447.
- [8] H. Baran, K. Jellinger, L. Deicke, J Neural Transm. (1999) 106, 165.
- [9] L. Vécsei, L. Szalárdy, F. Fülöp, J. Toldi, Nat Rev Drug Discov. (2013) 12, 64.
- [10] I.P. Lapin, J Neural Transm. (1978) 42, 37.
- [11] M.F. Beal, N.W. Kowall, D.W. Ellison, M.F. Mazurek, K.J. Swartz, J.B. Martin, Nature. (1986) 321, 168.
- [12] S. Fukui, R. Schwarcz, S.I. Rapoport, Y. Takada, Q.R. Smith, J Neurochem. (1991) 56, 2007.
- [13] V. Chauvel, E. Vámos, Á. Párdutz, L. Vécsei, J. Schoenen, S. Multon, Exp Neurol. (2012) 236, 207.
- [14] E. Vámos, Á. Párdutz, H. Varga, Z. Bohár, J. Tajti, F. Fülöp, J. Toldi, L. Vécsei, Neuropharmacology. (2009) 57, 425.
- [15] H. Németh, H. Robotka, Z. Kis, E. Rózsa, T. Janáky, C. Somlai, M. Marosi, T. Farkas, J. Toldi, L. Vécsei, Neuropharmacology. (2004) 47, 916.
- [16] E. Knyihár-Csillik, J. Toldi, B. Krisztin-Péva, Z. Chadaide, H. Németh, R. Fenyő, L. Vécsei, Neurosci Lett. (2007) 418, 122.
- [17] J.A. Kemp, A.C. Foster, P.D. Leeson, T. Priestley, R. Tridgett, L.L. Iversen, G.N. Woodruff, Proc Natl Acad Sci U S A. (1988) 85, 6547.
- [18] F. Fülöp, I. Szatmári, J. Toldi, L. Vécsei, J Neural Transm. (2012) 119, 109.
- [19] F. Fülöp, I. Szatmári, E. Vámos, D. Zádori, J. Toldi, L. Vécsei, Curr Med Chem. (2009) 16, 4828.
- [20] K. Nagy, I. Plangár, B. Tuka, L. Gellért, D. Varga, I. Demeter, T. Farkas, Z. Kis, M. Marosi, D. Zádori, P. Klivényi, F. Fülöp, I. Szatmári, L. Vécsei, J. Toldi, Bioorg Med Chem. (2011) 19, 7590.

- [21] M. Marosi, D. Nagy, T. Farkas, Z. Kis, E. Rózsa, H. Robotka, F. Fülöp, L. Vécsei, J. Toldi, J Neural Transm. (2010) 117, 183.
- [22] L. Gellért, J. Fuzik, A. Göblös, K. Sárközi, M. Marosi, Z. Kis, T. Farkas, I. Szatmári, F. Fülöp, L. Vécsei, J. Toldi, Eur J Pharmacol. (2011) 667, 182.
- [23] E. Knyihár-Csillik, A. Mihály, B. Krisztin-Péva, H. Robotka, I. Szatmári, F. Fülöp, J. Toldi, B. Csillik, L. Vécsei, Neurosci Res. (2008) 61, 429.
- [24] E. Vámos, A. Fejes, J. Koch, J. Tajti, F. Fülöp, J. Toldi, Á. Párdutz, L. Vécsei, Headache. (2010) 50, 834.
- [25] D. Zádori, G. Nyíri, A. Szőnyi, I. Szatmári, F. Fülöp, J. Toldi, T.F. Freund, L. Vécsei, P. Klivényi, J Neural Transm. (2011) 118, 865.
- [26] L. Gellért, D. Varga, M. Ruszka, J. Toldi, T. Farkas, I. Szatmári, F. Fülöp, L. Vécsei, Z. Kis, J Neural Transm. (2012) 119, 165.
- [27] V. Hornok, T. Bujdosó, J. Toldi, K. Nagy, I. Demeter, C. Fazakas, I. Krizbai, L. Vécsei, I. Dékány, J Neural Transm. (2012) 119, 115.

ÖSSZEFOGLALÁS

Bohár Zsuzsanna, Fülöp Ferenc, Dékány Imre, Toldi József, Vécsei László:

A kinureninek és analógjaik: új terápiás célpontok idegrendszeri betegségekben

A kinurénsav, a kvinolinsav és a 3-hidroxi-L-kinurenin, összefoglaló néven a kinureninek a triptofán metabolikus útvonalának közteiterek. Neuroaktív tulajdonságokkal rendelkező vegyületek, szerepük több idegrendszeri betegség kialakulásában is felmerült. A kinurénsav az egyetlen ismert endogén glutamát receptor antagonist, valamint neuroprotektív tulajdonságokkal rendelkezik. Vér-agy gáton való kismértékű átjutása alkalmazhatóságának gátat szab, ezért a kutatások iránya a kinurénsavval megegyező hatású, de jobb penetranciájú anyagok felé fordult. Az újonnan szintetizált N-(2,N-dimetilaminoetil)-4-oxo-1H-kinolin-2-karbox-amid-hidroklorid neuroprotektívnek bizonyult számos idegrendszeri betegség modelljében. A kinurénsav-analógokkal végzett kísérleti eredmények arra utalnak, hogy ezek a vegyületek új terápiás célpontot jelenthetnek ezeknek a betegségek kezelésében.



Pályázati felhívás középiskolásoknak

A **Nanopaprika** esszé- és rajzpályázatot hirdet középiskolásoknak „Megvalósult álmok?” – **nanotechnológia a hétköznapiakban** címmel.

A pályázat két kategóriában zajlik: I. kategória: 14–16 évesek, II. kategória: 17–18 évesek.

A nanopályázat témái:

1. Nanotechnológiával kapcsolatos, szabadon választott témájú esszé.

Terjedelem: az I. kategóriában legalább 3 gépelt oldal, a II. kategóriában legalább 5 gépelt oldal.

2. Rajzpályázat

A rajzokat és a szöveges pályázatokat elektronikus formában várjuk **2013. november 4-ig**. A munkákat felkért szakmai zsűri értékeli, kategóriánként a legjobbnak ítélt első három helyezett könyvtalomban részesül. A legnívósabb pályamunkákat feltöltjük a weboldalra.

Jelentkezési lap és további információ: editor@nanopaprika.eu

Csávás Magdolna¹–Lázár László²–Hadházi Ádám¹–Demeter Tamás¹–
Nábrádi Péter¹–Herczeg Mihály²–Eszenyi Dániel¹–Mező Erika¹–
Herczegh Pál¹–Borbás Anikó¹

¹ Debreceni Egyetem, Orvos- és Egészségtudományi Centrum, Gyógyszerészi Kémia Tanszék | borbas.aniko@pharm.unideb.hu

² Debreceni Egyetem, Szerves Kémiai Tanszék

Tiodiszacharidok és S-glikokonjugátumok szintézise tio-click módszerrel

A „click” kémia fogalmát K. B. Sharpless vezette be olyan szén-heteroatom kötés kialakulásával járó reakciókra, amelyekben gyorsan, sztereoselektíven, nagyon jó hozammal képződik a termék, és mind a reakciók kivitelezése, mind a termék izolálása nagyon egyszerű.[1] A „click” reakciók (magyarul „katt” reakcióknak nevezhetnénk) körébe sorolható a terminális alkéneken lejátszódó fotokatalizált, gyökös mechanizmusú tioladdíció, mivel enyhe körülmények között és bármilyen oldószerben végrehajtható, gyors, regioszelektív és kiváló hozamú.[2] A tio-click reakció nem igényel fémkatalizist és bioortogonális, ezért az utóbbi években egyre elterjedtebben alkalmazzák diagnosztikai vagy gyógyászati felhasználásra is alkalmas glikokonjugátumok[3] – pl. glikopeptid vakcinák,[4] szénhidrát bevonatú bioszenzorok[5] – előállítására.

Endociklusos kettős kötést tartalmazó szénhidrátokon, 2-acetoxi-glikálokon és Ferrier-glikálokon kutatócsoportunk hajtott végre elsőként tio-click reakciókat. [6] A reakciókat 2,2-dimetoxi-2-fenilacetofenon (DPAP) fotoiniciátor hatásmechanizmusa

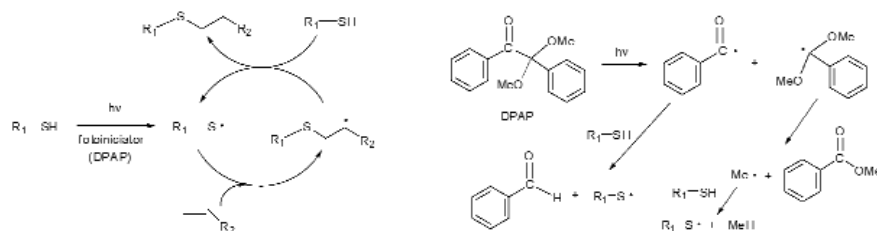
non (DPAP) jelenlétében UV-besugárzással ($\lambda_{\max} = 365 \text{ nm}$) iniciáltuk, oldószerként a tiolok polaritásától függően toluolt, metanol vagy DMF-víz elegyet alkalmaztunk (1. ábra).

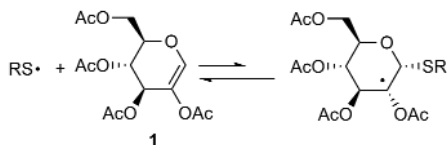
A 2-acetoxi-glikálok endociklusos kettős kötésén a tioladdíciók teljes regio- és sztereoselektivitással mentek végbe: kizárólag 1,2-cisz- α -tioglikozidok képződtek (1. táblázat). A reakcióban sem a glikálok bomlását, sem melléktermékek képződését nem tapasztaltuk. Néhány esetben alacsony volt a reaktánsok konverziója, ami a tioladdíciós lépés reverzibilitásával magyarázható; amennyiben a tiolgyök nagyon stabil és az endociklusos kettős kötés nem elég reaktív (például 1 reakciója 2b-vel és 2c-vel), akkor az egyensúlyi reakció a kiindulási anyagok irányába tolódik el (2. ábra). A 2-acetoxi-glikál a tioenolból képződő rezonanciastabilizált feniltiolgyökkel egyáltalán nem reagált, ugyanakkor nagyon jó konverziót mutatott alkil-tiolokkal (pl. 2a,d), szénhidrát-tiolokkal (pl. 2f,g), valamint aminosav- és peptidszármazékokkal is (pl. 2,i), és ezek a reakciók min-

RSH	Termék	Hozam (%)
		81
	nincs reakció	
		22
		67
		64
		87
		69
		61
		60

1. táblázat. Fotokatalitikus tioladdíció 2-acetoxi-glikálon

1. ábra. A fotokatalizált gyökös tiol-alkén reakció fő lépései és a 2,2-dimetoxi-2-fenilacetofenon (DPAP) fotoiniciátor hatásmechanizmusa

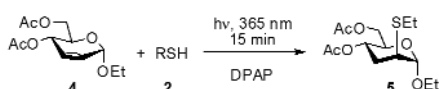




2. ábra. Stabilizált tiilgyök addíciója endociklusos kettős kötése

den esetben sztereoselektív módon adták a megfelelő α -tioglikozidot (1. táblázat).

A Ferrier-glikálként ismert 2,3-telítetlen glikozidok (pl. 4) szintén megfelelő reaktivitást mutattak a tio-click reakcióban. A szénhidrát-tiolokkal végrehajtott addíció itt is teljes regio- és sztereoselektivitással ment végbe, és kizárólag 3-dezoxi-2-S-diszacharidok (5) képződését eredményezte (2. táblázat). Érdekes megjegyezni, hogy a glikobiológiai kutatásokban a tioglikozidoknak kiemelkedő jelentősége van, mivel hidrolitikus és enzimatisuk stabilitásuk kö-



RSH	Termék	Hozam (%)
		71
		63
		72
		78

2. táblázat. Fotokatalitikus tioladdíció Ferrier-glikálon

vetkeztében mind biológiai vizsgálatokra, mind gyógyszerfejlesztésre alkalmasabbak, mint a természetes O-glikozidok.

A módszer kiterjesztése céljából részletesen vizsgáltuk exo- és endociklusos kettős kötést tartalmazó monoszacharidok (pl. 6–9) reakcióját különböző tiolokkal, és minden esetben teljes regio- és sztereoselektivitást tapasztaltunk.[7] A tiofenollal végzett addíció során a szénhidrát-alkének (6–9) a kettős kötés szubsztituáltságának és elektronsűrűségének függvényében különböző konverzióval reagáltak a re-

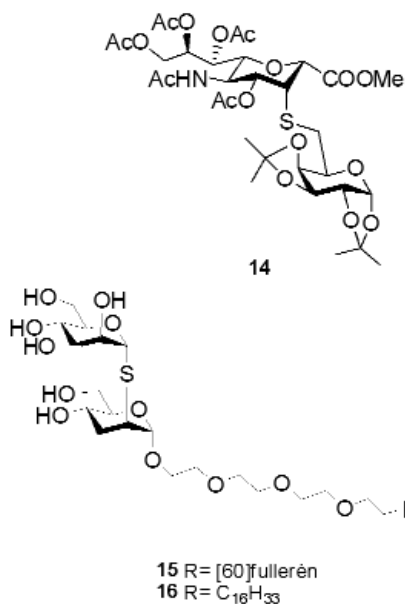
Glikál/enőz	Tiol	Termék	Hozam (%)
	PhSH		21
	PhSH		32
	PhSH		46
	PhSH		74

3. táblázat. Tiofenol addíciója telítetlen szénhidrátokra

zonanciastabilizált feniltiilgyökkel, így megtudtuk határozni reaktivitási sorrendjüket a tio-click reakcióban (3. táblázat).

A telítetlen szénhidrátokon végzett tioladdíció teljesítőképességének és korlátainak feltérképezése után a reakciót felhasználtuk bioreleváns oligoszacharidok (szialil-galaktozidok, oligomannozidok) tiomitikumainak egyszerű szintézisére (3. ábra). A potenciálisan influenzaellenes 14 pszeudodiszacharidot, amely az $\alpha(2\rightarrow6)$ -kötésű szialil-galaktozidok mimetikuma, N-acetilneuraminsav-glikálból és galaktóz-6-tiolból nyertük tio-click reakcióval. [8] Az amfifil jellegű 15 és 16 származék $\alpha(1\rightarrow2)$ -S-kötésű mannobiozid egységét tio-click reakcióval állítottuk elő 1-tioman-

3. ábra. Potenciálisan vírusellenes diszacharid mimetikumok



nózból és Ferrier-glikálból, majd azid-alkin click reakcióval kapcsoltuk össze a hidrofil és lipofil molekularészeket. Irodalmi adatok alapján a mannobioz-fullerénből (15) és mannobioz-hexadekanolból (16) önszerveződéssel képződő multivalens származékoktól HIV-transzinfekció-gátló hatás várható.[9]

Összefoglalásként megállapítható, hogy az endociklusos kettős kötést tartalmazó szénhidrátok a fotokatalitikus tioladdíció körülményei között a legtöbb tiollal szemben megfelelő reaktivitást mutatnak. A telítetlen monoszacharidokon végzett tioladdícióval gyorsan, hatékonyan és sztereoselektíven – vagyis „click” módon – állíthatunk elő tio-kötésű diszacharidokat és tioglikokonjugátumokat. Az így nyert glikomimetikumok, amelyek az O-glikozidos kötés helyett jóval stabilabb szulfid- vagy S-glikozidos kötést tartalmaznak, felhasználhatók a szénhidrátok biológiai funkcióinak vizsgálatában, és vezérmolekulaként szolgálhatnak új, szénhidrátalapú gyógyszerek kifejlesztésében.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS. A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 számú Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia program kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

IRODALOM

- [1] H. C. Kolb, M. G. Finn, K. B. Sharpless, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2001) 40, 2004.
- [2] (a) C. E. Hoyle, T. Y. Lee, T. Roper, *J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem.* (2004) 42, 5301; (b) C. E. Hoyle, C. N. Bowman, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2010) 49, 1540.
- [3] (a) A. Dondoni, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2008) 47, 8995; (b) A. Dondoni, A. Marra, *Chem. Soc. Rev.* (2012) 41, 573.
- [4] S. Wittrock, T. Becker, H. Kunz, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2007) 46, 5226.
- [5] O. Norberg, I. H. Lee, T. Aastrup, M. Yana, O. Ramström, *Biosensors, Bioelectronics* (2012) 34, 51.
- [6] L. Lázár, M. Csávás, M. Herczeg, P. Herczegh, A. Borbás, *Org. Lett.* (2012) 14, 4650.
- [7] L. Lázár, M. Csávás, Á. Hadházi, M. Herczeg, M. Tóth, L. Somsák, T. Barna, P. Herczegh, A. Borbás, *Org. Biomol. Chem.* (2013) 11, 5339.
- [8] (a) M. J. Kiefel, M. von Itzstein, *Chem. Rev.* (2002) 102, 471; (b) T. Angata, A. Varki, *Chem. Rev.* (2002) 102, 439.
- [9] (a) S. Sattin, A. Daggetti, M. Thepaut, A. Berzi, M. Sanchez-Navarro, G. Tabarani, J. Rojo, F. Fieschi, M. Clerici, A. Bernardi, *ACS. Chem. Biol.* (2010) 5, 301; (b) M. Thepaut, C. Guzzi, I. Sutkeviciute, S. Sattin, R. Ribeiro-Viana, N. Varga, E. Chabrol, J. Rojo, A. Bernardi, J. Angulo, P. M. Nieto, F. Fieschi, *J. Am. Chem. Soc.* (2013) 135, 2518.

Kreatív elemek

Beszélgetés Csermely Péterrel



KOLLÁNYI PÉTER FELVÉTELE

Csermely Péter a Semmelweis Egyetem Orvosi Vegytani, Molekuláris Biológiai és Patobiokémiai Intézetének professzora, az MTA és az Academia Europaea új tagja. 1995-ben indította el a Kutató Diákok Mozgalmát, amely elősegíti, hogy már a tehetséges középiskolás diákok is kutatóintézeti, egyetemi kutatásokba kapcsolódhassanak be. 2006 óta a Nemzeti Tehetségsegítő Tanács, 2012 óta az Európai Tehetségsegítő Tanács elnöke. 2008-tól 2010-ig a köztársasági elnök mellett működő Bölcsek Tanácsa tagja volt. Kitüntetései között szerepel az Európai Unió Descartes-díja. Saját megfogalmazása szerint „kutatásaiban a stressz és az öregedés között ingázik – mindezt hálózatosan”.

– Vegyész diplomát szerzett – de még akkor sem fut be „klasszikus vegyészpályát”, ha munkásságának csak a szakmai oldalát tekintjük: a Semmelweis Egyetem professzora, az MTA Biológiai Tudományok Osztályának idén megválasztott levelező tagja. Számít a „szakirányú” alapozás, vagy csak a jó alapozás fontos egy kutatói pálya indulásához?

– A jó egyetem leginkább az ismeretek megszerzésére és rendszerezésére tanítja meg az embert. Ezen felül olyan emberi példákat ad, akik egy egész élet során hatni fognak. Ebből és a tudományok mai interdiszciplinaritásából kiindulva, igen sokfajta szak elvezethet akár ugyanahhoz a kutatási területhez. A vegyész alapképzettiséget azért tartom nagyon szerencsés választásnak ma is, mert segítségével az ember egyszerre lesz fogékony a matematikusok és a fizikusok precizitására és formalizmusaira, valamint a biológusok és az orvosok biológiai jelenség-centrikusságára. Mindezt a molekulákra fókuszáló gondolatmenettel ötvözve, amelyik mindig a jelenségeket kiváltó okokat és mechanizmusokat keresi – sokszor segítségül véve ehhez a fizikusok, vagy a matematikusok fegyvertárát.

– Ezeket a gondolatokat nagyszerűen példázzák a kutatásai. LINK-csoportja honlapján¹ írja: „2005-ben és 2006-ban felismertük, hogy a gyenge kapcsolatok egészen

mást jelentenek az intramoduláris és az intermoduláris rendszerekben. Vizsgálataink során új hálózati elemeket azonosítottunk: a VIP-elemeket vagy kreatív elemeket. Mostanában azt próbálom megfejtetni, hogy milyen szerepet játszanak a gyenge kapcsolatok a hálózati partnerek közötti kölcsönhatásokban (dinamikus egyensúlyokban, játékokban).”

– Igen, egyre nagyobb figyelem irányul a hálózatok csoportjait összekötő hidakra. Ennek egyik példjaként Mihalik Ágostonnal közös saját munkánk² feltárta: az élesztősejt fehérje-fehérje kölcsönhatási hálózata úgy adaptálódik a például hőmérséklet-emelkedés formájában jelentkező stresszhez, hogy kevésbé intenzívvé teszi a nagy fehérjekomplexekeket összekötő hidakat, és sokkal sűrűbbé, intenzívebbé teszi a csoporton belüli kölcsönhatásokat. Úgy is mondhatnám, hogy a csoportok összetartása, kohéziója nő. Ez nagyon általános krízis-válasznak bizonyult, amelyet a társadalomban is nap mint nap tapasztalhatunk válság idején.

Az élesztő azonban tud valamit, amit sok társadalom nem tud: a válságban nemcsak a csoport-összetartást kell erősíteni, hanem a csoportok közötti hidakat is. Az élesztő a stressz alatt nemcsak arra „ügyel”, hogy a legfontosabb csoport-összekötő hidak maradjanak meg, hanem új hidakat is képez, addig egymástól távol lévő fehérjecsoportok között. Ezek az új összeköttetések addig nem létező, új megoldásokat adnak a beállt válsághelyzetre. Fontos lenne a társadalmak szintjén is leszární ezt a tanulságot, és válság idején a csoportokba tö-

mörülés mellett a csoportok közötti hídembereket sokkal jobban bátorítani, elismerni, segíteni hídképző munkájukban. A VIP-elemek, vagy kreatív elemek pontosan ilyen hidak, amelyek egymástól nagyon távoli csoportokat kötnék össze. Ráadásul ezek a kreatív nódusok nagyon dinamikusak, azaz állandóan más és más csoportokat próbálnak összekötni. Ez a viselkedés fontos feltétele annak, hogy a hálózat (a komplex rendszer) egésze meg tudja találni a válságban a legoptimálisabb új válaszokat.

