

A TARTALOMBÓL:

Online mérő-szabályozó berendezés hűtő-kenő emulziók vizsgálatára

Az f elemek elektronszerkezete

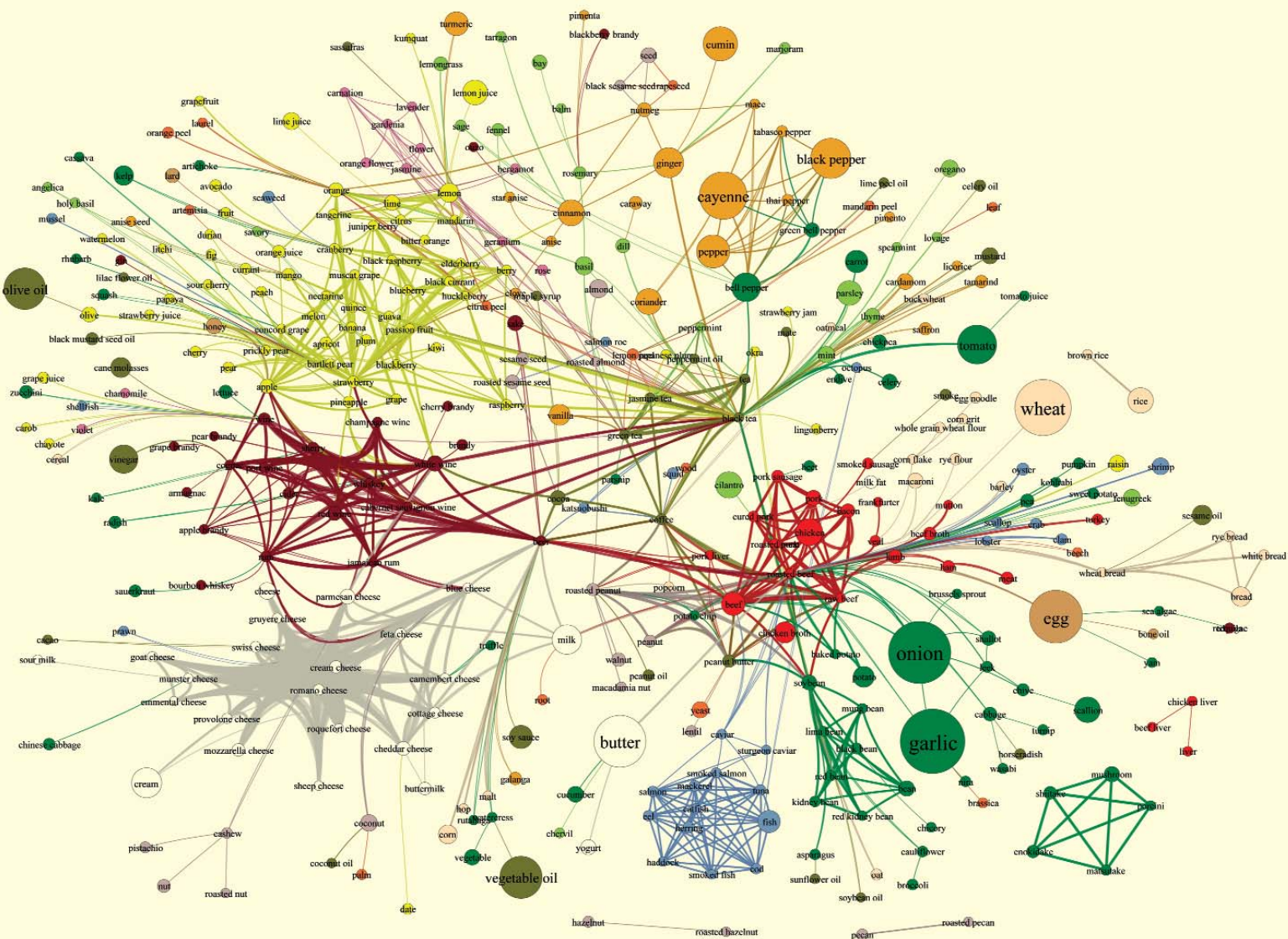
Beszélgetés az ide

Rátz Tanár Úr életműdíjas kémia tanárokkal



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXIX. ÉVFOLYAM • 2014. NOVEMBER • ÁRA: 850 FT



A lap megjelenését



a Nemzeti Kulturális Alap támogatja

Íz-, illat-, zamat-hálózat



Thermo Scientific:

AA, ICP-OES és ICP-MS spektrométerek
ED-XRF készülékek
Kompakt NMR spektrométerek
UV/látható spektrométerek
Automata fotometriás analízátorok
FTIR, Raman és NIR spektrométerek, mikroszkópok
Hordozható Raman és NIR spektrométerek
GC, kvadrupol és ioncsapdás GC/MS
HPLC, UHPLC, nano-LC
Kvadrupol és ioncsapdás LC/MS
Orbitrap hibrid LC/MS
Kromatográfiás oszlopok, kiegészítők és fogyóanyagok
C, H, N, S, O elemanalizátor

Thermo
S C I E N T I F I C
DISTRIBUTOR



Olympus:

Mikroszkópok

OLYMPUS
Your Vision, Our Future

SOTAX:

Tablettavizsgáló berendezések

SOTAX
Solutions for Pharmaceutical Testing

Global Analytical Solutions (GAS):

Kulcsrakész ipari kromatográfiás rendszerek

Markes International:

Termikus deszorpció

PS Analytical:

Atomfluoreszcenciás Hg, As, Se, stb. analízátorok

Trace Elemental Instruments:

TN, TS, TX, AOX meghatározók

HunterLab:

Színmérő készülékek

Peak Scientific:

Gázgenerátorok





Szerkesztőség:

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

Szerkesztők:

ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,
JANÁKY CSABA, LENTE GÁBOR,
NAGY GÁBOR, PAP JÓZSEF SÁNDOR,
ZÉKÁNY ANDRÁS

Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

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

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

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

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

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

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

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

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

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



Itthon Szent András havához gyakran a szürkeség, az enyészet gondolata társul. Nem csoda, hisz az őszi színek már kifakultak, december ünnepváró hangulata pedig még odébb. Ugyanakkor ez az a hónap is, amikor a már kiejert újborokkal koccinthatunk, az egész éves munka eredményének első kóstolójaként. Ilyenkor kerülnek asztalra gasztronómiai hagyományink képviselőjében a Márton-napi „lúdvacsorák” – s ha már gasztronómia, hadd ajánljam figyelmükbe Braun Tibor újabb remek írását, amelyben az ételek, italok tudományának molekuláris hátterébe enged betekintést. Szürkeség ide, szürkeség oda, a lap e hónapban sem veszít színességéből. Sőt!

A Vegyészleletek oldalain a kémia jelenéből mazsolázhathatunk, míg a Filatéliai kalandozások az ózonpajzs titkaiba avatja be az olvasót – bélyegekkel ezúttal is gazdagon illusztrálva. Az Oktatás rovatban két, Rácz Tanár Úr életműdíjas kémiatanárral készült interjút olvashatunk. A tudományos ismeretterjesztés a lap alapvető célja, most az f elemek egzotikus tulajdonságai mellett a VSEPR-modell sorsát kísérhetjük testközelből, utóbbit egy Hargittai István előadásából készült írás jóvoltából. Mennyivel élményszerűbb így olvasni erről a témáról – óhatatlanul is eszembe jut: bár hallgató koromban találkoztam volna ezzel a cikkel! Bátran ajánlom tehát oktatók és oktatók figyelmébe egyaránt, ahogyan azt az egyetemi tudás és az ipari tapasztalat eredményes találkozásának példaként állítható cikket is, amely egy emulziókat felügyelő online mérő-szabályozó berendezésről szól.

Széles a paletta, így tudom, hogy aki e novemberi számot forgatja, nem fog csalódní. Kívánok kellemes időtöltést lapunkkal!

Pap József Sándor
szerkesztő

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

Molnár Gergely, Horváth Barnabás, Szalai István, Nagymányai Antal,

Takács János: Online mérő-szabályozó berendezés vízalapú hűtő-kenő emulziók tulajdonságainak vizsgálatára **330**

Hargittai István: Felfedezések összefonódó történetekkel **334**

Pogány Péter, Kovács Attila: Az f elemek elektronszerkezete **339**

OKTATÁS

Ez a díj kizárólag a szakma elismerése. Beszélgetés a Rácz Tanár Úr életműdíjas kémiatanárokkal, **Cs. Nagy Gáborral** és **Oláh Gábor Péterrel** **343**

KITEKINTÉS

Braun Tibor: Gasztronómiai íz-, illat- és zamatpárosítások molekuláris háttere és új lehetőségei **347**

ISMERETTERJESZTÉS

Boros László: Filatéliai kalandozások. A léghő kémiaja: az ózonpajzs **352**

VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET

Vegyészkalendárium (Pap József Sándor rovata) **353**

VEGYÉSZLELETEK

Lente Gábor rovata **354**

EGYESÜLETI ÉLET

A HÓNAP HÍREI **356**

A HÓNAP HÍREI **358**



Címlap:

Iz-, illat-, zamathálózati (Yong-Yeol Ahn, Sebastian Ahnert, James P. Bagrow, A.-L. Barabási, „Flavor network and the principles of food pairing”, Scientific Reports (2011) 1, 196). Barabási Albert-László szíveségéből. Cikkünk a 347. oldalon

Molnár Gergely¹ – Horváth Barnabás¹ – Szalai István¹
– Nagymányai Antal² – Takács János²

¹ Pannon Egyetem Fizika és Mechatronika Intézet

² Eni Hungaria Zrt.

Online mérő-szabályozó berendezés vízalapú hűtő-kenő emulziók tulajdonságainak vizsgálatára

Bevezetés

A vízzel elegyíthető hűtő-kenő emulziók komplex folyadékok, ezeknek a folyadékoknak több feladatot kell ellátniuk: hűtés, kenés, korrózióvédelem stb. A fémforgácsoló-megmunkáló gépekben használt hűtő-kenő (HK) folyadékok fiziko-kémiai paraméterei folyamatosan változnak a gyártási folyamat során. Emellett az emulzióban különböző mikroorganizmusok (baktériumok, gombák) is elszaporodhatnak. Ezek a változások negatívan befolyásolhatják a termelékenységet, a szerszámkopást és a HK-emulzió élettartamát, ezért fontos, hogy a használat során folyamatosan követni tudjuk a folyadék paramétereinek időbeli változását [1–3]. A paraméterek objektív vizsgálata csak megfelelő műszeres mérésekkel lehetséges [4]. Egy automatizált mérőberendezéssel nemcsak a különböző fiziko-kémiai tulajdonságok vizsgálata oldható meg, hanem aktív beavatkozással az egyes paraméterek is szinten tarthatók bizonyos határok között. Egy ilyen készülék előnyei közé tartozik, hogy mintavétel céljából nem kell a helyszínen tartózkodnunk, nem jelent problémát napi többszöri mintavétel sem, illetve közel valós időben, távolról is követhető a HK-emulzió aktuális állapota.

Munkánk során kifejlesztettünk és megépítettünk egy olyan készüléket, amelyet a karbantartandó forgácsoló-megmunkáló gép emulziótartálya mellé telepítve nyo-

mon követhetjük a HK-folyadék megfelelő paramétereinek alakulását. Az emulziókezelő készülék (EKK) egy teljesen automatizált mérő- és adagolóberendezés. A HK-folyadék aktuális koncentrációjától és szintjétől függően megfelelő mennyiségű víz és/vagy koncentrátum adagolásával a koncentráció és folyadékszint előre meghatározott értékeken tartható bizonyos hibahatárokon belül. A készülék által mért legfontosabb paraméterek a következők: koncentráció (törésmutató alapján), térfogat (folyadékszint), pH, fajlagos elektromos vezetőképesség, hőmérséklet és biológiai aktivitás (mikroorganizmusok száma). Az EKK a mért értékeket központi adatbázisba menti, amelyet az arra jogosult felhasználók számítógépen internetes böngészővel vagy mobiltelefonon egy megfelelő androidos alkalmazással érhetnek el. A mért adatok alapján az emulzió-karbantartó személyzet távolról hozhat döntést az esetleges kézi beavatkozás szükségességéről (mint pl. különböző adalékok bekeverése), valamint ütemezhető az emulzió cseréje. Mivel a készülék a HK-koncentrátum precíz adagolását teszi lehetővé, a koncentrátum-fogyasztás is optimalizálható, növelve a gazdaságosságot.

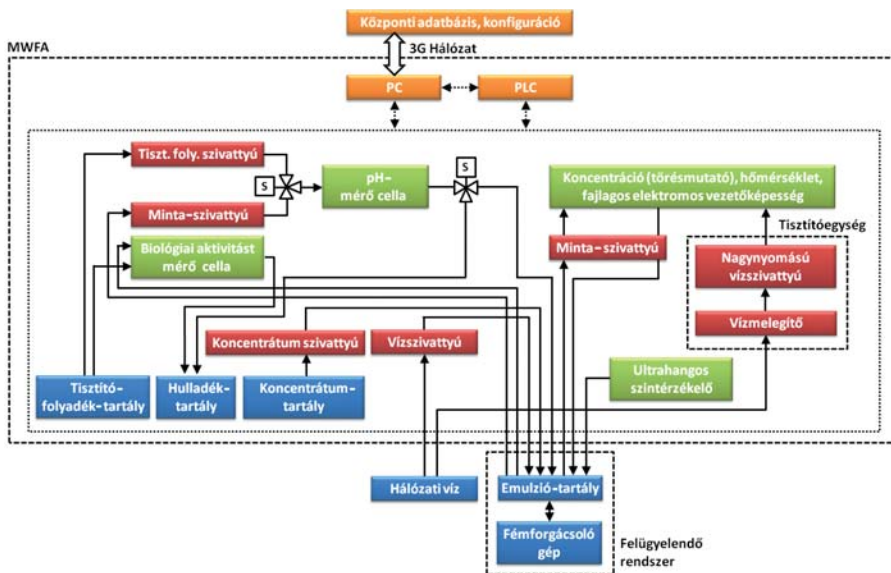
Az emulziókezelő készülék

Az EKK felépítése

A készüléket két nagyméretű, fém-, villamosági kapcsolószekrénybe építettük. A

kisebb szekrényben kapott helyet az ipari refraktométer és annak vezérlőegysége, a refraktométer-prizma tisztításához használt nagynyomású vízszivattyú, a minta-adagoló szivattyú, valamint az elektromos vezetést mérő szenzor és annak elektronika. A nagyobbik villamosági szekrény polcos kialakítású, amelynek legfelső polcán helyeztük el az összes elektromos egységet. Ide került a számítógép, a szünetmentes tápegység, a PLC, a motormeghajtó egységek, a relés kapcsoló-egységek, valamint a saját fejlesztésű elektronika. A szekrény második polcán kapott helyet a saját fejlesztésű, biológiai aktivitást mérő egység és egy átfolyásos mérőcella, amelyben a pH-elektrodot helyeztük el. A harmadik polcon találhatóak az adagolószivattyúk és mágnesszelepek, a legalsó polcra pedig a folyadéktartályok (koncentrátum, tisztítófolyadék és hulladéktároló) kerültek. A szekrények kerekkel vannak felszerelve, így egyszerűen mozgathatók, ezzel is könnyítve a készülék telepítését a felügyelendő forgácsológép mellé. Az **1. ábrán** látható blokkdiagram mutatja be az emulziókezelő készülék működését, míg felépítését a **2. ábra** szemlélteti.

Az EKK központi eleme egy beágyazott ipari számítógép, amely kommunikál a mérőegységekkel és továbbítja a mért adatokat a központi adatbázisba a vezeték nélküli routeren keresztül. A PLC és az általunk fejlesztett elektronikai panel soros porton (RS-232) keresztül kapcsolódnak a

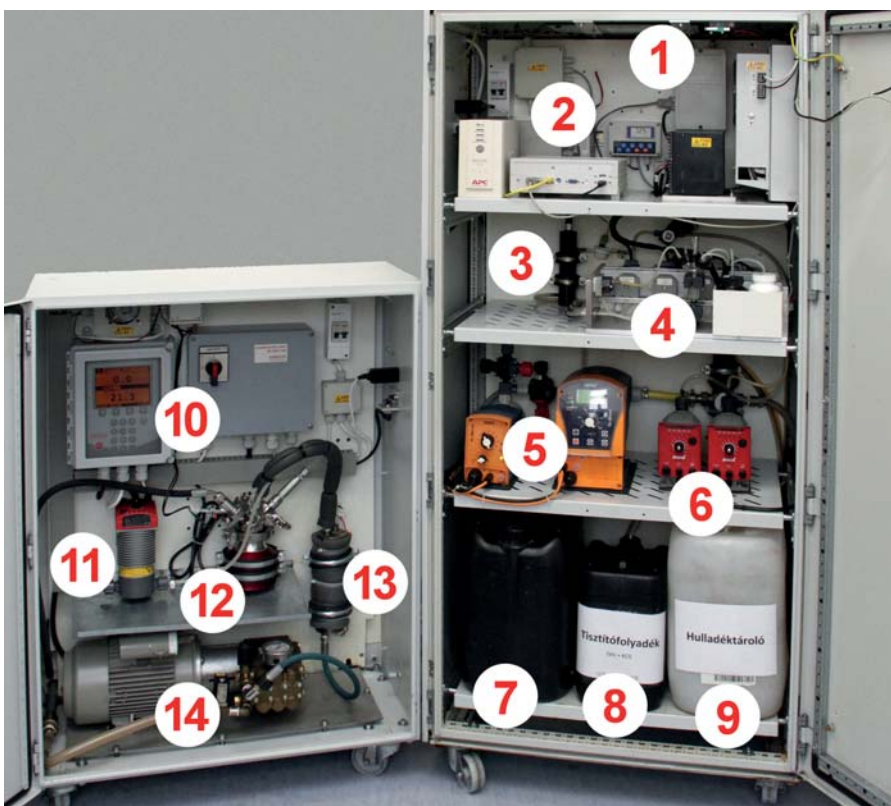


1. ábra. Az emulziókezelő készülék blokkdiagramja

számítógéphez, míg a K-Patents ipari refraktométert LAN hálózaton keresztül lehet elérni. Az adagoló- és mintavevő szivattyúkat, valamint a mágnesszelepeket a PLC-vel és a relés kapcsolóegységekkel vezérel-

hetjük. A fémforgácsoló-megmunkáló gépek általában rendelkeznek valamilyen külső HK-folyadék-tartállyal. A tartályban a folyadék szintje a megmunkálás közben folyamatosan ingadozik (aktuális munkafá-

2. ábra. Az emulziókezelő készülék részegységei: 1 – vezeték nélküli (3G) router; 2 – beágyazott PC; 3 – átfolyásos pH-mérő cella; 4 – biológia aktivitást mérő egység; 5 – adagolószivattyúk (koncentrátum és víz); 6 – mintavevő és tisztítófolyadék-szivattyúk; 7 – koncentrátumtartály; 8 – tisztítófolyadék-tartály; 9 – hulladéktároló tartály; 10 – refraktométer-vezérlő egység; 11 – mintavevő szivattyú; 12 – refraktométer-fej; 13 – vízmelegítő egység; 14 – nagynyomású szivattyú



zis szerint), illetve az idő függvényében egyre csökken a szintje (párolgás, kifröcskölődés, forgácskihordás stb.). Mivel a folyadékszint az egyik szabályozandó mennyiség, ezért fontos ennek pontos mérése, amit egy ultrahangos távolságmérő szenzorral oldottunk meg. Az ultrahangos szenzort a HK-folyadék-tartály tetejének egy nyitott felülete felett kell elhelyezni egy állítható magasságú állvánnyal úgy, hogy zavaró tárgy ne kerüljön a szenzor „látóterébe”. A szintmérő szenzor kimeneti jele 0–20 mA-es áramjel, amely arányos a mért folyadékszinttel, a mért áramjelet a feldolgozó elektronika előtt egy ellenállás segítségével arányos feszültséggé alakítjuk. A HK-folyadék-tartály geometriai méreteiből és a mért folyadékszintből egyszerűen kiszámolhatjuk a tartályban lévő HK-folyadék térfogatát. Az ultrahangos távolságmérő szenzorral közös állványon kaptak helyet a mintavevő és adagolószivattyúk szívó és nyomó tömlőcsonkjai.

Az emulziókezelő készülékben két darab mintavevő egység található, amelyek mágneses meghajtású membránszivattyúk. A beágyazott számítógép vezérli a refraktométer és a pH-cella mérőkörében a mintavevő szivattyúkat. A refraktométer-fejben található egy platina hőmérséklet-érzékelő (Pt100), ugyanis a precíz koncentrációméréshez elengedhetetlen, hogy pontosan ismerjük a mintafolyadék hőmérsékletét. Az emulzió koncentrációját a hőmérséklettel kompenzált törésmutató-értékből számítjuk ki. A refraktométer mérőfejébe beépített elektronika digitális kommunikációs vonalon küldi át a mért paramétereket a saját vezérlőegységének, amely egy miniszámítógép, grafikus kijelzővel és kezelőszervekkel egybeépítve. Ez a vezérlőegység kapcsolja a mintavevő szivattyút és a nagynyomású prizmaszószivattyút, valamint annak mágnesszelepét.

A saját fejlesztésű fajlagos vezetőképesség szenzorunkat közvetlenül a refraktométer-mérőfejébe építettük be a prizma köré. A vezetőképesség-szenzor két koncentrikus saválló acélgyűrűből áll, amelyek elektromos kivezetéseit saválló acélhuzalal vezettük ki a mérőfejből egy tömítődugón keresztül, hogy csatlakoztathassuk a mérőelektronikához. A mérőelektronika többszörös jelátalakítás után a vezetőképességgel arányos 0–20 mA-es kimeneti jelet ad, amelyet a digitalizálást követően egy mikrovezérlő dolgoz fel.