– A fehérjék szerkezeti hálózatainak dinamizmusát vizsgálva egy nagy érdeklődést kiváltó, a korábbinál átfogóbb konformációs szelekciós modellt írtak le.³ Mit „tud” ez a modell, milyen további kutatásokat ösztönöz?

– Egy kis kémiai molekulának (szubsztrátnak) a fehérjékhez (pl. enzimekhez) való kötődését sokféle modellel közelítették meg az évek során. A legelső a kulcs-zár modell volt, amelyet Emil Fischer csaknem 110 évvel ezelőtt alkotott meg. Ezt az „indukált fit” a születésem évében, 1958-ban publikált elképzelése annyiban haladta meg, hogy itt a fehérje a kis molekulát már nem mereven fogadta be, mint a zár a kulcsot, hanem rásimult. A fehérjedinamika még erőteljesebb hangsúlyozása jelent meg az 1964-es Straub–Szabolcsi-féle „fluktuációs fit” modellben, ahol a kémiai molekula a fehérjék sok-sok egymásba alakuló alakjából választotta ki és stabilizálta azt, amelyik a számára a legmegfelelőbb volt. Sajnálatos, hogy Straub F. Brúnó és felesége, Szabolcsi Gertúd ezt a kor-

¹ <http://www.linkgroup.hu/>

² Ágoston Mihalik, Peter Csermely: PLoS Comput. Biol. 7: e1002187

³ P. Csermely et al.: Trends in Biochemical Sciences (2010) 35, 539–546.



szakalkotó ötletüket egy orosz nyelvű könyv egyik fejezeteként jelentették meg, amelyet nem követett az elmélet angol nyelvű, bővebb, külön kifejtése később. Emiatt eshetett meg, hogy az elképzelést Ruth Nussinov 1999-ben „újra felfedezte”, és konformáció-szelekció elmélet néven világsikerre vitte. Nussinov professzor asszonyval közös, 2010-es TiBS-címlapsztori cikkünkben⁴ nemcsak a konformáció-szelekciós elmélet Straub–Szabolcsi-féle alapjait „tettük helyre” – annak Závodszy Péter által adott első kísérletes bizonyítékával, amelyet sajnos szintén egy viszonylag kevesek által olvasott lapban, az Acta Biochim. Biophys. Acad. Sci. Hung.-ban közöltek 1966-ban –, hanem kiterjesztettük ezt az elképzelést arra az általánosabb esetre is, amikor két rugalmas entitás, azaz például két fehérje találkozik, és kötődik egymáshoz. A cikk igen nagy figyelmet keltett, az elmúlt két évben több mint százötvenszer idézték.

– Az egyik legújabb review-cikkében⁵ írja, hogy a gyógyszer-felfedezés sarkalatos kérdéseire (hogyan mutatható ki egy betegséghez köthető célpont, vagy hogyan található meg az a molekula, amely terápiás szempontból hatásosan módosítja ezt a célpontot) a hálózatos leírás és a hálózatelemzés új paradigmát teremthet. Milyen ígéretet hordoz ez a megközelítés?

– A hálózatos módszerek alkalmazásához elsőként definiálni kell azt a hálózatot, amely a vizsgálat tárgyát képezi. Ehhez szükség van arra, hogy pontosan átgonadjuk, mit értünk a hálózat nódusai alatt (pl. fehérjéket vagy kémiai molekulákat),

és mit tekintünk a nódusok közötti kapcsolatoknak. Precízen át kell gondolni azt is, hogy a kapcsolatok súlyát (erősségét) hogyan definiáljuk, és hogy képesek vagyunk-e a kapcsolatoknak irányt adni. Mindez azért nagyon fontos a gyógyszerkutatásban, mert mára rengeteg adat gyűlt fel, amelyek között a gyógyszereket fejlesztő szakember ilyenfajta „segédlet” nélkül könnyen elveszhet. Ha sikerült a hálózatunkat megfelelő szigorúsággal definiálnunk, akkor a matematika, a fizika, a kémia és a biológia hálózatos kutatásai elemző módszerek egész fegyvertárát adják a hálózatok legfontosabb nódusainak a kiválasztására. Azok a nódusok, amelyek a legjobban képesek átváltoztatni a hálózat aktuális (pl. beteg) állapotát egy másik (pl. egészséges) állapotba, fontos gyógyszer-célpontok lehetnek. Ugyanígy a hálózatos működést a legjobban megbontó nódusok fontos targetjei lehetnek az adott sejt (pl. fertőző baktérium vagy rákos sejt) elpusztítására alkalmas gyógyszereknek. A több mint 1200 közleményt összefoglaló, nagy figyelmet keltő (eddig már két maximális, 3 csillagos Faculty 1000 értékelést kapó) review-cikkünk egyik legfontosabb új gondolata az volt, hogy a gyorsan osztódó sejtek plasztikus hálózatait teljesen más jellegű célpontokon kell eltalálni, mint a differenciált sejtek merev hálózatait. A hálózatos eljárások tehát nemcsak azokat a pontjait tudják megmutatni a sejtet alkotó hálózatoknak, amelyek gyógyszeres befolyásolásával nagy hatás érhető el, hanem azokat is, amelyek e hatást szelektíven képesek kiváltani. Az ilyen beavatkozások igen sokszor nemcsak egy, hanem több gyógyszer-célpont együttes alkalmazását is igénylik. Az ilyen gyógyszer-csoportok meghatározására a hálózatos módszerek különösen alkalmasak.

– A KutDiák mozgalom néhány év alatt közismertté vált. Sikerének titkát Ön is elemezte egyik blogbejegyzésében.⁶ De hogyan lesz sikeres az Ön által vezetett Nemzeti Tehetségsegítő Tanács és az Európai Tehetségsegítő Tanács: milyen elgondolások mentén vezeti ezt a két szervezetet, és mit tart majd a siker mércéjének?

– A Nemzeti Tehetségsegítő Tanácsot 2006-ban alapította meg sok, igen sikeres magyar tehetséggondozó szervezet, például a tudományos diákköri mozgalom, a kérdésben említett kutató diák mozgalom, vagy a Magyar Innovációs Szövetség. A Tanács a Kárpát-medence magyarságának egészére kiterjedő tehetséggondozó hálózat kiépítését tűzte ki célul. Ma már csaknem ezer Tehetségpont működik az országban, a Felvidéken, Kárpátalján, Erdélyben és a Vajdaságban. A Tehetségpontok zöme oktatási intézmény (az óvodától az egyetemig), de van közöttük sakk-kör, sportklub, művészeti egyesület, asztalosműhely és javító-nevelő intézet is. A Tehetségpont nyitott: saját tehetséggondozó programjain kívül tanácsot ad a hozzá forduló tehetséges fiataloknak, szüleiknek, tanáraiknak, hogy megmutassák, miben rejlik az adott ember tehetsége, milyen szinten van pillanatnyilag és milyen segítséggel fejleszthető optimálisan. Mindenki rejtőzhet a tehetség sok ezer formájából valami, és soha nem lehetünk biztosak abban sem, hogy életünk következő szakaszában milyen új tehetséget fogunk felfedezni magunkban – vagy másokban. A Nemzeti Tehetségsegítő Tanács akkor lesz sikeres, ha a Kárpát-medence magyarsága tehetségbarát társadalommá válik. Ettől még messze vagyunk, de a száz megyei, illetve tematikus (matematikai, roma, egyházi stb.) tehetségsegítő tanács öntevékenysége már most igen biztató.

Az Európai Tehetségsegítő Tanács 25 évvel ezelőtt alakult civil szervezet, amelynek tagjai Európa legjobb tehetségsegítő szakemberei. A Tanács akkor lesz sikeres, ha a szakmai fejlődés csúcspontjainak szervezésén túl felelősséget tud vállalni Európa tehetséges fiataljainak felfedezéséért és segítéséért. Az az Európai Tehetségsegítő Hálózat, amelynek a megteremtésén jelenleg – az Európai Bizottság és az Európai Parlament, valamint az EU-tagállamok segítségével – munkálkodunk, nagy előrelépés lesz ezen az úton. Igen jó érzés, hogy a tehetséggondozás tekintetében Magyarország világtrendet megteremtő, példa-ország. **SV**

Az interjú részletet tartalmaz az OTKA honlapján 2013 augusztusában megjelent beszélgetésből.

Hogyan gazdagíthatja a tehetség igazán az összképet?

Az igazi tehetség kivételes alkotásokkal és viselkedéssel véteti észre magát. Hányszor és mennyire kivételesek egy tehetség mindennapjai? Mikor és meddig hasznos ez a kivételesség? Összeegyeztethető-e a zavarbahozóan új a harmóniával? Kell nekünk ez a luxus egy válság közepén? Érték-e az, ami nem kivételes?

A válasz kettős. A kivételességre éppen hogy egy válság közepén van a legnagyobb szükség. A válságot teremtő új helyzet új megoldásokat kíván. Az a kreativitás, ami a szokásos körülmények között azért is luxus, mert nem megbízható, egy válságban a csoport életbiztosítása lesz.

Ugyanakkor a legtöbb tehetség, a legtöbb kivételes alkotás kibontakoztatása „szürke” munkával teli napok ezreit igényli. A kivétel csak egy patikamérlegen meghatározott arányban gazdagítja az összképet a legjobban. Ez az a skálafüggetlen arány, amelyet a hálózatok vonatkozásában Barabási László jellemzett először. Tízszer kivételesebb viselkedésből pontosan tizedannyi kell ahhoz, hogy a harmónia fennmaradjon. A mindennapi, tisztességes, minőségi munka nélkül nem alakulhat ki az a harmónia, ami nélkül csoda teremhet ugyan, de tartós jóérzés soha. [...]

<http://csermelyblog.tehetsegpont.hu/>

Braun Tibor

■ ELTE TTK Kémiai Intézet

Gutenbergtől egy új kémiaáig?

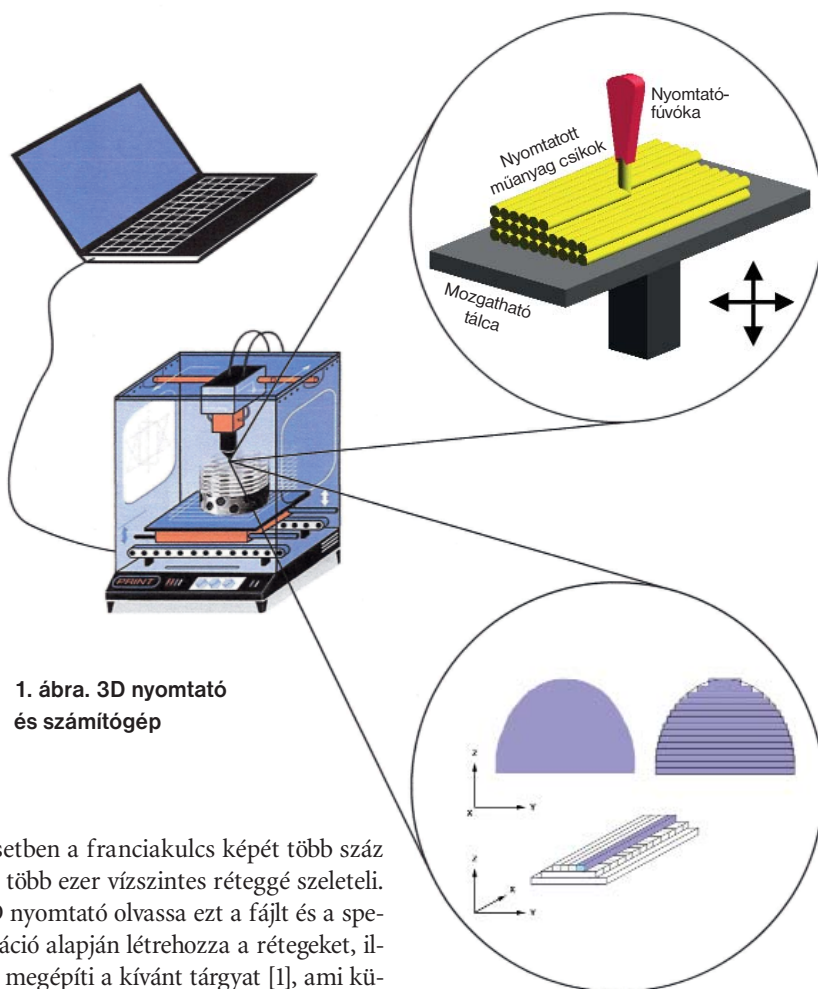
3D nyomtatás és nyomtatók térben és időben

Előszó

Johannes Gutenberg ha élne, mosolygós elégedettséggel szemlélhetné és állapíthatná meg találmánya, a nyomtatás évezredes „karrierjét” és azt, hogy még mindig velünk van és egyre intenzívebben használjuk a 21. század elején is. Pedig az elektronikus rögzítés által nem kis veszély fenyegette az előző évszázad során, amikor egyre erősebben húzták meg fölötté és a könyvkiadás fölött a vészharangot. Talán leghallhatóbban akkor, amikor a kanadai Marshall McLuhan 1962-ben közzétette *The Gutenberg Galaxy. The Making of the Typographic Man* című, a nyomtatás kultúrtörténetét eredeti módon jellemző, de a könyvnyomtatás végét is előre látó keserű, óriási sikerű bestsellerét. E téma részletes elemzése is biztosan megérné egy műsöt, de jelen munkának nem tárgya. Anynyira azonban mégis, hogy talán a technikafejlődés nézőpontja mentén Gutenberg korszakalkotó találmányát egydimenziós nyomtatásként tarthatnánk számon, amit logikus értelemben követett a kétdimenziós, majd a 20. század végén a háromdimenziós nyomtatás, amivel kimondottan vegyész szemmel foglalkozunk a következőkben.

Bevezetés

A 3D (háromdimenziós) nyomtatás rétegről rétegre való egymásra építésből hoz létre háromdimenziós (térbeli) tárgyakat. Ezen rétegek mindegyike a létrehozandó tárgy egy-egy vékony, vízszintes szelete. Minden 3D-ben nyomtatott tárgyat digitális CAD (computer aided design – számítógépes tervező) program alkot meg (**1. ábra**). A 3D modellezéshez szkennert is használhatunk: a **2. ábrán** például egy franciakuks szkennelését, illetve kinyomtatását látjuk. Ahhoz, hogy a képfájl eljusson azokig az utasításokig, amiket a 3D nyomtató megért, a tervezőprogram a létrehozandó tárgyat,

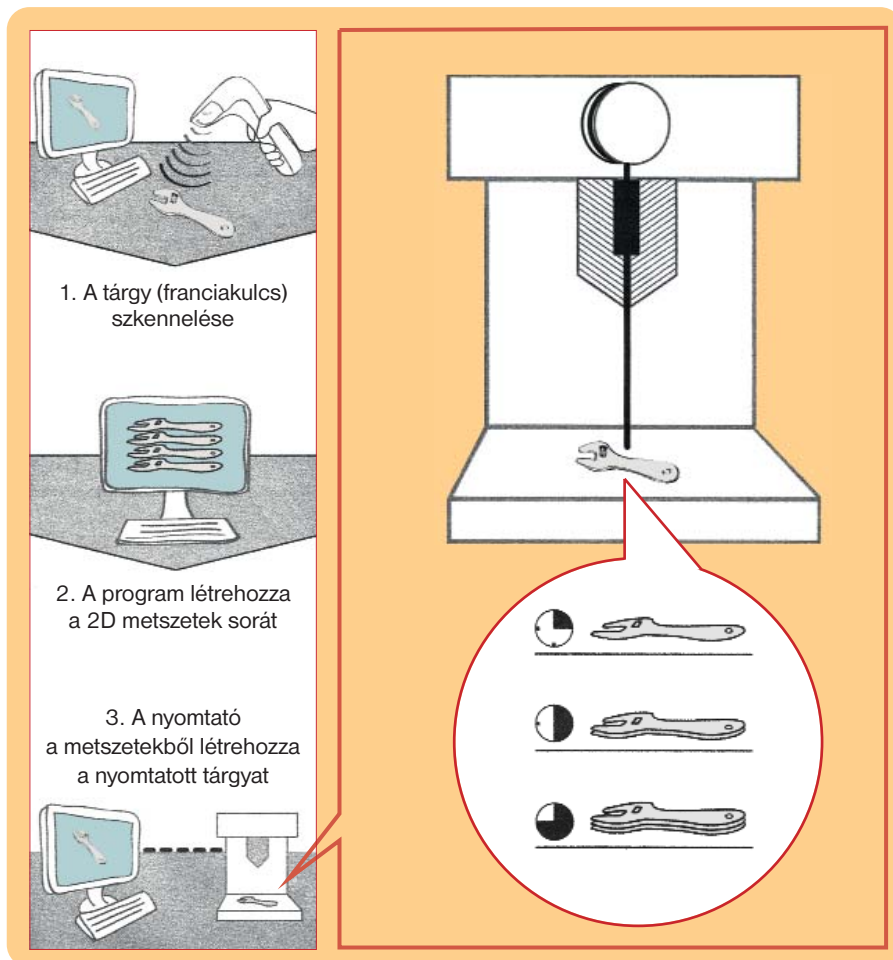


1. ábra. 3D nyomtató és számítógép

ez esetben a franciakuks képét több száz vagy több ezer vízszintes réteggé szelheti. A 3D nyomtató olvassa ezt a fájlt és a specifikáció alapján létrehozza a rétegeket, illetve megépíti a kívánt tárgyat [1], ami különleges bonyolultságú is lehet (**3. ábra**).

Az egyszerű 2D nyomtató a fűvókából tinta- vagy festékvonalakból álló rajzot, ábrát vagy betűket nyomtat egy papír felületére. A 3D nyomtató tinta helyett, hasonló fűvókából, például tetszőleges vastagságú műanyag csíkokat nyomtat. Ezek megfelelő, egyidejű kezeléssel (például melegítés, lézer- vagy UV-sugárzás) megkeményednek, és úgy rétegeződnek, hogy a nyomtatandó háromdimenziós tárgy sima felületét hozzák létre. A rétegek (csíkok) állhatnak tehát valamilyen extrudálható vagy olvadó műanyagból, de szórófejből vagy fűvókából szórt fémporból is, ami szintén

rezhető, vagy kerámiaporból, amit szintén külön szórófejből adagolt kötőanyag fog össze. Mivel a 3D nyomtatás anyagok, rétegek egymásra építésével hoz létre tárgyakat, additív (hozzáadásos) építésnek, előállításnak, gyártásnak is nevezik. Ezt fel foghatjuk a szubsztraktív előállítás ellenétéeként, ahol például egy tömbszerű tárgyból kifaragással (esztergálással) alakítják ki a kívánt 3D tárgyat. Hasonlatként megemlíthető Henry Moore neves angol szobrász mondása: minden kőben benne van a szobor, csak le kell róla fejteni a felesleget.



2. ábra. Olvasztott műanyag szállal működő 3D nyomtató

Előzmények, fejlődés, remények

A 3D nyomtatás feltalálását az amerikai Charles Hullnak tulajdonítják. Hull szabadalma 1986. március 11-én jelent meg. Ezután 3D nyomtatók gyártására Hull megalapította *3D Systems* nevű vállalkozását, és 1988-ban SLA-250 néven piacra dobta a világ első 3D nyomtatóját.

A Hull-féle berendezést követően a szintén amerikai Scott Crump 1988-ban felta-

3. ábra. 3D nyomtatóval készített, bonyolult geometriájú tárgy



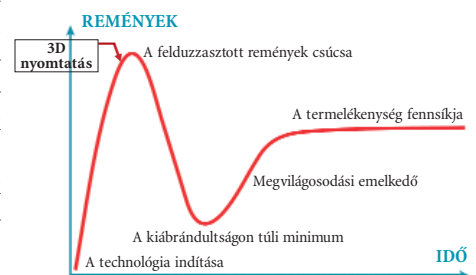
lalta a 3D nyomtatáshoz a *Fused Deposition Modelling (FDM)* és a *Selective Laser Sintering (SLS)* technológiákat és azok forgalmazására létrehozta a *Stratasyst* nevű vállalatot. Nem soroljuk tovább azokat a 3D nyomtatókat létrehozó cégeket, amelyek 1986 és 2013 között az Egyesült Államokban és más országokban létrejöttek [2]. Ezek után a 3D nyomtatók gyártása és használata világszerte jelentős fejlődésnek indult. 2008 és 2012 között az eladott nyomtatók száma exponenciálisan növekedett, miközben az asztali méretű egyszerűbb típusok ára ugyancsak exponenciálisan csökkent, illetve feleződött, és piacfelmérések szerint 2018-ban a 3D nyomtatók körülbelül egy PC-nél vagy laptopnál is olcsóbbak lehetnek [4,5]. Az asztali 3D nyomtatók gyártása és forgalmazása emlékeztet a személyi számítógépek 1970-es évekbeli elterjedésére [3].

Értékelés és jövőkép

Nehéz megtalálni a józan értékeléshez vezető utat a 3D nyomtatást és nyomtatókat kísérő óriási nemzetközi érdeklődés köze-

pette. A visszafogottságát gyakran bizonyító *New Scientist* szerint: „This will change everything. 3D printing technology will revolutionise the way we live our lives.” (Ez mindent megváltoztat. A 3D nyomtatási technológia forradalmasítja életünket.) A világszerte megszülető technológiákat értékelő és elemző amerikai *Gartner* cég [7, 11, 12] „túlzás és remény ciklus”-nak (*Gartner Hype Cycle*) nevezett metodológiát és grafikont javasolt az új technológiákat és újításokat kísérő, gyakran előforduló túllelkedés, kiábrándulás és esetleges siker értékelésére (4. ábra). A *Gartner*-ciklus a vizsgált új technológiáknak a médiában való feltűnését és előfordulását használja indikátorként. A ciklus „a technológia indításaként” a sajtóban való gyakori megjelenést és az azt kísérő érdeklődést tekint. „A felduzzasztott remények csúcsa” jelzi, hogy a publicitás túllelkedést és nem realisztikus reményeket hoz létre. Ezen a szakaszon fordul elő a legtöbb kudarc és csalódás. „A kiábrándultságon túli minimumhoz” azok a fejlesztések kerülnek, amelyek nem tudnak megfelelni a várakozásoknak, és a média nem foglalkozik velük tovább. A médiahallgatás ellenére egyes technológiák továbbfejlődnek és híruk emelkedni kezd. Egy technológia akkor jut el „a termelékenység fennsíkjára”, amikor haszna végleg bebizonyosodik, és gazdaságilag, illetve üzletileg is megbízható stabilitást mutat.