A refraktométer prizmájára bizonyos idő (8–10 óra) elteltével lerakódó emulzióréteg lehetetlenné teszi a törésmutató pontos mérést, ezért a megfelelő működéshez



3. ábra. Az emulziókezelő készülék egy CNC köszörűgép emulziótartálya mellé telepítve: 1 – emulziókezelő készülék; 2 – emulziótartály; 3 – CNC köszörűgép

szükséges egy prizmatisztító rendszer közbeiktatása. A tisztítást egy nagynyomású szivattyú végzi; ez a hálózati alacsony nyomású vízből állít elő 30 bar nyomású vizet, amelyet egy kis átmérőjű fúvóka közvetlenül a prizmára irányít. A nagynyomású szivattyú és a fúvóka közé beépítettünk egy vízmelegítő tartályt, amelyben kb. 500 cm³ vizet tudunk felmelegíteni 60 °C-ra. Ezzel a meleg vizes mosatással hatékonyabban lehet a prizmára rakódott szennyeződést eltávolítani. A refraktométer-fej tisztásához felhasznált vizet visszakeringetjük a HK-tartályba, mivel ez olyan csekély mennyiség, hogy nem befolyásolja a koncentrációt. A vezetőképesség mérőelektrodjait azért építettük a refraktométer-fejbe, hogy a prizmamosással együtt azokat is rendszeresen tisztíthassuk. A nagynyomású szivattyút és a bejövő víz mágnesszelepét a vezérlőegység egy időzítővel egybeépített nagy teljesítményű kapcsolón keresztül vezérli.

A nagyobbik szekrényben található mintavevő szivattyú a pH-elektrod mérőkörében keringeti a mintát. A pH-elektrod hagyományos kombinált üvegelektrod, amelyet egy átfolyó cellában helyeztünk el. Az elektrod egy gyári transzmitterhez kapcsolódik, amely LCD kijelzőn megjeleníti a mért eredményt, valamint egy analóg 4–20 mA-es kimeneten keresztül továbbítja azt a mikrovezérlőnek. A HK-emulzió részleges bomlása miatt a pH-mérőcella tisztítása is szükséges bizonyos időközönként, ehhez egy másik membránszivattyúval 0,3 M koncentrációjú KCl-oldatot keringetünk a

cellán keresztül. A minta és a tisztítófolyadék közti váltást mágnesszelepekkel oldottuk meg, amelyek vezérlése a szivattyúk működésével van szinkronizálva. A tisztítófolyadék keringetésekor a KCl-oldatot nem engedhetjük vissza az emulziótartályba, ezt a tisztítás után hulladékgyűjtő tartályba vezetjük el.

A mikroorganizmus-sejtszám meghatározásához teljesen automatizált, kataláz módszerrel [1] alapuló mérőegységet építettünk. A módszer a hidrogén-peroxid katalitikus bomlása során keletkező oxigén mennyiségének a mérésén alapszik, ahol a katalizátor szerepét a különböző mikroorganizmusokban (baktériumok, gombák) megtalálható kataláz enzim tölti be. Így a fejlődő oxigén mennyisége (nyomása) arányos a mikrobasűrűséggel. A bio-mérőcella központi eleme egy kicsi üvegreaktor, amelyen számos tömlőcsatlakozó csonk található. A reaktorba való folyadékadagolást és leürítést kisméretű perisztaltikus szivattyúkkal végezzük. A perisztaltikus szivattyúk tengelyeit precíz, nagy szögfelbontású léptetőmotorok forgatják meg, amelyeket a gyári vezérlők hajtanak. A léptetőmotor-meghajtókat az általunk tervezett elektronika vezérli. A biológiai aktivitás mérésének szekvenciája mindig a reaktor tisztításával kezdődik, ilyenkor a tisztítófolyadék szivattyúja folyamatos kevergetés mellett teletölti a mérőcellát a pH-mérésnél is használt KCl-oldattal. A keverést egy mágneses keverő végzi. A tisztítófolyadék leürítése után a mintavevő szivattyú egyszer az emulzióval is átöblíti a reaktort, és csak

ezután tölti fel pontosan kimért mennyiségű mintával a méréshez. A következő lépésben a két reagensadagoló hidrogén-peroxidot és EDTA-oldatot adagol a mintához folyamatos keverés mellett. A mintához adagolt EDTA az emulzióban lévő fémionokkal stabil komplexet képez, így megakadályozza, hogy azok katalizálják a H₂O₂ bomlását. Adott idő elteltével a légmentesen zárt reaktorban megmérjük a keletkezett gáz nyomását a cellához kapcsolt precíziós nyomásmérő szenzorral. A mérés végén egy szeleppel kiegyenlítjük a nyomást a cellában, és a folyadékot a hulladékértartályba szivattyúzzuk.

A HK-emulzió koncentrációjának és térfogatának szinten tartása két adagoló membránszivattyú feladata. A víz adagolását egy nagyobb teljesítményű (75 l/h) szivattyú látja el, míg a koncentrációt adagolásához elegendő volt egy kisebb teljesítményű (11 l/h) szivattyú. A kiszolgálható legnagyobb emulziótartály térfogatát az adagolószivattyúk teljesítménye szabja meg, ez a jelenleg használt szivattyúk mellett kb. 1 m³, ami azt jelenti, hogy a berendezés nagy teljesítményű fémforgácsoló állomások kiszolgálására is alkalmas. A két szivattyú nyomóágában egy multifunkciós szelep található, amely azt biztosítja, hogy a szivattyúk egy-egy lökete mindig azonos térfogatú legyen. Az egy-egy víz- és koncentrátumlökethez tartozó térfogatok ismeretében egyszerűen kiszámolható, hogy hány egységnyi víz és koncentrátum kell ahhoz, hogy az emulzió koncentrációja és szintje az előírt intervallumban maradjon. A két folyadék külön tömlőkön jut el az emulziótartályhoz, ahol egy keverőcsövön keresztül adagoljuk be a rendszerbe.

A vezérlőszoftver

A C programozási nyelven írt vezérlőprogramot az EKK beágyazott számítógépe futtatja Linux operációs rendszer alatt [5]. A program főbb feladatai a következők: utasításokkal vezérli a beavatkozó szerveket (pumpák, szelepek, fűtés) a PLC-n és relémodulokon keresztül, fogadja és feldolgozza a szenzorok felől érkező nyers mérési adatokat, időzíti az egyes folyamatok lefutását, archiválja az eredményeket és 3G hálózaton keresztül kapcsolódást tesz lehetővé külső eszközökkel. A vezérlőprogram állapotgépként hajtja végre az egyes feladatokat. A szoftver két adatfájlból veszi a működéshez szükséges paramétereit.

A működési paramétereket leíró fájl a következőket tartalmazza: az aktuálisan



használt HK-koncentrátum típusát, az emulziótartályban tartani kívánt folyadék szintjét (az ultrahangos távolságmérő szenzor nyakától a folyadék felszínéig mért távolságból számítva) és térfogatát, a folyadékszint megengedett túsúsát, a tartani kívánt koncentrációt térfogatszázalékban, a megengedett koncentrációűrtést százalékosan és az egységnyi magasságváltozásokhoz tartozó folyadék-térfogatváltozás értékét. Továbbá ebben a fájlban tilthatjuk le a koncentrátumadagolást és állíthatjuk be a különböző feladatok periódusidejét, pl. biológiai mérés, pH-mérő cella tisztítása, nagy nyomású prizmamosság és a mintafolyadék keringetésének ideje.

A konfigurációs fájlokban találhatóak a kalibrációs paraméterek, ilyen például a HK-emulzió koncentrációja, a törésmutató és a hőmérséklet függvényét megadó kifejezés együtthatói. Továbbá egyéb állandó paraméterek, úgymint a pH-mérőcella tisztítása és a biológiai aktivitás mérése után keletkező hulladék térfogata.

A vezérlőprogram minden mért értéket és paramétert naplóz, amelyekből különböző szöveges fájlok készülnek. Dátum szerint külön fájlba kerülnek az emulzió fontosabb mért paraméterei (a tartani kívánt szinthez viszonyított folyadékszint, pH, fajlagos elektromos vezetőképesség, hőmérséklet és koncentráció), egy külön fájlba a biológiai aktivitás méréseinek eredményei, egy harmadik fájlban pedig a beadagolt folyadékmennyiségeket archiválja a program. Külön naplófájl készül a méréssel, vezérléssel kapcsolatos eseményekről, figyelmeztetésekről és hibáüzenetek-

ről. Minden fájl a számítógép merevlemezén kerül tárolásra. A vezérlőprogramot biztonságos SSH protokollon keresztül indíthatjuk vagy állíthatjuk le, valamint kérdezhetjük le a mérési eredményeket vagy működési paramétereket tartalmazó szöveges fájlkat.

Kenéstechnikai Információs Rendszer (KEN) szoftver

A Kenéstechnikai Információs Rendszer egy adatbázis, amelyet az ENI Hungária Zrt. fejlesztett ki. Az adatbázis az emulziókezelő készülék és más mérőberendezések által rögzített adatokat, valamint a laboratóriumi vizsgálatok eredményeit tartalmazza. A KEN szoftver biztonságos, vezeték nélküli VPN hálózaton keresztül lefoglalja az EKK merevlemezéről a mérési adatokat tartalmazó szöveges fájlkat, majd adatbázisba szervezi őket. Az adatbázishoz csak a megfelelő jogosultsággal rendelkező felhasználók férhetnek hozzá internetböngésző segítségével. Ezen a felhasználói felületen a HK-emulzió állapota közel valós időben látható a különböző grafikonokon. A naprakész adatok alapján még időben észlelni lehet, ha valami kiugró értéket mér a készülék, ilyen esetben a kezelőszemélyzet eldöntheti, hogy szükséges-e emberi beavatkozás a paraméterek megfelelő értékre való beállításához, pl. pH-növelő vagy biocid adalék hozzáadása az emulzióhoz stb. A programból azt is szemmel lehet tartani, hogy mennyi koncentrátum fogyott el a tartályból, így előre kalkulálható, hogy mikor esedékes a tartály utántöltése.

Eredmények

A mérőberendezés több vállalat forgácslóműhelyében is teljesített hónapokig tartó, sikeres próbaüzemet. A **3. ábrán** az emulziókezelő készülék látható egy CNC köszörűgép mellé telepítve.

A **4. ábra** 15 napos működési periódust mutat be; az EKK egy acél alkatrészeket megmunkáló CNC gép emulziótartálya mellé volt telepítve. A grafikonokon látható, hogy az emulziókezelő készülék megfelelően el tudta látni a feladatát. Az ábrán a legfelső diagram a beadagolt víz (vékony piros vonal) és koncentrátum (vastag fekete) mennyiségét mutatja. Az alatta lévő grafikonokon az emulzió mért paramétere láthatóak az idő függvényében, amelyek főntről lefelé haladva a következők: koncentráció (előírt érték: 5%), folyadékszint-eltérés az előírt értéktől, elektromos vezetőképesség, pH, hőmérséklet. ●●●

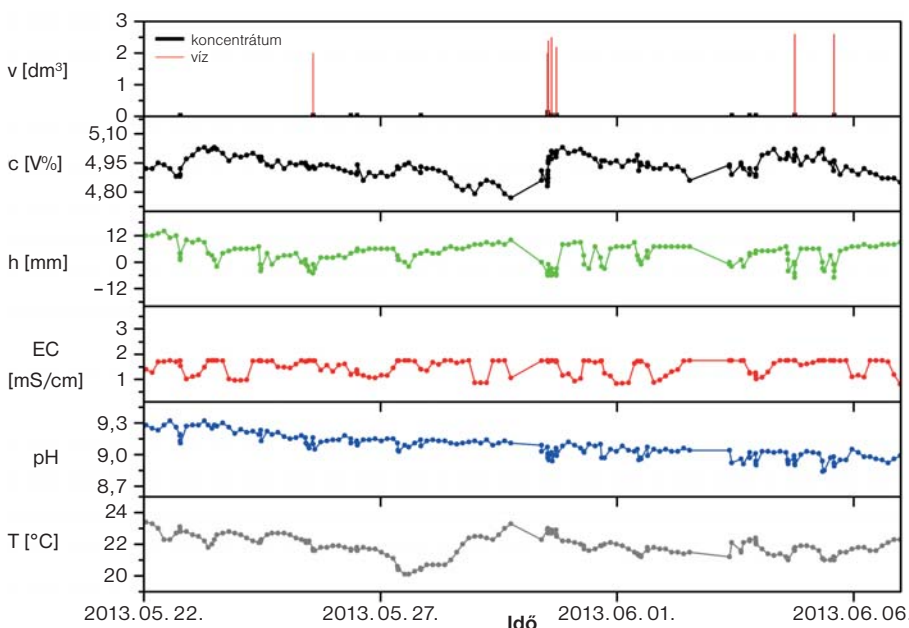
KÖSZÖNETNYILVÁNTÁS

Ezúton is szeretnénk köszönetet mondani volt kollégáinknak, Csuta Péternek és Máté Zoltánnak, akik részt vettek az emulziókezelő berendezés megépítésében és a vezérlőprogram fejlesztésében. A kutatómunka a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0071 jelű projekt részeként az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

IRODALOM

- [1] J. P. Byers, *Metalworking Fluids*, Taylor & Francis, Boca Raton, 2006.
- [2] M. Kozma, G. Ertsey, *Gép* (2004) 55, 48.
- [3] I. Juhász., Z. Kecskés, *MetalForum* (2006) 84, 22.
- [4] W. Bolton, *Mechatronics*, Pearson Education, Harlow, 2011.
- [5] P. Csuta, Z. Máté, I. Szalai, A. Nagymányai, J. Takács, *Mérő-szabályzó berendezés hűtő-kenő emulziók fiziko-kémiai tulajdonságainak vizsgálatára*, Műszaki Kémiai Napok, Veszprém, 2008.

4. ábra. 15 napos működési periódus során rögzített adatok



ÖSSZEFOGLALÁS

Molnár Gergely, Horváth Barnabás, Szalai István, Nagymányai Antal, Takács János:
Online mérő-szabályzó berendezés vízalapú hűtő-kenő emulziók tulajdonságainak vizsgálatára

A közlemény olyan online mérőberendezést mutat be, amelyet forgácslógépek emulziótartályai mellé telepíthetünk, hogy az teljesen automatizált módon vizsgálja a felhasznált hűtő-kenő folyadék fizikai kémiai tulajdonságait. A készülék nemcsak passzív mérőberendezés, hanem koncentrátum és víz adagolásával képes szinten tartani a rendszerben lévő emulzió térfogatát és koncentrációját. A mérési eredményeket és egyéb paramétereket mobil interneten keresztül érhetjük el, valamint ezek az Eni Hungária Zrt. adatbázisában is eltárolásra kerülnek.

Hargittai István

Felfedezések összefonódó történetekkel¹

Molekulageometria: a VSEPR-modell

Kevés olyan modell kerül bele a középiskolai tankönyvekbe, amelyek még él a megalkotója. A vegyértékhéj-elektronpár tasztítási (VSEPR, valence shell electron pair repulsion) modell azonban ezek közé tartozik. Ronald Gillespie (1. ábra) publikálta először,



HARGITTAI ISTVÁN FELVÉTELE

1. ábra. Ronald J. Gillespie az 1980-as években, Austin, Texas

akinek az idén ünnepezzük a kilencvenedik születésnapját.

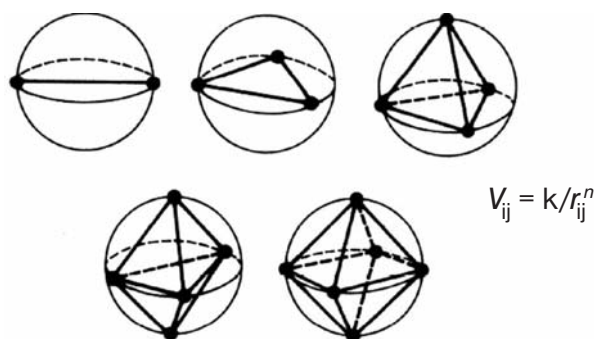
A kémikusokat régóta foglalkoztatja, milyen geometriájú molekula képződik, ha egy (központi) atomhoz újabb atomok kapcsolódnak. A molekula formálódásában döntő szerepet játszik „a térért való küzdelem”. Ezt a kijelentést, természetesen, kvantitatívban is megfogalmazhatjuk. Képzelnünk el egy gömbfelületet, amelyen pontokat jelölünk ki – kettőt, hármat és így tovább –, s keressük azt az elrendeződést, azt a geometriát, amely maximalizálja a pontok közötti

távolságot, mert a térkihasználás akkor a legjobb, ha a pontok közötti távolság maximális. A VSEPR-modell arra a feltevésre épül, hogy egy molekula geometriáját a központi atom vegyértékhéjában levő, kötő és nemkötő elektronpárok közötti tasztítások együttesen szabják meg. További feltételezés, hogy a központi atom vegyértékhéja a molekulában megtartja gömbszimmetriáját, és az összes elektronpár azonos távolságra esik a központi atomtól (2. ábra). A tasztításokból adódó V_{ij} potenciális energia,

$$V_{ij} = k/r_{ij}^n,$$

ahol k állandó, r_{ij} az i és j pont közötti távolság; n értéke „erős” tasztítások esetén nagy, „gyengék” esetén kicsi.

Az n kitevő értékét nem ismerjük, csak annyit tudunk róla, hogy nagyobb annál, mint ami a pusztán elektrosztatikus tasztításnak felelne meg. Ebben a modellben az a nagyszerű, hogy egy



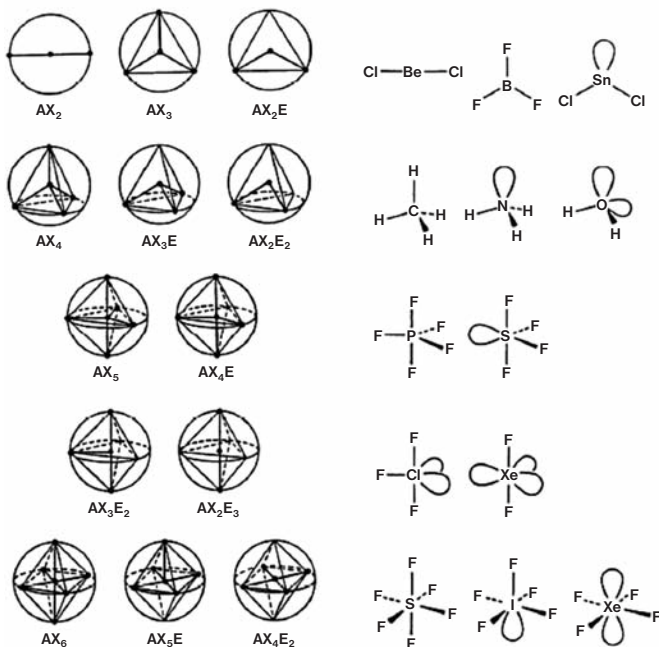
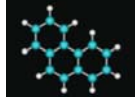
2. ábra. „Pontok” a gömbfelületen és a VSEPR-modell szerinti potenciális energia

bizonyos érték után nem is kell tudnunk, mekkora az n , mert ha a pontok közötti távolságot maximalizáljuk, mindig ugyanazok az alakzatok keletkeznek.

Gillespie és kollégája, Ronald Nyholm 1957-ben alkotta meg a modellt. Akkor már tudták, hogy az elektronpárok száma meghatározza a geometriát: tehát ha van egy központi atom, amelyhez más atomok kapcsolódnak, és megszámloljuk az elektronpárok, vagyis a kötések számát, meg tudjuk állapítani a molekula alakját. Ez ma triviálisnak tűnik, de sok évtizeddel ezelőtt egyáltalán nem volt az. Gillespie-ék idejében az meg pláne nem volt magától értetődő, hogy nemcsak a kötő, hanem a nemkötő elektronpárokat is figyelembe kell venni a molekulageometria jóslásakor. A VSEPR-modellnek éppen az az érdeme, hogy a nemkötő elektronpárok szerepét is felismeri. Gillespie és Nyholm 1957-ben nagy összefoglaló dolgozatot írt; ebben táblázatokat is közöltek, amelyekben nagyon sokféle molekulára megadták, hogy a szabályszerűségek alapján milyen lehet a geometria. Ma már mindezt a 3. ábrával szemléltetjük.

Ábránkon látjuk például, hogy a berillium-diklorid lineáris, a bór-trifluorid trigonális, síkbeli molekula. Az ón-diklorid a nemkötő elektronpár miatt azonban nem lineáris. A következő sorból is kitűnik, hogy a nemkötő elektronpár befolyásolja a molekulageometriát. Most nézzük a kén-hexafluoridot: szabályos oktaéder – olyan, mintha két tetragonális piramist összeragasztanánk. Ha az egyik kén-fluor kötést helyettesítem egy nemkötő elektronpárral, akkor ez bármelyik helyzetet elfoglalhatja, mert egy szabályos oktaéderben minden csúcs egyenértékű. De ha még egy kötést helyettesítünk egy újabb nemkötő elektronpárral, akkor az abba a helyzetbe kerül, amelyik térbelileg a „legkényelmesebb”: az elsővel ellentétes pozíciót vesz fel. Most térjünk vissza az ötös esetre: ekkor két elrendezés, a trigonális bipiramis és a tetragonális piramis nagyon hasonló energiájú. A foszfor-penta-

¹ Silberer Vera írása Hargittai Istvánnak a BME VBK-n – Nyulási László professzor „Válogatott fejezetek a szervetlen kémiából” című tárgya keretében – 2014. március 12-én tartott előadásán készített jegyzetek alapján.



3. ábra. A kötő és nemkötő elektronpárok számából következő molekulageometria

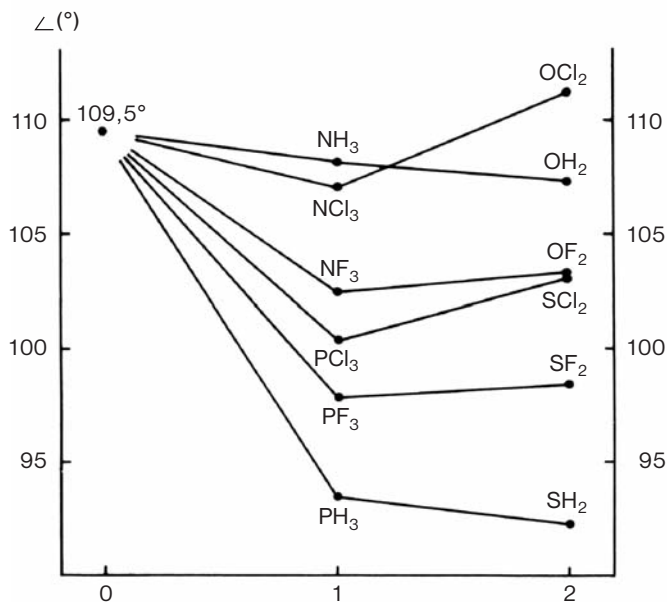
fluorid trigonális bipiramist alkot. Ha egy kötő elektronpárt nemkötőre cserélünk, nem mindegy, hogy ekvatoriális vagy axiális helyzetbe kerül-e. Ha azonosak a központi atom körül atomok, az ekvatoriális atomok között 120 fok a kötésszög, az ekvatoriális és axiális atomok között 90 fok. Mivel a kölcsönhatások erőssége gyorsan változik a távolsággal, a 90 fokos kölcsönhatás a meghatározó. Ilyenből kettő van minden ekvatoriális helyzetben, és ehhez járul két 120 fokos kölcsönhatás (a másik két ekvatoriálissal). Az axiális helyzeteknek viszont három 90 fokos kölcsönhatásuk van, és egy 180 fokos (a másik axiálissal). Az ekvatoriális helyzet tehát kicsit „lazább”, mint az axiális, ezért a kötő elektronpárnál nagyobb térigényű nemkötő elektronpár ekvatoriális helyzetbe kerül, sőt, a második meg a harmadik nemkötő elektronpár is, ha van ilyen. Ezért lesz például a xenon-difluorid lineáris, és nem azért, amiért a berillium-diklorid az, hiszen a xenon vegyértékhéjában lévő tíz elektron (nyolc a xenontól és összesen kettő a két fluortól) öt elektronpárt képez; ez az öt elektronpár trigonális bipiramisos elrendezésű, és a nemkötő elektronpárok mind ekvatoriális helyzetbe kerülnek. A nemkötő elektronpárhoz hasonlóan a kettős kötés is nagyobb térigényű, mint az egyes kötés, tehát kettős kötés jelenléte esetén a trigonális bipiramisos konfigurációban a kettős kötés is ekvatoriális helyzetben lesz.

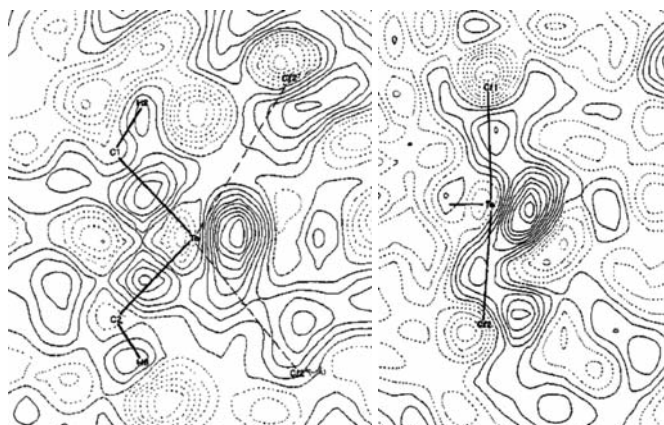
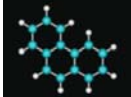
Térjünk vissza a metán, ammónia, víz sorához – és itt kezdődik az első történet. Az ELTE-n kezdtem a tanulmányaimat, aztán a Moszkvai Állami Egyetemen fejeztem be, ahol – szerencsémre – sokkal több matematikát, fizikát hallgattam, mint itthon. Hátrányt jelentett viszont, hogy a hatvanas években, amikor ott tanultam, az ideológia még beszívárgott az oktatásba, és akármilyen furcsán hangzik, nem tanultunk az elektronegativitásról. Pedig a molekulageometria kialakulásában annak is szerepe van: minél elektronegatívabb egy ligandum, annál inkább magához húzza az elektronfelhőt, így annak kisebb a térigénye a központi atom környezetében. Ezért ha egy elektronegatív atomot kicserélek egy kevésbé elektronegatívra, akkor a kötés nagyobb térigényű lesz, az új atom ekvatoriális helyzetbe kerül. Tehát az elektronegativitás fogalma is nagyon fontos a szerkezetek

közötti tájékozódásban. Nem sokkal azután, hogy elkezdtem a hazai pályafutásomat a molekulászerkezetek meghatározása területén, előadást tarthattam egy amerikai egyetemen. Ismertettem azokat a viszonylag egyszerű szerkezeteket, amelyeket meghatároztunk, majd valaki megkérdezte, hogy nem próbáltuk-e értelmezni ezeket Gillespie modelljével. Be kellett vallanom tájékozatlanságomat. Utána egész éjjel a könyvtárban ültem és a modellt tanulmányoztam, színes rajzokat készítettem, és hazaküldtem őket újdonsült feleségemnek, akivel együtt dolgoztunk.

Amerikából hazatérve azt tapasztaltam, hogy itthon nem közismert ez a jól használható modell. Elhatároztam, hogy írok egy népszerűsítő cikket a *Természet Világába*. A legegyszerűbb példákat akartam felhozni: a metán, az ammónia és a víz esetével kezdtem. Itt rendre 109, 107 és 104 fok a kötésszög. Más hasonló sorozatokat is kerestem, például a metán, nitrogén-trifluorid, oxigén-difluorid hármast, és ott más trendet találtam. Hamarosan kiderült, hogy épp a legegyszerűbb molekulák között vannak olyanok, amelyek nem követik a modell jóslatait (4. ábra). Mit csinál ilyenkor az ember? Írtam Gillespie professzornak, hogy nem működik a modellje. Nagyon kedvesen válaszolt: nem támadt rám, hogy valamit rosszul csináljak, hanem megkért, hogy ne siessem el a publikálást, mert most ad ki egy könyvet a moderről, s a cikk befolyásolná a kötet sikerét. Ez 1971-ben történt. Nem ennek a kérdésnek a megoldása volt a munkám, de foglalkoztatott, és nyolc év múlva értettem meg, milyen hatás érvényesül ezekben a kis molekulás sorozatokban: a nemkötő elektronpárok a kötésszögnél nagyobb szöget zárnak be egymással és a kötő elektronpárokkal is. Ekkor már elég jó kvantumkémiiai számításokat engedtek meg a számítógépek, és egy kiváló magyar kvantumkémikussal, Pulay Péterrel éppen ugyanazon az amerikai egyetemen voltunk vendégkutatók: ő vállalkozott a számításokra. Így kvantumkémiiai alátámasztást nyert az, amivel kiegészítettem Gillespie modelljét. 1979-ben – amerikai kollégákkal együtt – írtunk egy cikket a *Journal of the American Chemical Society*-ba, és felhasználtuk azt az ábrát, amely évekkorábban az ismeretterjesztő *Természet Világában* jelent meg először...

4. ábra. Az X–A–X kötésszögek a nemkötő elektronpárok számának függvényében (A jelöli a központi atomot, X a többi). Ezt az ábrát az 1970-es évek elején a *Természet Világában* jelentettem meg





5. ábra. $(\text{CH}_3)_2\text{TeCl}_2$ – elektronsűrűség-differencia térképek (R. F. Ziolo, J. M. Troup, © 1983, American Chemical Society)

Hogyan demonstrálható kísérleti adatokon a modell helyessége? A legszemléletesebbnek a differencia-térképet tartom (5. ábra). Ha egy molekula röntgendiffrakcióval mért elektronsűrűség-eloszlásából kivonjuk az egyes atomok (számított) elektronsűrűség-eloszlását, akkor különbségtérképet kapunk. Nézzük például a $(\text{CH}_3)_2\text{TeCl}_2$ -vegyületet. A tellúrhoz kapcsolódó négy atom egy-egy elektronnal és a tellúr vegyértékéjében összesen tíz elektronnal rendelkezik, ami öt elektronnak felel meg. Ez trigonális bipiramisos geometriához vezet, de csak négy irányban képződik kötés, az egyik ekvatoriális helyzetbe nem kötődő elektronnak kerül. Ezt látjuk az ábrán is, két metszetben.

Egy idő múlva Ronald Gillespie felvetette, hogy együtt írhatnánk új könyvet a VSEPR-modellről. Ez 1991-ben készült el. Adigra ő már nyugdíjba vonult, Észak-Amerika keleti partja mentén vitorlázott. A küldeményeimet mindig úgy kellett időzítenem, hogy ő éppen egy kikötőben legyen, amikor megérkeznek. Hosszú hónapokig készült a könyv, amelyet főként én írtam, ő pedig lektorált – rengeteget tanultam tőle. Például azt, hogy minden oldalnak pedagógiai szempontból is jónak kell lennie, semmit sem szabad elsumákolni, mindent meg kell magyarázni. A könyv sikert aratott, tavalyelőtt megjelent egy új kiadása (6. ábra).

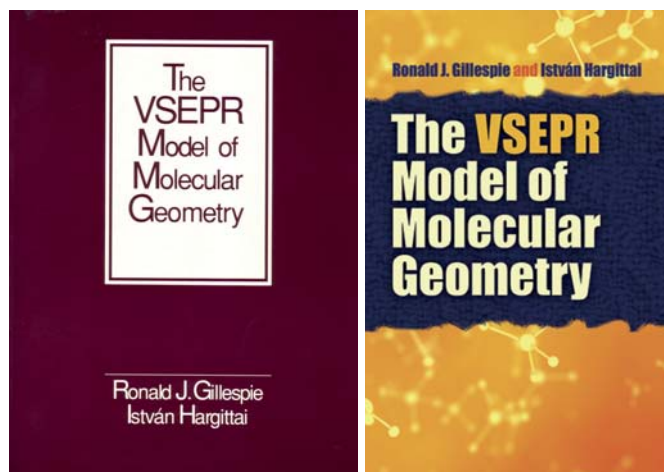
Az első nemesgáz-vegyület

A periódusos rendszer utolsó oszlopának elemeit régen inert gázoknak hívták. 1962 után nemesgázra kellett változtatni a nevüket: ebben az évben állították elő az első nemesgáz-vegyületet. Ezzel a szintézissel már az 1930-as évek elején is próbálkoztak a Kaliforniai Műszaki Egyetemen, ahol Linus Pauling dolgozott. Ő javasolta egy szervetlenkémikus-kollégájának, Don M. Yostnak, hogy „eressenek össze” xenont fluorral, és állítsanak elő xenon-fluor-vegyületet. Az „inert gáz”-ok közül Pauling a xenont tartotta a legalkalmasabbnak a vegyületképzésre. A kísérlet azonban kudarcot vallott.

1962-ben egy Neil Bartlett nevű brit kémikus, a kanadai Vancouver városának British Columbia Egyetemén előállította a platina-hexafluorid oxidját. Nem ezzel a céllal indította a kísérletet, de végül ezt a vegyületet kapta, ami szintén érdekes volt. Úgy gondolta, hogy a platina-hexafluorid ionizálhatta az oxigénmolekulát, O_2^+ -ion keletkezett, és ez kapcsolódott a negatívra váló platina-fluor együtteshez. Bartlett ebben az időben szervetlenkémia-előadásokat tartott, ahol szóba került az ionizációs potenciál. Ekkor jutott eszébe, hogy más olyan atomokat is keres, amelyek-

nek nagyjából egyezik az ionizációs potenciáljuk az oxigénével. (Mengelejev hasonló módon jutott el a periódusos rendszeréhez: olyan elemeket akart bemutatni a hallgatóinak, amelyek analóg tulajdonságokkal rendelkeznek – az első kezdetleges periódusos rendszer akkor született, amikor „rendbe tette” az elemeket.) Neil Bartlett arra jutott, hogy a xenon ionizációs potenciálja nagyon hasonlít az oxigénmolekula ionizációs potenciáljához, és elhatározta, hogy a xenont és a platina-hexafluoridot is összeereszti: így keletkezett a világ első inertgáz-vegyülete, a XePtF_6 , és azóta nevezik inkább nemesgázoknak az addig inert gázoknak nevezett elemeket.

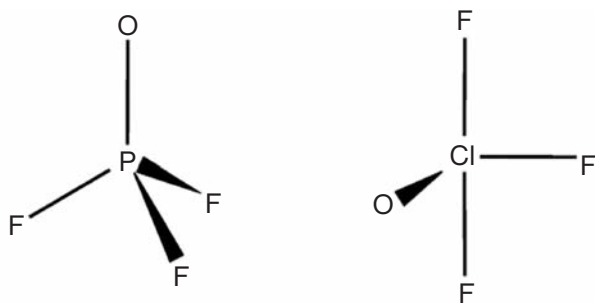
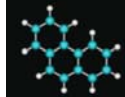
Évtizedekig senki sem tudott inert gázokkal vegyületet előállítani, de amikor Bartlettnek sikerült, a hír hallatán néhány hónapon belül négy vagy öt kutatócsoport is nemesgáz-vegyületet állított elő a világ legkülönbözőbb pontjain. Ha tudjuk, hogy valami létezik, könnyebb megtalálni, mint amikor azt gondoljuk, hogy nem létezik. Bartlett a felfedezése nyomán arra is rájött, hogy Yostnak miért nem sikerült előállítania a xenon és a fluor összeeresztésével vegyületet. Azért, mert a kísérletet légkondicionált laboratóriumban végezte. Ha a felszerelését kivitte volna a kaliforniai napfényrel elárasztott udvarra, biztosan lejátszódott volna a reakció.



6. ábra. A Gillespie–Hargittai-kötet 1991-es és 2012-es kiadásának borítója

Még 1962-ben sorra jelentek meg publikációk a xenon-fluoridok előállításáról. Hogyan kapcsolódik ez a történet a VSEPR-modellhez? Amikor először állítottak elő XeF_6 -molekulát, ránézésre természetesnek tartották, hogy szabályos oktaéderes geometriájú. Nemcsak megtippelték, hanem meg is határozták ezt a szerkezetet – spektroszkópiai és diffrakciós módszerrel –, így kísérleti adatokkal is igazolták a szabályos oktaéderes szerkezetet.

És akkor jött Gillespie, aki azt mondta, hogy a xenonnak már eleve nyolc elektron van a vegyértékéjében, a hat fluor egy-egy elektronnal pedig összesen tizenhárom lesz. Ebből hét elektronnak lehet kötettség; marad egy nem kötődő elektronnak. A VSEPR-modell szerint tehát a xenon-hexafluoridnak nem lehet szabályos oktaéderes szerkezete. A spektroszkópikus és a diffrakciós szakemberek visszamentek a kísérletükhöz, s most már mindannyian torzult oktaéderes szerkezetet állapítottak meg. Ettől Gillespie és a modell ázsiója nagyon megnőtt, még azok előtt is, akik addig túl egyszerűnek tartották a modellt, hiszen egy rajzocskával ki lehet okumálni egy molekula geometriáját, ha a



7. ábra. Az OPF_3 és az OClF_3 molekula geometriája

molekulában van egy központi atom. Gillespie maga is szeretne volna, ha komoly alátámasztást kap a modellje, de a különböző kiegészítések után elveszett a könnyedsége. Egy modell nagyon sok lehetséges effektus közül egyet vagy keveset választ ki, és az összes többit elhanyagolja. De mivel csak egyre vagy kevesre koncentrálnak, egyszerű eszközökkel ad nagyon jó előrejelzéseket. Abban a pillanatban, amikor elkezdjük sokféle effektusra kiterjedő, bonyolult rendszerré változtatni, elmélettől alakul át, és más kontextusba kerül. Egy modellnek elég, ha egyszerű.

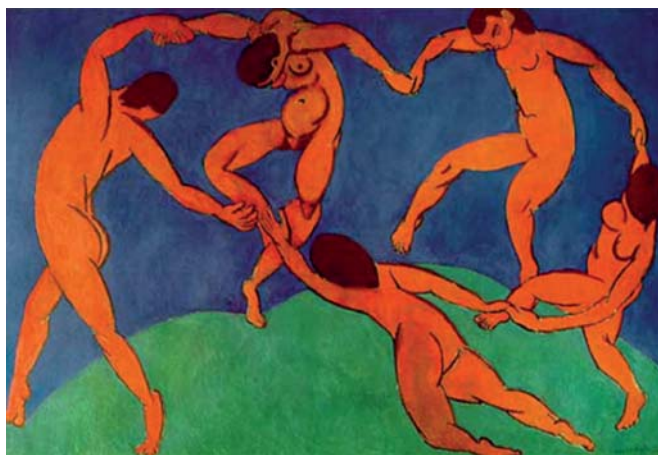
Mutatok még egy példát (7. ábra). Az OPF_3 -molekulában van három foszfor-fluor és egy foszfor-oxigén kötés. Milyen lehet a szerkezete? A foszfornek öt elektronja van a vegyértékhéjában. Ehhez hozzáadódik három a fluortól, kettő az oxigéntől, az összesen tíz, de az oxigénkötés igénybe vesz négy elektront, mert kettős kötés. Tehát nem marad nemkötő elektronpár, és ha elektronpárok helyett elektrontartományokról beszélünk, akkor azt mondhatjuk, hogy négy elektrontartomány van, ezért (torzult) tetraédres szerkezet alakul ki. Ezt a vegyületet már régóta ismerték, viszont az 1960-as években előállították a hasonló tapasztalati és szerkezeti képletű OClF_3 -molekulát és rögtön felvették a rezgési spektrumát. Eleve feltételezték, hogy az OClF_3 -molekula geometriája az OPCl_3 -molekula geometriájához hasonlít, és ezt a felvett spektrumok igazolták. A spektrum annál bonyolultabb, minél kisebb a molekula szimmetriája. Az OPCl_3 spektruma egyszerű volt, mert ennek a molekulának elég nagy, hármas a szimmetriája. Az OClF_3 spektruma nagyon hasonlított az OPCl_3 molekula spektrumához. Úgy gondolták, hogy az utóbbinak ugyanúgy hármas szimmetriája van, mint a foszforszármazéknak.

És akkor megint jött Gillespie, aki azt mondta, hogy a klór vegyértékhéjában eleve hét elektron van, hozzáadunk még kettőt az oxigéntől meg hármat a három fluortól, az tizenkettőt. Ebből az oxigén kettős kötésre esik négy, a három fluoros kötésre hat, és marad egy magános, nemkötő elektronpár. Ez azt jelenti, hogy öt elektrontartománnyal kell számolnunk, amihez trigonális bipiramisos geometria tartozik, amelyben mind a kettős kötés, mind a magános elektronpár nagyobb térigényű, mint az egyszeres kötések kötőpárjai. A klór-oxigén kötés és a magános elektronpár is ekvatoriális helyzetet foglal el. Ennek a molekulának már nincs hármas szimmetriája, hanem csak egy tükörsíkja van, ami jóval kisebb szimmetria. Ennek megfelelően a spektrumának bonyolultabbnak kell lennie annál, mint amit közöltek. Kiderült, hogy korábban csak egy bizonyos tartományban vették fel a spektrumot, és ahogy kitágították ezt a tartományt, a klórvegyület spektrumában további rezgési átmenetek jelentek meg, a foszforvegyületében viszont nem. Ez volt a másik híres eset, amelyik megmutatta, hogy Gillespie modellje még a kísérleti eredmények felülbírálásában is komoly eszköz lehet.

Kétféle idő

Egy molekula szerkezetének meghatározásakor a különböző fizikai módszerek eltérő eredményeket adhatnak. Például a foszfor-pentafluorid geometriája trigonális bipiramisos. A tetragonális piramis azonban energetikailag nem sokkal kevésbé előnyös, mint a trigonális bipiramis, és egy részletesebb vizsgálat azt mutatja, hogy a molekula ebben a tetragonális piramisos állapotban is tölt bizonyos időt. Ha a mérésünk elég hosszú ideig tart, akkor ez a tetragonális piramisos állapot is jobban érzékelhető. Ezért fontos, hogy egy-egy szerkezet mennyi ideig „él”, de az is fontos, hogy méréskor mennyi ideig „nézzük” ezt a szerkezetet. A diffrakciós kísérletekben a mérésel járó kölcsönhatás 10^{-18} – 10^{-20} másodpercig tart. A rezgési spektroszkópiában ez az idő 10^{-12} másodperc nagyságrendű. Az NMR-spektroszkópiában 10^{-5} – 10^{-6} másodperc a jellemző időtartam. Ha tehát NMR-spektroszkópiával vizsgálunk egy molekulát, többféle geometriát „látunk”, és tulajdonképpen azoknak az átlagát észleljük, amelyeket a diffrakciós kísérletekben kaphatunk el. A szerkezet élettartamának a mérési kölcsönhatás időtartamának az összehasonlítása nagyon fontosá válik, amikor a különböző módszerrel meghatározott szerkezetek eltérnek egymástól.

Nézzük meg Matisse festményén az öt táncost (8. ábra). Képezzük el, hogy tánc közben valaki felugrik, visszakerül a padlóra, aztán felugrik a következő és így tovább. Úgy tűnik, mintha a mozgás körbemenne, holott mindenki a helyén marad: ezt hívják pszeudoforgásnak. Ha ezt a mozgást olyan fényképezőgéppel szeretnénk felvenni, amelyikkel hosszan kell exponálnunk, mert nem túl érzékeny a filmünk, akkor elmosódott képet kapunk, ahol mindegyik táncos kicsit felemelkedik a padlóról. Ha viszont

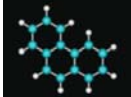


8. ábra. Matisse: A tánc

nagyon érzékeny a filmünk és rövid ideig exponálunk, elkapjuk azt, amikor az egyik táncos van fönt és a másik négy lent. A ciklopentán esetében az egyik szerkezetmeghatározás azt jelezte, hogy négy atom van egy síkban, egy pedig kitér a síkból, egy másik leírás szerint viszont fluktuáló szerkezetű.