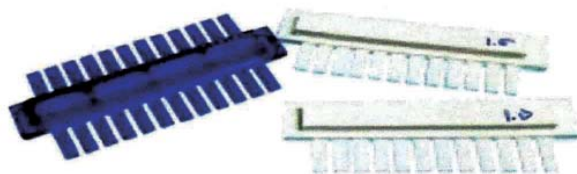
Úgy tűnik, hogy a *Gartner*-féle vizsgálat valamelyest alábecsülte a 3D nyomtatás fejlődését, sebességét és jelentőségét. Ezt



4. ábra. A *Gartner*-ciklus [11]

nemcsak az mutatja, hogy amikor jelen dolgozat szerzője az Interneten rákeresett a „3D printing” szóparra, 220 millió találatot kapott, hanem az is, hogy a „megvilágosodási emelkedés” a vártól meredekebbnek bizonyult 2012 után.

Az amerikai Phoenixben rendezett *Siemens Global Innovation Summit* konferencián (2013) *Paul Brody* [8], az IBM egyik igazgatója szerint a 3D nyomtatás nemcsak eszköz, hanem feltörekvő ökoszisztéma. A 3D nyomtatásról *Brody* külön kiemelte,



5. ábra. 3D nyomtatással készült: elektroforézishez használt műanyag fésű [21], Büchner-tölcsér [23], küvetatartó állvány [22]

hogy gyorsan elérje azt a teljesítmény-színvonalat, ami ahhoz szükséges, hogy készen álljon a termelésre; már most használják a gyártásban (az orvosi műszerek és a légiközlekedés esetében); a teljesítménye évről évre javul; kisebb térfogatú tárgyaknál az egységnyi árak versenyképesek a szubsztraktív megmunkálással és a fröccsöntéses műanyaggyártással.

Mindezeket megerősíti az a hír is, hogy 2012 augusztusában Obama elnök személyesen jelentett be egy 30 millió dolláros befektetési projektet a youngstowni (Ohio) Nemzeti Additív Gyártási Innovációs Intézet létrehozására [9]. A Gardner-ciklushoz visszatérve megemlítenéd, hogy a „Manufacturing the future. 10 trends to come in 3D printing” (A jövő gyártása. A 3D nyomtatásban megvalósuló 10 trend) ausztrál prognosztika [10] kiemelt fontosságúnak ítélte a 3D nyomtatást és nyomtatókat.

3D nyomtatók

Az előbbiekben említettük, hogy ennek a dolgozatnak sem célja, sem tárgya a 3D nyomtatók [13–18] részletes műszaki leírása, illetve bemutatása. Néhány fotója azért látható a cikk végén, és megemlítjük, hogy jelen pillanatban a világ számos országában nagyszámú cég gyárt és forgalmaz ilyen berendezéseket. Ezek ára gyártótól, típustól, felhasznált anyagtól függően jelenleg körülbelül 800 és 20 000 USD között változik. Nemrégén száznál több 3D nyomtatót; típusokat, gyártókat és árakat is tartalmazó nagyon hasznos összeállítást is közzétettek [18].

Amint említettük, a 3D nyomtatókat szá-

mítógép, illetve a megoldandó feladathoz szükséges CAD szoftver vezérli. Ez utóbbi egyrészt a kereskedelembe megvásárolható, másrészt „free open source software (FOSS)” termékként díjmentesen hozzáférhető. A FOSS-szal együttműködő hardver, például az Arduino [20] is figyelmet érdemel. Amennyiben a kívánság, vagy feladat egy meglévő tárgy, alkatrész, idom 3D nyomtatásban való másolása, úgy ezt, mint már említettük, szkennelssel kell letapogatni.

Kémia és 3D nyomtatás

Jelenleg a 3D nyomtatás három kémiai alkalmazásáról tudunk. Az elsőben megfelelő műanyagból (például akrilnitrilből, butilsztirolból, politejsavból, polisztirolból, teflonból stb.) kémiai laboratóriumi edényeket és más eszközöket nyomtatnak, illetve építenek. A másodikban, ami a szerző szerint a kémia szemszögéből valószínűleg a legforradalmibb alkalmazás, nem valamilyen szilárd tárgy, anyag létrehozá-

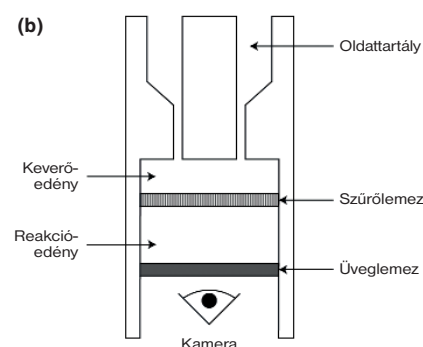
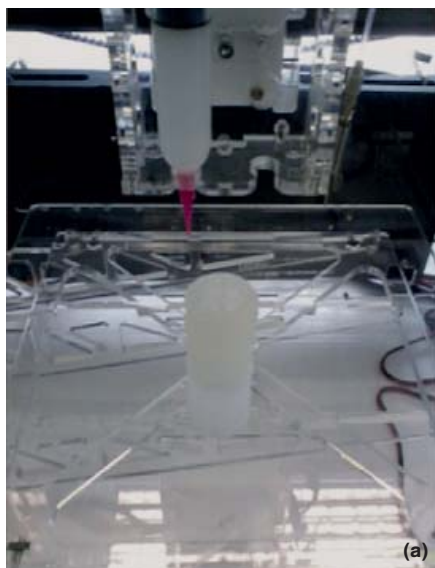
sára, hanem számítógéppel programozott pipettaként (fecskendőként) több folyadék („nyomtatási tinta”) reakcióedénybe való adagolására, elegyítésére használják a 3D nyomtatókat, kémiai szintézisek érdekében. A harmadikban a 3D nyomtató ehető (élelmiszer-kémiai) termékeket (élelmiszereket) nyomtat. Sőt, van olyan alkalmazás is, amely sejteket, illetve sejtkomponenseket, biológiai adalékokat nyomtat (bioprinting), bizonyos élelmezési reményekkel, például hús előállítására. Ezekkel a továbbiakban külön-külön foglalkozunk.

Laboreszközök 3D nyomtatása

A kémiai, biokémiai, biológiai, klinikai laboratóriumokban tízezer számára használnak különböző formájú, méretű edényeket és ezekből épített berendezéseket. Ezek az edények 3D nyomtatóval, FOSS segítségével bármilyen méretben, formában, falvastagságban elkészíthetők. Bizonyították, hogy célszerűen beszerzett 3D nyomtatóval vagy nyomtatókkal teljes laboratóriumok szerelhetők fel a szükséges laboráriumokból. Sőt, olyan edények, eszközök nyomtathatók, amelyekbe üvegből vagy más anyagokból például ablakok, szelepek, elektródok is beépíthetők. Az 5. ábra egyszerű, nyomtatott laboratóriumi eszközöket mutat be [21–25]. De bonyolultabbak is nyomtathatók. A 6. ábrán bemutatott, műanyagból kinyomtatott mikrofluidikai elemek felhasználásával, pumpákkal működtetett áramlásos rendszerben megvalósították imin, szekunder és tercier amin, sőt, a $\{Mo_{36}\}$, $\{Mo_{154}\}$ és aranyanorészecskék szintézisét is [28].

6. ábra. 3D nyomtatott mikrofluidikai reakcióedények [28]





7. ábra. Laboratóriumi edényt nyomtató berendezés (a). Loctite 5366 polimerből készített reakcióedény (b) [30]

3D nyomtatások, kémiai szintézis

Megfelelő 3D nyomtatóval, gyorsan keményedő műanyagból (acetilszilikon polimer, Loctite 5300 fürdőszobai ragasztó) és aránylag könnyen hozzáférhető FOSS szoftverrel tehát bármilyen formájú, idomú, méretű laborberendezés nyomtatható, előállítható. De ha már kinyomtattuk a berendezést, miért ne nyomtassuk (fecskendezük) bele a megfelelő reagenseket, vegyületeket [29]? Ehhez a nyomtató fúvókáit pipettaként, fecskendőként használhatjuk, a szoftverrel vezérelve. A programozás a folyadékok (tínták) térfogatának, a befecskendezés sebességének, a hőmérséklet változtatásával számtalan lehetőséget biztosít a kémiai szintézis legjobb körülményeinek kialakítására. Szinte már semmiségnek tűnik az a lehetőség, hogy az edények falába, nyomtatásuk közben, katalizátorok is bevihetők. Ezzel, nyugodtan állíthatjuk, teljesen új kémiához jutottunk, ami számtalan lehetőséget kínál.

A most vázolt berendezést szerves és szervetlen kémiai szintézisek esetében is al-

kalmazzák. A szervetlenül egy nanoklasztert szintetizáltak úgy, hogy műanyagból pótlólag kinyomtattak egy szűrőlapot és üveglapot is magába foglaló reakcióedényt (7. ábra). A nyomtató egyik fecskendőjéből CoCl_2 -oldatot fecskendeztek a reakcióedényben előzőleg elkészített $[\text{Se}_2\text{W}_{19}\text{O}_{67}(\text{H}_2\text{O})]^{12-}$ -oldathoz. A két oldatot a reakcióedényből vákuumszivattyúhoz csatolt és a reakcióedény falán átszűrt injekciós tűvel a programvezérlés átszívta a reakcióedényébe. A tű eltávolítása után a műanyag fal újra bezárult. A bekövetkező kristályosodást az üveglap mögött elhelyezett, különböző időpontokra programozott videokamera felvette. 60 perc után a műanyag reakcióedényt sebészi szikével kettévágták, és a kialakult kristályokat röntgenkristallográfián, FTIR-rel, termogravimetrián és elemanalízissel vizsgálták. Az előállított vegyület klasszikus, szendvics típusú anionos klasztert – $[\text{W}_{10}\text{Co}_2\text{O}_{61}\text{Cl}(\text{SeO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]^{9-}$ – tartalmazott [30, 31].

Nem árt még egyszer hangsúlyozni, illetve kiemelni azokat a lehetőségeket [30], amelyeket a kémiai 3D nyomtatás – lényegében számítógép által programozott reagensadagolás (pipettázás) és 3D nyomtatással készült reaktorok, reakcióedények, formák, méretek szinergikus szinkronba helyezése – nyit meg a kémia előtt. A reaktorok, edények geometriai kialakítási lehetősége és a reaktánsok programozott találkozása még innovatívabb utakat kínál.

Az elmondottak illusztrálására szolgál a következő szerves kémiai szintézis (8. ábra). Az itt nyomtatott műanyag edény [30] lényegében ugyanaz, mint a 7.b ábrán bemutatott azzal a különbséggel, hogy nem építettek bele szűrőlapot. A reakcióban egy ekvivalens 4-metoxianilint reagál-

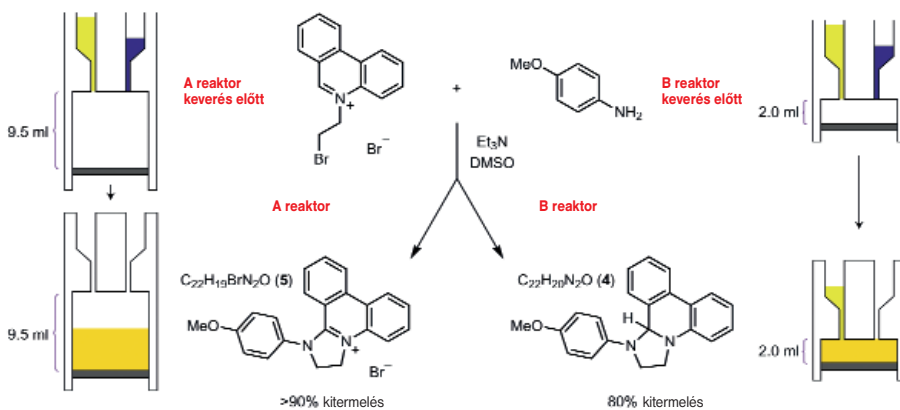
tattak DMSO-ban oldott három ekvivalens 5-(2-brómetil)-fenantridinium-bromiddal Et_3N -feleslegében [31]. Az A reaktor két fecskendőjében az oldatok térfogata 4,7 ml, az alsó edényrész 9,5 ml térfogatú volt. A szoftverrel tervezett edénytérfogatok űrtartalma és a nyomtatott edények végleges űrtartalma között 5%-on belül volt a különbség. A B reaktorban az oldattérfogatot mindkét esetben 2,0 ml volt. A reakció kimenetelét jelentősen meghatározta a két reaktor térfogatkülönbsége. Az A reaktor esetében mindkét reagenst teljes egészében befecskendezték az alsó kamrába. A B reaktorban bizonyos mennyiségű 5-(2-brómetil) fenantridinium-bromid-oldat keverés után reagálatlan maradt a reakciókamra kisebb térfogatának következményeként.

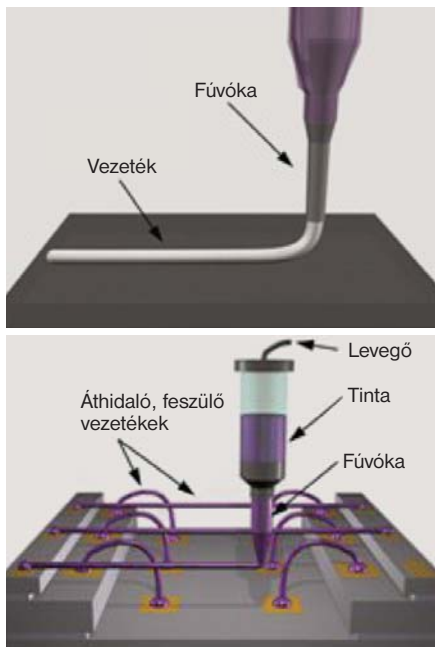
3D nyomtatott huzalok

Elektronikus, optoelektronikus és orvosi berendezésekben a vezetékek, huzalok sűrű erdejével találkozunk. Ezek elhelyezése, vezetése számos nehézséget von maga után. Az ilyen huzalozások gyors, egyszerű és olcsó megoldására érdekes megoldást javasoltak [32]. A huzalokat 5000 és 50 000 relatív molekulatömegű poliakrilsav, dietanolamid és ezüst-nanorészecskékből összeállított keverék tintából (pasztából) nyomtatták 3D nyomtatóval a kívánt felületekre (9. ábra). A huzalok vastagságát a 3D fúvókák nyílásának méretével tudták szabályozni.

Hasonló gondolatmenetbe illik egy 3D nyomtatással megvalósított elektrokémiai fejlesztés is: olyan akkumulátorokat kívánnak előállítani, amelyek 20%-kal több energiát képesek tárolni, mint a jelenleg hasz-

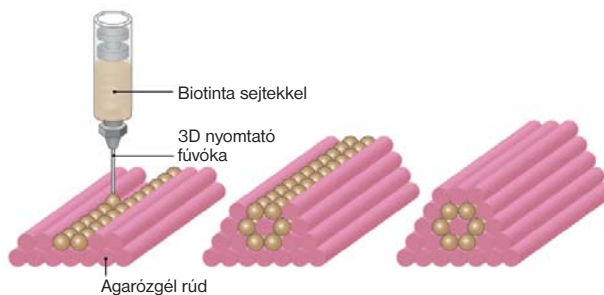
8. ábra. $\text{C}_{22}\text{H}_{20}\text{O}(4)$ és $\text{C}_{22}\text{H}_{19}\text{BrN}_2\text{O}$ szelektív szintézise 3D nyomtatott reakcióedényekben [30]. Az A reaktor esetében mindkét reagens teljes mennyisége befolyik az alsó kamrába. A B reaktorban bizonyos mennyiségű 5-(2-brómetil)-fenantridinium-bromid-oldat reagálatlan marad a keveredés után a reakcióedény kisebb mérete következtében





9. ábra. Rugalmas poliakrilsav-ezüst nanorészecske-kompozitból 3D nyomtatott elektromos huzalok [32]

nált típusok. Több energiát tároló akkumulátor több lítiumionot tartalmazó, nagyobb katódot igényel. Azonban a vastagabb katódra nem tudnak elég mélyen behatolni a lítiumionok. Ez csökkenti az akkumulátor energiasűrűségét, „erejét” és lomha gyorsuláshoz vezet. A PARC laboratórium [33] úgy szeretne ezen javítani, hogy két anyagból készíti a katódot. Az egyik sűrű és tárolásra van optimalizálva, a másik pórusos, hogy gyorsítsa a töltés átvitelét. Ezáltal széles tárolórégiók váltakoznak keskeny vezetőrégiókkal. Ez lehetővé teszi a nagyobb, energiadúsabb akkumulátorok építését. A kutatók a két anyagot szerves anyagba keverik és egy 3D nyomtató fűvókás fecskendőjébe töltik úgy, hogy párhuzamos, vékony csíkokat nyomtassanak egy fémlapra – mintha fogpasztát nyomnának ki. Száradás közben a csíkokból elpárolog a szerves anyag, maga után hagyva a szilárd katódot. További fejlesztésként teljes nyomtatott akkumulátorok építését is tervezik. Ez öt tinta (paszta) nyomtatását igényli, kettő-kettő anódként és katódként, és egy elválasztóként működik. Az együtt nyomtatás ígéretesnek tűnik napelemek teljesítményének a növelésére is – ilyenkor ezüstpasztából nyomtatnak vékony ezüstvezetéseket. A pasztásításhoz olyan szerves anyagot használnak, amely a melegítéskor elég. Így 50 μm -es huzalok helyett 20 μm átmérőjűek hozhatók létre; ezek kisebb árnyékot vetnek, ezáltal több napfényt érheti a cellát [33].



10. ábra. Mesterséges izomszövet 3D nyomtatása

3D nyomtatás – élelmiszer-kémia

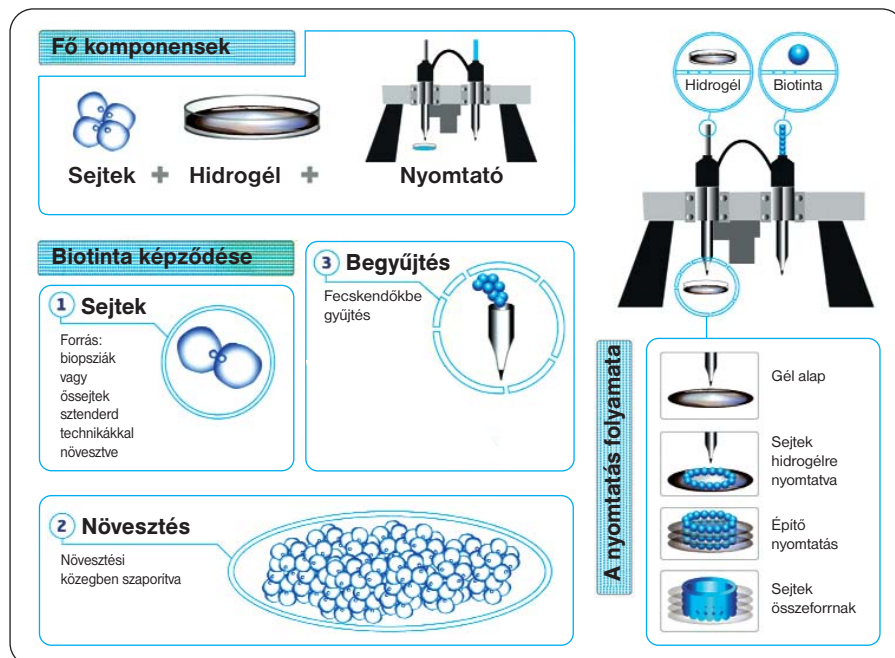
Két irányban is folynak 3D nyomtatásos kutatások az élelmiszerek terén. Az elsőben pürésített húsokból, halakból, zöldségek-ből, valamint gyümölcsökből hoznak létre olyan nyomtatott egyedi vagy keverék idomokat, amelyeket másképpen nem lehetséges megvalósítani, és amelyek a nyomtatásos formázás után sűrítethetők, grillezhetők vagy főzhetők formájuk megtartásával. E célra általában transzaminázts kevernek a nyomtatott püréhez.

A másik irány a fenténél talán még érdekesebb: mesterséges húskészítmények előállítását célozza 3D nyomtatással. Az állatvilág kímélése érdekében az emberiség fejlődése során aránylag régen felmerült az állati húshoz hasonló étkezési igényeket kielégítő mesterséges hús előállításának a gondolata. Ez annyiban is bonyolult feladat, amennyiben a hús nem teljes egészében tekinthető izomsejtek együttesének, hanem tartalmaz zsírt, kötőszövetet és más sejt-szerű komponenseket, amelyek jelentősen hozzájárulnak ízéhez és textúrájához.

A 2011 októberében San Diegóban megrendezett TEDMED konferencián bemutatták azt a készítményt, amely a mesterséges hús előfutárának is tekinthető [35, 36]. A kérdéssel komoly ráfordítások árán is foglalkoznak [37]. A 3D nyomtatással előállított húskészítmények témája átvezet egy olyan területre, nevezetesen a 3D bio-nyomtatásra (bioprinting), amellyel ez a dolgozat nem kíván foglalkozni – csak annyiban, amennyiben a 3D nyomtatott hús kérdését illeti. Példaként megemlíthető a 10. ábrán bemutatott izomszövet 3D bioprintelése agaróz és őssejtekből álló biotinta felhasználásával [38].

Az Egyesült Államokban magyar származású apa-fiú kutatópár által létesített *Modern Meadow* vállalkozásról [39] a közelmúltbeli a *Google Solve for X* konferencián számoltak be, ahol sertésből vett biopsziából kiindulva képzelik el a 3D printeléssel előállított hús útját. Ugyanők egy másik, Organovo nevű vállalkozásukban mesterséges szervek, például erek építéséhez hidrogélekre nyomtatnak őssejteket (11. ábra).