Oláh György és Ronald Gillespie

Hasonlóan indult a pályájuk. Oláh György (9. ábra) Budapesten végzett, a Műegyetemen, és itt kezdte el azokat a kutatásokat, amelyek a Nobel-díjához vezettek. 1956 után elhagyta az országot, nem is egyedül: több munkatársa vele tartott. Oláh György



9. ábra. Oláh György 1995-ben a Műegyetemen

nagyon önzetlen, gondoskodó ember. Először Londonba került, azután Kanadába. Itt ipari kutatóhelyen kezdett dolgozni, de folytatta az alapkutatót. A laboratóriumban pontosan meghatározták, mit csinálhat, viszont megengedték, hogy munkaidőn kívül használja a laboratórium berendezéseit. Oláh György a szupersavak specialistája. Írt egy könyvet a szupersavakról, amelynek a bevezetőjében arra is kitért, hogy sokat köszönhet Gillespie-nek, aki először írta le ezeket a vegyületeket, és a terület úttörője volt.

Ronald Gillespie angol, Londonban járt egyetemre, aztán az egyetemen maradt egy híres szerves kémikus, Christopher Ingold laboratóriumában. Ingold is gondoskodó típus volt – annyira, hogy Gillespie első cikkeit ő öntötte formába, de sok más nagy professzortól eltérően nem írta rá a nevét azokra a dolgozatokra, amelyek Gillespie eredményeit ismertették. Egy idő után azonban terhéssé vált a túlzott gondoskodás: Gillespie már nem tudott úgy témát kezdeni vagy műszerért pályázni, hogy ne Ingold döntött volna helyette. Gillespie Kanadába távozott, ahol megígérték neki, hogy a legkorszerűbb berendezésekkel szerelik fel a laboratóriumát. Kanadában az övé volt az első nagy teljesítményű NMR-berendezés, és Oláh Györgynek, akivel Londonban már találkozott, megengedte, hogy használja. Oláh György az alapkutatói során előállított anyagokat a technikusára bízta, az elvitte őket Gillespie laboratóriumába, ahol felvették az NMR-spektrumokat.

Oláh György, a szupersavak révén, belekeveredett egy nagy vitába. Ez két nagyon ismert szerves kémikus, Saul Winstein és H. C. Brown között folyt egy reakciómechanizmusról. Oláhnak sikerült eldöntenie a vitát. Mindenki megismerte a nevét. A szupersavak segítségével Oláh György ötös koordinációjú szénatomot állított elő, ami újdonságszámba ment akkor, és a vegyületeiben ezt a köztitermének számító anyagot sikerült stabilizálnia a szupersavak segítségével. Az anyagait, ahogy említettük, elküldte Gillespie-hez, ahol az NMR-spektrumok alapján azonosították őket – és ez vezetett Oláh György sikeréhez: eldönthette a szerves kémikusok világát foglalkoztató évtizedes vitát.

Gillespie szerint Oláh néha olyan anyagokat küldött vizsgálatra, amelyek feketék, gyantaszzerűek voltak, és ő csak a barátja

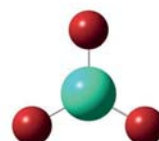
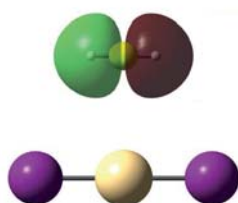
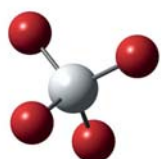
iránti tiszteletből, szeretetből engedte meg a vizsgálatot, a saját munkatársainak megtiltotta volna. Oláh György szerint nem voltak ezek az anyagok annyira elvetemültek... Gillespie úgy érzi, azért nem lett olyan sikeres, mint Oláh György, mert túl óvatos volt, nagyon ügyelt a tisztaságra, és talán kitisztította azokat az izgalmas komponenseket, amelyek Oláh György anyagában megmaradtak, mert Oláh nagyvonalúbb volt. Ezzel nem azt akarom mondani, hogy koszos anyagokat használjunk, hanem csak azt, hogy ne törekedjünk teljes sterilitásra, mert esetleg mi magunk tüntettjük el azt, ami igazán érdekes lehet egy anyagban.

Már utaltam arra, hogy Gillespie szerette volna magasabb szintre emelni a VSEPR-modellt, holott az egyszerűségében volt jó. Nem engedte viszont – és ezen sokat vitatkoztunk a könyv írásakor –, hogy a kivételekkel foglalkozzunk. Végül is kompromisszumot kötöttünk, és tárgyaltuk a kivételeket, de nem olyan mértékben, ahogy lehetett volna. Ha van egy központi atomunk, akkor a VSEPR-modell annál jobban „jósol”, minél kisebbek a ligandumok a központi atom körül, mert ilyenkor az elektronpárok határozzák meg a szerkezetet. Ha a központi atom kicsi, és a ligandumok nagyok, akkor azoknak a kölcsönhatása dönti el a geometriát. Gillespie nem akart ezzel foglalkozni. Ez engem bántott, mert én éppen az egymáshoz nem kötődő atomok kölcsönhatásainak terén tettem megfigyeléseket. Erre a jelenségre nem én hívtam fel először a figyelmet, hanem L. S. Bartell, de találtam rá izgalmas példákat és alkalmazásokat is. Észrevettem többek között, hogy a szulfonok körében, egy nagy sorozatban – mondjuk, 20–30 vegyületnek a szerkezetében – érezhetően változik az S–O kötés hossza, az O–S–O kötésszög, de azonos marad a két oxigén közötti távolság. Ez a megfigyelés két szempontból is hasznosítható. Egyrészt egy új szulfonszerkezet diffrakciós meghatározásakor az egyébként nehezen kezelhető O...O távolságot ismertnek tekinthetjük. Másrészt tudjuk, hogy a mikrohullámú spektroszkópia nem alkalmas az S–O kötéshossz és az O–S–O kötésszög pontos megállapítására, de pontosan megadja az O–O távolságot. Ezért arra jutottam, hogy a mikrohullámú (tiszta forgási) spektroszkópiai adatokat kombinálom a diffrakciós adatokkal, és ebből nagyon sok pontos szerkezeti paramétert nyertem. Szóval, Gillespie sokáig nem akart foglalkozni azoknak az atomoknak a kölcsönhatásával, amelyek között nincs kötés. Az utóbbi években viszont már csak ezek a kölcsönhatások érdeklik. És ami nagyon ritka: egy összefoglaló dolgozatban bocsánatot kért Bartelltől meg tőlem, amiért nem ismerte fel vagy nem ismerte el ezeknek a kölcsönhatásoknak a fontosságát.

Gillespie igazi úttörő és nagyszerű pedagógus. Ha olyan nagyvonalú lett volna, mint Oláh György, akkor sikeresebbnek érezhetné magát. Mindenki más véleménye szerint azonban óriási eredményeket ért el. Sikerességének egyik biztos jele, hogy a világon mindenütt használják és tanítják a nevéhez fűződő VSEPR-modellt.



HARGITTAI ISTVÁN FELVÉTELEI



Molekulageometria – dióval



Pogány Péter^{1,3} – Kovács Attila^{1,2}

¹ European Commission, Joint Research Centre, Institute for Transuranium Elements, Karlsruhe, Németország

² Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

³ Jelenlegi cím: MTA Természettudományi Kutatóközpont, Budapest | Email: pogany@centrum.sk

Az f elemek elektronszerkezete

Az f elemek a periódusos rendszer speciális csoportjait képviselik: elektronszerkezetükben a 4f (lantanidák), illetve 5f (aktinidák) alhéjak töltődnek be fokozatosan, ami ezeknek az elemeknek a többitől eltérő kémiai és fizikai tulajdonságokat kölcsönöz. Ráadásul, a 4f és 5f alhéjak eltérő jellege miatt, a két csoport egymástól is különbözik. Az elektronszerkezet felderítése, s ezáltal az egzotikus tulajdonságok magyarázata kvantumkémiai számítások segítségével vált lehetővé.

Bevezetés

A periódusos táblázat f elemeit a lantanidák és aktinidák képviselik. A lantanidák sora a lantántól ($_{57}\text{La}$) a lutéciumig ($_{71}\text{Lu}$) terjed. Leggyakrabban 3-as oxidációs számmal szerepelnek vegyületeikben, a szkandiummal ($_{21}\text{Sc}$) és az ittriummal ($_{39}\text{Y}$) együtt nagyon hasonló kémiai tulajdonságokat mutatnak. Az aktinidák sorát az aktíniumtól ($_{89}\text{Ac}$) a laurenciumig ($_{103}\text{Lr}$) bezárólag található 15 elem alkotja. Közülük a természetben csak a tórium ($_{90}\text{Th}$) és az urán ($_{92}\text{U}$) fordul elő nagyobb mennyiségben. Az aktinidák egy része nem a 3-as oxidációs számot preferálja vegyületeiben, így ezek az elemek nem hasonlítanak a IIIb oszlop többi elemére (Sc, Y, lantanidák). Előszörban radioaktivitásuk, ritkaságuk, szokatlan elektronszerkezetük, furcsa komplexeik és alacsony szimmetriájú kristályszerkezeteik miatt nevezzük őket „egzotikusnak”. Még mielőtt a két csoport részletesebb tárgyalásába kezdenénk, meg kell említeni egy nevezéktani kérdést. Bár az IUPAC ajánlása [1] a lantanoida és az aktinoida nevet részesíti előnyben, a lantanoida és az aktinoida kifejezés használata olyannyira elterjedt az irodalomban, hogy ebben a cikkben is ezt használjuk.

Az f elemek vizsgálatában nagy szerepük van a kvantumkémiai számításoknak, ame-

lyek, különösen a vegyületekre, teljesebb képet adnak az elektronszerkezetéről, mint a kísérletek. A most bemutatott eredmények jelentős része is ilyen számításokon alapul.

A relativitásról röviden

Az elméleti vizsgálatok során az egyik komoly probléma a relativisztikus hatás. 1929-ben Paul Dirac angol fizikus, akit a relativisztikus kvantumfizika atyjának tekintünk, még úgy látta, hogy „[a relativisztikus hatások] semmilyen jelentőséggel sem bírnak atomi és molekuláris rendszerek esetében” [2]. A 70-es években az elméleti módszerekben végbement egy forradalom, amelynek során sikerült többé-kevésbé figyelembe venni a relativisztikus hatást atomok és molekulák számításai során. Ekkor derült ki, hogy Dirac megállapítása nem állja meg a helyét, különösen a nehezebb elemek esetében. A 6. periódus egyes jól ismert elemeinek szokatlan tulajdonságait éppen a relativisztikus hatásokkal sikerült magyarázni. Az arany színe és kémiai inertsége nagyrészt relativisztikus eredetű, ahogyan a higany folyékony halmazállapota is. De egyes nehezebb p elemek csoportjuktól eltérő oxidációs száma is nagymértékben a relativisztikus hatásoknak köszönhető [például a bór csoport (B, Al, Ga, In) elemeinek 3 a jellemző oxidációs száma, míg a legnehezebb tagnak, a Tl-nak 1].

Az első relativisztikus Dirac–Fock-számításokat a periódusos táblázat elemeire 120-as rendszámig Desclaux publikálta 1973-ban [3]. Pyykkö 1978-as összefoglaló tanulmánya [4] után pedig nyilvánvalóvá vált, hogy a relativisztikus hatások nem hanyagolhatók el a kémiában sem. A relativisztikus hatások a 6. periódusban (itt vannak az első f elemek, a lantanidák) válnak fontossá, a 7. periódusban (ahol az aktinidák is vannak) szerepük még jelentősebb lesz.

A speciális relativitáselméletet Einstein

vezette be [5]. Ennek legújszerűbb állítása az volt, hogy a tér és az idő nem függetlenek egymástól, ellentétben azzal, ahogyan mindennapi életünkben érzékeljük, ahol a fény sebességéhez közeli sebességekkel nem találkozunk. Eredményeképpen a gyorsan mozgó test tömege (m_r) nem egyezik meg a nyugalmi tömeggel (m):

$$m_r = \frac{m}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (\text{I})$$

ahol v a test sebessége, c pedig a fény sebessége.

A kvantumkémiai számításokban használt alapösszefüggések a Schrödinger- és Dirac- egyenletek. A relativisztikus effektusok leírását tartalmazó Dirac-egyenlet 4 komponensű, közelítések alkalmazásával oldjuk meg. Ennek megfelelően a Dirac-egyenlet hullámfüggvénye is négykomponensű vektorfüggvény. A Schrödinger-egyenlet megoldása egykomponensű skalárfüggvény. A számítások szempontjából skaláris és spin-pálya relativisztikus effektusokat különböztetünk meg. A skaláris hatások közé tartozik a fent említett relativisztikus tömegváltozás, valamint a Darwin-hatás, amely az elektron átlagos pozíciója körüli kis, szabálytalan oszcilláció következménye. A spin-pálya csatolás az elektron spinjének a mozgásával való kölcsönhatását jelenti.

A skaláris korrekciókat egyszerűen alkalmazhatjuk a Schrödinger-egyenletre is, hiszen itt a hullámfüggvény továbbra is egykomponensű marad. A spin-pálya korrekciók ennél bonyolultabbak, mivel vektoriális változást jelentenek, vagyis a spin-pálya korrigált egyenlet hullámfüggvénye legalább kétkomponensű.

A relativitás hatása az atompályákra

Az (I) egyenlet értelmében az elektron tömege függ a sebességtől. Ez hatással van



többek között az atompálya sugarára (a_0), melyre Bohr a következő összefüggést állította fel [6]:

$$a_0 = \frac{n^2 4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_r Z e^2}, \quad (\text{II})$$

ahol n az adott pálya főkvantumszáma, ϵ_0 [P1] a vákuum permittivitása, \hbar a redukált Planck-állandó, e az elemi töltés és Z a mag töltése (egész szám). Ha az elektron sebessége megközelíti a fény sebességét (ami igaz a mag közeli elektronokra), akkor relativisztikus tömegnövekedést tapasztalunk (m_r megnő), aminek következtében az atompálya sugara csökken. Ezzel az egyszerű érveléssel megmagyarázható a belső elektronhéjakat jellemző kontrakció, amelyet közvetlen relativisztikus hatásnak nevezünk.

Az **1. ábrán** a lantanidák és aktinidák vegyértékelektron-pályáit vetjük össze a cérium (Ce) és az urán (U) példáján. Azért erre a két nem teljesen analóg vegyérték-héjú elemre esett a választás, mert viszonylag gyakori elemek és mindkettőnek van d és f elektronja is. Az ábrán a pályae energiák vannak feltüntetve relativisztikus és nem relativisztikus számításokból. Ha a relativisztikus hatásokat „bekapcsoljuk”, akkor a vegyérték d és s pályák közötti energia lecsökken a cérium esetében, míg az uránnál a két pálya helyet cserél. A vegyérték f és p pályák esetében is jól látható, hogy a relativisztikus hatások sokkal jelentősebben hatnak az aktinidákra, mint a lantanidákra.

Fontos megjegyezni, hogy a vegyérték-pályák energiájában és térbeli kiterjedésében a relativitás hatására megfigyelhető változások csak közvetetten relativisztikus eredetűek. Ez azt jelenti, hogy a belső elektronpályák közvetlen relativisztikus eredetű változása vonzza maga után a külső elektronpályák változását. A külső elektronok sebessége ugyanis már nem közelíti olyan mértékben a fény sebességét, mint a belső elektronoké, ezért a közvetlen relativisztikus hatás elenyésző.

Az **1. ábra** szemléletesen tükrözi, hogy az alacsonyabb impulzuszórával rendelkező pályákat (s és p) a relativisztikus hatások stabilizálják, vagyis ezeknek a pályáknak egyrészt az energiája átlagosan csökken, másrészt térbeli kiterjedésük is csökken a nem relativisztikus pályákéhoz képest. A magasabb impulzuszórával rendelkező pályákra (d és f) az ellenkezője érvényes. Egy adott elem esetében az atompályák stabilitása csökken a növekvő főkvantumszámmal (azonos mellékquantumszámú pályákat összehasonlítva) és egy adott főkvantumszám mellett növekvő mellékquantumszámmal. A magasabb mellékquantumszámú pályák (d és f) destabilizációja az első ilyen pályák ($3d$ és $4f$) magtól való nagyobb távolságával magyarázható. Az ezeken a pályákon tartózkodó elektronok sebessége ugyanis jelentősen kisebb, mint az első s és p pályák elektronjaié ($1s$ és $2p$). Emellett a magtöltés leárnýékoltsága is megjelenik itt: mivel a belső s és p pályák közel vannak a mag-

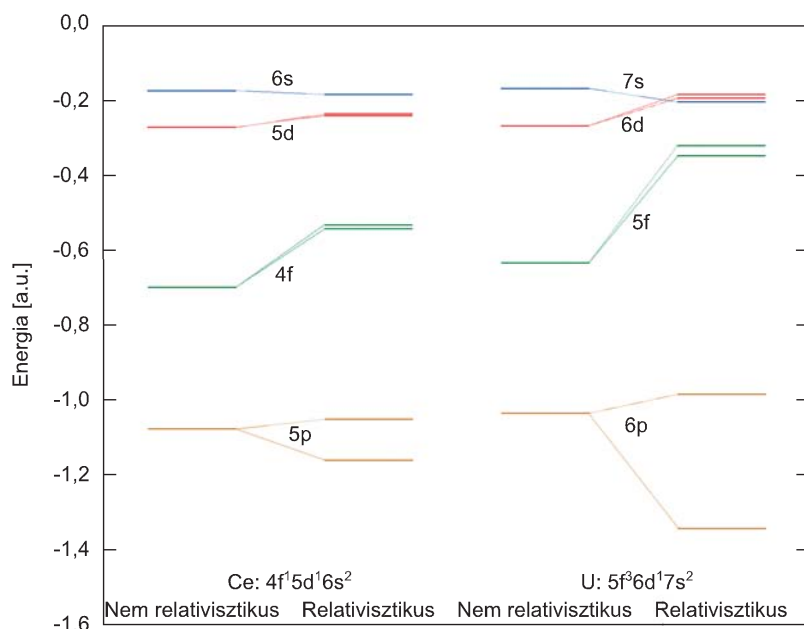
hoz, erősen árnyékolják a magtöltést, így a d és f pályákra eső „effektív” magtöltés kisebb lesz. Ezért is nevezik ezt a relativisztikus destabilizáló hatást „közvetett” (indirekt) relativisztikus hatásnak, vagy relativisztikus SCF (self-consistent field) hatásnak [7,8]. A d és f pályák árnyékoló hatása kisebb, mint az s és p pályáké, ami ugyanakkor közvetett stabilizációt okoz a külső (beleértve a vegyérték) s és p pályákon. Valójában mind a stabilizáló, mind a destabilizáló hatás egyaránt hat az összes pályára, csak míg a stabilizáló hatás erősebb az s és p pályák esetében, addig a destabilizáló hatás hatékonyabb a d és f pályák esetében.

Az f elemek elektronszerkezeti tulajdonságai

Az f elemek és vegyületeik elektronszerkezetének számítása kihívás elé állítja a kutatókat. A lantanidákban és az aktinidákban rendre a $4f$ és az $5f$ alhéj fokozatosan töltődik be elektronokkal, emiatt nagyrészt nyílt héjú molekulákat hoznak létre, vagyis nincs minden elektron párosítva bennük.

Emiatt már a lantanidák besorolása és elektronszerkezetének meghatározása is komoly problémát okozott a kutatóknak. Kémiai tulajdonságaik nagy hasonlósága miatt hosszú ideig nem tudták őket egymástól elválasztani: például 1911-ben Charles James 15 000 átkristályosítással jutott tiszta túlium-bromáthoz [9]. Niels Bohr a Nobel-díj átvételekor tartott előadásában [10,11] a lantanidákra olyan alapállapotú konfigurációt javasolt, amelynél nem a külső, 6-os főkvantumszámú héj töltődik be folyamatosan a rendszám növekedésével, hanem a maghoz közelebbi 4-es főkvantumszámú héj. Ebben az időben (1922) a kvantumkémia matematikai leírása még nem létezett (ez 1926-ban történt meg [12]), ezért Bohr spektroszkópiai adatokból jutott erre a következtetésre. Ma azonban azt mondanánk, hogy Bohr a lantanidákra $6s^2 5d^1 4f^n$ elektronszerkezetet javasolt, ahol n a rendszámmal nő a lantanidák sorozatában. Ez a leírás nagyon jól magyarázta a 3-as oxidációs szám nagy stabilitását, hiszen a $4f$ alhéj egy belső alhéj, aminek következtében nehezebb róla eltávolítani az elektronokat, mint a $6s$ és $5d$ alhéjakról. Bohr helyesen megjósolta, hogy a $4f$ elektronok alacsony energiája miatt e pályák fokozatos betöltődése nem fog jelentős eltérést okozni a kémiai tulajdonságokban, de jelentősen befolyásolhatja a mágneses tulajdonságokat. Zalubas és Bor-

1. ábra. Dirac–Fock- és Hartree–Fock-pályae energiák [3,4] atomi egységekben a cériumra és az uránra. Látható, hogy a relativisztikus hatások két különböző energiájú pályára bontják a p , d és f pályákat





Niels Bohr 1935-ben

chardt 1973-as munkája [13] óta azonban tudjuk, hogy az 5d pálya egyedül a La, Ce, Gd és Lu alapállapotában egyszeres betöltöttségű. A többi lantanidában az 5d héj üres. Így Bohr egyszerű elmélete csak részben igaz, de mégis fantasztikus, hogy az ismereteket 50 évvel megelőzve jósolta meg ezeket a tulajdonságokat.