11. ábra. 3D nyomtatott, őssejtből előállított ér petricsészébe helyezett hidrogélen





Zárszó

Amennyiben a 3D nyomtatás és nyomtatók, valamint a vezérlő szoftverek fejlődése abban a ritmusban és a sebességgel fejlődik és folytatódik, mint az utóbbi körülbelül 2 évben, akkor valóban közel van az az idő, amikor minden háztartás, laboratórium, iroda asztalán a számítógép és 2D nyomtató mellett megjelenik a 3D nyomtató valamelyik változata, ami műanyag tárgyak, de a további fejlődés során élelmiszerek, sőt kerámia-, illetve fémtárgyak saját kezű előállítását szolgálhatja.

Ez vonatkozik persze a középiskolai oktatásra is, ahol a gyerekek kíváncsiságát, alkotó érdeklődését jelentősen stimulálhatja egy önállóan működtethető 3D nyomtató. A kiemelkedően innovatív „3D nyomtatásos kémia” csak az aránylag közeljövőben, jelen szerző szerint az elkövetkező körülbelül egy évtized során igazolhatja létjogosultságát és kibontakozásban lévő átfogóan széles körű potenciálját.

Az IBM-et képviselő Paul Brody [8] és Obama elnök [9] hangsúlyos megnyilvánulása a 3D nyomtatás jövőjét illetően nem-

csak figyelemre méltó, hanem döntően meggyőző és iránymutató lehet az emberi fejlődés műszaki jövője szempontjából. Ezek mellett, sőt ezeken felülemelkedve nyomós érv lehet a fentiek alátámasztására az a mondat, amit talán nem lehet tömörebben megfogalmazni, mint hogy „a kínaiak már a spájzban vannak”. Ezt nem lehet jobban bizonyítani, illetve illusztrálni, mint ahogy a 12. ábrán szerepel. [41]



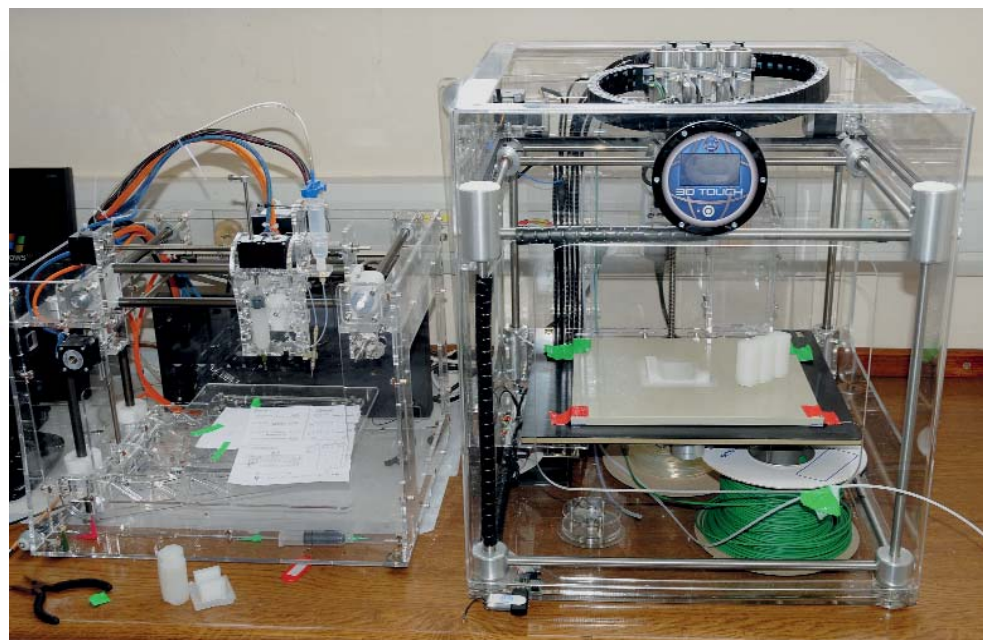
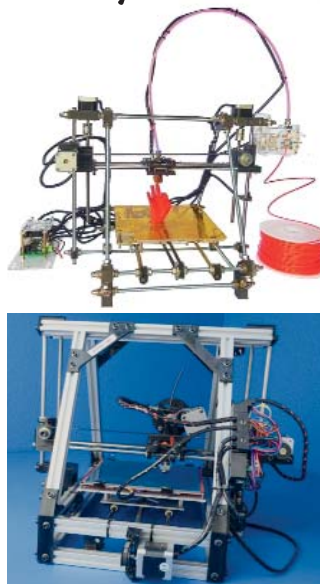
IRODALOM

- [1] http://en.wikipedia.org/wiki/3D_printing
- [2] <http://www.3d-innovations.com/blog/?p=373>
- [3] H. Lipson, M. Kurman, Factory@Home. The Emerging Economy of Personal Manufacturing. One of a Series of Occasional Papers in Science and Technology, <http://www.handelsblatt.com/technologie/it-tk/it-internet/3d-druck-die-revolution-wird-abgeblasen/7817508.html>, <http://www.thingiverse.com/thing:370>
- [4] <http://www.3dprinter.net/rise-of-3d-printing-exponential>
- [5] CISCO
- [6] New Scientist (2011) 30 July.
- [7] <http://en.wikipedia.org/wiki/Gartner>
- [8] <http://on3dprinting.com/2013/03/21/ibm-sees-exponential-growth-of-3d-printing-ind...>
- [9] <http://www.3ders.org/articles/20120816-white-house-announced-new-manufacturing-...>
- [10] <http://www.forbes.com/sites/ciocentral/2012/12/07/manufacturing-the-future-10-trends-to-come-in-3d-printing/>
- [11] http://www.google.hu/search?q=Gartner+Hype+Cycle+for+Emerging+Technologies.gif&hl=en&tbm=isch&tbo=u&source=univ&sa=X&ei=f89aUe_4CaT74QSVIIQCw&ved=0CDQQAQ&biw=1280&bih=886#imgsrc=aTvCfjXmMzK00M%3A%3BdQ5ghz239TbcCM%3Bhttp%253A%252F%252Fupload.wikimedia.org%252Fwikipedia%252Fcommons%252F%252F%252F%252FGartner_Hype_Cycle_for_Emerging_Technologies.gif%3Bhttp%253A%252F%252Fcommons.wikimedia.org%252Fwiki%252FFile%253AGartner_Hype_Cycle_for_Emerging_Technologies.gif%3B610%3B531
- [12] http://en.wikipedia.org/wiki/File:Gartner_Hype_Cycle.srg
- [13] http://reprapthai.com/index.php?route=product/product&product_id=50
- [14] <http://www.3dstuffmaker.com/evolution-3d-printer/>
- [15] http://www.reprap.org/wiki/Mendel_Build_Manual
- [16] <http://www.nagyformatumu.hu/hu/3d-nyomtato-rapman-32-3d-nyomtato-epitokeszlet>
- [17] <http://discovermagazine.com/2013/jan-feb/19-3-d-printers-make-every-home-a-factory#.UXYR36KeNfY>
- [18] <http://www.3dstuffmaker.com/images/classicprusad.jpg>
- [19] <http://www.3ders.org/pricecompare/3dprinters>
- [20] <http://www.arduino.cc/>
- [21] <http://cen.acs.org/articles/9/i7/3-D-Printers-Move-Research.html>
- [22] <http://www.thingiverse.com/thing:25080>
- [23] <http://www.thingiverse.com/thing:25188>
- [24] <http://www.thingiverse.com/thing:11621>
- [25] Braun Tibor, Magyar Kémikusok Lapja (2012), 67.
- [26] <http://www.sciencemag.org/context/337/6100/1303/F1.large.jpg>
- [27] <http://www.rsc.org/chemistryworld/2012/08/3d-printed-miniaturized-fluidic-devices>
- [28] P. Y. Kitson, M. L. Rosnes, V. Sans, V. Dragone, L. Cronin, Lab-on-a-Chip (2012) 238, 3267.
- [29] K. Sanderson, New Scientist (2012) 21 April.
- [30] M. D. Symes, Ph. J. Kitson, Jun Yan, C. J. Richmond, G. J. T. Cooper, R. W. Bowman, P. Vilbrandt, L. Cronin, Nature Chemistry (2012) 4, 349.
- [31] A. D. Parenty, L. V. Smith, A. L. Pickering, D.-L. Long, L. Cronin, J. Org. Chem. (2004) 69, 5934.
- [32] Bok Yeop Ahn, S. B. Walker, S. C. Slimmer, A. Ruso, S. Kranz, E. D. Duoso, F. F. Malkowski, J. A. Lewis, J. Vis. Exp. (2011) 58, 3189.
- [33] <http://www.pcworld.com/article/2030320/parc-re-designs-printers-to-produce-solar-panels-batteries.html>
- [34] <http://eativemashines.cornell.edu/node/194>
- [35] <http://utwiren.engr.utexas.edu/lff/symposium/proceedingsArchive/pubs/Manuscript/2010-08-Lipton.pdf>
- [36] <http://www.inc.com/john-mcdermott/big-ideas-modern-meadow-in-vitro-meat.html>
- [37] <http://www.geek.com/news/sartup-gets-350k-in-funding-to-3d-print-meat-1509683>
- [38] V. S. Balakrishnan, Lab Times (2013) 2, 24.
- [39] <http://3dprintingindustry.com/2013/03/07/update-andreas-forgacs-on-3d-printed-meat/>
- [40] <http://www.3ders.org/articles/20120730-gabor-forgacs-scientific-founder-of-organovo-recognized-for-pioneering-work-in-bioprinting.html>
- [41] The Economist, April 27, 2013. <http://www.economist.com/news/science-and-technology/21576626-additive-manufacturing-growing-apace-china-new-brick-great-wall>

12. ábra. A kínaiak már a spájzban vannak



3D nyomtatók



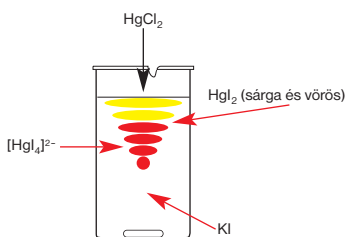


Árus Dávid

Egyszerű és motiváló kísérletek a kémia tanításához¹

A kémia megfelelő hatékonyságú tanítása érdekében nagyon fontos, hogy a tanulók motiváltak legyenek, és szeressék a tantárgyat. Gyakorlati tapasztalat, hogy a szépen kivitelezett, látványos kísérletekkel „tarkított” kémiaórák a tanulók számára élményt jelentenek, és így az elméleti anyagot is könnyebben elsajátítják. Természetesen a kísérletek célja nemcsak a tanulók motiválása, hanem annak szemléltetése, hogy a tanult törvényszerűségek hogyan jelennek meg a gyakorlatban. Éppen ezért egy fogalom tanításakor gyakran igen hasznos, ha kísérletből indulunk ki. A gyakorlati foglalkozáson olyan egyszerű kísérleteket mutattunk be, amelyek didaktikailag jól hasznosíthatók a kémiaórákon, viszonylag rövid idő alatt kivitelezhetők, nem rejtenek különösebb veszélyt magukban, végül pedig nem igényelnek nehezen hozzáférhető és drága vegyszereket.

Az „orange tornado” reakció



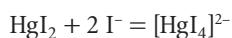
Egy 500 cm³-es pohárba 400 cm³ desztillált vizet öntünk, és 5 g kálium-jodidot oldunk fel benne. Egy másik pohárban telített HgCl₂- (szublimát-) oldatot készítünk, és pipettába felszívjuk. A KI-oldatot tartalmazó poharat mágneses ke-

verőre helyezve, közepes sebességgel keverjük, hogy 4–5 cm-es örvény alakuljon ki (mágneses keverő hiányában üvegbotot használunk), és az örvény közelében a HgCl₂-oldatot a pipettából belefolyatjuk a KI-oldatba. Narancsszínű és sárga csapadék leválását tapasztaljuk, amely az örvényen kívül színtelenül oldódik. Kb. 100 cm³ HgCl₂-oldat hozzáadása után a csapadék már nem oldódik fel.

Magyarázat: A KI-oldathoz HgCl₂-oldatot öntve, helyileg csapadék válik le: a HgI₂ sárga módosulata, amely nem stabil, gyorsan átalakul a narancsszínű módosulattá:



A keverés során azonban feloldódik a csapadék, mert a feleslegben levő jodidion színtelen tetrajodo-merkurát komplexbe viszi:



Tartósan csak akkor jelenik meg a HgI₂, ha a Hg²⁺-ionok mennyisége meghalad egy, a koncentrációk, a HgI₂ oldhatósági

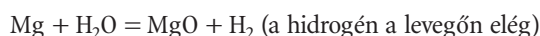
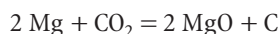
szorzata, valamint a [HgI₃]⁻ és [HgI₄]²⁻ komplexek stabilitása által meghatározott értéket.

Ceruzahegyező meggyújtása

Egy magnézium ceruzahegyezőt (KUM® márkájú, német gyártmány), drótháló fölött csipesszel tartva, Bunsen-égővel erősen hevítünk. Pár perc hevítés után megolvad, majd meggyullad, vakító lánggal égni kezd. Az égő hegyezőre vizet spriccelünk, ami igen heves reakciót vált ki, a keletkező hidrogén nagy lánggal ég. Ezután egy szódás szifonból engedünk rá szén-dioxidot. Ekkor is heves reakciót tapasztalunk, vakító fény kíséretében. Nagy mennyiségű homok rászórásával sikerül csak eloltani a hegyezőt.

Egy ugyanilyen hegyezőről eltávolítjuk a pengét, és krokodilcsipesszel vezetéket kapcsolunk hozzá. A vezetékek másik végét egy 1,5 voltos ceruzaelemmel működő ébresztőóra negatív sarkához kapcsoljuk, a pozitív pólushoz pedig egy 15 cm hosszú, spirálissá tekert rézdrótot kapcsolunk vezetékek segítségével. A fémeket egy pohár vízbe mártjuk: változást nem észlelünk. Kevergetés közben kénsavat csepegtetünk a vízbe: az óra hamarosan járni kezd.

Magyarázat: A ceruzahegyező anyaga fémmagnézium, ami az égés hőmérsékletén igen hevesen bontja a vizet és a CO₂-ot:



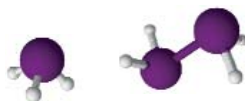
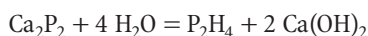
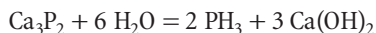
A második kísérletben összeállított galvánelem azt szemlélteti, miként védi az acélból készült pengét elektrolit jelenlétében a rozsdásodástól a magnézium (helyi elem képződik, aminek anódja a magnézium, katódja pedig a vas).

Füstkarikák (lidércfény) és öngyulladó ólom

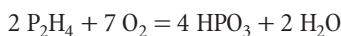
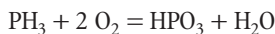
Egy üvegcádba vagy nagyobb főzőpohárba öntsünk vizet, helyezzünk el benne vízzel telt kémcsövet, valamint kis üvegtölcsért a kémcső alá. Babszem nagyságú kalcium-foszfidot dobunk a vízbe, helyezzük rá az üvegtölcsért és a kémcsövet. A fejlődő gáz a kémcsőben gyűlik össze. Dugóval zárjuk le a kémcsövet, és hagyjuk az üvegcádban az óráig. A bemutatáskor vegyük ki a dugót a víz alatt, és engedjük ki a buborékokat a kémcsőből. Ezek a víz felületére jutva meggyulladnak, és szép füstkarikákat képezve elégnék. **Vigyázat! A keletkező, kellemetlen szagú és mérgező foszfin miatt az előkészítést fülke alatt végezzük!**

Magyarázat: A kalcium-foszfidban kétfajta vegyület található, amelyek a vízben hidrolizálnak (sav-bázis reakció), és PH₃, valamint P₂H₄ képződik:

¹ Gyakorlati foglalkozás a Kémia tanárok Nyári Országos Továbbképzésén, Szeged, 2013. július 3–6.



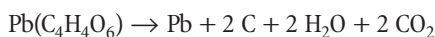
Ezek a vegyületek, a nitrogén megfelelő vegyületeihez (amónia és hidrazin) képest kevésbé stabilisak, ami a P-atom nagyobb méretével és ezért a kötés gyengébb mivoltával magyarázható. Így a P_2H_4 oxigénnel már szobahőfokon reagál (öngyulladós), és a foszfint is meggyújtja:



A természetben (állítólag) előforduló egyik igen ritka jelenség, a lidércfény is ezen vegyületek anaerob képződésével magyarázható.

Öngyulladó ólom: Készítsünk ólom(II)-tartarátot úgy, hogy 33,1 g ólom-nitrátot és 15,0 g borkósavat (gyógyszertárban kapható) annyi desztillált vízben oldunk, hogy telített oldat keletkezzék. Az oldatokat összeöntjük, és keverés közben 8,5 g NaOH 50 cm³ vízben készült oldatát öntjük hozzá. A leváló fehér csapadékot leszűrjük, alaposan kimossuk desztillált vízzel, és megszáritjuk (szobahőfokon néhány nap vagy szárítószekrényben, kb. 120 °C-on pár óra alatt). Az anyagból 2–3 g-ot tegyünk kémcsőbe, és (lehetőleg fülke alatt) Bunsen-égővel erősen hevítjük, amíg a vízgőz és a füst képződése meg nem szűnik. Ekkor zárjuk el dugóval a kémcsövet, és hagyjuk lehűlni. Rázogatással törjük össze az anyagot, majd (a dugót kivéve) lassan szórjuk ki egy darab szűrőpapírra. Az anyag lilás lánggal elég, és sárga ólom(II)-oxid marad vissza.

Magyarázat: A bomlás közben igen finom eloszlású fémólm és szén keveréke keletkezik:

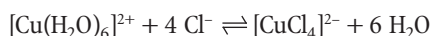


A kísérlet rávilágít arra, hogy heterogén reakciók esetében a reakciósebesség függ a fázisok érintkezési felületétől (egy darab fémólm csak a felületén oxidálódik lassan, jelen esetben viszont öngyulladásig fokozódik a reakció sebessége).

Színes lángok alufóliával

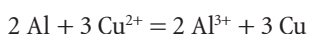
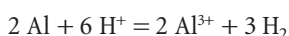
Egy 500 cm³-es lombikba (gömb- vagy Erlenmeyer-lombik) kb. 30 cm³ tömény sósavat öntünk, és kiskanálnyi $\text{CuSO}_4 \times 5 \text{H}_2\text{O}$ -t oldunk fel benne. A kék kristályos anyag gyönyörű smaragdzöld színnel oldódik. Hígítsuk meg az oldatot desztillált vízzel (kb. 100 cm³), ekkor a szokásos halványkék oldatot kapjuk. Dobjunk az oldatba 2–3 dió nagyságúra összegyúrt alufólia darabot. Rövid idő múlva intenzív gázfejlődés indul meg. Ha a képződő gázt meggyújtjuk, az szép kékeszöld lánggal ég. A reakció lejártszódása után szintelen oldatot kapunk, amelyben barnás csapadék található.

Magyarázat: A tömény sósavban zöld színnel oldódik a réz-szulfát, mert tetrakloro-komplex képződik:



Desztillált víz hatására a Le Chatelier-törvény értelmében a kék színű akvakomplex irányába tolódik el az egyensúly.

Az alumínium hatására két párhuzamos reakció megy végbe, egyrészt H_2 fejlődik, másrészt fémréz válik ki. A H_2 oldatcseppeket ragad magával, az ebben található Cu^{2+} -ionok megfestik a lángot.



Aldehid-óra reakció

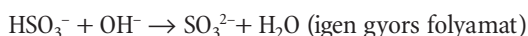
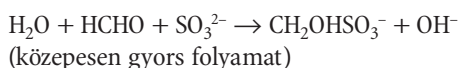
Készítsük el az alábbi két oldatot:

A: 9 g $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_5$ (kálium-piroszulfít) + 1 g NaOH/dm³

B: 7 cm³ 40%-os formaldehid-oldat/dm³

Készítsünk elő hat darab főzőpoharat. Az első háromba mérjük be 50–50 cm³ A oldatot. Az első pohárba cseppentsünk 2–3 csepp fenoltalein indikátort, a másodikba timoltaleint, a harmadikba pedig p-nitrofenolt + timoltaleint (az indikátorok kb. 1%-os alkoholos oldatát használjuk). A másik három pohárba mérjük be 50–50 cm³ B oldatot. Párunként öntsük össze az oldatokat. Kb. 1 perc múlva az első pohárban lila, a másodikban kék, a harmadikban pedig zöld szín jelenik meg.

Magyarázat: A rendszerben három eltérő sebességű reakció fut párhuzamosan:



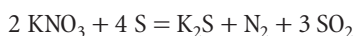
Az oldat meglúgosodása (és ezzel együtt az indikátorok átcsapása) tehát akkor következik be, ha az OH^- -iont fogyasztó HSO_3^- elfogy a rendszerből. A kísérlet szemléletesen mutatja, hogy a reakciósebesség viszonylag egyszerű módszerekkel is mérhető. A $\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_5$ borkén néven mezőgazdasági boltokban megvásárolható.

Durranópor készítése

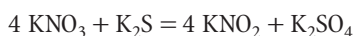
Lemérünk 3 g kálium-nitrátot, 2 g kálium-karbonátot és 1,3 g kénport. A három anyagot dörzsmozsárban alaposan összekeverjük. A keverékből kiskanálnyi porcelántálba szórunk, és égő gyújtópálcával meggyújtjuk: hevesen elég. Kiskanálnyi keveréket egy vaslapra szórunk, és alulról Bunsen-égővel, kis lánggal(!), lassan melegítjük. Az anyag megolvad, füstölni kezd és erős robbanással reagál.

Vigyázat! A robbanás néha olyan heves, hogy a vaslap lerepül az állványról. Ezért 3 méternél közelebb ne álljunk a kísérlethez!

Magyarázat: A keverék meggyújtásakor gyors égés megy végbe, a kálium-nitrát oxidálja a kénport:



A lassú felmelegítés esetén bekövetkező heves detonáció több, párhuzamosan futó reakció eredményeként értelmezhető. A kén a K_2CO_3 hatására diszproporcionálódik szulfidra és tioszulfátra (ún. kénmáj keletkezik), ezzel párhuzamosan a nitrát nitritté redukálódik:



A keverékben tehát felszaporodik a kálium-nitrit, és kellő hőmérséklet elérése után robbanásszerűen oxidálja a szulfidot, illetve a tioszulfátot.

IRODALOM

Rózsahegyi Márta, Wajand Judit: Látványos kémiai kísérletek. Mozaik Kiadó, Szeged, 1999.

Lengyel Béla: Általános és szervetlen kémiai praktikum. Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1999.



Vegyészkalendárium

Pap József Sándor rovata

SIR JOHN ANTHONY POPLÉ (1925. OKTÓBER 31.) – EGÉSZEN AZ ELEJÉTŐL. A család első olyan tagja, aki diplomát szerez. Apja férfi ruházati boltja mellett édesanyja magántanítói jövedelméből élnek. Keith Pople élelmes ember, árujával a környékbeli farmokat járja, ezzel még a gazdasági válság alatt is biztosítja



stabil jövedelmüket. Mindkét szülő vágya, hogy gyermekeik többre vigyék náluk, ennek megfelelően John is jó iskolába akarják járatni. A merev osztályrendszer miatt a burnham-on-sea-i általános iskola után 1936-tól Bristolba ingázik. Tízévesen már élen érdeklődik a matematika iránt, szabadidejében „titkos” kutatásokat folytat, ugyanakkor az iskolai dolgozatokban szándékos hibákat vét, nehogy társai okostojás-

ként kezeljék. Ez egészen addig így megy, amíg R. C. Lyness személyében új tanár érkezik a Bristol Grammar Schoolba. Egy minden addiginál nehezebb dolgozatot állít össze diákjai képességeinek felmérésére. John Pople-t elfogja a kísértés, és tökéletes megoldást ad be. Még szüleit is behívják, s ettől kezdve Lyness külön foglalkozik vele, így vezethet a kereskedő fiának útja egészen Cambridge-ig.

Szerencséje van, hiszen míg társai legtöbbje katonai szolgálatra kényszerül, néhány hasonlóan kiváló képességű hallgatóval együtt folytathatja tanulmányait, azzal a céllal, hogy majd a radarfejlesztésekben, vagy épp a kódfejtők munkájában segítkezzen. Tanárai kiváló tudósok, mint C. E. Powell, 1950 fizikai Nobel-díjasa és A. S. Besicovich matematikus. Bármennyire is sikeres, a háború végeztével az egyetem köteles a katonai szolgálatból visszatérő fiatalokat befogadni, így Pople kiszorul a képzésből.

Átmenetileg a Bristol Aeroplane Company alkalmazásába áll, de ebben cseppet sem leli örömét. Végre 1947-ben visszajut Cambridge-be, ahol újra nagyszerű tanárokkal hozza össze a sors. Paul Dirac, Fred Hoyle (ő adta a világegyetem keletkezéséről szóló elméletnek a „Big Bang” nevet, mivel nem értett vele egyet) és John Lennard-Johnes előadásain csiszolhatja tudását. Végül Lennard-Johnes mellett válik elméleti kémikussá, aki akkoriban közül fontos cikkeket az MO-elmélet, az atomok között fellépő erők és a folyadékok elmélete terén.

Első cikkét 1949-ben küldik be, ebben az elfajult pályák jelentőségét tárgyalja a kémiai vegyérték vonatkozásában. Szabadidejében zongorázni tanul és az MO-elmélettel nehezen magyarázható jelenségbe botlik. E jelenség ifjú tanára Joy Cynthia Bowers, akit 1952-ben elvesz feleségül. Falura költöznek, ahonnan John rendszerint MG sportkocsiján jár be munkahelyére. Négy

gyermekük születik az évek során (az utolsó már Amerikában). Szakmai érdeklődése a statisztikus mechanika irányába is bővül, általános módszert dolgoz ki a szögfüggő intermolekuláris kölcsönhatások termodinamikai hatásainak vizsgálatára. 1951-ben szerzi PhD-fokozatát.

Számos jelentős publikációja jelenik meg az 50-es években, többek között R. K. Nesbittel a megkötés nélküli Hartree-Fock-módszer alapját képező rövid cikke, vagy a planáris, telítetlen szénhidrogének elektron-kölcsönhatásairól szóló, Pariser és Parr munkájához kapcsolódó közleménye (ma szemiempirikus PPP-modellként ismert). Lennard-Johnes távozása, majd halála után Longuet-Higgins kapja az elméleti kémia professzori székét, akit Pople elektrongerjesztési spektrumok értelmezésén dolgozik együtt, majd nagy felbontású NMR-spektroszkópiai kutatások kapcsán Kanadába utazik.

Matematikusból gyakorló kutatóvá válik, a „matektanári” pozíció már nem elégíti ki, így 1958-ban elfogadja a National Physical Laboratory (NPL) fizikai osztályának vezetését. Kiváló kutatókkal dolgozhat, nagyon magas színvonalú technikai háttérrel, mégis terméketlen az itt töltött 6 éve. Érzi, hogy valami másra van szüksége, ezért hosszas vívódások után elfogadja a pittsburghi Carnegie Institute of Technology ajánlatát, s egészen 1993-ig itt is marad. Visszatér elméleti kémiai kutatásai gyökeréhez, az elektronszerkezetek meghatározásának problémájához. A PPP-modellt alapul véve csoportja kifejleszti a CNDO, INDO és NDDO *ab initio* közelítő módszereket. Nagy rivalizálás alakul ki Michael Dewar szemiempirikus MINDO, MNDO és AM1 módszereivel, amelynek majd a DFT módszerek elterjedése vet véget.

Pople folyamatosan fejleszti *ab initio* módszereit a minél általánosabb és könnyebb alkalmazhatóság jegyében. Nagy segítséget jelent Boys ötlete, aki a Slater-függvényeket Gauss-függvények kombinációjával közelíti. (A 80-as évekig ívelő korszak fejlődését jól összefoglalja a Hehre-vel, Radommal és Schleyerrel közös, 1986-ban megjelent *Ab-initio molecular orbital theory c. könyvük.*) Rövidesen megjelenik a széles körben alkalmazható Gaussian 70 program, s megalakul a Gaussian Incorporated, ami komoly lökést ad a számítógépes kémiának. A csapatban Schleyer mint tapasztalt kémikus töl-

ti be a „kísérleti nyúl” szerepét, rajta tesztelik, mennyire biztonságos a program előismeretekkel alig rendelkező felhasználók kezében. Sorban követik egymást a tökéletesített változatok, nem csoda, hogy a Gaussian piacvezető szoftver lesz. Pople 1993-as visszavonulása után az illinoisi Northwestern Universityn még egy évtizeden át részt vesz a szoftver gondozásában. Teljesítményéért Walther Kohnnal megosztva kapja az 1998-as kémiai Nobel-díjat (s ahogyan az néha lenni szokott, már *ab initio* jelen van némi sértődés szűkebb

Pople 10 évesen egy bristoli iskola tanulója lett, ahová naponta ingázott Burnham-on-sea-ből: 2 mérföld kerékpárral, 25 mérföld vonattal és 1 mérföld gyalog. A háború kitörésével kalandossá vált ez a túra, gyakran fel nem robbant bombák és égő épületek között kellett utat találniuk az iskoláig, ahol az órákat nem ritkán föld alatti óvóhelyeken tartották.



szakmai körökben, mondván, Pople csak azt fejlesztette tovább, amit mások már előtte elkezdtek).

Rövid betegség után, 2004 márciusában, családi körben távozik az élők közül. Nobel-díja mellett még számos rangos kitüntetés és tiszteletbeli doktori cím birtokosa volt.

(Forrás: A. D. Buckingham, *Biogr. Mem. Fell. R. Soc.* 2006, **52**, 299.)

LARS ONSAGER (1903. NOVEMBER 27.) – AZ INDIVIDUALISTA. Oslo-i születésű, apja ügyvéd, acélipari kapcsolatokkal. Liberális oktatásban részesül, ennek is köszönhető, hogy rendkívül széles műveltséggel büszkélkedhet. 1920-ban iratkozik be a Norvég Műszaki Főiskola vegyészmérnöki képzésére, szabadidejét matematikai analízis problémák megoldásával tölti. Elsőévesként ismeri meg az elektrolitoldatokat, nem is elsősorban a tankönyvekből,



inkább a korabeli szakmai folyóiratokból. Ez a szellemi függetlenség később egyedülálló tudományos eredetiséggé nő ki magát, s a Trondheimben szerzett matematikai és mérnöki ismeretei megalapozzák későbbi szakmai érdeklődését és sikereit. 1923-ban rájön, hogy az elektrolitoldatok Debye-Hückel-elmélete pontatlan. Végzése évében (1925) Zürichbe utazik Debye-hoz, akivel nemes egyszerűséggel közli felfedezését és kifejti a hiba okát. Debye-t lenyűgö-

zi a fiatal elme és két évre felveszi intézetébe, mi több, maga vezeti be leendő kollégája eredményeit a tudományos közéletbe.

Onsager ezután az Egyesült Államokba emigrál, hogy a Johns Hopkins Egyetemen általános kémiát tanítson. Itteni pályafutása azonban szokatlanul rövidre sikerül. Hamar kiütközik gyengéje, amely élete során egyik „védjegyévé” válik: mélyen szakmai előadásmódja miatt órái nehezen követhetők és nem túl népszerűek. Hallgatóságáról általában azt feltételezi, hogy eleve rendelkeznek az ő tudásával, s ennek köszönhető, hogy nemcsak a hallgatók, de még a kutatótársai sem tudják követni előadásait. A helyzet a Brown Egyetemen se javul: a diákok statisztikus mechanika kurzusát csak „szadisztikus” mechanikának becézik. Mindenesetre itt találkozik Ray Fous-szal, leendő doktoranduszával, szellemi társával és első társszerzőjével(!). Az intellektuális elszigetelődés egyébként egész életén át jellemzi, rendszerint egyedül dolgozik, ha mégsem, akkor is legfeljebb egy-két kiválasztott posztdoktori ösztöndíjasával. Fous azon kevesek egyike, akik követni tudják a zseni szárnyalásait.

A Brown Egyetemen kezd irreverzibilis folyamatok sebességével foglalkozni. Oldott ionok és elektromos erőterük mozgását, illetve a hőmérsékleti gradiens hatására bekövetkező diffúzió jelenségét végiggondolva eljut oda, hogy matematikailag le tudja írni a térben inhomogén rendszerek és entrópiájuk kis kitéréseit az egyensúlyi állapotból és felismeri a mikroreverzibilitás relevanciáját. Ebből születnek meg az 1929-ben közzétett Onsager-relációk, amelyekkel összefoglaló módon leírja a különböző transzportfolyamatokat. E relációk jelentőségét csak másfél évtizeddel később ismeri fel a tudományos közösség.

A gazdasági válság miatt el kell hagynia a Brown Egyetemet, így kerül a Yale-re, mint posztdoktori kutató. Ennek csak egy szépséghibája van: nincs doktorija. Seba, munkatársai tanácsára beküldi relációit a Norvég Műegyetemre, ahonnan azonban azt a választ kapja, hogy ez a munka így nem felel meg a követelményeknek. (Még szerencse, hogy az 1968-as Nobel-díj megítélésénél ezt a véleményt nem veszik figyelembe.) A Yale illetékesei sem esnek kétségbe, javasolják, hogy bármelyik korábbi cikkét beadva folyamodjon náluk a fokozatért. Onsagerben felébred a szakmai büszkeség, és disszertációt ír, amelyet azonban sem a kémikusok, sem a fizikusok nem tudnak megítélni. Erre átküldi a matematika tanszékre, ahol Einar Hille professzor örömmel veszi kézbe a nagyszerű dolgozatot, és felajánlja, ha a kémia tanszéken nem fogadják be, ő szívesen javasolja a PhD-fokozatot Onsagernek matematikából. Végül marad a kémiai PhD...

Közben Európába látogat, ahonnan már jegyesen tér vissza, s röviddel ezután összeházasodik Margarethe Arledterrel, Falkenhagen osztrák elektrokémikus húgával. New Havenben telepednek le, ahol négy gyermekük születik. Még farmot is vásárolnak, mivel Onsager szenvedélyes kertész.

A Yale-en töltött első évek alatt kevés, de annál jelentősebb publikációja születik: a Wien-effektus (gyenge elektrolitok erős elektromos térben mutatott vezetőképessége) mellett a dielektrikumok dipólméletén dolgozik. Az utóbbi eredményeiről írt közleményt Debye lapjába küldi be, aki a cikk közlését elutasítja (nem csoda, hiszen immár második alkalommal, épp az ő korábbi munkáját kérdőjelezi meg). A háború előtti időszak utolsó négy cikke az eljövendő évtizedek főbb kutatásait alapozza meg: az izotópok termódifúziója, a kristályos molekulák elektrosztatikus kölcsönhatásai és a turbulencia-jelenségek kerülnek terítékre.

Az 1940-es években a szilárd anyagokban végbemenő fázisátalakulásokat tanulmányozza. Kérdésselvetése a következő: lehet-e a statisztikus mechanika posztulátumait követve magyarázatot adni az éles fázisátalakulások előfordulására részecskék olyan rendezett halmazában, ahol mindegyik részecske csak a legközelebbi szomszédjaival hat kölcsön? Innen jut el 1944-ben a két-dimenziós Ising-modell egzakt megoldásának közléséig, amely óriási szenzációként hat az elméleti fizikusok körében. Leírja a spontán mágnességet (1948), a fajhó kritikus pontbeli szingularitását (1944), a turbulenciát, a szuperfolyékony hélium mozgását és a pálcika alakú molekulák anizotrop viselkedését (1949). Az 50-es és 60-as években újra az elektrolitokra fókuszál és a jég elektromos tulajdonságait próbálja felderíteni. 1947-ben az Akadémia tagjává választják; ezt követően sorra kapja a rangos díjakat, tiszteletbeli doktori címeteket (végre Norvégiában is) és a kitüntetések. 1968-ban a fizikai és a kémiai Nobel-díjra is jelölilik, végül utóbbit nyeri el.

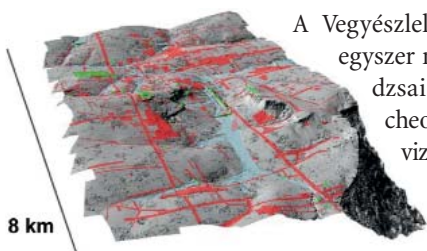
Kényszerű nyugdíjba vonulása után (1972) utolsó éveit a Miami Egyetemen tölti. Miami-ban éri a halál, miközben épp szokásos úszásához készül 1976 egyik őszi reggelén.

(Forrás: H. C. Longuet-Higgins, M. E. Fisher, *Biogr. Memoirs-Natl. Acad. Sci. USA* 1991, **60**, 182.)

A Brown University Charles A. Kraus volt a főnöke, aki állandóan azzal nyaggatta, hogy végezzen kísérletes kutatásokat is. Egy nap Onsager azzal állt elé, hogy izotópokat szeretne elkülöníteni termódifúzió segítségével. „Rendben” – így Kraus, aki annak különösen örült, hogy Onsager csak egy hosszú csövet kért a kísérletekhez. Öröme nem lehetett teljes, mert Onsager így folytatta: „Platinából kellene készíteni, és az alagsorból a kémia tanszék harmadik emeletéig kellene érnie.”



TÚL A KÉMIÁN

Történelemkutatás
lézerradarral

8 km

A Vegyészleletek 2013 márciusában egyszer már beszámolt a kambodzsai Angkor Watban tett archeológiai felfedezésekről. A vizsgálatok azóta is jelentős újdonságokat tártak fel; ezekhez nagymértékben hozzájárult a ma-

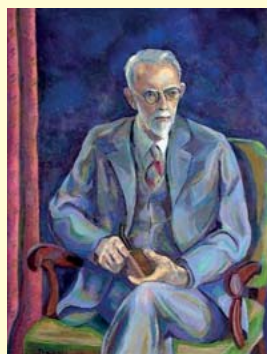
gyarra lézerradarként fordítható LiDAR (Light Detection And Ranging) módszer használata. Az eredmények szerint a Khmer Birodalom fővárosa a korábbi feltételezésekénél lényegesen összetettebb településszerkezetű és nagyobb területű volt, teljes becslést kiterjedése mintegy 1000 km² lehetett, ami a mai Budapest területének közel kétszerese. A LiDAR módszert néhány éve már sikerrel használták maja romok feltérképezésére. Angkor esetében összesen húszórányi helikopteres repüléssel végzett felmérést végeztek fel a korábban csak feliratokból ismert, Mahendraparvatának nevezett IX. századi várost, amely a Khmer Birodalom első fővárosa lehetett. Arra is találtak bizonyítékot, hogy a földből épített gátak rendszere sokkal kiterjedtebb és sokkal kifinomultabb, mint azt a közvetlen ásások eredménye alapján eddig sejtették.

Proc. Natl. Acad. Sci. USA 110, 12595. (2013)

Őskori fűszerek

Az emberek már az őskorban is kedvelték a fűszereket. Ez a tanulsága egy közelmúltban megjelent tanulmánynak, amelyben a fokhagymára és mustárra emlékeztető aromájú kányszombor (*Alliaria petiolata*) magjait azonosították a Balti-tenger partján talált, hatezer éves főzőedényekben. A növény tápértéke igen csekély, de a mellette talált lipidmaradványokban olyan zsírsavak is voltak, amelyek csak tengeri élőlényekben fordulnak elő. Tehát a vadászó-gyűjtögető kultúra minden bizonnyal kedvelte a mustáros-fokhagymás halat és kagylót. A lelet jelenleg az étkezési fűszerhasználat legkorábbi európai példája.

PLoS One 8, e70583. (2013)



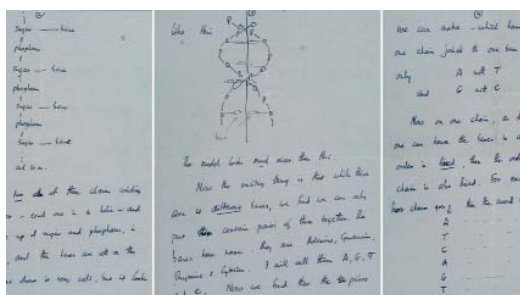
CENTENÁRIUM

Charles A. Kraus: The Isolation and the Properties of Some Electropositive Groups and Their Bearing on the Problem of the Metallic State

Journal of the American Chemical Society. Vol. 35., pp. 1732–1741. (1913. november)

Charles August Kraus (1875–1967)

amerikai kémikus volt. Az első világháború alatt a Clark Universityn dolgozott, s a vegyi fegyverekkel foglalkozó állami bizottság vezetője is volt. Később a Brown University munkatársa lett, a második világháború alatt pedig a Manhattan-program tanácsadójaként is foglalkoztatták. Tudományos munkája hozzájárult az UV-lámpák, a hőálló üveg és az olmozott benzín kifejlesztéséhez. 1950-ben megkapta az Amerikai Kémiai Társaság legnagyobb kitüntetését, a Priestley-érmet.



APRÓSÁG

Francis Crick levelét, amelyet 1953-ban írt 12 éves fiának, 5,3 millió dollárért vették meg egy árverésen.

Láthatatlan festékek

Háromezer éves, Szíriában talált, föníciai eredetű elefántcsont faragványok tudományos elemzése igen meglepő eredményt adott: egy karlsruhei múzeumban őrzött tárgyak felszínén festékből visszamaradó, szabad szemmel láthatatlan fémnyomokat sikerült kimutatni. A fémnyomok minden bizonnyal az ősi Egyiptomban használt réztartalmú kék és vastartalmú vörös festékanyagból származnak. Művészettörténészek már korábban is sejtették, hogy a hasonló föníciai tárgyakat eredetileg festhették, de bizonyíték nem volt rá. A fémnyomokat szinkrotronsugárzást használó, kb. 50 µm-es térbeli felbontású röntgenfluoreszcencia módszerrel sikerült kimutatni, s így a térbeli eloszlás alapján az eredeti mintázatokat is reprodukálni lehetett.

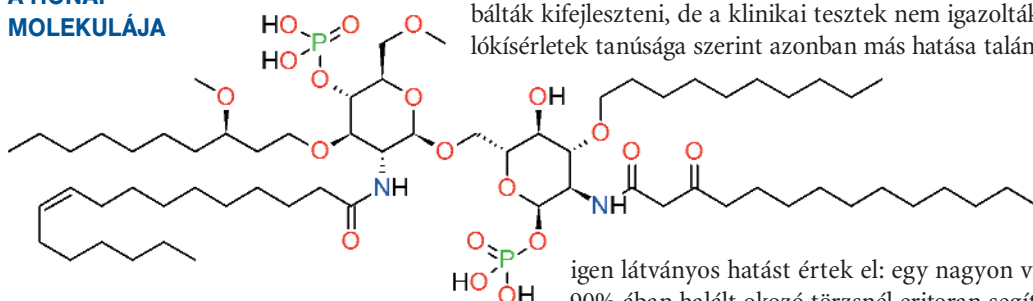


Anal. Chem. 85, 5857. (2013)

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



A HÓNAP MOLEKULÁJA



Az eritoran ($C_{65}H_{124}N_2O_{19}P_2$) gyógyszermolekulát eredetileg vérmérgezés kezelésére próbálták kifejleszteni, de a klinikai tesztek nem igazolták terápiás hasznosságát. Rágcsálókísérletek tanúsága szerint azonban más hatása talán lényegesebb: influenzát lehet vele kezelni. A vírust megtámadó szokásos influenzagyógyszerekkel szemben ez a szer a szervezet vírusra adott válaszát gyengíti egy gyulladásos folyamat blokkolásával. Egereken igen látványos hatást értek el: egy nagyon virulens, kezelés nélkül az esetek 90%-ában halált okozó törzsnél eritoran segítségével 10%-ra sikerült csökkenteni ezt az arányt.