Abban az időben az aktinidákat még nem ismerték széles körben, azonban ezek az elemek még nagyobb eltérést mutatnak Bohr modelljétől. Az aktinidasorozat elején az Ac és a Th nem rendelkezik 5f elektronnal az alapállapotban (a konfiguráció rendre $7s^2 6d^1$ és $7s^2 6d^2$), míg az őket követő három elem, a Pa, az U és a Np egyszeresen betöltött 6d és fokozatosan betöltődő 5f alhéjakkal rendelkezik. A legstabilabb oxidációs szám az utóbbi négy elem esetében nem 3, hanem rendre a 4, 5, 6 és 5. Hasonlóképpen azok az általános irányelvek sem alkalmazhatók maradéktalanul az f elemek esetében, amelyek az átmeneti fémek koordinációs vegyületeinél jól használhatók (a gondot többek között az aktinidavegyületek alacsony szimmetriájú kristályszerkezetei [14] vagy alacsony szimmetriájú és változó szerkezetű komplexei [15] okozzák).

Az aktinidák esetében a vegyérték 6d pályák betöltöttsége magasabb, ezáltal az 5f pályák betöltöttsége alacsonyabb, mint a lantanidák analóg pályái esetében: például a Ce alapállapota $4f^1 5d^1 6s^2$ konfigurációjú, míg a Th alapállapota $6d^2 7s^2$ konfigurációjú. Ez az egyik fő oka annak, hogy egyes szerzők miért tekintenek a tóriumra úgy, mint d elemre. Hangsúlyoznánk azonban, hogy a Th^{3+} alapállapotának konfigu-

rációja $5f^1$, és molekuláiban az 5f pályák részvétele nem elhanyagolható, ami miatt a Th nem tekinthető d elemnek.

Az f elemek egy másik jellemző tulajdonsága a sok közeli energiájú elektronállapot. A vegyérték f alhéj nagyfokú degenerációja (összesen 14 elektron fér el rajta) és a megfelelő vegyérték s és d pályák nagyon közeli energiaszintjei igen nagy számú mikroállapotot tesznek lehetővé: ha k számú elektront helyezünk el l számú pályán (egy pályára maximálisan 2 elektron kerülhet), az összes konfiguráció száma

$$\frac{2l!}{k!(2l-k)!}$$

A Tb $4f^9 6s^2$ alapállapota (${}^6H_{15/2}$) például csak $3,4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ -al helyezkedik el alacsonyabban, mint az első gerjesztett $4f^8 5d^1 6s^2$ állapot (${}^6G_{13/2}$). A Ce szinglett $4f^1 5d^1 6s^2$ alapállapota (1G_4) csak $2,7 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ -al helyezkedik el alacsonyabban, mint az első gerjesztett triplett állapot (3F_2) [16]. Mindezen nehézségeket okozhat a számításoknál az alapállapotú szerkezetek meghatározásában.

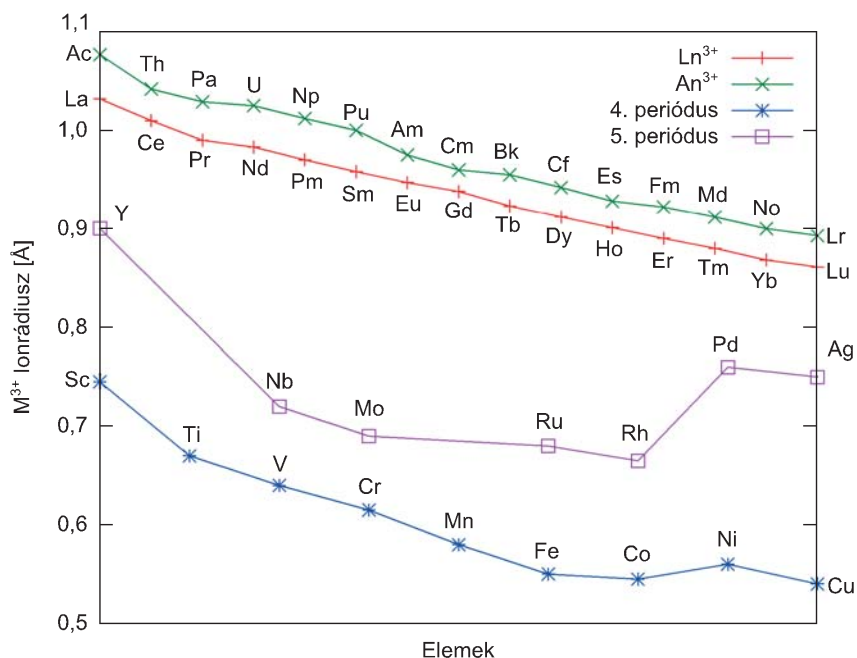
A spektroszkópiai tulajdonságokra vonatkozóan Field 1982-ben megalkotta a szuperkonfigurációs modellt [17], amely abból a feltételezésből indul ki, hogy az f elektronok inertek. A modell szerint különböző elektronállapotok hasonló spektroszkópiai paraméterekkel rendelkezhetnek, ha a különbség csak az elektronok vegyérték f pályákon való eloszlásában van. Ez több különböző elektronállapotot foglalhat magába aszerint, hogy az elektro-

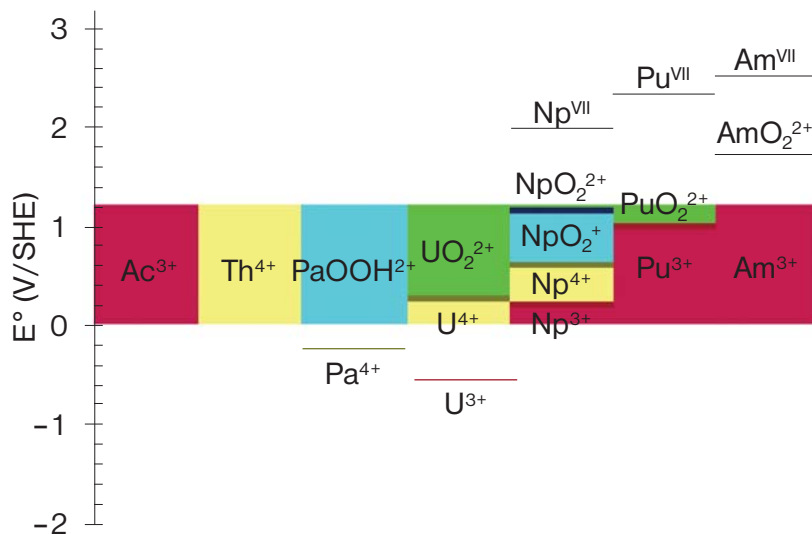
nok pontosan melyik pályákon vannak, amelyek együtt ún. szuperkonfigurációt alkothatnak. Ez a modell viszonylag jó közelítést ad a lantanidák vegyületeinek leírására, amelyeknél a 4f elektronok nagyon alacsony energiájúak és többnyire nem vesznek részt a kémiai kötésekben. Az aktinidáknál azonban, különösen a sorozat elején található gyakorlati szempontból jelentősebb elemeknél, már nem alkalmazható, mivel az 5f pályák jóval közelebb vannak a többi vegyértékpályához, így a kötésbeli részesedésük nem elhanyagolható (lásd a 4f és az 5f elhelyezkedését a Ce és U esetén az 1. ábrán).

Az f elemek fontos jellemzője a kontrakció, azaz az atom- és ionrádiuszok csökkenése a növekvő rendszámmal. A pályák méretének relativisztikus csökkenése a vegyületekben a kötéstávolságok csökkenését vonja maga után.

A lantanidakontrakció kifejezést először 1925-ben Goldschmidt használta, hogy leírja az atomok méretének csökkenését a lantanidavegyületek kristályaiban [18]. A lantanidakontrakció gyakorlati szempontból nagyon fontos, ugyanis az ionrádiuszokban jelentkező különbség tette lehetővé, hogy preparatív módszerekkel elválasszák egymástól az amúgy kémiai szempontból nagyon hasonló lantanidákat. Annak ellenére, hogy hasonló kontrakciós tendenciák megfigyelhetők a d elemeknél és az aktinidáknál is (2. ábra), nem terjedt el a d elem-kontrakció és az aktinidakontrakció kifejezés. Ugyanis az ezekbe a

2. ábra. A háromszorosan töltött kationok ionrádiuszainak változása a d elemek 4. és 5. periódusában, valamint az f elemekben (lantanidák és aktinidák) [19,20]





3. ábra. A könnyű aktinidák fő oxidációs állapotai vízben pH=0-nál [25]. A színes sáv feletti és alatti rész a nemegyensúlyi állapotot adja meg. SHE a standard hidrogén-elektrodot jelöli, a színek pedig az oxidációs számot: piros 3, sárga 4, kék 5, zöld 6

csoportokba tartozó elemek oxidációs száma (ami szintén befolyásolja a kötéshosszat) változó, eltérően a lantanidaktól, melyek többnyire 3-as oxidációs számmal szerepelnek vegyületeikben.

A kontrakciót többnyire vegyületekben vizsgálták, mert ott van gyakorlati jelentősége (emellett a kötéshossz jobban definiált mint egy atompálya, s ráadásul kísérleti úton is meghatározható). Az ilyen irányú kvantumkémiai számítások egyik fő célja a relativisztikus hatások felderítése volt. Pyykkö szerint [21] a relativisztikus hatás részesevé a teljes kontrakció 10%-a a lantanidák esetében. Clavaguéra és társai újabb közleménye [22] korábbi számításokat is figyelembe véve 9% és 23% közé teszi a relativisztikus tényező szerepét (rendre LnI₃- és LnF₃-vegyületekre számolva). Küchle és társainak számításai LnF- és AnF-vegyületekre [23] 10–14% közé teszik ezt az értéket a lantanidáknál és 44–46% közé az aktinidáknál.

A számításokkal kapcsolatban meg kell jegyezni, hogy a legtöbb cikkben csak a sorozatok első és utolsó tagját számították ki és ez alapján adták meg a kontrakciót. A kontrakció eredeti jelentése azonban a sorozatokban az ionrádiusz fokozatos csökkenése. A fenti szerzők megállapították, hogy azok a vegyületek, amelyek merev (erős) kötéssel rendelkeznek (nagy erőállandóval, például LnO), kis kontrakciót mutatnak, míg a gyenge kötéssel rendelkező vegyületek (például LnH) nagyobb kontrakcióval jellemezhetők. Az aktinida-oxidok vizsgálata megmutatta [24], hogy a kontrakció sok tényezőtől függ: ionos/kovalens jelleg, oxidációs szám, a kovalens

kötés multiplicitása (egyszeres, kétszeres, háromszoros), koordinációs szám. Minél több paraméter hasonló, annál valószínűbb a kontrakció megjelenése egy vegyületcsaládon belül. Az aktinida-oxidok esetében a kötés jelentősen kovalens jellegű és így a kötéstávolságot elsősorban a kötő- és lazító pályák betöltöttsége szabja meg.

Az aktinidák esetében a sor elején levő 6 elem (Th–Am) erősen eltérő tulajdonságokat mutat. Ezeknek a könnyű aktinidáknak a vizes oldatban uralkodó legstabilabb oxidációs számait [25] tüntettük fel a 3. ábrán. Míg a lantanidák esetében csak a Ce fordulhat elő 4-es és az Eu 2-es oxidációs számmal (a legstabilabb oxidációs szám azonban mindkét esetben a 3-as), addig az aktinidák első elemei változatos oxidációs számokkal rendelkeznek. Ennek oka az, hogy az 5f elektronok a sorozat jóval későbbi elemeinél válnak törzselektron jellegűvé (mélyebb energia), öszszesvetve a 4f elektronokkal a lantanidák esetében. Így az aktinidasorozat első elemeinél az 5f elektronok könnyen eltávolíthatók. Az első öt aktinida (Ac–Np) alapállapotában 6d elektronok is szerepelnek, így a kötésekben a 6d és 5f pályák is részt vehetnek (az Ac kivételével), ellentétben a lantanidákkal, ahol a 4f pályák nem vesznek részt jelentősebben a kötésekben. A Th különleges helyet foglal el, hiszen alapállapotában üres az 5f héja. Az aktinidasorozat második fele viszont nagyobb hasonlóságot mutat a lantanidákkal, ugyanis ezekre is a 3-as oxidációs szám jellemző. Egyedül a No esetében valószínűsíthető a 2-es oxidációs szám a No²⁺ nagyon stabil 5f¹⁴ konfigurációja miatt.

IRODALOM

[1] N. Connelly, T. Damhus, R. M. Hartshorn, A. T. Hut-ton, Nomenclature of Inorganic Chemistry: IUPAC Recommendations 2005. Royal Society of Chemistry Publishing and IUPAC, 2005.
 [2] P. A. M. Dirac, Proc. R. Soc. London, Ser. A (1929) 123, 714.
 [3] J. P. Desclaux, At. Data Nucl. Data Tables (1973) 12, 311.
 [4] P. Pyykkö, Adv. Quantum. Chem. (1978) 11, 353.
 [5] A. Einstein, Ann. Phys. (Berlin) (1905) 17, 891.
 [6] N. Bohr, Philos. Mag. (1913) 26, 1.
 [7] M. Dolg, H. Stoll, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, 22. kötet, North-Holland Publishing Company, 1996, 152. fejezet, 607.
 [8] M. Iliaš, V. Kellő, M. Urban, Acta Phys. Slovaca (2010) 60, 259.
 [9] C. James, J. Am. Chem. Soc. (1911) 33, 1332.
 [10] N. Bohr, Nobel Lectures in Physics, World Scientific, 1998. 7–43.
 [11] E. Szabadváry, Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths, 11. kötet, North-Holland Publishing Company, 1988, 43. fejezet, 33.
 [12] E. Schrödinger, Ann. Phys. (1926) 384, 361.
 [13] R. Zalubas, B. R. Borchartd, J. Opt. Soc. Am. (1973) 63, 102.
 [14] L. Petit, A. Svane, W. M. Temmerman, Z. Szotek, Solid State Commun. (2000) 116, 379.
 [15] A. Earnshaw, N. Greenwood, Chemistry of the Elements, Elsevier Science, 1997, 31. fejezet, 1250–1284.
 [16] A. E. Kramida, Y. Ralchenko, J. Reader, "NIST atomic spectra database ver. 5.1," 2008. online elérhető: <http://physics.nist.gov/asd>.
 [17] R. W. Field, Bunsenges. Phys. Chem. (1982) 86, 771.
 [18] V. M. Goldschmidt, L. Thomassen, F. Ulrich, T. F. W. Barth, G. O. J. Lunde, W. H. Zachariasen, D. Holmsen, Geochemische Verteilungsgesetze der Elemente. No. 7, In Kommission bei J. Dybwad, 1925.
 [19] E. David, K. Samhoun, R. Guillaumont, N. Edelstein, J. Inorg. Nucl. Chem. (1978) 40, 69.
 [20] R. D. Shannon, Acta Crystallogr., Sect. A (1976) 32, 751.
 [21] P. Pyykkö, Phys. Scr. (1979) 20, 647.
 [22] C. Clavaguéra, J.-P. Dognon, P. Pyykkö, Chem. Phys. Lett. (2006) 429, 8.
 [23] W. Küchle, M. Dolg, H. Stoll, J. Phys. Chem. A (1997) 101, 7128.
 [24] A. Kovács, P. Pogány, R. J. M. Konings, Inorg. Chem. (2012) 51, 4841.
 [25] G. H. Wolfe, Uranium: Compounds, Isotopes and Applications. Nova Science Publishers, Incorporated, 2009.

ÖSSZEFOGLALÁS

Pogány Péter, Kovács Attila: Az f elemek elektronszerkezete

A cikkben az f elemek egzotikus elektronszerkezetét és ennek következtében fellépő jellemző kémiai tulajdonságait mutattuk be. Ezek egyik meghatározó tényezőjét alkotják a relativisztikus hatások, melyek skáláris és spin-pálya kölcsönhatásokból tevődnek össze. Vizsgáltuk a lantanidákat és aktinidákat jellemző oxidációs számok különbözőségének okait, melyeket nagyrészt az aktinidáknál jelentkező erőteljesebb relativisztikus hatás okoz. Értelmeztük az ún. lantanidakontrakciót, és a hozzá hasonló, azonban a gyakorlat számára kevésbé fontos aktinida- és d elem-kontrakciót.

Bár az utóbbi évtizedben komoly fejlődés ment végbe a számítási kémiában, az f elemek számítása továbbra is komoly kihívás, mivel egyrészt a relativisztikus hatások, másrészt az elektronkorreláció minél pontosabb figyelembevételét igényli.



Ez a díj kizárólag a szakma elismerése

Beszélgetés a Rátz Tanár Úr életműdíjas kémiantanárokkal

A 2013. évi Rátz Tanár Úr Életműdíjat dr. Cs. Nagy Gábor és Oláh Gábor Péter, a hajdani debreceni és a budapesti vegyipari technikumok tanárai vehették át. Cs. Nagy Gábor diákja is volt a debreceni intézménynek. A díjátadásról ez év februári számunkban beszámoltunk (MKL, 2014/2. 64.). Mindketten jól ismerik a „vegyiparik” (egyáltalán a technikumok) múltját, történetét, helyzetének változását, átértékelését az oktatáspolitikai kusza rendszerében, ami talán nem mindig találkozott a társadalmi elvárásokkal. A kitüntetettek sorsának alakulása mellett, azaz hogyan érték el a középiskolai tanárok talán legbecsesebb szakmai elismerését, a Rátz Tanár Úr Életműdíjat, ezekről a kérdésekről is kérdezem beszélgetőpartnereimet.

Kezdjük egy nagyon banális kérdéssel. Hogyan értesültek a díj odaítéléséről?



Cs. Nagy Gábor: 2013. október közepén a feleségemmel Bécsben tartózkodtunk, ahol az idősebb fiunk él a családjával, és mivel a szülőknek pár napos programjuk volt, „unokás szolgáltató” láttunk el azokban a napokban. Ebéd utáni csendes pihenő közben telefonon hívott az MTA-ról Kroó Norbert professzor úr, hogy a kuratórium elnökeként elsőként és személyesen tájékoztasson aznapi döntésükről.

Nagy-nagy meglepetésként ért a megtisztelő hír, kerestem a szavakat és csak nehezen tudtam néhány köszönő szót értelmesen elmondani.

Oláh Gábor: Meglepetés volt számomra a díj elnyerése, mert nem tudtam róla, hogy 2013-ban felterjesztettek rá. Egy dolgos hétköznapon, az iskolai menzán, ebéd közben csörrent meg a telefonom, és egy ismeretlen szám jelentkezett. Felvettem, bemutakoztam, majd a hívó Kroó Norbert akadémikus úr titkárnőjeként mutatkozott be.



Megkérdezte, tudom-e, hogy miért keres engem, mire én azt feleltem, hogy a professzor urat névről ismerem, és ismerem tudományos ismeretterjesztő munkáját is, de a megkeresés okát nem tudom kitalálni. Erre azt mondta, hogy adja a professzor urat, és így tőle személyesen tudtam meg, hogy kémiantanárként engem választott ki az egyik díjra az értékelő bizottság. Utólag visszagondolva mély hálát érzek azért a személyes és emberi hangért, amely már Kroó Norbert professzor úr telefonos megkeresésből áradt. Letettem a telefont, és alig tudtam befejezni az ebédelést.

Oláh Gábor: Meglepetés volt számomra a díj elnyerése, mert nem tudtam róla, hogy 2013-ban felterjesztettek rá. Egy dolgos hétköznapon, az iskolai menzán, ebéd közben csörrent meg a telefonom, és egy ismeretlen szám jelentkezett. Felvettem, bemutakoztam, majd a hívó Kroó Norbert akadémikus úr titkárnőjeként mutatkozott be. Megkérdezte, tudom-e, hogy miért keres engem, mire én azt feleltem, hogy a professzor urat névről ismerem, és ismerem tudományos ismeretterjesztő munkáját is, de a megkeresés okát nem tudom kitalálni. Erre azt mondta, hogy adja a professzor urat, és így tőle személyesen tudtam meg, hogy kémiantanárként engem választott ki az egyik díjra az értékelő bizottság. Utólag visszagondolva mély hálát érzek azért a személyes és emberi hangért, amely már Kroó Norbert professzor úr telefonos megkeresésből áradt. Letettem a telefont, és alig tudtam befejezni az ebédelést.

Mindketten vegyiparisok voltak. Milyen volt a presztízse az iskolájuknak abban az időben, amikor oda jártak?

N.G.: Én 1960 és 1964 között voltam vegyiparis diák. Azokban az években a technikumok voltak a legelismertebb középiskolák

a szülők (és a végzős általános iskolás diákok) között. Így volt ez a Békés megyei Gyoma község I. sz. Általános Iskolájában is, ahonnan korábban még senki nem jutott be a rangos Debreceni Vegyipari Technikumba. Később aztán voltak követőim... Az ősi iskolavárosban is érzékelt lehetett a mi iskolánk presztízset, és erre büszké is voltunk (ez nem azt jelentette persze, hogy a kötelező diáksapkát el ne rejtettük volna „kritikus” esetekben!)

O.G.: Én Komlón, a Kun Béla Gimnáziumban érettségiztem 1978-ban. Általános iskolai osztálytársaim közül az egyik legjobb tanuló a Pécsi Vegyipari Technikumban tanult tovább. Én tőle tudtam informálódni a 70-es évek nagyszerű, igencsak jól felszerelt pécsi technikumáról és az ottani magas színvonalú képzésről. Ámulattal hallgattam azokat a beszámolókat, amikor a vegyipariban elvégzett kísérletekről és mérésekről, a műszerekről és a laborokról mesélt Németh Jenő barátom.

Említsenek egy-két tanárt, aki maradandó nyomot hagyott emlékezetükben, befolyásolta pályájuk alakulását.

N.G.: Az általános iskolában nagyszerű magyar-, matematika- és kémiantanárom volt (Varga Zsigmondné, Kovács Gábor, Puskás László), hiszen csakis az ő alapos felkészítő munkájuk révén felkeltem meg a felvételi vizsgán. Középiskolás éveimből Oláh József történelem, Halmai Lászlóné vegyipari technológia és laboratóriumi gyakorlat, Kopcsa József fizikai kémia szakos tanáraink nevét említhetem – más-más okokból.