Nature 497, 498. (2013)



Múmia I.: ősi baktérium-genomok

A közelmúltban a tuberkulózist és leprát is okozó *Mycobacterium* család két tagjának genetikai történetéről is jelentős új felfedezéseket tettek. A X–XIV. századi csontvázakból és mumifikált holttestekből kinyert maradványok elemzésével a *Mycobacterium leprae* majd ezeréves változatainak genetikai felépítését sikerült feltérképezni. A tapasztalatok szerint más kórokozókhoz képest ez meglepően kevésbé tér el az ókorból származó, illetve a modern mintákban. Így valószínű, hogy a lepra visszaszorulását a javuló köztisztaság okozta, és nem genetikai változások. Egy másik tanulmányban egy Magyarországon, Vácott lévő kriptában talált 242 mumifikálódott testet elemeztek. Ezek egyikeből, az 1797. december 25-én elhunyt Hausmann Terézia mellkasából sikerült a *Mycobacterium tuberculosis* két különböző törzsét is azonosítani. A genetikai analízis eredményei szerint a két évszázados váci baktériumok sok hasonlóságot mutatnak egy 1998 és 2010 között Németországban terjedő TBC-változat H37Rv jelű kórokozóival.

Science 341, 179. (2013)

New Engl. J. Med. 369, 289. (2013)

ICP-vel a római üvegkereskedők nyomában

Az emberiség már közel ötezer éve készít üveget. Az is nagyon régóta ismeretes, hogy antimon (fém vagy érc) hozzáadásával a kész üveg átláthatósága könnyen szabályozható. Brit tudósok kidolgoztak egy módszert, amely tömegspektrometriával csatolt ICP módszerrel méri a 123-as és 121-es tömegszámú antimonizotópok arányát az üvegmintákban. Mivel ez az arány csekély, de jól mérhető változásokat mutat az antimonbánya földrajzi helyétől függően, az üvegipari alapanyagok beszerzésén keresztül az ókori kereskedelmi szokásokról is képet kaphatunk. A módszert kidolgozó tudósok a római korból származó leletek segítségével bizonyították, hogy ezen az elven fontos archeológiai következtetéseket is le lehet vonni.

J. Anal. At. Spectrom. 28, 1213. (2013)



Múmia II.: alkohol és kokain

Az 1999-ben megtalált, ma az archeológusok között Llullaillaco-i Szűzként emlegetett maradvány az inka

korból legjobb állapotban fennmaradt múmia. A 13 éves leány fagyott testét az argentin Llullaillaco-vulkán közelében, jeges környezetben, másfél méterrel a föld alatt, egy kamrában temették el két másik, négy-öt éves gyermekkel együtt. A fiatalokat az inkák capacochának nevezett szertartásuk során áldozták fel az isteneknek. A múmiák hajszálainak tömegspektrometriával kapcsolt HPLC-vizsgálata olyan metabolitok jelenlétét mutatta ki a fejbőrhöz közeli részekből, amely jelentős mennyiségű alkohol és kokalevél elfogyasztásának következménye lehetett. Az inkák, úgy tűnik, az emberáldozatok sikerét meglehetősen alaposan bebiztosították.

Proc. Natl. Acad. Sci. USA 110, 13322. (2013)

Középkori képek analízise

A legtöbb középkori festmény túl értékes ahhoz, hogy roncsolásos módszerrel analizálják benne a festékkomponensek vagy a vászon összetételét. Ezért a művészettörténet számára nagy jelentősége lehet annak, hogy új, a mintát változtatlan állapotban megőrző módszert sikerült kidolgozni ilyen vizsgálatokhoz. A módszer a közeli infravörös sugárzás visszaverésén alapuló képalkotás (near infrared reflectance imaging spectroscopy), s hasznosságát egy Cosimo Tura által festett, 1475-ből származó kép analízisével bizonyították. Az eredmények szerint a festékben használt kötőanyag nagyrészt tojássárgája és állatbőrből készített enyv volt.

Analyst 138, 4838. (2013)

nosságát egy Cosimo Tura által festett, 1475-ből származó kép analízisével bizonyították. Az eredmények szerint a festékben használt kötőanyag nagyrészt tojássárgája és állatbőrből készített enyv volt.



TUDOMÁNYOS ÉLET

15th Austrian Chemistry Days, Joint Meeting of the Hungarian and Austrian Chemical Societies

Graz, 2013. szeptember 23–26.

Az ez évi 15. Österreichische Chemietage (15. Osztrák Kémiai Napok) nemzetközi konferencia a GöCH (Osztrák Kémikusok Egyesülete) és MKE közreműködésével szerveződött. A neves rendezvény a Grazi Műszaki Egyetemen kapott helyet, ahol a szervezők igen változatos és magas színvonalú programokkal várták a résztvevőket.



A négynapos konferencián 5 plenáris előadás, 3 meghívott előadás, 51 miniszimpoziumi előadás és 100 rövid előadás hangzott el, továbbá 194 posztert mutattak be, melyek felölelték a kémia szinte minden területét (analitikai kémia, elektrokémia, szerves kémia, anyagtudomány, fizikai kémia, szerves kémia, felületi kémia és katalízis, polimer kémia, biokémia és biotechnológia). A konferencián 22 kiállító cég vett részt.

A tudományos rendezvényeken kívül a szervezők kiváló programokkal készültek a résztvevők számára, melyek kitűnő lehetőséget adtak a fiatal kémikusok szakmai és nem utolsósorban baráti kapcsolatainak építésére.

A tudományos program két kiemelkedő plenáris előadását Huszthy Péter akadémikus és Kilár Ferenc professzor tartotta. A magyar delegáció közel 40 fővel képviseltette magát a közös szervezésű konferencián.

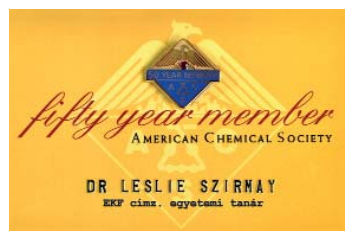
50 éves kémikus egyesületi tagság

Dr. vitéz Szirmay László professzor emeritus, címzetes egyetemi tanár ötven éve tagja az Amerikai Vegyészmérnök Egyesületnek és az Amerikai Kémiai Egyesületnek.

Szirmay László vegyészmérnök, tudós, egyetemi tanár 1923. november 13-án született Egerben, itt érettségizett a Dobó István Gimnáziumban. Budapesten a Pázmány Péter Tudományegyetemen folytatta tanulmányait, vegyészként diplomázott.

1954-ben elhagyta az országot, rövid európai tartózkodás után az Amerikai Egyesült Államokban, később Kanadában telepedett

le. Vegyészmérnöki mesterdiplomát szerzett a detroiti egyetemen, továbbá nukleáris mérnöki mesterdiplomát az iowai egyetemen, majd vegyészmérnöki doktorátust a denveri egyetemen. Dolgozott mérnökként, harminc évig egyetemi tanárként, kutatási területe: petrolkémia, fém-előállítás, nukleáris reaktorok működése. Több mint száz tudományos publikáció fűződik nevéhez, könyvet írt a fúziós nukleáris reaktorok



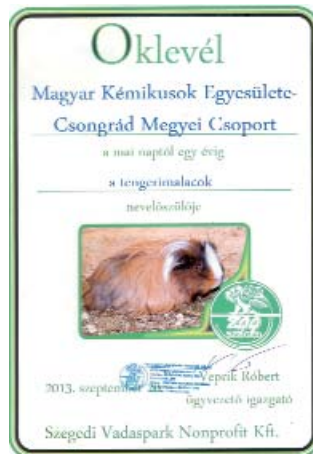
tervezési alapjairól. 2004-ben hazatelepült Egerbe. 2009-ben címzetes egyetemi tanári kinevezést kapott az Eszterházy Károly Főiskolán.

A Magyar Kémikusok Egyesülete is gratulál szakmai elismeréséhez.

EMLÉKEZÉS

Örökbefogadás

A Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportja (a továbbiakban MKE CSMCS) nagy hangsúlyt fektet Szent-Györgyi Albert szellemi örökségének ápolására. 2012. december 10-én,



Nobel-díja átvételének 75. évfordulóján támogatásunkkal létesült emlékszooba 1930 és 1935 közötti munkahelyén, a mai Déri Mik-sa Szakközépiskolában, ami a „C-vitamin szülőhelye”. Hagyományápolásunk újabb állomása, hogy születésének 120. évfordulója alkalmából szeptember 20-án a szegedi Vadasparkban örökbe fogadtuk a C-vitamin azonosításában kulcsszerepet játszó tengerimalacok mai utódait.

Szent-Györgyi Albert a '20-as években hollandiai kutatásai során alapvető eredményeket ért el a biológiai oxidáció területén. Eközben marha mellékveséből izolált egy erősen redukáló, antioxidáns anyagot, amelynek további vizsgálata volt kémiai doktori disszertációjának a témája Cambridge-ben, 1927-ben. Ekkor csak annyit tudott megállapítani, hogy cukorszerű, savas kémhatású anyag $C_6H_8O_6$ összegképlettel, szerkezetét nem. Hexuronsavnak nevezve publikálta eredményeit.

1928-ban Klebelsberg Kuno, az akkori oktatási miniszter Szegedre hívta, de csak 1930-ban foglalta el egyetemi tanári állását. Közben, amerikai ösztöndíja során a Chicago környéki nagy marhavágóhidakról kapott mellékveséből 25 g hexuronsavat tudott kinyerni. Ebből 15 g-ot Angliába küldött szerkezetvizsgálatra és 10 g-ot hozott magával Szegedre.

1931 őszén jelent meg a Déri Miksa Szakközépiskola Kálvária téri épületében Joseph Svírbely magyar származású, Pittsburgh-ben doktorált C-vitamin kutató, hogy Szent-Györgyivel szeretne dolgozni. Arra a kérdésre, hogy mihez ért, azt válaszolta, hogy tengerimalac-tesztet vizsgálta, hogy egy anyag skorbutellenes, azaz C-vitamin hatású, vagy sem. (Az emberhez hasonlóan a tengeri malac szervezete sem termel C-vitaint, neki is a táplálékkal kell bevennie.) Szent-Györgyi levette a polcra a hexuronsavat tartalmazó üvegcsét, hogy ennek tartalmát vizsgálja meg.

A több hétig tartó állatkísérlet során a tengerimalacok egyik 8-10 egyedből álló kontroll-csoportja az irodalomban elfogadott, C-vitaint biztos nem tartalmazó ételmet kapta: tejpor, zabpehely, korpa, tejszín, só. A másik csoportba tartozó szerencsésebbek kaptak hozzá 1 mg hexuronsavat is naponta. Előbbieknek fokozatosan csökkent a súlya, és átlag 26 nap után skorbutban elpusztultak. Utóbbiak nem kaptak skorbutot, és még tán ma is élnek, ha meg nem haltak. A kísérletet még egyszer megismétel-



ték és ezzel bizonyították, hogy Szent-Györgyi anyaga maga a C-vitamin. Tehát Szent-Györgyi és Svirebely mellett a C-vitamin „fel-fedezésének” harmadik fontos szereplői a tengerimalacok voltak. Tréfásan azt is mondhatjuk, hogy maig nem tudnánk, mi a C-vitamin, ha nincsenek a tengeri malacok.

Nem sokkal később, 1932 őszén pedig Szent-Györgyi Albert a C-vitamin-forrást is megtalálta. Az ő története szerint egyik este a vacsorájához paprikát is kapott, szép piros paradicsompaprikát, amit nem szeretett. Nem merete megmondani a feleségének, hogy nem kéri. Azt a kifogást találta ki, hogy a paprikának még nem is vizsgálta meg a C-vitamin-tartalmát. A lakásból a belső udvaron át lement a laborba, és éjfélre már meg is volt az első eredmény. Hamarosan kiderült, hogy a többi zöldséghez és gyümölcshöz képest minden fajta szegedi paprika egy „valóságos C-vitamin-bánya”.

A néhány hét alatt kg-os mennyiségben kinyert kristályos anyagot szétküldte a világba a C-vitamin-kutatóknak. Angol légájának sikerült megállapítani a pontos szerkezetét is, és skorbutellenes hatására utalva Szent-Györgyivel átkeresztelték hexuronsavról aszkorbinsavra.

Az örökbefogadás során a fentieket, a tengerimalac-tesztet és a paprikából kinyerést röviden összefoglaló tábla is kikerült a tengerimalacok ketrecének falára, hogy a látogatók is megismerjék, milyen fontos szerepet játszottak a tengerimalacok a tudomány szolgálatában, és mindez Szegeden a Déri Miksa Szakközépiskola épületében történt. Az iskola diákjai C-vitaminnal kapcsolatos kísérleteket is végeztek Németh Veronika és munkatársai irányításával.

Hannus István
MKE CSMCS-elnök

Müller Sándor emléktáblája

Müller Sándor professzor tanárom volt az ELTE-n. Az egyetem befejezése után pedig három éven keresztül, 1958 és 1961 között, a munkatársa voltam.¹

Végigsétálva az ELTE új, lágymányosi kémiai épületének folyosóján szomorúan, ugyanakkor megdöbbenve és értetlenül tapasztaltam, hogy az egyetem mennyire nem ápolja a professzor emlékét, aki pedig közel harminc évet dolgozott az egyetemen.² Az impozáns hallban emléktáblákon megörökített professzorok között hiába kerestem Müller Sándor nevét, és Müller Sándorról elnevezett tanteremmel sem találkoztam. Ugyanakkor a Veszprémi Vegyipari Egyetem, ahol mindössze nyolc éven át, 1957 és 1965 között, másodállásban vezette a szerves kémiai tanszéket, Müller Sándorról egy laboratóriumot nevezett el.

Egykori professzorom és főnököm emlékét maradandóan megőrzendő, tíz évvel ezelőtt, emléktábla elhelyezését vettem tervbe annak a rózsadombi villának a falán, melynek egyik első emeleti lakásában Müller Sándor feleségével az 1950-es évek elejétől haláláig élt. Egyik nap elsétáltam a Rózsadombra szemrevételezni a házat, hová is lehetne elhelyezni az emléktáblát? A villa előkertjében egy nyugszéken idős nő üldögélt élvezve a szeptemberi nap melegét. Megszóltottam, és röviden elmeséltem, mi



Müller Sándor emléktáblája a Pentelei Molnár utca 3. falán

járatban vagyok. A Müller név hallatán arca felderült. Kinyitotta a kertkaput, és beinvitált. Kitént, hogy az egyetlen emberrel álllok szemben a villa lakói közül, aki még ismerte a Müller házaspárt. Sziijártóné, Erzsike 1949 óta élt a Pentelei Molnár utcai

házban. Nagy-nagy szeretettel, szinte meghatottan beszélt Mülleréről, még macskájukra, Picurra is emlékezett. Megmutatta, hol olvasgatott a kertben a Müller házaspár hétvégi délutánokon, hogyan kerítették el a kert egy részét a macska számára, hogy az állat ne tudjon elszökni. Sziijártóné, Erzsike nagy szerepe volt az emléktábla megvalósulásában. Akkortájt magántulajdonban lévő házakon emléktábla elhelyezése kizárólag a tulajdonosok



Müller Sándor emléktáblájának avatása. Balról jobbra: Farkas Ödön, Hollósi Miklós, Medzihradsky Kálmán, Mészáros Miomír, Tomasz Jenő, Kucsman Árpád, Lempertné, Sréter Magda, Lempert Károly, Schiller Róbert, Kutassy Lászlóné, Vajda Tamás, Simonyi Miklós

döntési kompetenciájába tartozott. Viszont a hatlakásos társasházban az egyik tulajdonos nem akart hozzájárulni az emléktábla elhelyezéséhez. Végül is Sziijártóné, Erzsike volt az, aki ezt a Müllerék egykori lakásában élő tulajdonost elhatározásának megváltoztatására rábeszélte.

Az emléktábla-állítás költségeit egykori tanítványok, munkatársak fedezték. Szövegéről Kucsman Árpáddal közösen döntöttünk.

A tábla avatására, melyen tizenvalahányan vettünk részt, 2004. november 19-én csúnya, esős, szeles időben került sor. A táblát Hollósi Miklós avatta fel. A tanítványok és munkatársak nevében, kérésre, Mészáros Miomír emlékezett Müller Sándorra.

Tomasz Jenő

¹ Tomasz Jenő: Emlékeim Müller Sándor professzoráról. Természet Világa, 135, 364 (2004)

² Müller Sándor 1938-ban Széki Tibor professzor meghívására adjunktus lett a Pázmány Péter Tudományegyetem Szerves és Gyógyszerészeti Kémiai Intézetében. 1940-ben magántanári képesítést szerzett. 1943-ban nyilvános rendkívüli tanári kinevezést kapott. Lényegében ő vezette az intézeti szerves kémiai kutatásokat. Irányításával 1950-ig 27 doktori értekezés készült el. 1948-ban intézeti tanárrá, 1954-ben az elméleti szerves kémia professzorává nevezték ki.



Kétszeresére növelt olajcsere-periódus a WearCheck olaj- és gépdiagnosztika segítségével

Az ipari termelésben egy óra kiesés is milliós nagyságrendű károkat okozhat, amely folyamatos felügyelettel és megfelelő karbantartási eljárásokkal megelőzhető. A magyar alumíniumipar meghatározó szereplője, az Inotal Zrt. is hasonló problémával szembesült: a szalagöntő berendezésében bekövetkezett meghibásodás súlyos termeléskiesést és anyagi kárt eredményezett. A további veszteségek elkerülése érdekében a MOL-LUB Kft. a rendszeres olaj- és gépállapot-felügyelet bevezetését és egy csúcsteljesítményű ipari hajtóműolaj használatát javasolta a cégnek.

A több évtizedes szakmai múlttal rendelkező Inotal Zrt. alumínium félgyművek széles választékával látja el partnereit folyamatosan. A vállalat szalagöntő berendezése 8 éven át hibátlanul működött, általános teljesítményszintű ipari hajtóműolajjal és a gyártó által meghatározott karbantartás mellett az év 300 napján, napi 12 tonna kapacitással termelt. 2010-ben azonban meghibásodás történt: a fogaskerekek váratlanul berágódtak és a hajtóműolaj az extrém sűrűsödés és hő hatására teljesen degradálódott. A meghibásodás 5 hét termeléskiesést és 35 000 euró javítási költséget jelentett a vállalatnak.

A további termeléskiesés és javítási költségek elkerülése érdekében a MOL-LUB Kft. kenéstechnikai szakmérnökei a kenőanyag-felhasználás optimalizálása mellett rendszeres WearCheck olajdiagnosztikai vizsgálatokat javasoltak. Ezzel a napjainkban egyre elterjedtebb eljárással nyomon követhető

a berendezések természetes elhasználódása, így a meghibásodások is megelőzhetővé válnak, ráadásul a felmerülő károkhoz képest a szolgáltatás költségei elhanyagolhatók.

A MOL-LUB Kft. által végzett vizsgálat során optimalizálták a kenőanyag-felhasználást, és a kenési rendszer is átalakításra került. Az újraindulás után a MOL-LUB Kft. szakemberei a már több ipari alkalmazásban bizonyított, csúcsteljesítményű, speciális kopáscsökkentő és nagy nyomásállóságot biztosító adalékokat tartalmazó LE 1604 DUOLEC hajtóműolaj használatát javasolták, amely révén az olajcsere-ciklus 100%-kal megnövekedett.

„Megnyugtató megoldást kaptunk a szalagöntő gépünk biztonságos üzemeltetéséhez. A tapasztalatok alapján egyéb berendezéseinken is bevezetjük a speciális hajtóműolaj használatát és a rendszeres olajdiagnosztikai vizsgálatot.”

Szőnyi László karbantartás-vezető,
Inotal Zrt.



1. KIHÍVÁS

A termeléskiesés és a jelentős javítási költségek megelőzése, optimalizált kenőanyag-felhasználás.

2. MEGOLDÁS

Nagy teljesítményű ipari hajtóműolaj-alkalmazás, és WearCheck kenőanyag-vizsgálaton alapuló gépállapot-figyelés.

3. EREDMÉNYEK

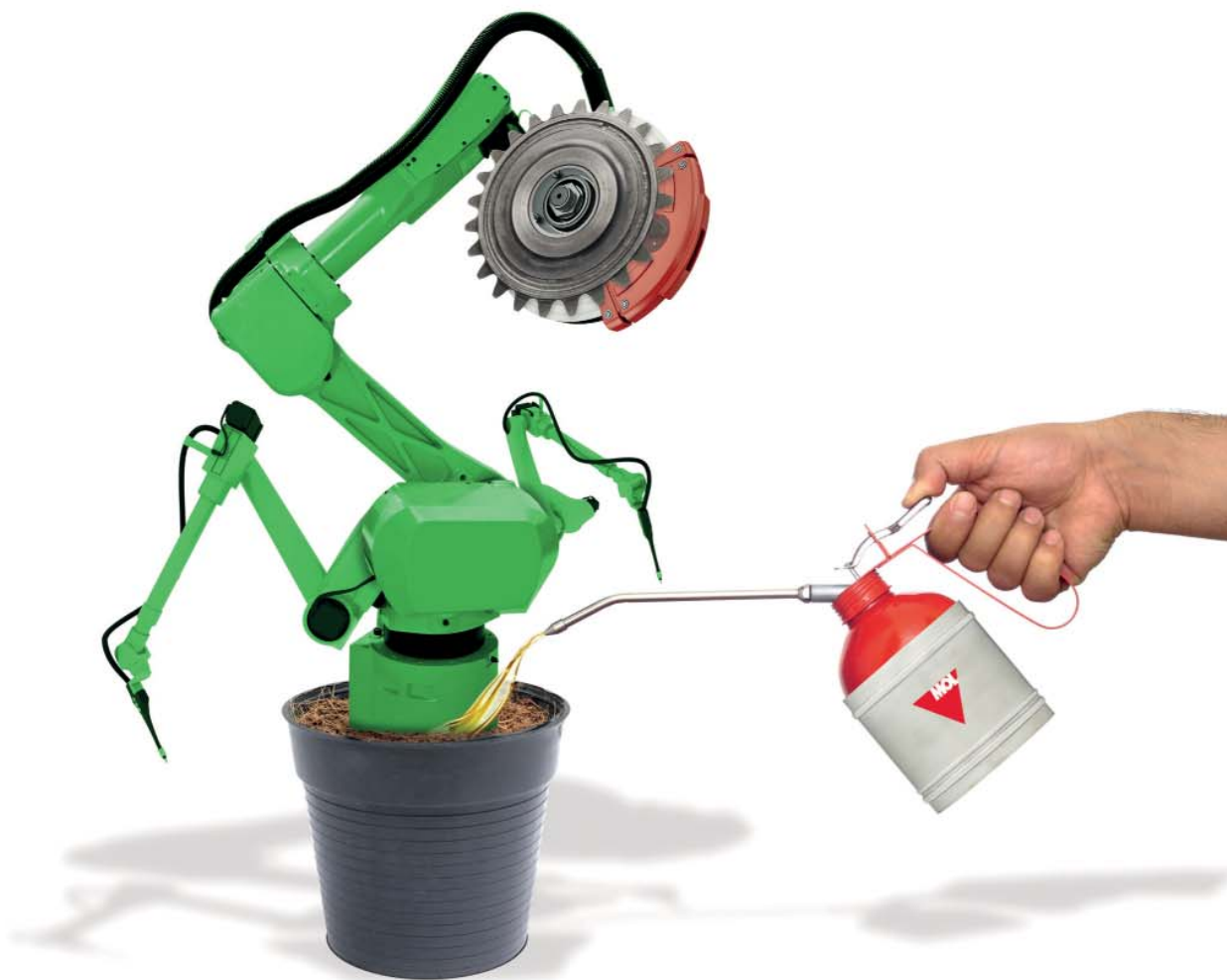
A gépek megbízhatósága megnőtt, a további meghibásodások és termeléskiesések megelőzhetővé váltak.

További információk: MOL-LUB Kft.
Kenéstechnikai tanácsadás: +36 (80) 201-296
E-mail: kenoanyag@mol.hu
Web: www.mol.hu/engineering



KIFIZETŐDŐ GONDOSKODÁS

A MOL kenéstechnikai szolgáltatásaival kockázatmentesen csökkentheti költségeit, ráadásul gépei is hálásak lesznek.



Használja ki maximálisan a vállalatában rejlő műszaki lehetőségeket a kenőanyagok helyes megválasztásával, és csökkentse költségeit gépállapot-figyeléssel!
A MOL kenéstechnikai szolgáltatásainak alkalmazásával hatékonyabbá tehető vállalata kenőanyag-gazdálkodása: növelhető a termelés megbízhatósága és gazdaságossága, minimalizálhatók a javítási költségek és csökkenthetők a géphibák okozta termeléskiesésből fakadó károk.

Töltsön, és nyerjen!

Töltse ki rövid kenésgazdálkodási tesztünket a mol.hu/engineering oldalon, és nyerje meg vállalatának az 5 db Samsung Galaxy Tab P3110* táblagép egyikét.

Az akció részletei a mol.hu/engineering oldalon olvashatóak. Az akció 2013. október 7-től 2013. december 10-ig tart.
*A „Galaxy Tab” a Samsung védjegye.





HÍREK AZ IPARBÓL

Vegyipari mozaik

A MOL mantovai finomítója terméklogisztikai központtá alakul át. Ez az átalakítás mutatja, hogy a MOL-csoport továbbra is elkötelezett Mantova iránt, és a jelenlegi nehéz gazdasági környezet ellenére is javítja olaszországi versenypozícióját.

Miután a finomítás számára kedvezőtlenül alakult a gazdasági környezet Olaszországban, az IES mantovai működésének részletes, hosszú távú fenntarthatóságát vizsgáló elemzés eredményeként a MOL-csoport úgy döntött, hogy finomítóját terméklogisztikai központtá alakítja át. Figyelembe véve, hogy a mantovai finomító hosszú távú kőolaj-logisztikai szerződése hamarosan lejár, az ENI-vel a főbb vonalakban megállapodásra jutottunk, melyeknek értelmében átalakítási projektünkkel a partner „zöld finomító” kezdeményezéséhez kapcsolódunk. A Porto Marghera kikötőt és a mantovai finomítót összekötő komplex logisztikai hálózatot, mely korábban a kőolaj-ellátást biztosította, a jövőben végtermékek szállítására használjuk majd. Ez lehetővé teszi számunkra, hogy finomítóinkat fokozatosan terméklogisztikai központtá alakítsuk át, így a MOL-csoport továbbra is jelen marad az iparágban mantovai kereskedelmi tevékenysége révén. Az átalakítás segítségével meg tudjuk tartani munkavállalóink egy részét, akik az új üzleti modell működtetésében vesznek majd részt mantovai telephelyünkön. A MOL-csoport kész olyan beruházások megvalósítására, melyek eredményeként versenyképességünk javulhat Olaszországban – olvasható a vállalat közleményében. Az IES Feldolgozás és Kereskedelem üzletág befektetett eszköz-értéke 423 millió eurót tett ki a MOL-csoport IFRS-beszámolójának 2013. I. féléves mérlegében. A finomító logisztikai központtá alakítása várhatóan jelentős egyszeri, pénzmozgással nem járó hatást gyakorol majd a csoport harmadik negyedéves eredményére. A MOL azt várja, hogy az új, hatékonyabb működési modell hozzájárulása a csoport eredményéhez kedvezőbb lesz, mint az olaszországi finomítói tevékenység profitabilitása a gazdasági válság kirobbanása óta. (*profitline.hu*)

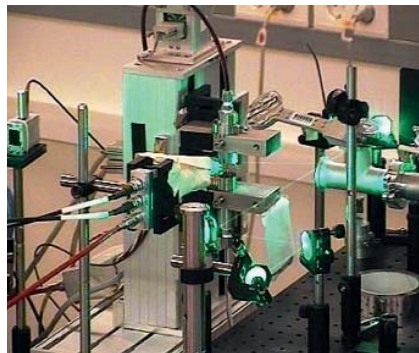


„A megkezdett kísérletek folytatását és új, hazai kísérleti bázis építését teszi lehetővé a Lendület.” Az információtechnológia, a környezetvédelem, valamint a molekuláris biológia területén is előremutatóak lehetnek Vankó György kémiai fizikus kutatásai, amelyeket munkatársaival az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpontban folytat. A csoport a molekulákban a másodperc milliárdomodrészének a milliomodrészéig változásokat tanulmányozza.



A posztgraduális kutatóként, majd vezető kutatóként csaknem hét évet Franciaországban, az Európai Szinkrotronsugárzási Intézetben (ESRF) töltő Vankó György néhány esztendeje tért haza. „Célom egy olyan magyarországi kutatócsoport megalapítása volt, amely rugalmatlan röntgenszórást használ anyagszerkezeti kutatásokra. Ez egy viszonylag új, dinamikusan fejlődő módszer, amelyhez szinkrotronok

(speciális részecskegyorsítók) erős röntgennyalábjaira van szükség.” Az anyagot változás közben vizsgáló ultragyors spektroszkópia gyorsan változó tudományterület, amely nemrégiben felkeltette Vankó György kutatócsoportjának érdeklődését is. „Megjelent a röntgenforrások új generációja, a szabadelektron-röntgenlézer. Az ilyen berendezések femtoszekundumos, vagyis a másodperc egymilliárdomodrészének egymilliomodrészéig alatti impulzusokban állítanak elő minden eddiginél fényesebb röntgensugárzást.



„Úgy gondoltuk, hogy a röntgenszórásra épülő, nagy teljesítőképességű szerkezetkutató módszereket az atomi

időskálán zajló dinamika tanulmányozására is alkalmazhatjuk.”

„A funkcionális molekulákban (avagy részecskéikben) különféle célokra hasznosítható változásokat tudunk előidézni” – emelte ki Vankó György. Példaként említette a kapcsolható molekulákat, amelyeknek több, lényegesen különböző állapotuk ismert, és amelyeket a kutatók megfelelő külső ráhatással a céljaiknak megfelelő állapotba tudnak hozni. Az egyes állapotok jellegében, mágnességében vagy elektronszerkezetében megmutatkozó különbségek kiaknázásával a rendszer állapota könnyen azonosítható. A nanométernél kisebb molekulák mérete és igen gyors állapotváltozásai alapján a kutatók azt remélik, hogy felhasználásukkal a meglévőknél lényegesen nagyobb adatsűrűségű és sokkal gyorsabban kapcsolható rendszerek, például adattárolók vagy molekuláris kapcsolók állíthatók elő. (MTA)



Nemzeti Tudáspolitikai és Innovációs Testület létrehozásáról döntött a kormány. A testület elnöke a miniszterelnök, társelnöke a Magyar Tudományos Akadémia elnöke.

A testület a magyarországi tudományos kutatás, a kutatás-fejlesztés és az innováció stratégiai jelentőségű kérdéseiről, jelentős programjairól, mindezek hosszú távon fenntartható finanszírozásáról, valamint a tudományos kutatást végző intézmények eredményességének értékelési rendjéről és stratégiájáról, az értékelés eredményeiről foglal állást. Ezenkívül véleményezi a területével kapcsolatos kormány-előterjesztések tervezetét, a kabinet tudáspolitikai stratégiájának megvalósulását. Szakmai egyeztetésekkel előkészíti a kormány tudáspolitikai döntéseit, közreműködik a területével kapcsolatos kormányzati egyeztetésben. A miniszterelnök a testület elnöke, társelnökek a kormány az MTA elnökét kéri fel. További tagjai a Miniszterelnökséget vezető államtitkár, a kabinet kutatás-fejlesztései és innovációért, a kormányzati tevékenység összehangolásáért, a tudáspolitikai koordinációjáért, a nem az európai uniós fejlesztési források felhasználásához kapcsolódó fejlesztéspolitikáért, az oktatásért, valamint a kormányzati tudáspolitikáért felelős tagja. Meghívottként részt vehet az üléseken annak a minisztériumnak a képviselője, amelynek hatáskörét érinti a tárgyaló dokumentum.

A testület tagjai a munkájukért sem díjazásban, sem költség-térítésben nem részesülnek. (MTA)

FOLYTATÁS A 359. OLDALON



EuCheMS

NEWSLETTER

November 2013

Themes of the EuCheMS Chemistry Congress 2014

Turkey will host the 5th EuCheMS Chemistry Congress between 31 August and 4 September 2014. Chemists and scientists from related disciplines will meet in the heart of Istanbul at the best season of the city. The scientific programme is now completed:

Theme A: Resources and environment

- A1 Environmental contaminants of emerging concern
- A2 Water quality and food production
- A3 Natural resources and mining
- A4 Advanced oxidation processes for water treatment
- A5 Air quality

Theme B: Chemistry and society

- B1 Chemistry in the cultural context – safeguarding the past with responsibility for the future
- B2 Chemistry in the multinational European environment – education and communication
- B3 EYCN workshops

Theme C: Materials

- C1 Properties, structure and synthesis of materials
- C2 Nanochemistry
- C3 Functional materials
- C4 Energy materials
- C5 Soft solids and polymers

Theme D: Synthesis and catalysis

- D1 New horizons in catalysis
- D2 Advances in inorganic synthesis
- D3 Synthesis of functional compounds for bioimaging and related applications
- D4 Advances in organic synthesis



Theme E: Chemistry for and in life sciences

- E1 Imaging in the life sciences
- E2 Chemical biology and drug discovery
- E3 Advances in the chemistry of biomacromolecules

Theme F: Understanding matter and reactions

- F1 From biomics to metabolomics to functionalomics: progress in analytical methodology
- F2 Bioanalytics for life sciences
- F3 Nanostructured natural and man-made materials
- F4 Advances in analytical methods

In addition to the scientific programme the organisers also have planned a very rich social programme including a Bosphorus boat trip and a social dinner.

We hope that you will include the 5th EuCheMS Chemistry Congress in your 2014 calendar and are looking forward to welcoming you in Istanbul.

Helena Grennberg
Chair of the scientific committee
helena.grennberg@kemi.uu.se

The committee for Istanbul

The EuCheMS Newsletter introduces the scientific committee of the 5th EuCheMS Chemistry Congress in Istanbul. This issue goes on with Nick Westwood and Maria-Cristina Todasca.

Nick Westwood is professor of chemistry and chemical biology at the University of St Andrews, UK. He carried out his early studies at Oxford completing his PhD with Chris Schofield in 1988. He took up a Nato post-doctoral fellowship in the lab of Philip D. Magnus at the University of Texas in Austin. He then moved to the Institute of Chemistry and Chemical Biology at Harvard where he worked with Matthew Shair and Tim Mitchison. In 2001, he returned to the UK as a Royal Society University Research Fellow. The main aim of his research is to apply high level methods in organic synthesis to problems in both chemistry and at the chemistry-biology interface. He was promoted to full professor in 2013. With respect to the EuCheMS Congress he is responsible for Theme E (Chemistry for and in the life sciences).



Maria-Cristina Todasca lectures in food chemistry at the Faculty of Applied Chemistry and Material Science of the University Politehnica in Bucharest. She studied food chemistry in Bucharest and finished her PhD in 2006. She has been a member of the Faculty Teachers Board since 2012, participating in decision-making regarding all educational aspects, and part of the Faculty Commission of Quality Assurance. She was president of the Romanian Young Chemists Division of the Romanian Chemical Society (2007 to 2013) and has been active in EuCheMS as communication officer in the first steering committee of the European Young Chemists Network (EYCN, 2007 to 2009), as secretary of EYCN (2011 to 2012) and as chair of EYCN (2012 to 2013). With respect to the EuCheMS Congress she is the convener of the Career Days, organised by EYCN and GDCh Career Services. *KS*



More mobility: Electronic professional card on its way

The Directive 2005/36/EC on the recognition of professional qualifications is intended to support professionals to work in another Member State. However, the level of professional mobility has remained low due to a lack of simple and clear rules governing the recognition of professional qualifications.

Therefore, in 2011 the European Commission proposed a revision of the existing procedure with two main changes: First, an electronic European professional card will replace the existing time-consuming declaration procedures concerning the professional's qualifications. The second main change refers to new possibilities for automatic recognition through common training frameworks and tests based on more transparency on continuous professional development. In June 2013 the European Parliament and the Council reached an agreement on a provisional text to be formally approved by the Council Committee of Permanent Representatives and Parliament Internal Market Committee before the plenary vote in October.

EuCheMS was actively involved in the consolidated version of Directive 2005/36/EC and in September 2011 submitted its contribution on the modernisation of the Professional Qualification Directive to the EU. In 2012 a delegation met the corresponding responsible party of the Internal Market Directorate for the presentation of the decision of the Consiglio Nazionale dei Chimici (CNC) of Italy to adopt a preliminary professional card for the chemical profession. This card was transformed into an electronic international version and connected to the Internal Market Information System (IMI) of the Commission.

During 2013 the CNC produced a first version of the electronic professional card. In July the Executive Board of EuCheMS suggested to set up an ad hoc committee for approaching other interested countries. The committee introduced the final version of the electronic card at the EuCheMS General Assembly in Budapest in October 2013.

*Sergio Facetti
s.facchetti@chimici.it*

Transatlantic Frontiers of Chemistry Symposium 2013 in Germany

The 3rd Transatlantic Frontiers of Chemistry (TFOC) Symposium was organised in common by the American Chemical Society (ACS), the Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) and the Royal Society of Chemistry (RSC). GDCh hosted the symposium in the Bavarian countryside at Kloster Seeon, Germany, on 8 to 11 August.

More than 60 invited young scientists from US, UK, Germany and – for the first time – from a guest country (Brazil) discussed their latest research and possible future trans-disciplinary and trans-national co-operation. The attendance of ACS President Marinda Wu, RSC CEO Robert Parker, and GDCh Vice President Eckhard Ottow showed the extraordinary importance of the symposium for the common international activities of the organising chemical societies. "In the future without any doubt chemistry with all its different disciplines will strongly contribute to global solutions for the global challenges," encouraged Ottow the young scientists to overcome borders between the disciplines. Parker pointed out that there is a need for new tools in chemistry, which is getting more and more multidisciplinary. "A diverse group of young scientists with research interests that span so many disciplines play critical roles in addressing the many



TFOC organisers and guests. (photo: Anna Wirt)

problems that confront our world today," added Wu.

Furthermore, representatives from German funding organisations, from chemical industry and publishers as well as students from the RISE and Fulbright programmes contributed to the symposium. All invited young scientists gave a lecture and presented a poster. The symposium consisted of nine thematic sessions, a poster session, breakout sessions on basic research, industry co-operation, organisation of one's own research group and an excursion to the Alps. A really pleasing feature of the symposium was the trans-disciplinary interaction between all participants. A scientific conference report will be published in *Chemistry – A European Journal* soon.

*Hans-Georg Weinig, h.weinig@gdch.de
Ruth Neale, nealer@rsc.org*

EuCheMS with new premises in Brussels' European quarter

We are pleased to report that the headquarters of the EuCheMS Brussels office have recently been moved to a venue where EuCheMS can benefit from the strategic position just around the corner from the European Parliament and many European Commission buildings as well as the Council of the EU. This will certainly be an asset not only in liaising with various institutions in Brussels but also to serve as a convenient meeting point for all representatives of EuCheMS member associations.

The new premises include a variety of meeting rooms at our disposal, of which the big-

gest can host meetings, seminars or workshops for up to 100 participants. All meeting rooms are supported by newest technologies, allowing for an efficient as well as enjoyable working environment. To date, two events have been held at the new EuCheMS location: a meeting on artificial photosynthesis and a workshop on green chemistry.

Our member societies as well as any interested party can from now onwards contact us here: Rue du Trône 62, B-1050 Brussels, Belgium, Telephone: +32 (0) 2289 26 90.

*Nineta Majcen
nineta.majcen@euchems.eu*

European employment survey starts

Which country pays its chemists and chemical engineers highest salaries? Where do I soonest find a new job? Which chemical sub-discipline offers most jobs? Reliable answers for these and other questions will be derived from the first European employment survey for chemists and chemical engineers, which has started this September on www.chemsurvey.eu.

The questionnaire is available in 24 European languages. All responses to the questionnaire are saved anonymously, even though a valid e-mail address is required on the first page. The validity of this e-mail address is checked upon start in order to prevent misuse. Only if you want to receive the results of the survey (in particular about salaries) directly, your e-mail address is saved independently of your responses.

The questionnaire has six general pages (Personal – Education – Employment – Job – Training – Salary) which provide fields for

free-text responses. Industry employees find special questions on an additional page. We hope for active participation of chemists from industry, since industry is less represented in some national societies. Participating societies nominated National Delegates. They may be contacted in case of queries via a link on the entry page.

Members of participating EuCheMS societies will soon receive an e-mail with the invitation to participate. All other European chemist and chemical engineers are invited to participate as well.

The survey is requested by the Joint Research Centre of the European Commission, supported by EuCheMS, the European Chemical Industry Council (CEFIC) and the European Chemistry and Chemical Engineering Education Network (EC2E2N) and executed by the European Chemistry Thematic Network Association (ECTNA).

Reiner Salzer, reiner.salzer@tu-dresden.de

2014 IUPAC-ThalesNano Prize in Flow Chemistry

The IUPAC-ThalesNano Prize in Flow Chemistry prize is to be awarded to an internationally recognized scientist, whose activities have made an outstanding contribution in the field of flow chemistry in academia or industry. The prize is US-Dollar 7500. The award shall be presented at the 13th International Conference on MicroReaction Technology in June 2014 in Budapest. A contribution to travel expenses will be provided.

The IUPAC-ThalesNano Prize will be awarded for the second time. It has been established by a generous gift from the Hungarian Technology company ThalesNano to acknowledge the

key role that flow chemistry plays towards the improvement of chemical processes.

Applicants should be received by nomination only, with just one person needing to serve in that capacity, although a total of five individuals should be listed as referees overall. The package must be submitted electronically and should contain a complete résumé, a professional autobiography of not more than two pages and a one-page summary of what the individual considers to be his or her activities, accomplishments or publications that have had the most significant impact upon the field of flow chemistry. The material will be forwarded confidentially to an independent selection committee appointed by the IUPAC Committee on Chemistry and Industry.

Nomination materials should be submitted by 31 January 2014 to the chair of the IUPAC Committee on Chemistry and Industry, Michael Dröschner, by e-mail at m.droeschner@t-online.de. For more information please contact Michael Dröschner (Telephone: +49 2369 1383, Fax: +49 2369 248348).

Michael Dröschner, m.droeschner@t-online.de



*Micro reaction technology is safe and fast.
(photo: Fraunhofer ICT)*

DAC Tribute to Bo Karlberg and Adam Hulanicki

It was the privilege of the delegates and guests at the annual meeting of the EuCheMS Division of Analytical Chemistry (DAC) in Warsaw on 25 August to witness the DAC Tribute to Bo Karlberg and Adam Hulanicki.

Bo Karlberg from Stockholm University has recently completed two terms (2005 to 2010) as chair of DAC. He was on the steering committee for the conferences Euroanalysis 14 in Belgium and Euroanalysis 15 in Austria. He established the "Who's Who in Analytical Chemistry" on the DAC website (www.anchem.su.se/euchems/countries.asp) and subsequently a task force on "European Analytical Chemistry on the Web". He has also been active as the DAC liaison person for joint activities with the EuCheMS Division of Food Chemistry and co-authored several of the "European Analytical Column" articles in analytical chemistry journals (www.dac-euchems.org/publications/eac/index.html).



Adam Hulanicki's involvement with the Working Party on Analytical Chemistry of the Federation of European Chemical Society started soon after its creation in Heidelberg in 1972. Wiktor Kemula, president of the Polish Chemical Society and chair of the Committee on Analytical Chemistry of the Polish Academy of Sciences at the time, proposed him as the Polish Analytical Chemistry representative. His active participation as a Polish delegate started in 1975 in Vienna and he was involved in early discussions on working procedures and practices. He was a member of the Working Party until 1997 and subsequently a member of DAC until 2006, including several years as a member of the steering committee. He took active part in all Euroanalysis conferences from the Budapest conference in 1975 to the Dortmund conference in 2002. In 1978 he was chair of Euroanalysis 5 which took place in Cracow, Poland.