O.G.: Elsősorban általános iskolai és középiskolai kémiantanárainknak vagyok hálás a hivatásomért. Balassa Lászlóné Marika néni nagyszerű munkájának és lelkesítésének köszönhetően nyolcadikos koromban megnyertem a városi és a megyei kémiaversenyt, és eljutottam az akkor még építés alatt álló Zánkára. Perleczky József gimnáziumi tanáromtól a megfigyelések és mérések alapos és precíz elvégzését, a természet és a természetjárás szeretetét, és egy kicsit a pedagógia mesterségét is tanultam. Sajnos, már egyikőjük sincs az élők sorában.

Az egyetemi évek alatt hivatásomra leginkább Kajtár Márton és Rózsahegyi Márta volt hatással. Kajtár Marci bácsi megkapó őszintesége, sugárzó egyénisége, egyszerűsége, embersége és mély



hite, briliáns magyarázóképesége ragadott meg, és ma is példa számomra.

Azt, hogy nem kutatóvegyész, hanem kémia tanár lettem, Rózsahegyi Mártának köszönhetem, aki az első általam tartott próbatanítás után azzal kezdte óráim értékelését, hogy „Gábor, magát az Uristen is tanárnak teremtette”. Ez a visszajelzés máig meghatározó az életemben. Márta nénivel mind a mai napig jó emberi és szakmai kapcsolatot tartok, kikérem tanácsát, meghívom az általam szervezett egyházi iskolai kémia tanári továbbképzésekre, diákjaim kémiai témájú projektjeinek bemutatóira és az iskolai természettudományos tehetségnapi rendezvényeinkre.

Pályájuk úgy alakult, hogy évekkel később visszakerültek iskolájukba, most már tanárként. Mít éreztek, változott az iskola társadalmi értékítélete az eltelt idő alatt?

N.G.: Az 1969/70-es tanévben kerültem vissza pályakezdő tanárként volt iskolámba, ami önmagában is nagy megtiszteltetés volt. Ez a tanév – amint utólag beleláttam – „negatív mérföldkőnek” számított az iskola fejlődéstörténetében, hiszen közel két évtizedes, országos ismertséget/elismertséget eredményező periódus után ekkor szűnt meg a nappali tagozatos technikusképzés; a belépő évfolyam már a Debreceni Vegyipari Szakközépiskolában kezdte meg tanulmányait. A tanári kar tehát egyfajta presztízsvesztéséggé vált meg ezt az oktatáspolitikai döntést, ám a szülői társadalom bizalma nem csökkent: a Vegyipari továbbra is „a Vegyipari” maradt.

O.G.: Petrikes egyetemista évfolyamtársaim mind-mind igazán felkészült, nagy-nagy anyagismerettel és laboratóriumi praxissal rendelkeztek, és mindannyian csupa pozitív jelzőkkel illették egykori iskolájukat, tanáraikat. A „Petrik” mindig igyekezett a vegyipari szakképzés zászlóshajójaként minőségi szakképzést megvalósítani. A vegyipari és gyógyszeripari cégek a nyolcvanas évek közepén is tárt karokkal várták a Petrikből érkező munkavállalókat. Petrikesnek lenni, onnan „vegyész” végzettséggel kikerülni akkor is rangot jelentett. Nagyon szerencsés és kegyelemteli pillanat volt, amikor pályakezdő tanárként felvételt nyertem a Petrikbe, ami álmaim iskolája volt.

Annnyit tudunk, hogy a Vegyipari Technikum/Szakközépiskola meghatározó szerepet játszott életükben. Kaphatnánk azért egy rövid bemutatkozást, mi történt önökkel, amíg eljutottak ideig, hogy pályatársaik irigyelt tanárai közzé kerültek, Rátz Tanár Úr életműdíjasok lettek.

N.G.: A mai napig nagy szeretettel gondolok vissza a pályakezdés éveire, amikor megélhettem volt igazgatóm, volt tanáram befogadó bizalmát, segítőkészségét. Szakmai szempontból igazán „mély vízbe dobtak”, hiszen a diákok között „mumusnak” tartott fizikai kémiát és műszeres laboratóriumi gyakorlatokat tanítottam, emellett osztályfőnöki és diákönkormányzat-patronál feladatokat is kaptam. Ekkor születtek a fiaim is, tehát mind a hivatás, mind az emberi oldal szempontjából értékes volt az alapozás. Épp ezért is volt nehéz a döntés 1973-ban, amikor az egyetemünk (akkor – és sokak számára ma is – Kossuth Lajos Tudományegyetem) hívott: legyek a Kémiai Szakmódszertani Csoport munkatársa. Az érzelmi fékek ellenére belevágtam, és ma is helytálló döntésnek tartom, hiszen nagyszerű, érdeklődő és a tanári pálya iránt igazi elkötelezettséget mutató tanárjelöltekkel dolgozhattam együtt. Büszke vagyok rájuk, hiszen elismerésre méltó pályát futottak/futnak kémia tanárként, igazgatóként, szakértőként egyaránt. Közülük többen megkapták a Richter Alapítvány „A kémia oktatásért” díját is.



A Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Vegyipari, Környezetvédelmi és Informatikai Szakközépiskola

1979 áprilisában ért a váratlan, de rendkívül megtisztelő hír: az igazgatóválsággal küzdő középiskolám tanári kara azt kezdeményezte Debrecen város oktatásirányítóinál, hogy engem nevezzenek ki igazgatójuknak. Ilyen elismerést is hordozó kihívásnak – volt vegyiparis diákként pláne – nem lehetett ellenállni, és erre bátorítottak családtagjaim, egyetemi barátaim is. Az egyetemmel később sem szűnt meg a kapcsolat, de 2007-ben történt nyugdíjba vonulásomig már az Alma Matert szolgáltam. Igazgatóként természetesen sokkal kisebb óraszámban taníthattam; az intézmény vezetése, folyamatos fejlesztése képezte elsődleges feladataimat. Mégis több diákom került be a Grand Prix Chimique nemzetközi vegyészversenyen szereplő magyar csapatba, még többen szereztek győzelmet vagy értékes helyezést kémia OKTV, illetve vegyész OSZTV döntőiben.

O.G.: 1984-től tíz évig a Petrik Lajos Vegyipari Szakközépiskolában tanítottam, két osztálynak érettségig, két osztálynak a technikus évből voltam osztályfőnöke. Két évig szaktanácsadó is voltam vegyipari szakképzési területen. Sommer László kedves kollégám beosztottjaként jártam az ország vegyipari szakképző iskoláit, segítettem a kollégák szakmai munkáját és az iskolák szakképzési tevékenységét. Tankönyvírásban, az első OKJ (Országos Képzési Jegyzék) kidolgozásában és a világbanki szakképzési program hazai adaptációjában is részt vettem – nagyszerű kollégák társaságában. Szabó Lászlóné kiváló igazgatóm – fiatal korom ellenére – műszaki igazgatóhelyettesének nevezett ki 1993-ban.

1994-ben személyes felkérést kaptam egy egyházi általános iskola beindításában való segítségre a Patrona Hungariae-ban. Büszke vagyok arra, hogy a Patrona Gimnázium hazánk egyetlen leánygimnáziuma, és a hozzánk járó tehetséges leányoknak 1994 óta én lehetek az egyik kémia tanára.

Az általános iskolának 2011-ig igazgatóhelyettese voltam. Gyakorlóiskolai vezetőként sok-sok tanítónő és hitoktató szakmai gyakorlatát, államvizsgáját szerveztem. Tevékenységemet 2011-ben a Váci Katolikus Felsőoktatásért Díjjal jutalmazták.

2011-től igazgatóhelyettesként a Patrona Tehetségpontot vezetem. Diákjaim sokféle sikert értek el hazai és nemzetközi kémiai versenyeken: OKTV-helyezések, Diákvegyész Napokon és Kémikus Diákszimposiumokon elért első helyezések és különdíjak. Az Osztrák Kémia Tanárok Egyesülete (VCO) nemzetközi kémiai projektversenyének különdíját – egyedüli magyar iskolaként – patronás diákjaim nyerték el. Tehetséggondozó munkámat 2012-



ben „A Tehetségek szolgálatáért” életműdíjjal, 2013-ban pedig „BONIS BONA – A Nemzet Tehetségeiért” díjjal jutalmazták.

Három dolgot még szeretnék kiemelni, amire igazán büszke vagyok.

- Előadóként több száz pedagógus előtt beszélhettem 2002-ben a Katolikus Pedagógiai Napokon a természettudományos nevelésről.

- Az Öveges József Tanáregylet 2007-ben könyv formában kiadta egy írásomat, melynek címe: Pedagógiai gondolatok Szent Lukács evangéliumában. Mindkettővel azt próbáltam érzékeltetni, hogy a természettudományok művelése hogyan gazdagíthatja a keresztény hitet.

- Eszter leányomnak én lehettem a kémia tanára. Eszter kutatóvegyész lett és szakmérnökként megbecsült vezetője egy sikeres vegyipari cégnek.

Mit gondolnak, mi adja ennek a díjnak a különleges értékét a pedagógustársadalomban?

N.G.: Az én számomra egyértelmű a válasz: ez a díj kizárólag a szakma elismerése, és nem játszanak szerepet benne egyéb tényezők.

O.G.: Ezt a díjat a pedagógusok Kossuth-díjának szokták mondani. Az egyházi iskolák pedagógusai között is rendkívüli megbecsülésnek számít a Rátz Tanár Úr Életműdíj elnyerése. Kémiából az eddigi 26 díjazott közül öten tanítanak egyházi iskolában, ketten evangélikus, hárman pedig katolikus gimnáziumban. Számomra nagy megtiszteltetés Velkey László és Kromek Sándor tanár urak után harmadik katolikus iskolai kémia tanárnaként megkapnom e nagyszerű díjat.

Iskolámból, a Patrona Hungariae Gimnáziumból én vagyok a második pedagógus, aki elnyerte ezt a megtisztelő díjat. Kolléganóm, Plósz Katalin M. Georgia nővér fizikából kapott 2007-ben Rátz Tanár Úr Életműdíjat.

Térjünk vissza a vegyipari technikumokhoz. A hetvenes években az oktatási kormányzat úgy gondolta, hogy a közoktatásban nincs szükség a túl specializált és magas szintű szakmai képzést adó technikumokra, hanem erősíteni kell a humán oktatást, és átalakították a technikumokat szakközépiskolákká. A technikummi végzettséget „5. év ráadásával” lehetett megszerezni. Hol érte önöket ez az átszervezés? Hogyan fogadták?

N.G.: A kérdésből kiderül: ez a jelentős tartalmi és strukturális átszervezés a Debreceni (akkor már Erdey-Grúz Tiborral elnevezett) Vegyipari Szakközépiskola élén ért – és nem váratlanul! Intézményvezetőként megéltem a gazdaság ez irányú igényeit, megtapasztaltam a hivatalos oktatás- és szakképzés-politika törekvéseit és – a több évtizedes „vegyiparis” fejlesztő hagyományokat követve – a tanári karral együtt, alkotó módon melléálltunk. Nem volt nehéz azokban az években belátni, hogy mindenkori tanítványink jövője szempontjából fontos, ha erősítjük az idegen nyelvi kultúrájukat, alkalmazóképes informatikai felkészítést kínálunk és azt sem, hogy igényes vegyészképzés biológiaoktatás nélkül nem lehetséges (az egykori vegyipari technikumokban nem létezett biológia tantárgy!). Voltak persze belső vitáink, volt sok-sok konzultáció/egyeztetés, de érdemben közreműködtünk a képzés hálótervének kialakításában, új tantárgyi tantervek, tankönyvek, példatárak létrehozásában. Az 1985/86. tanévben bevezettük a 2+3 éves technikus és a 2+2 éves érettségizett szakmunkásképzés új rendszerét.

O.G.: Én már az új, szakközépiskolai rendszerbe születtem bele, hiszen 1984-ben a Petrik Lajos Vegyipari Szakközépiskola lett

az első munkahelyem. A technikai képzést csak az iskola nagy öregjeitől, az ő személyes, szakmai véleményükön keresztül ismertem meg. A Petrik öregjei igencsak sajnálták, hogy a szakmai gyakorlatok időtartama lecsökkent, és az volt a félelmük, hogy kevesebb laboratóriumi gyakorlattal nem lehet jó vegyianyaggyártóvá, vegyésztechnikussá nevelni tanítványainkat. Az 1980-as évek közepére korszerű műveleti labort alakítottak ki a petrikes kollégák Bertalan Zsolt, a későbbi igazgató hathatós munkájának köszönhetően.

Nem vitatható a gondolat kiindulópontjának jogossága, a nyelvi, humán és számítástechnikai ismeretek növelésének indoklottsága. Bár rögtön felvethetnénk, hogy talán nagyobb baj szokott lenni az állampolgárok alapvető természettudományos ismereteinek hiányával, mint a humán műveltséggel. Amíg azonban az utóbbi szegénylivaló, az előbbivel kérkedni szoktak.

N.G.: Az említett változások nem rázták meg az iskolát; sem a természettudományos/műszaki, sem a humán oktatás igényességét. Büszke vagyok rá, hogy az iskola humán erőforrás-oldala országos viszonylatban is kiemelkedő volt: kandidátusok, egyetemi doktorok, többdiplomás és/vagy szakvizsgázott pedagógusok, megyei szaktanácsadók, tankönyvszerzők és -lektorok, tanárjelölteket felkészítő vezetőtanárok alkották a tantestület progresszív „magját”, köztük nem kis számban egykori diákjaink, akik megújítva, de elkötelezetten integrálódtak a tanári karba.

Emlékszem. Vegyipari, gépipari, építőipari – ezek az iskolák fogalmak voltak diákkoromban Debrecenben. Ezekbe bejutni kitüntetésnek számított. Elitiskolák voltak, mint a Tóth Árpád, a Kossuth, a Fazekas Gimnázium. Ide a legjobbak kerültek csak be. Jó, elsősorban szakmai képzést adtak, ahonnan jó eséllyel lehetett továbbtanulásra jelentkezni és szakmát is kínáltak.

N.G.: A rendszerváltozás hullámai (a gazdaság szétesése, átalakulása, a munkanélküliség megjelenése és erősödő mértéke stb.) nem hagyták érintetlenül a középfokú iskolahálózatot sem. A szülői társadalomban mind erőteljesebbé vált az „üljön csak minél tovább iskolapadban a gyerek, a pályaválasztást, szakmaszerzést toljuk minél későbbre” szemlélet, ami ellehetetlenítette a szakmunkásképző intézetek nagy részét, és a szakközépiskolákat is új megoldásokra, képzési kínálatuk bővítésére ösztönözte (esetünkben is ekkor, 1993-ban kezdődött a környezetvédelmi szakmacsoportos oktatás). Kétségtelen, hogy a korszak legújabb tartalmi és strukturális fejlesztése, az ún. „Világbanki modell” a szakközépiskolák esetében előrelépést jelentett, ám ezek az évek igazi térnyerést a gimnáziumok számára hoztak, különösen a

A Debreceni Vegyipari Szakközépiskola





6 és 8 évfolyamos struktúrákkal, a két tanítási nyelvű képzés bevezetésével.

O.G.: Amint már említettem, az ELTE vegyész szakán számtalan jól felkészült, a szakmai fogásokat, eljárásokat kiválóan ismerő petrikes tanult. A nyolcvanas évek közepén osztályfőnök lettem a Petrikben. Akkor még kellett szóbeli vizsgát és elbeszélést tartani, a jelentkezők nagy száma miatt. Valóban egyfajta elitképzés folyt még a nyolcvanas években is az öt(!) párhuzamos „általános vegyész” osztályban. 2014 júniusában volt a 25 éves érettségi találkozója ennek az osztálynak. Vegyiparral kapcsolatos területen dolgozik (kutatóvegyész, technikus, minőségbiztosító, vegyianyaggyártó, laboráns, vegyianyag-forgalmazó vállalkozó stb.) a végzett diákjaim kb. harmada. Lett közülük bölcsészdoktor, énekesnő, közgazdász, fodrász, kozmetikus, rendőr, tanítónő és egy kémia tanár is. Ketten külföldön dolgoznak – nem vegyipari szakterületen.

A vállalatok igényelték a technikai középkadereket. Az a képzettségi szint nekik éppen megfelelő volt. Hosszú évek múltán is nosztalgiaiával emlékeztek a technikusokra.

N.G.: Ezt helytálló és életszerű megállapításnak tartom és hozzászom: a technikus kvalifikáció és státus „kivezetését” nem lehetett végigvinni, pedig voltak rá törekvések. Az elmúlt bő két évtizedben többször módosult az Országos Képzési Jegyzék, de még a legutóbbi, 2012-es változatában is megjelenik ez a szakmai végzettség. Természetesen nem a technikai „hőskor” jellemzőivel, hiszen modulrendszerű a képzés, egyre gyakorlat orientáltabb – de: létezik! Csak tanulni is akarjanak a technikusjelöltek! Ezen a „fronton” nem igazán kedvezőek napjaink tapasztalatai.

Később jött a felsőfokú szakképzés bevezetése. Ezt nagyon jól fel tudták volna vállalni a technikumok/szakközépiskolák. Ráértették az egyetemre, ahol nem nagyon találták meg a helyüket, ma sem találják. Mennyire látják iskolájuk jövőjét perspektivikusnak egy közoktatásban részt vevő tanár számára?

N.G.: Messzemenően egyetérték, sőt elmondanám: igazgatói ténykedésem utolsó periódusában az volt a tervem, hogy – a mi egyetemünk Kémiai Intézetével fennmaradt jó kapcsolatokra építve – közös felsőfokú szakképzést valósítsunk meg. Ennek mind a személyi, mind az infrastrukturális feltételei is adottak voltak, ám az egyetemet lekötötték a bolognai fejlesztés feladatai, majd a jogszabályi feltételek is megszűntek egy ilyen együttműködéshez. Igazán sajnálom, mert értelmes dolog jött volna ki belőle.

Ajánlanák az iskolájukat rokon gyerekeknek, barátaik gyerekeinek?

N.G.: Igen, felelősen, mert sok szempontból sikerült az értékek átmentése, sőt több új képzés is beindult. Van azonban egy szempont, ami némileg fékez: a legújabb intézkedések hatására visszaállt a szakközépiskola funkciójának az 1970-es évtizedben képviselt normarendszere, vagyis szűkül a felsőfokú továbbtanulás lehetősége. Márpedig a szülők nem kis hányada egyetemi, főiskolai végzettséget szeretne gyermekének...

O.G.: Igen, a Petriket is és a Patronát is jó szívvel. Elkötelezett pedagógusok (tanítók, gimnáziumi és zeneiskolai és szakmai tanárok) élnek mindkét iskolában pedagógus hivatásuknak.

A Petrikben ma folyó szakmai képzést és tartalmi fejlesztéseket a TISZK rendszer kiépülése, a pedagógus-továbbképzések, az emelt szintű érettségik szervezése és a volt kollégákkal való beszélgetések segítenek megismernem. Aki magas színvonalú, világviszonylatban is korszerű vegyipari és laboratóriumi ismereteket és sokféle kamatoztatható tudást kíván szerezni, annak mindenképpen a Petrikben a helye. Ma már a környezetvédelmi és az informatikai szakok is fontos szerepet játszanak az intézményben.



A Patronában sokféle humán és reál irányú szakkör, sportkör, zeneiskola, kollégiumi foglalkozás áll diákjaink rendelkezésére. Sok-sok sikeres pályázatban való részvételünk nagyszámú ingyenes tehetségtábor tette lehetővé diákjainknak az elmúlt időszakban. Nálunk a diákok nemcsak nyelvet és tudományt, hanem emberséget és hitbeli elmélyülést is szerezhetnek.

Még fiatal emberek: tervek, elképzelések a közeljövőre?

N.G.: Gábor druzsám, Rátz Tanár Úr díjas kedves kollégám valóban fiatal ember. Én épp ezekben a hetekben készülök az 50 éves érettségi találkozónkra, ami azt is jelenti, hogy valójában már csak „redukáltabb” szakmai törekvéseim lehetnek. Ha az egészségem engedi, azért még szeretnék a „partvonalon kívülről”, vagyis szakértőként, szaktanácsadóként segíteni a közoktatást, a szakképzés mai szereplőinek – ha lesz rá igény. És szeretnék utána (vagy közben?) olyan vegyiparis kiadványt összehozni, amelyben az egykori és mai diákok üzenének egymásnak és a jövőnek...

Még fiatal emberek: tervek, elképzelések a közeljövőre?

O.G.: További szakmai terveim:

- diákjaimmal szeretném 2015-ben harmadszor is megnyerni az Osztrák Kémia tanárok Szövetsége (VCÖ) által kiírandó nemzetközi kémiai projektversenyt;
- szeretném, hogy diákjaim sikeresek legyenek az egyetemen és majd a szakmai és magánéletben is;
- be kívánok lépni – 2014-ben – a Magyar Kémikusok Egyesülete Kémia tanári Szakosztályába;
- be kívánok lépni – 2014-ben – a Kutató Tanárok Országos Szövetségebe;
- szeretnék cikket írni a Középszak Kémiai Lapokba és/vagy A Kémia Tanítása módszertani folyóiratba egy – az IBL alapelveinek alkalmazásával – általam kidolgozott kísérlet témakörében;
- az ISIT-projektben megismert szövegértés-kompetencia fejlesztési módszereit szeretném továbbadni kollégáimnak és a katolikus iskolák tanárainak;
- szeretnék ismét – húsz év után – szaktanácsadó lenni.

Olvasóink nevében ismételtelen gratulálunk Cs. Nagy Gábornak és Oláh Gábornak ehhez a kiemelkedően szép és eredményes tanári-pedagógusi életúthoz! Kívánunk a további szakmai sikerek mellett jó erőt és egészséget, családi boldogságot, hogy élvezni tudják azt a megbecsülést, társadalmi elismerést, amit a legértékesebb tanári díj elnyerése jelent.

Kiss Tamás



Braun Tibor

■ ELTE, Kémiai Intézet, MTA Könyvtár és Információs Központ

Gasztronómiai íz-, illat- és zamatpárosítások molekuláris háttere és új lehetőségei

Előszó

A dolgozat nem élelmiszer-kémiai, hanem gasztronómiai szempontból kívánja témáját ismertetni, miután előző munkánkban már definiáltuk a gasztronómiát, az ételek és italok szakértő ismeretét, illetve élvezésük művészetét [1]. Ott arra is kitértünk, hogy a múlt évszázad közepén magyar kutatói segédlettel (Kürti Miklós, Oxford) létrehozott molekuláris gasztronómia azt kívánja megismerni és hasznosítani, hogyan működik a főzés és sütés a molekulák és szupramolekulák szintjén, illetve mi történik a molekulákkal, amikor hőhatás éri őket.

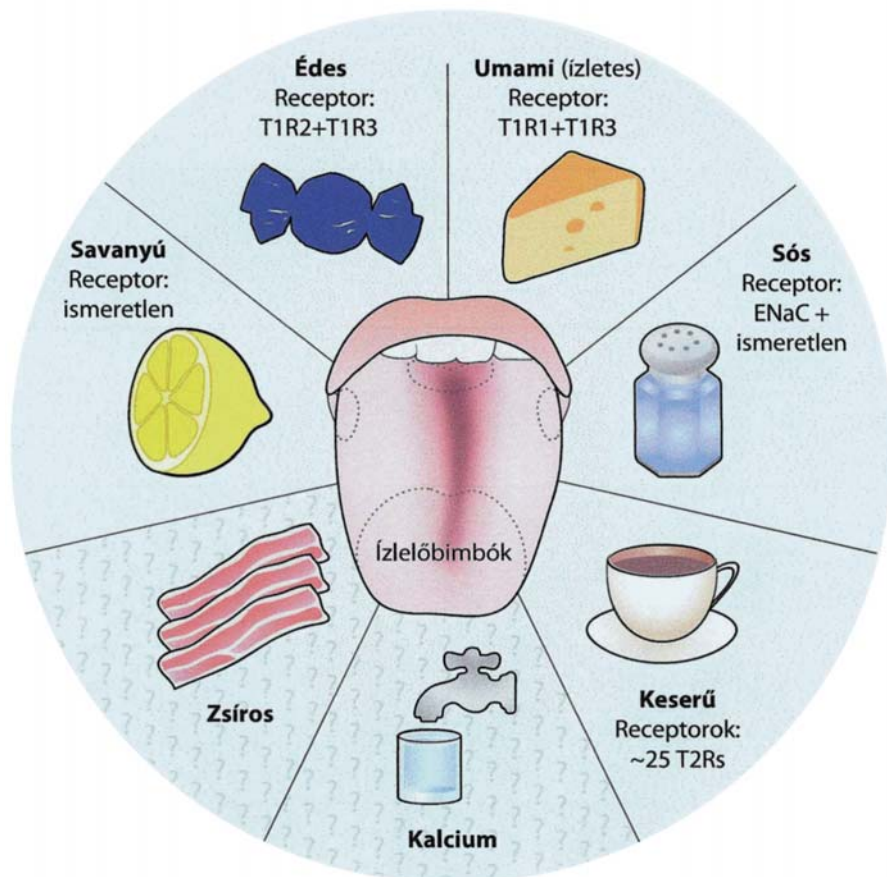
A mostani írás a fentieket kiegészítve azokkal az ismeretekkel foglalkozik, hogy mi történik, amikor az ízeket keverik, valamint azt is elemezzük, hogy a gasztroélvező hogyan értelmezi az ízeket, illatokat és zamatokat, és mindez milyen kihívásokat jelent azokkal a tradicionális érzékelésekkel és szokásokkal szemben, amelyekről egy étel ízletesnek és élvezetesnek tűnik. Ehhez alapvető premisszánk, hogy az elemzéshez az új kémiai, fizikai elemzési és adatbányászati eljárások, illetve azok alkalmazásai számos lehetőséget nyújtanak gasztronómiailag új íz-, illat- és zamatkombinációk létrehozására és vizsgálatára, s ezek nemcsak kiterjeszthetik, sőt forradalmasíthatják étkezési ízlésünket és szokásainkat, hanem képesek átértelmezni az ételek élvezetét is. Bizonyos ételeket együtt fogyasztva ízletesnek érzünk, másokat nem. Ennek az egyszerű megfigyelésnek az eredete az emberi érzékek biokémiájában rejlik.

Bevezetés

Egy étel minőségéről, ízletességéről, illetve élvezeti fokáról születő döntés messzemenően személyes jellegű. Mint tudjuk, ételünkkel az érzékelésen keresztül kerülünk kapcsolatba, azaz tapintás, látás, hallás, ízlelés és szaglás útján. Talán furcsának tűnik, de például a tapintási és látási érzékelések messzemenően befolyásolják az ételek ízével kapcsolatos észleléseinket. Másképp érezzük az étel ízét, ha jó minőségű porcelántányérból vagy ezüst-, illetve papírtányérból eszünk, azaz az ízérzékelés a felhasznált edény minőségétől is függ. Hasonlóan, az étel színe is befolyásolhatja ízlésünket; gondoljunk arra, hogy milyenek éreznénk egy kékre festett libacombot...

Az étel élvezésében kémiai érzékelésünk a legjelentősebbek. Ezek az íz, ízlelés, az illat (szag) és a *chemesthesis* [2] (e szónak nincs magyar nyelvű szótári megfelelője, talán „kemesztézis”-re lehetne magyarítani). Ez utóbbit a bőr és a nyálkahártyák kémiai érzékenységeként definiálják, és akkor jelentkezik, amikor a vegyületek aktiválják a más érzékeinkhez, például fájdalomhoz, tapintáshoz és égetéshez kötődő receptorokat. Ezek a kémiailag indukált érzésreakciók nem illeszkednek a hagyományos ízlési és szagérzékelési kategóriákhoz. A kemesztetikus érzékelésre példa a paprikától, illetve hatóanyagától, a kapszaicintól származó égető, csípős érzés, vagy a mentol okozta hűsítő érzet. Előbbieket a gasztronómiában csípősségnek vagy pikánsságnak is nevezzük.

Az ízelelés vagy kóstolás a szájból levő szenzorokkal érzékeli a folyadékokban oldott kémiai vegyületeket. Az illat és a szaglás a levegőben lévő vegyületeket detektálja, de érzékeljük azokat az illatokat is, amelyeket az élelmiszerek a szájüregekben emittálnak. Ízlelésünk az édes, savanyú, sós és keserű ízek érzékelésére alkalmas. Újabban ezekhez további ízek csatlakoztak, mint az umami, a zsíros és a kalcium (1. ábra). Az 1905-ben Japánban felfedezett furcsa, gyámoltalan elnevezésű umami japánul kellemesen felséges ízt jelent, és valós létezését csak 2000-ben sikerült a megfelelő receptorokkal igazolni [5]: az umami tulajdonképpen egy aminosav, illetve a nátrium-L-glutamát íze, aminek egyik fő jellegzetessége, hogy más izmolekulákkal társulva fokozza azok intenzitását és az ízlelőbimbókra gyakorolt hatását. Ugyanakkor közismert, hogy több ezer ízt és illatot felismerünk és érzékelünk. A nyelvünkön, a szájpadlásunkon és a felső torkunkon lévő kemoreceptorok felismerik a megfelelő ízjelzéseket, például a keserűt, a savanyút, az édeset. Ezen észlelések mindegyike annak érdekében fejlődött ki, hogy információt közöljön a különösen kívánatos (például só, cukor, aminosavak), vagy nemkívánatos (toxikus alkaloidák) élelmiszerekről. A receptorok a nyelven lévő ízlelőbimbókban helyezkednek el. Az ízlelendő molekulák az ízlelőbimbók csúcsán lévő pórusokon keresztül jutnak a bimbókba, és adszorbeálódnak az ízreceptor sejteken. Az édes ízt érzékelő receptorfehérjéket például aránylag csak a közelmúltban azonosították. [3,4] Mindezek a



1. ábra. Ismert és javasolt ízek [6]

receptorok a G-fehérjéhez csatolt receptorok supercslád alosztályát képezik, amelyeket T_1R_i ; T_1R_2 ; T_1R_3 és T_2R -ként azonosítottak. Például a T_1R_2 – T_1R_3 heterodimerek az érzékelői az édességnek, míg a T_2R -ek a keserű ízt érzékelik. A savanyú és sós ízek érzékelői lényegében ioncsatornák.

Az eltelt évszázadok során az ételek előállítását empirikusan kialakított receptekben rögzítették, és az ízek, zamatok minőségét, élvezeti értékét [6] az egyéni, sze-

mélyes ízlés határozta meg. Azt, hogy a különböző élelmiszer-alapanyagok közül mit, mivel, hogyan és milyen arányban kell vagy lehet párosítani, keverni, mint említettük, az empiria jellemezte, és az élvezetőséget a kellemesség, illetve elfogadhatóság műveletileg közelebb hozta a művészethez, mint a tudományhoz (szakácsművészet).

A molekuláris és szupramolekuláris [1] gasztronómia bevezetésével manapság eg-

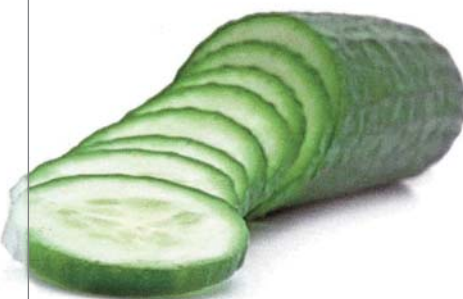
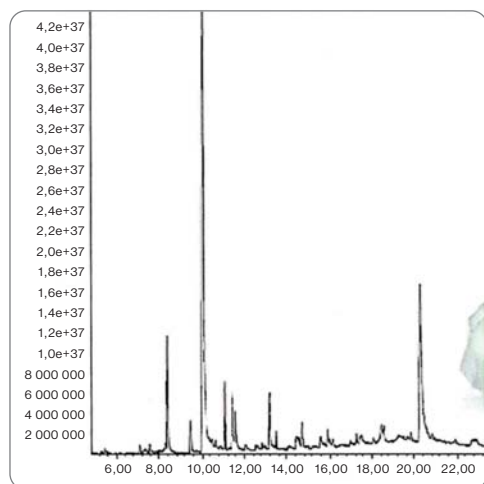
zaktabb gasztronómiai ismeretekkel rendelkezünk a főzés és sütés alatt végbemenő fizikai és kémiai jelenségekről, de az ízek párosításával, keverésével, illetve molekuláris háttérével és az ezek során kialakuló ízhatások vizsgálatával még csak mostanában kezdett az élvezeti gasztronómiai [6] kutatás foglalkozni. Ennek az útnak az elejéről számolunk be a továbbiakban.

Ízmolekula-hasonlóság

Az ízmolekula-hasonlósági elvet *Heston Blumenthal* angol séf és molekuláris gasztronómus vetette fel először 2002-ben, majd részletezte számos példával „fűszerezve” 2008-ban [7,8]. Blumenthal a séfje és tulajdonosa a berkshire-i Fat Duck nevű három Michelin-csillagos vendéglőnek, és nem kutató ugyan, de vendéglője mellett nagyon jól felszerelt műszeres fizikai kémiai laboratóriumot is működtet. Az általa alkalmazott elv szerint, ha két étel azonos illékony molekulákat tartalmaz, akkor keverékük étkezéskor kellemes íz- és illatérzetet kelt. Az élelmiszer-alapanyagok elemzésére folyadékkromatográfiát és tömegspektrometriás gázkromatográfiát alkalmazva számos élelmiszer-alapanyagot vizsgált. Például a **2. ábra** a nyers uborka illóízanyagainak a gázkromatogramját mutatja be. Fentiek alapján Blumenthal vendéglője számos új, nem konvencionális, izletes ételkombinációt kínál, például jázminos sertés májat vagy kaviáros fehér csokoládét [8]. Blumenthal felkérte *François Benoit*, a világ második legnagyobb illat-, izgyártó és -forgalmazó, Svájcban székelő *Firminich S. A.* [9–11] nevű cégének fővegyészét, hogy működjenek együtt az ízhasonlóság vizsgálatában. Blumenthalék elképzelései gyorsan elterjedtek a világban, és számos séf egyedül vagy illatkémikusok együttműködésével rengeteg új, izletes ételkombinációt hozott létre. Így például *Martin Lerch* norvég kémikus, aki fémorganikus vegyületekkel foglalkozik, Blumenthalék nyomait követve megalapította az interneten a *Khymos* nevű [12] blogot és a „They Go Really Well Together (TGRWT)” (Valóban kitűnően illenek egymáshoz) sorozatot, amelyben főleg saját tapasztalatait ismerteti az ízek hasonlósági elve alapján kialakított izletes ételekről. Ezek egyike például a földieper korianderrel: ezt az ízeletről szóló kézikönyv [13] nyomán kiválasztott (7)-3-hexanal ízvegyület alapján alkotta, amely mindkettőben jelen van.

Blumenthal, bevallása szerint, az ízek hasonlóságát alapul vevő ételeinek kidolgozásakor erősen támaszkodik az eredeti-

2. ábra. Nyers uborka ízanyagainak gázkromatogramja [7]





leg 1963-ban létrehozott „Volatile Compounds in Food” [14] című nyomtatott adatbázisra. Ez az adatbázis az International Organization of the Flavour Industry szervezet révén 2000-tól az Interneten is hozzáférhető [14].

Számítógépes ízpárosítás (élelmiszer-párosítás)

Szintén a Blumenthal által bevezetett ízhasonlósági elv ihletése nyomán a már említett *François Benzi* vegyész és *Bernard Lahousse* biomérnök Belgiumban magánvállalkozásként megalapította a Sense for Taste (Ízérzet) nevű céget azzal a céllal, hogy főleg séfeknek és élelmiszer-vállalatoknak, de magánszemélyeknek is innovatív ízpárosításokat forgalmazzanak. A cég *Foodpairing* című weblapja elsősorban folyadékromatográfiával és tömegspektrometriás gázkromatográfiával, de más műszeres analitikai eljárásokkal is az élelmiszerek ízeit elemzi, és saját algoritmusokkal szoftvereket fejleszt és forgalmaz kompatibilis ízpárosítások létrehozására. Ezek a cég weblapján hozzáférhetőek [15]. A 3. ábra a párosítások vizualizálására alkalmas „fákat” mutat be. A továbbiakban szó szerint, prospektusszerűen ismertetjük az interaktív weblap alkalmazási lehetőségeit [16].

„Az eredeti *Foodpairing* weblap körülbelül 250 különböző alapanyag párosításait tette hozzáférhetővé (a 3. ábrán látható) statikus ábrák formájában. Magát a megvalósítást – azaz hogy miből mennyit és milyen formában használjunk fel ahhoz, hogy valóban működjön a párosítás – az olvasóra hagyták, bár az egyes kategóriákat – például gyümölcsök, húskok vagy halak – külön ágakként tüntették fel.

2011-től megújult kezelőfelülettel megjelent a *Foodpairing* profi változata, amit eleinte csak a gasztronómia területén dolgozók számára kínáltak. Emellett tovább

működött az ingyenes, mindenki számára elérhető statikus oldal. 2012-ben viszont megszűnt az ingyenes oldal, és ezzel együtt átalakult a *Foodpairing* üzleti modellje is. Ma már bárki regisztrálhat a *Foodpairing* oldalán, és ingyen böngészhet 100 alapanyag között. Aki a teljes, folyamatosan bővülő és jelenleg 870 alapanyagból álló adatbázishoz szeretne hozzáférni, havi 15 euróért (azaz egy szakácskönyv árértékéért) vagy évi 129 euróért (azaz egy-két többcsillagos séf könyvének árértékéért) válthat ki profi hozzáférést. Tehát több szinten is ki lehet próbálni és meg lehet ismerni az új kezelőfelületet és az alapanyagok közötti párosításokat.

Az alapanyagok közötti böngészés megkezdésekor először talán a modernebb megjelenés tűnik fel. Az egyes alapanyagok ábrái felépítésüket tekintve hasonlítanak statikus elődjeikre, de kissé rendezettebbek és áttekinthetőbbek is lettek. A megtekintett alapanyag „párosításgráfja” (3. ábra) közepén továbbra is magát az alapanyagot találjuk. Körben a különböző kategóriák ikonjai előtt három példát látunk, amennyiben létezik egyáltalán párosítás az adott kategóriából. Ha zavaróak a kategóriák ikonjai, akkor a jobb alsó sarokban található pöttyre kattintva eltüntethetjük őket. További kategóriánkénti párosítási javaslatért a központi alapanyag közelében található csomópontokra kattintva nagyíthatunk bele az egyes ágakba. Itt további alkategóriákat is találunk, például zöldségeknél magukat a zöldségeket és a gombákat, vagy halaknál a kagylókat, a tengeri és édesvízi halakat, valamint egyéb tengeri élőlényeket (például algák, kaviár). Az eredeti ábrához a középső főalapanyagunkra kattintva juthatunk vissza.

Az egyes alapanyagokra kattintva rövid leírást olvashatunk az adott alapanyagról, gyakran képpel is ellátva. Ezen túl két lehetőség közül is választhatunk, mégpedig átvándorolhatunk a kiválasztott alapanyag

párosításgráfjához, és ott folytathatjuk a böngészést, vagy hozzáadhatjuk az alapanyagot a párosításlistánkhoz. Az eddig összegyűjtött párosításainkat a jobb oldalon tekinthetjük meg, törölhetünk belőlük alapanyagokat és megnézhetjük a gráfjait is. A kiválasztott alapanyagok a bal oldali ábrákban is kiemelve, nagyobb betűkkel jelennek meg az adott kategóriájukban.

Arról, hogy melyik alapanyag mennyire jól párosítható a kiválasztott alapanyaggal, egyrészt magából a párosításgráfból értesülhetünk. A középső alapanyag körül koncentrikus körök találhatók, melyeknél a közelebbi körön belül elhelyezkedő alapanyagok jobban harmonizálnak az adott alapanyaggal. Másrészt a jobb oldali lila nagyítóra kattintva nyithatjuk meg a keresőt, s itt ötös skála alapján sorrendbe gyűjtött listaként tekinthetjük meg a párosítható alapanyagokat.

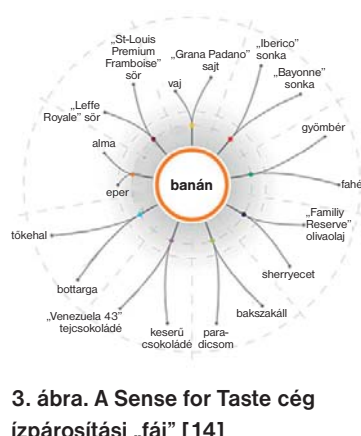
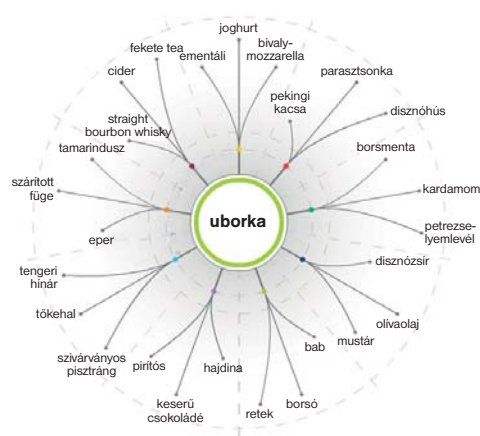
Ebben a keresőben számos új és igazán segítőkész funkciót is találunk. Üres jobb oldali párosításlista esetén mind a 870 alapanyag között kereshetünk. Amint viszont kiválasztottunk egy vagy néhány alapanyagot a párosításlistánkba, életbe lép a „scope”, azaz látókör funkció. A bal oldali ikon a párosításlistában szereplő alapanyagaink saját párosításkapcsolatainak egyesített listáját mutatja, míg a másik ikon a metszetét. Tovább segíti az áttekinthetőséget a kategóriák leszűkítése, például ha csak ecetet keresünk a jelenlegi párosításlistánkhoz. (Végül az összeállított kombinációinkat elmenthetjük, és akár receptet is begépelhetünk hozzá!)

Rengeteg bővítésen és igen jól sikerült újításon ment keresztül a *Foodpairing* weblapja. Aktuális formájában kitűnően használható új ételek, receptek tervezése, vagy akár meglévő receptek megújítása során is” [16].

A fentiekben ismertetett algoritmusok és szoftver részleteit Lahousse nem volt hajlandó közzétenni, annyit azonban elárult, hogy azok több mint két illékony vegyületet vesznek tekintetbe egy vizsgált élelmiszerpár esetében, és hozzátette, hogy szerinte az ember különböző vegyületeket különböző küszöbértékeknél érzékel, így erre is figyelni kell.

Íz-, illat-, zamathálózatok

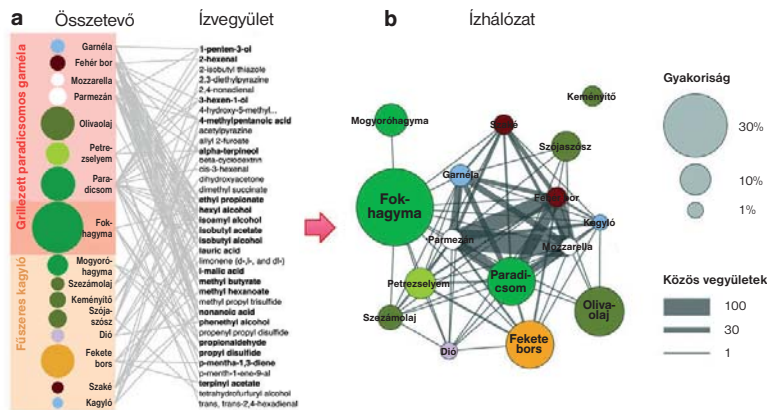
Ugyancsak a Blumenthal- és Benzi-Lahousse-féle alapokból indulva, de felvetve, hogy ezek nem tudnak kielégítő magyarázatot adni minden gasztronómiai ízkombinációra, az angol *Sebastian Ahnert* cam-



3. ábra. A Sense for Taste cég ízpárosítási „fái” [14]



KITEKINTÉS



4. ábra. Íz-, illat- és zamathálózat [17]

bridge-i elméleti fizikus és műkedvelő molekularis gasztronómus által vezetett csoport (amelynek *Barabási Albert-László* román–magyar–amerikai fizikus is tagja volt) kidolgozott egy ízhálózatot [17]. Ebben több mint 50 000 online konyharecept hozzávalóját és íz-, illetve illat- és zamatvegyületeit (amihez forrásként egy kézikönyv szolgált [19]) rendelte egymáshoz. Ezeket észak-amerikai, latin-amerikai és ázsiai jellegük szerint csoportosították annak köszönhetően, hogy a gasztronómusok lehetővé tették a gasztronómiai összetevők körülbelül 51 íz-, illat- és zamatvegyületének azonosítását.