Wolfgang Buchberger

Paul Worsfold

P.Worsfold@plymouth.ac.uk

Euroanalysis 2013 in Warsaw

In August Euroanalysis 2013 was hosted by the Polish Chemical Society at Warsaw University of Technology. There was an excellent team of local organisers, with Maciej Jarosz as chair and Ewa Bulska as co-chair.

The conference had 722 registered participants from 64 countries. The organisers were able to offer a number of student attendance bursaries, courtesy of funding from the 2011 Euroanalysis XVI conference in Belgrade, Serbia. The conference was also the occasion at which the Robert Kellner Lecture was delivered by Jürgen Popp from Jena, Germany.

Next Euroanalysis will be held in Bordeaux, France, in September 2015, hosted by the Société Chimique de France and the EuChemS Division of Analytical Chemistry (DAC).

Maciej Jarosz, chair of Euroanalysis 2013

Paul Worsfold, chair of EuChemS DAC

P.Worsfold@plymouth.ac.uk



Maciej Jarosz (left), Paul Worsfold and Ewa Bulska.

ICCE 2013 in Barcelona

The 14th EuChemS International Conference on Chemistry and the Environment (ICCE 2013) was held in Barcelona from 25 to 28 June. The scientific programme was completed by four satellite events organised at the Institute of Catalan Studies, two of them co-organised by the American Chemical Society. 500 attendants from 50 countries, only around 25 percent of the participants were Spanish, discussed environmental chemistry topics which were organised in eight symposia. In Barcelona Joan Albaigés received the career's award of the EuChemS Division of Chemistry and the Environment for its long and fruitful scientific work on environmental chemistry.

Events 2014

27 – 28 February 2014, Blankenberge, Belgium

12th Chemistry Conference for Young Scientists (ChemCYS 2014), www.chemcys.be

29 – 31 May 2014, Hamburg, Germany

113th Annual German Conference on Physical Chemistry – Physical Chemistry on the Nanometer Scale, www.bunsen.de/bunsentagung2014.html

11 – 15 June 2014, Malmö, Sweden

15th International Conference on Electroanalysis <http://eseac2014.com>

23 – 28 June 2014, Uppsala, Sweden

18th International Symposium on Bioluminescence and Chemiluminescence, www-conference.slu.se/isbc2014

29 June – 4 July 2014, Prague, Czech Republic

EUChem Conference on Organic Free Radicals www.uochb.cz/web/structure/1259.html

6 – 10 July 2014, Tallinn, Estonia

EUChem 2014 Conference on Molten Salts and Ionic Liquids, <http://euchem2014.ttu.ee>

31 August – 4 September 2014, Istanbul, Turkey

5th EuChemS Chemistry Congress www.euchems-istanbul2014.org

7 – 10 September 2014, Prague, Czech Republic

22nd Conference on Isoprenoids www.vsch.cz/lam/isoprenoids/Isoprenoids.htm

7 – 11 September 2014, Lisbon, Portugal

EFMC-ISMIC 2014 – 23rd International Symposium on Medicinal Chemistry

Events 2015

5 – 9 July 2015, Bratislava, Slovakia

21st European Conference on Organometallic Chemistry, www.eucomcxii.eu

22 – 25 September 2015, Leipzig, Germany

15th EuChemS International Conference on Chemistry and the Environment

Slovakia: From bioinorganic to solid state chemistry

The 24th International Conference on Coordination & Bioinorganic Chemistry (ICCBiC) took place in Smolenice in June 2013 with about 170 participants. Young scientists presented their results in a special session. The focus was devoted to four areas: Electron, molecular and crystal structure (organized by Norimichi Kojima, Japan), Reactivity in solution and in solid state (by Andrzej Ozarowski, USA), Applied inorganic and coordination chemistry (by Lee Brammer, UK), Complexes in medicine and environment (by Edward Solomon, USA). 25th ICCBiC will be held in June 2015 in Smolenice.

The 11th Conference on Solid State Chemistry (SSC 2014) will take place on 6 to 11 July 2014 in Trenčianske Teplice, one of the oldest spas of Slovakia. The scientific programme will consist of plenary lectures, keynote lectures (including an IUPAC presentation), other lectures and posters. IUPAC awards will be awarded for best posters of young participants. A special issue of *Pure & Applied Chemistry* devoted to papers based on lectures of SSC 2014 will be published after the conference.

Milan Drabik, drabik@fns.uniba.sk

www.ssc2014.sav.sk

EuChemS Newsletter



Newsletter coordinator: Karin J. Schmitz

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

Editors: Wolfram Koch (responsible),

Karin J. Schmitz, Uta Neubauer, Frankfurt am Main

Advisory board: Wolfram Koch (Chair, Germany),

Luis Oro (Spain), Giovanni Natile (Italy), Nineta

Majcen (EuChemS Secretariat), Ulrich Schubert

(Austria), Marie-Claude Vitorge (France), Paola

Turano (Italy), Viktor Milata (Slovakia).

Layout: Jürgen Bugler, Frankfurt am Main

Production: Nachrichten aus der Chemie

Publisher: Gesellschaft Deutscher Chemiker on behalf of EuChemS

Postfach 900440, D-60444 Frankfurt am Main
euchems@gdch.de

EuChemS General Secretary:

Nineta Majcen, Rue du Trône 62,

B-1050 Brussels

secretariat@euchems.org

www.euchems.org

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



„Nem követnünk, hanem irányítanunk kell a technológiai fejlődést.” Az új technológiáknak a posztgraduális oktatásban betöltött jelenlegi és jövőbeli szerepéről tanácskozott 14 ország 40 vezető kutatója és felsőoktatási szakembere a Stratégiai Vezetők Éves Világtalálkozóján.

Az MTA, a Posztgraduális Iskolák Tanácsa (CGS) és a Közép-európai Egyetem (CEU) közös szervezésében tartott csúcstalálkozózn a részt vevő szakemberek egyebek mellett arról tanácskoztak, milyen új technológiák jelentek meg és terjednek a posztgraduális oktatásban, illetve miként alkalmazható a közösségi média a képzési intézményekben jelentkezők számára és az oktatási programok minőségének növelése, a hallgatók és az oktatási intézmények dolgozói közötti együttműködés optimalizálása, valamint a kutatáshoz való egyszerűbb hozzáférés érdekében.

„Nem követnünk, hanem irányítanunk kell a technológiai fejlődést. A felkínált eszközök szolgai alkalmazása helyett nekünk kell kijelölni a fejlődés irányát” – figyelmeztetett a konferencián a legújabb technológia és az online lehetőségek oktatásban való alkalmazásának előnyeit és kockázatait mérlegelve a Magyar Tu-

abban, hogy az egyre nagyobb ütemben megjelenő technológiai újítások alapvetően elősegíthetik a ma diákjainak felkészítését arra, hogy a jövő tudásának létrehozóivá és vezető szakembereivé váljanak, akik megtalálják világunk gazdagításának és gyarapításának eszközeit. A budapesti csúcstalálkozó résztvevői abban is egyetértettek, hogy bár az új technológiai eszközök és módszerek hatékonyabbá tehetik a posztgraduális oktatást, egyúttal kockázatot is hordoznak magukban, és nem minden esetben járnak költségsökkenéssel. Ezért az intézmények vezetőinek a felelőssége, hogy gondos mérlegelést követően döntsenek a lehetőségek alkalmazásáról. A posztgraduális oktatás és kutatás terén az új technológiai eszközök hatékony felhasználásának támogatására egységes elvek követését tanácsolják, amelyeknél figyelembe kell venni a fejlesztések következményeinek globális természetét, illetve a nemzetközi perspektívákat. (MTA)

Banai Endre összeállítása

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

Short Course on Thermal Analysis 2013

2013. november 11–13.

Hotel Bara, 1118 Budapest, Hegyalja út 34–36.

Online regisztráció: <https://www.mke.org.hu/conferences/thermanal2013/registration/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Androsits Beáta, thermanal@mke.org.hu



dományos Akadémia elnöke. *Pálinskás József* alapvető fontosságúnak nevezte, hogy megfelelő egyensúly alakuljon ki a tudomány kínálta új és a hagyományos oktatási módszerek között. Mint fogalmazott: az előzőek nagyon jól kiegészíthetik az utóbbiakat, és jelentősen emelhetik az oktatás színvonalát. Ugyanakkor hangsúlyozta az egyetemek és oktatási intézmények meghatározó közösségformáló erejét és a diákok szociális fejlődésében játszott alapvető szerepét: „Az oktatók nem csupán a tudás közvetítői ebben a folyamatban, magatartási modellt, valamint olyan egyéb emberi, személyes értékeket is átadhatnak, amelyek köz-



vetítésére a modern technológia eszközei jelenleg, úgy tűnik, még nem kínálnak megoldást.” *John Shattuck*, a CEU elnök-rektora a Stratégiai Vezetők Éves Világtalálkozójának idei helyszínválasztásáról szólva méltatta az MTA és Magyarország tudományban betöltött szerepét. Mint elmondta: „Magyarország mindig fontos és előremutató tényező volt az akadémiai kiválóság, a felfedező kutatások, illetve az élenjáró fejlesztések területén. Nem meglepő tehát, hogy az információtechnológia egyes meghatározó elemei, amelyeket ma már természetesnek fogadunk el, éppen Magyarországról és a Magyar Tudományos Akadémiáról indultak.”



A tanácskozást értékelő sajtótájékoztatót *Debra W. Stewart*, a Posztgraduális Iskolák Tanácsának (CGS) elnöke elmondta, a globális csúcstalálkozó résztvevői egyetértettek

Az MKE Kozmetikai és Háztartás-vegyipari Társasága Kozmetikai Szimpózium – 2013

Budapest, Bara Hotel, 2013. november 21.

SZÉPSÉG – EGÉSZSÉG – TUDOMÁNY

Témák:

Új ható- és segédanyagok

Új segédanyagok és technológiák

Vizsgálati módszerek

Klinikai és kozmetológiai vizsgálatok

INFORMÁCIÓ:

Előadás-bejelentés, szponzorálás: Dr. Hangay György, tel.: 06-1-203 0089

SZERVEZÉSI KÉRDÉSEK: Schenker Beatrix,

Magyar Kémikusok Egyesülete, tel.: 201 68 83,

fax: 201 8056; email: beatrix.schenker@mke.org.hu

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

A kolozsvári székhelyű Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT) 2013. november 21–24. között Nagybanján (Hotel MARA) a Babeş-Bolyai Tudományegyetem Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézetével közösen szervezi meg a XIX. Nemzetközi Vegyészkonferenciát. Bővebb információk, jelentkezési lapok, valamint előadás/poszter-bejelentő lapok a konferencia honlapján – <http://chem.emt.ro/> – elérhetők.

A Magyar Kémikusok Egyesülete BAZ Megyei Területi Szervezete és a Miskolci Akadémiai Bizottság Vegyészeti Szakbizottsága tisztelettel meghívja Önt a

30. BORSODI VEGYIPARI NAP

rendezvényére

Időpont: 2013. november 27. (szerda)

Helyszín: MTA Miskolci Akadémiai Bizottság Díszterem
Miskolc, Erzsébet tér 3.

Előfizetés a Magyar Kémiai Folyóirat 2014. évi számaira

A Magyar Kémiai Folyóirat 2014. évi díja fizető egyesületi tagjaink számára 1400 Ft. Kérjük, hogy az előfizetési díjat a tagdíjjal együtt szíveskedjenek befizetni. Lehetőség van átutalással rendezni az előfizetést a Titkárság által küldött számla ellenében. Kérjük, jelezzék az erre vonatkozó igényüket!

Köszönjük mindazoknak, akik 2013-ban kettős előfizetéssel hozzájárultak a határon túli magyar kémikusoknak küldött Folyóirat terjesztési költségeihez. Kérjük, aki teheti, 2014-ban is csatlakozzon a kettős előfizetés akcióhoz.

MKE Titkárság

2014-ben

ESCAPE 24 – European Symposium on Computer Aided Process Engineering

2014. június 15–18.

Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1117 Budapest,

Pázmány Péter stny. 1/a

Online regisztráció: [https://www.mke.org.hu/conferences/](https://www.mke.org.hu/conferences/escape24/registration/)

[escape24/registration/](https://www.mke.org.hu/conferences/escape24/registration/)

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika, escape24@mke.org.hu

ICOS-20 – 20th International Conference on Organic Synthesis

2014. június 29. – július 4.

Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1117 Budapest,

Pázmány Péter stny. 1/a.

Online regisztráció hamarosan a <http://www.icos20.hu/>

honlapon keresztül.

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, icos20@mke.org.hu

MKE egyéni tagdíj (2014)

Kérjük tisztelt tagtársainkat, hogy a **2014. évi tagdíj** befizetéséről szíveskedjenek gondoskodni annak érdekében, hogy a Magyar Kémikusok Lapját 2014 januárjától is zavartalanul postázhassuk Önöknek. A tagdíj összege az egyes tagdíj-kategóriák szerint az alábbi:

- | | |
|--|---------------|
| • alaptagdíj: | 8000 Ft/fő/év |
| • nyugdíjas (50%): | 4000 Ft/fő/év |
| • közoktatásban dolgozó kémiatanár (50%) | 4000 Ft/fő/év |
| • ifjúsági tag (25%): | 2000 Ft/fő/év |
| • gyesen lévő (25%) | 2000 Ft/fő/év |

Tagdíjbefizetési lehetőségek:

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

Banki átutalásos és csekkes tagdíjbefizetés esetén a **név, lakcím, összeg rendeltetése** adatokat kérjük jól olvashatóan feltüntetni. Ahol a munkahely levonja a munkabérből a tagdíjat és listás átutalás formájában továbbítja az MKE-nek, ez a lista szolgálja a tagdíjbefizetés nyilvántartását.

Nobel-díj

Lapzárta után hirdették ki a 2013. évi Nobel-díjasokat. A kémiai Nobel-díjat Martin Karplus, Michael Levitt és Arieh Warshel kapta „bonyolult kémiai rendszerek többletétké modelljeinek kidolgozásáért”. A három kutató olyan módszereket alkotott, amelyek klasszikus fizikai és kvantummechanikai megközelítést is használnak. A módszereiken alapuló számítógépes programok jól alkalmazhatók a kémiai folyamatok értelmezésében és előrejelzésében.

A díjakra későbbi számainkban visszatérünk.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXVIII. No. 11. November 2013

CONTENTS

<i>LCO processing to upgrade refinery product value and diesel yield</i>	322
ISTVÁN VALKAI, ILONA WAHL HORVÁTH, MÁRIA BALASSA, BENCE NAGY, RICHÁRD SÁGI	
<i>Safety data sheets. Part IX. Identification of dangerous products</i>	329
GYULA KÖRTVÉLYESSY	
<i>Kynurenines and their analogues: new therapeutic targets in neurological disorders</i>	331
ZSUZSANNA BOHÁR, FERENC FÜLÖP, IMRE DÉKÁNY, JÓZSEF TOLDI, LÁSZLÓ VÉCSEI	
<i>Syntheses of thiodisaccharides and S-glycoconjugates via thio-click reactions</i>	334
MAGDOLNA CSÁVÁS, LÁSZLÓ LÁZÁR, ÁDÁM HADHÁZI, TAMÁS DEMETER, PÉTER NÁBRÁDI, MIHÁLY HERCZEG, DÁNIEL ESZENYI, ERIKA MEZŐ, PÁL HERCZEGH, ANIKÓ BORBÁS	
<i>Creative elements. An interview with Professor Péter Csermely</i>	336
VERA SILBERER	
<i>From Gutenberg towards a new chemistry? 3D printing and printers in space and time</i>	338
TIBOR BRAUN	
<i>Simple and motivating experiments in teaching chemistry</i>	344
DÁVID ÁRUS	
<i>Chemistry calendar (Edited by JÓZSEF SÁNDOR PAP)</i>	346
<i>Chembits (Edited by GÁBOR LENTE)</i>	348
<i>The Society's Life</i>	350
<i>News of the Month</i>	352
<i>EuCheMS Newsletter, November 2013</i>	355

Nívódíjak, 2013

A Magyar Kémikusok Egyesülete 2013. évi pályázatára beérkezett 25+5 színvonalas pályamunka közül a Műszaki-Tudományos Bizottság a következő 13 pályázatot jutalmazta Nívódíjjal:

Pályázó neve	Egyetem	Témavezető	Diplomamunka címe
Balogh Réka	Semmelweis Egyetem Gyógyszerésztudományi Kar	Dr. Béni Szabolcs	Anyatej-glikomika: az oligaszacharidok biológiai szerepe, szerkezetük jellemzése és analitikája
Bihari Zsolt	Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	Dr. Buglyó Péter	Potenciálisan rákellenes hatású felszéndvics típusú $[Ru(\eta^6-p\text{-cimol})(H_2O)_3]^{2+}$ kölcsönhatása hisztidintartalmú oligopeptidekkel és modelljeikkel
Bogáth Nóra	Pannon Egyetem Mérnöki Kar	Dr. Kaizer József	Nemhem-vastartalmú modellek előállítása és gyakorlati alkalmazásai: 1-amino-ciklopropán-1-karbonsav oxidáz (ACCO)
Hadházi Ádám	Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	Dr. Borbás Anikó	Neoglükokongugátumok előállítására alkalmas szialil-galaktozidok szintézise
Kakucska Georgina	Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar Szervetlen Kémia Tanszék	Dr. Fülöp László Dr. Kilar Ferenc	Módszer kidolgozása olajtermelő mikroalgatörzsek neutrális lipidtartalmának meghatározására
Kobzi Balázs	Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézet	Dr. Kiss Éva Dr. Horváth Róbert	Felületérzékeny optikai módszer alkalmazása antibakteriális polimerek penetrációképességének jellemzésére
Kovács Tamara	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	Dr. Keglevich György	Alkil-foszfolén ligandumokat tartalmazó komplexek előállítása, és alkalmazásuk katalitikus reakcióban
Kozmér Zsuzsanna	Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	Dr. Alapi Tünde Arany Eszter Dr. Dombi András Dr. Takács Erzsébet Dr. Wojnárovits László	Hasonlóságok és különbségek a fenol vákuum-ultraibolya fotolízise és γ -radiolízise között, a reakciókörülmények befolyása
Majtényi Eszter	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	Dr. Németh Gábor	A terhelhetőség növelési lehetőségeinek vizsgálata királis tölteteken
Pethő Lilla	Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézet	Dr. Mező Gábor	Peptid-hatóanyag konjugátumok szintézise és vizsgálata kombinált célzott tumorterápia céljára
Simon József	Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar Szervetlen Kémia Tanszék	Dr. Felinger Attila	Kétdimenziós korreláció alkalmazása a kromatográfiában
Szabó Johanna	Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	Dr. Mernyák Erzsébet	Új D-homo- és D-szekoösztion-származékok szintézise és hatástani vizsgálata
Szilágyi Barnabás Áron	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	Dr. Szilágyi András	Enzimatikusan lebomló poliaszparaginsav hidrogének szintézise és vizsgálata



FELHÍVÁS

Tisztelt nyugdíjas Tagtársak!

A nyugdíjas kémikusok óriási tapasztalatának megosztása alapvető feladata a Magyar Kémikusok Egyesületének. Ezért nem szabad veszni hagyni azt a fél évszázados hagyományt, amelyet a Nyugdíjas Kémikusok Köre képvisel, sőt az aktivitás fokozásával szélesíteni lehet egyrészt a tagságot, másrészt a konzultációs tevékenységet.

A Egyesület alapszabálya szerint: „Az MKE a kémia iránt érdeklődők önkéntes és egyéni aktivitáson alapuló szerveződése a széles értelemben vett szakmai információk cseréjére, értékelésére és közzétételére. Célja egyidejűleg a hazai kémikusok személyiségjegyeinek és tudásszintjének közösségi értékelése, emelése és elismerése itthon és külföldön egyaránt.”

Alapvető értékeink a szakmai tudás emelése, információk cseréje. Ennek elősegítése érdekében keressük azokat, akik tudásukat hajlandók megosztani másokkal, hogy a munkájuk során felhalmozott tapasztalatukat továbbadják.

Keressük az aktív tagok között azokat a nyugdíjasokat, akik hajlandók szakmai kérdésekben tanácsokat adni, emellett havonta/kéthavonta megadott témakörök alapján szemináriumot rendezhetünk, ahol az adott kérdés legjobb szakértői tartanak előadásokat.

A szemináriumokon természetesen *nemcsak* a szakemberek, hanem például kémia tanárok, középiskolások, egyetemi/főiskolai hallgatók, üzemi szakemberek és laikus érdeklődők is részt vehetnek.

Ezeknek a szemináriumoknak az anyagát beszerkesztve feltehetjük a honlapra, hogy a kémia iránt érdeklődő olvasó tájékozódhasson a legfrissebb, kémiával kapcsolatos információkról, és tájékozódási pontot adhatunk azoknak is, akik a jelenlegi „agymosott” kémiai tévhitek útvesztőjében eltévedtek...

Ritz Ferenc nyugdíjas vegyészmérnök,
MKE RG Munkahelyi Szervezet titkára, e-mail: f.ritz@t-online.hu

Ritter

Made in Germany

PRECIZIÓS GÁZTÉRFOGAT MÉRŐK és GÁZBALLONOK

Gáztérfogatmérők:

- forgódobos
- membrános
- billenőkamrás

1,0 ml/h -tól...

... 160 000 l/h -ig

Sokféle szerkezeti anyag:

PVC, PP, PVDF, PE, saválló acél, viton

5-rétegű biztonsági
GÁZBALLONOK
0,1 - 200 literig



Flow	Pressure	Temperature	Flow	Pressure	Temperature
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
0.03	0.03	0.03	0.03	0.03	0.03
0.04	0.04	0.04	0.04	0.04	0.04
0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
0.06	0.06	0.06	0.06	0.06	0.06
0.07	0.07	0.07	0.07	0.07	0.07
0.08	0.08	0.08	0.08	0.08	0.08
0.09	0.09	0.09	0.09	0.09	0.09
0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10

AKTIVIT Kft.

Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök

1145 Budapest, Pétervárad u. 14.

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

Fax: 252-9940 info@aktivit.hu www.aktivit.hu