Az eredményeket páros gráfba tömörítették. Az egyik oldal 381, az egész világon

használt recept összetevőit, a másik az említett összetevők 1021 íz-, illat- és zamatvegyületét tartalmazza (4.a ábra). Ennek a gráfnak a vetülete az az íz-, illat- és zamathálózat, amelyben két csomópont (összetevő) akkor kapcsolódik, ha legalább egy íz-, illat- és zamatösszetevőjük közös (4.b ábra). Az egyes kapcsolatok, vonalak súlya a közös íz-, illat- és zamatvegyületek számából adódik, így az íz-, illat-, zamathálózat súlyozott hálózat.

Mivel bizonyos íz-, illat- és zamatvegyület nagyszámú összetevőben is szerepel, a létrejövő íz-, illat- és zamathálózat közvetlen vizualizálásához a hálózat túlságosan sűrű. Ezért egy eljárással minden összetevőnek meghatározták a statisztikailag szig-

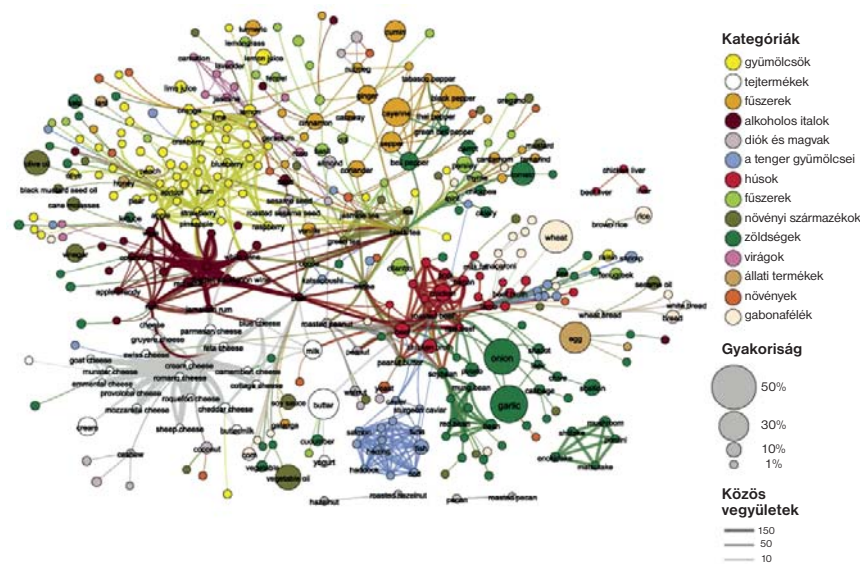
nifikáns kapcsolatait (5. ábra). Nem meglepő, hogy a hálózat mindegyik modulja egy ételosztálynak felel meg, például hússoknak (vörös) vagy gyümölcsöknek (sárga). A modulok közötti kapcsolatok tájékoztatnak azokról az ízekről, illatokról és zamatokról, amelyek összetartják a különböző élelmiszer-csoportokat. Így például a gyümölcsök és tejtermékek közel vannak az alkoholos italokhoz, de a gombák elkülönülnek, mivel nagyszámú íz-, illat- és zamatvegyületük csak más gombákéval közös.

Az íz-, illat- és zamathálózat lehetővé tette, hogy a szerzők az ételpárosítás-hipotézist topológiai kérdésként fogalmazzák újra: tehát gyakrabban használunk-e olyan alapanyag-párosításokat, amelyek erősen kapcsolódnak az íz-, illat-, zamathálózatban, vagy igyekszünk ezeket elkerülni? Ennek a hipotézisnek az ellenőrzésére a szerzőknek szükségük volt olyan, az emberek által kedvelt alapanyag-kombinációkra, amelyek hozzáférhető kurrens ételreceptekben. A szerzők két amerikai receptgyűjtemény (*epicurious.com* és *allrecipes.com*) 46 498 receptjét használták fel a munkához. A világkonyha kimondottan nyugati értelmezését elkerülendő, egy koreai (*menupan.com*) adatbázist is igénybe vettek. A recepteket földrajzilag megkülönböztethető (észak-amerikai, nyugat-európai, dél-európai, latin-amerikai és kelet-ázsiai) konyháként csoportosították.

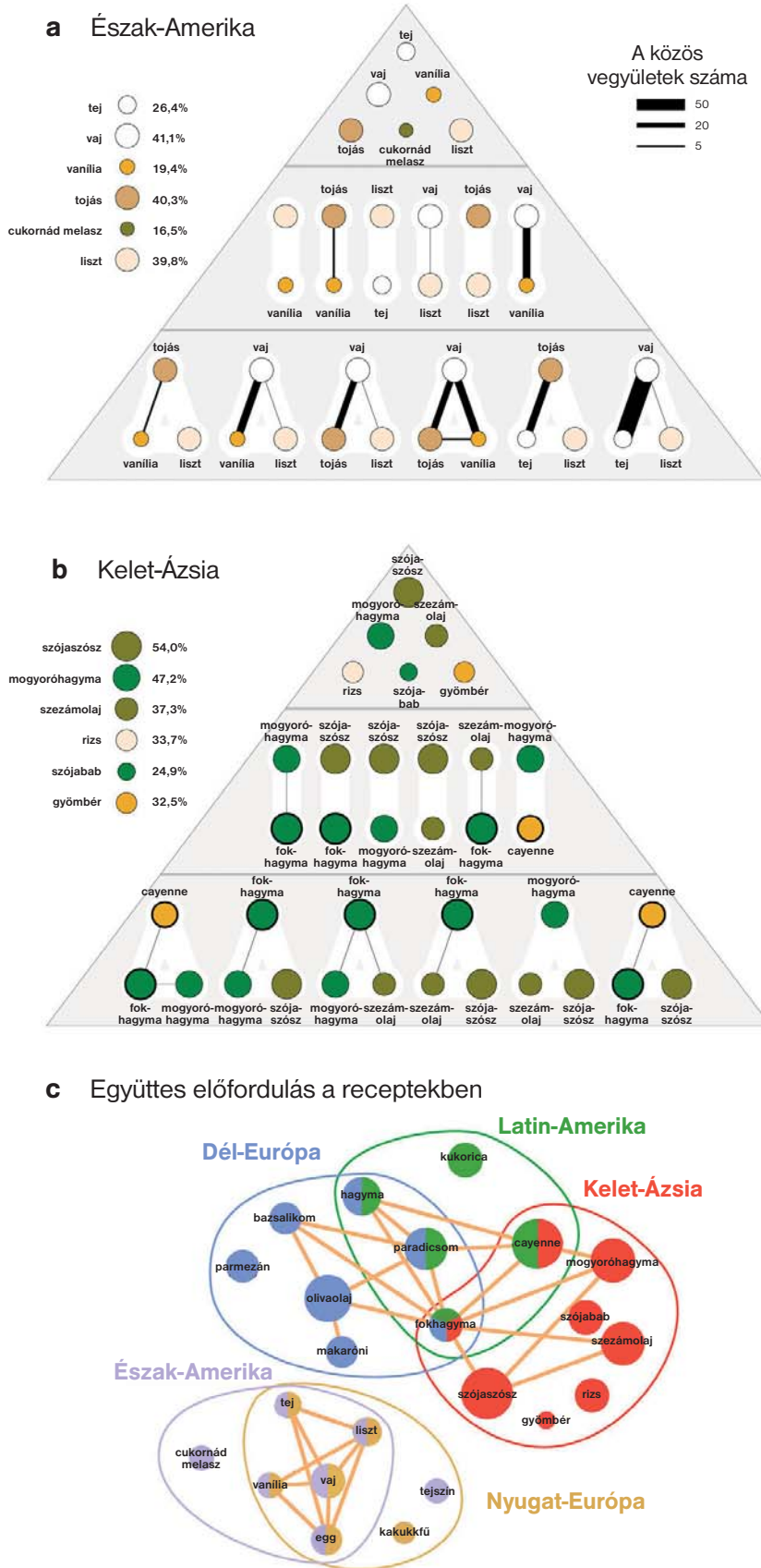
Az alapanyagok száma egy átlagos receptben nyolcnak bizonyult, eloszlásuk kötött, ami jelzi, hogy ritkák azok a receptek, amelyek nagyon sok vagy nagyon kevés alapanyagból készülnek. Ezzel szemben a különböző specifikus alapanyagok népszerűsége négy nagyságrendben változik, ezáltal igazolva azt, hogy milyen nagy különbségek vannak a receptekben használt alapanyagok összetevői között. Ez még meggyőzőbben látható a 6. ábrán.

Konkrétumokat is felsorolva, egy észak-amerikai ételben, például a garnélarakos-paradicsomos rostonsültben egyaránt van 1-penten-3-ol, és a recept szerinti mozzarella, parmezán és paradicsom tartalmaz 4-metilpentánsavat. Ez a nyugat-európai receptekben szintén előfordulhat. Ellenben a kelet-ázsiai és a dél-európai receptekben ellenkező a trend, az alapanyagok valószínűleg nem osztoznak az íz-, illat- és zamatösszetevőkben. Egy másik példa: az észak-amerikai receptek gyakori összetevői, a tej, vaj, kakaó, vanília, tejszín és tojás közös íz-, illat-, zamatvegyületeket tartalmaznak sok más élelmiszerrel. Amikor ezeket az alapanyagokat kiiktatták a vizs-

5. ábra. Az íz-, illat- és zamathálózat gerince [17]. Mindegyik csomópont egy alapanyagot jelez, a csomópont színe az ételcsoportot mutatja, míg a csomópont mérete az összetevők gyakoriságára utal. Két alapanyag akkor kapcsolódik, ha jelentős számú közös íz-, illat- és zamatvegyülete van. A vonalak vastagsága a két alapanyag közös vegyületeinek számát érzékelteti



A kategóriák közötti kapcsolatok tájékoztatnak azokról az ízekről, illatokról és zamatokról, amelyek kialakítják a különböző élelmiszer-csoportokat.



6. ábra. Íz-, illat- és zamatpiramisok az észak-amerikai és ázsiai konyhákban (a,b) [17]. A piramisok a legautentikusabb hat alapanyagot, -párt és -tripletet tartalmazzák. A csomópontok mérete arra utal, hogy egy adott konyha receptjei mennyit használnak az alapanyagból. A színek az alapanyag kategóriáját jelzik (l. 5. ábra), a vonal vastagsága a közös vegyületek számát mutatja. c) A hat legautentikusabb alapanyag és alapanyag-pár a regionális konyhákban. A csomópont színe a konyhát, a vonalak az alapanyagpár relatív gyakoriságát tükrözik

gálatokból, a közös ízek, illatok és zamatok érzete is gyengült. Ezzel szemben amikor az ázsiai konyhánál kiiktatták az olyan alapanyagokat, mint például a marhahús, gyömbér, sertéshús, cayenne bors, csirkehús, hagyma, amelyek a legkevesebb közös íz-, illat- és zamatvegyületet tartalmazták, az íz-, illat-, zamatösszetevők száma megnőtt.

Végszó

Az élelem-felhasználás, a gasztronómiai és érzékelésbiológiai adathozzáférés hatására egy átfogóan új, már e dolgozatban is említett adatbányászat nyomán felmerült a „computational gastronomy” (számításgasztronómia) elnevezésű kutatási terület [18] szűkségessége.

A lehetséges fejlődésre gondolva talán jelen területre is reményt keltők lehetnek a biológiai, biokémiai receptorokat kiegészítő, a kémiai szenzorokra alapozott elektronikus orrok és nyelvek fejlesztésére vonatkozó kutatások. Ezeket jelenleg a gasztronómiában még nem, de az élelmiszeriparban már igénybe veszik [20].

IRODALOM

- [1] Braun Tibor, Empíriától a tudományig. Molekuláris és szupramolekuláris gasztronómia, Magy. Kém. Lapja (2011) 66, 113.
- [2] <http://en.wikipedia.org/wiki/Chemesthesis>
- [3] E. Adler, M. A. Horn, K. L. Mueller, J. Chandrasekar, N. J. P. Ryka, C. S. Zucker, Cell (2000) 100, 683.
- [4] J. Chandrasekar, K. L. Mueller, M. A. Horn, E. Adler, L. Feng, L. Guo, C. S. Zucker, N. J. p. Ryka, T2Rs Function as Bitter Taste Receptors, Cell (2000) 100, 703.
- [5] <http://en.wikipedia.org/wiki/Umami>
- [6] K. Kupferschmidt, Following the Flavor, Science (2013) 340, 808.
- [7] H. Blumenthal, The Guardian, 2002. május 4.
- [8] H. Blumenthal, The Big Fat Duck Cookbook, Blumsbury, London, 2008.
- [9] <http://www.kiserletikonyha.hu/2009/11/konyvajanlofat-duck-cookbook.html>
- [10] <https://www.foodpairing.com/en/what-is-foodpairing/the-science-behind>
- [11] <http://wikipedia.org/wiki/Firmenich>
- [12] <http://blog.khymos.org/about/>
- [13] Handbook of Flavor Characterization: Sensory Analysis, Chemistry and Physiology, CRC Press, Boca Raton 2004.
- [14] B. Nijssen, K. van Ingen, J. Donders, Volatile Compounds in Food, version 10.1.1 (2008), www.vcf-online.nl
- [15] <http://en.wikipedia.org/wiki/Foodpairing>
- [16] <http://www.kiserletikonyha.hu/2012/02/foodpairing-avagy-az-alapanyagok.html>
- [17] Y. Y. Ahn, S. E. Ahnert, J. P. Bagrow, A.-L. Barabási, Flavor network and the principles of food pairing, Sci. Rep. (2011) 1, 196.
- [18] S. E. Ahnert, Network analysis and datamining in food science: the emergence of computational gastronomy, Flavour (2012) 2, 4.
- [19] G. A. Burdock, Fenaroli's Handbook of Flavor Ingredients, 6th edition, CRC Press, Boca Raton, 2009.
- [20] E. A. Baldwin, J. Bai, A. Plott, Sh. Dea, Electronic Noses and Tongues: Applications for the Food and Pharmaceutical Industries, Sensors (2011) 11, 4744.

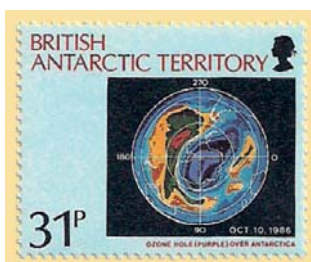
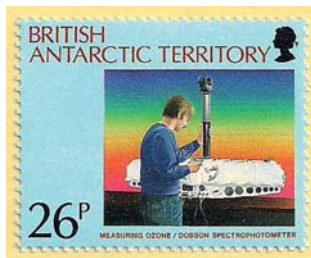
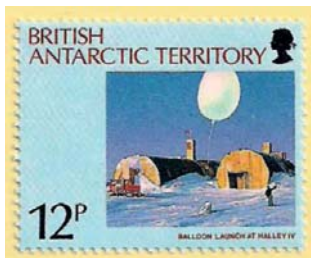


A légkör kémiája: az ózonpajzs



Az oxigén háromatomos módosulatát Christian Friedrich Schönbein (1799–1868) svájci kémikus és fizikus fedezte fel 1839-ben.

Az ózon természetes körülmények között a talaj közeli levegőben viszonylag kis mennyiségben fordul elő. A sztratoszférában lévő ózonréteget francia kutatók 1913-ban mutatták ki ultraibolya sugárzás tartományában végzett mérésekkel. Az ózon a Nap ultraibolya sugárzásának (UV-C, UV-B) hatására, az oxigénmolekulák felhasításával keletkezik a sztratoszférában alsó rétegében, 10–29 km magasságban. Az ózonmolekula azonban ultraibolya sugárzás hatására maga is széthasad. Dinamikus egyensúly alakul ki, amely biztosítja az ózonréteg állandóságát. Az ózonréteg a Nap káros UV-sugárzásának elnyelésével lehetővé teszi a szárazföldi életet.



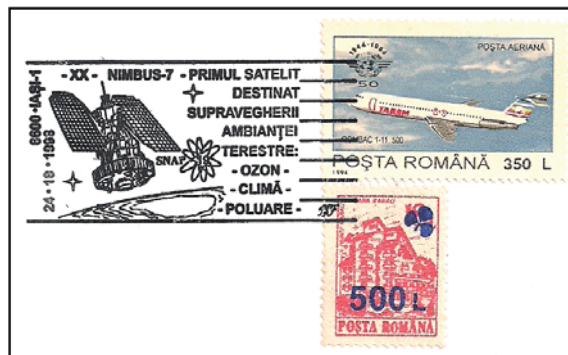
Az angol fizikus és meteorológus, Gordon Dobson (1920–1960) a Föld felszínéről elsőként mérte a légkör ózontartalmát az erre a célra kifejlesztett UV-spektrométerével.

A sztratoszférában lévő ózonréteg bomlását az Antarktisz felett angol kutatók figyelték meg először, a Halley Bay kutatóállomáson. 1977 és 1984 között az ózonréteg 40%-kal csökkent az egész kontinensre kiterjedő 12–

24 km magasságban, a tavaszi (a déli féltekén az októberi–decemberi) időszakban.



Az ózonréteg vastagságát Dobson-egységben mérik. Egy Dobson-egység 0,01 mm vastag ózonrétegrek felel meg normál állapotban a Föld felszínén. A szokásos érték 275 Dobson-egység, ami tehát 2,75 mm vastag ózonrétegrek felel meg a földfelszínén. Nem csoda, hogy ilyen törekeny felettünk az ózonpajzs.



Ballonokra, repülőgépekre (NASA ER-2, TRANSALL C-160) és műholdakra (pl. Nimbus 7, ERS, ENVISAT) telepített ultraibolya-spektrométerekkel és a LIDAR műszerrel folyamatosan mérik az ózontartalmat és a nyomnyi mennyiségben előforduló, ózonbontó gázok (pl. dinitrogén-oxid, perfluorozott, perklorozott szénhidrogének, az ún. CFC-k) koncentrációját.



Kimutatták, hogy a spray-k hajtógázai az ózonkoncentráció csökkenéséhez vezetnek. Ebben a sarkvidéki, salétromsavból és vízből álló jégfelhőknek (sarki sztratoszferikus felhők) van szerepük, amelyek –80 °C hőmérsékleten kifagynak a levegőből, és katalizálják az ózon bontását.

Az ózonréteget a napkitörések keletkező mágneses viharok is bontják. A Nap ultraibolya és lágy röntgensugárzása atomi nitrogénre hasítja szét a nitrogénmolekulát. Ez az ózonnal reagálva nitrogén-monoxidot képez, miközben oxigénmolekula is képződik.



Az 1989. január 1-jén életbe lépett Montreali Egyezményt aláíró országok kötelezték magukat, hogy a CFC gázok gyártását csökkentik, majd teljesen megszüntetik. A Meteorológiai Világszervezet becslései szerint csak 2060–75-re várható az ózonréteg regenerálódása. Addig ózonréteg-



csökkenéssel kell számolnunk. Emiatt a Nap nagy energiájú sugárzása eléri a földfelszínt, és ezzel erősen növeli a bőrkárosodás kockázatát, a leégés veszélyét, a bőrrák kialakulását, valamint elősegíti a szürke hályog kialakulását a szemben. **Boros László**



Vegyészkalendárium

Pap József Sándor rovata

LEO HENDRIK BAEKELAND (1863. NOVEMBER 14.) – LIFELONG LEARNING À LA BAEKELAND. A flamand gyökereire mindig is büszke Baekeland Gent születő. Ötévesen már állami általános iskolába jár, majd a technikum következik, ahol esti kurzusokon kémiát, fizikát, mechanikát és közgazdaságtant tanul. Kiváló eredményei jutalmául a



Genti Egyetem ösztöndíjasa lesz, két év alatt BSc-diplomát szerez, a negyedik esztendő vége pedig már a tudományok doktoraként üdvözölheti. Városi ösztöndíjának és tanársegédi jövedelmének hála, az egyetemi évek alatt teljesen önállótóvá válik, s erre szüksége is van, hiszen családja támogatására szűkös anyagi lehetőségeik miatt nem számíthat.

A Genti Egyetem a kémia területén ekkoriban már világszerte elismert, Kekulé 1865-ben közölt benzolgyűrű-szerkezetelméletének köszönhetően. Kekulé ugyan elhagyja

Gentet, fő munkatársa, Theodore Swarts azonban Baekeland idejében még javában tevékenykedik. De miért is fontos ez a történet szempontjából? Baekeland 1887-ben egy bruges-i iskolában kap kémia és fizika katedrát, de leghőbb vágya, hogy visszatérhessen Gentbe. Vágyának azonban csak egyik forrása a tudomány, konkrétan a fényképezés kémiájának megismerése Van Monkhoven szárazlemez-készítő műhelyében, a másik Swarts professzor lánya, Céline. Így visszatérése szülővárosába egyfelől kijelöli szakmai pályáját, másfelől házassággal teszi. Céline 1889-es frigyük után egy életen át társa és segítője marad férjének (igaz, elismert festőművészként is jegyzik).

A fiatal pár nem marad sokáig egy helyben, ugyanis Baekeland még 1887-ben megnyeri a belga egyetemek közötti kémiaversenyt, amelynek díja egy nemzetközi tanulmányút. Így 1889-ben ennek kontójára útra kelnek. Állomásaik a University College, London, az Oxfordi és az Edinburgh-i Egyetem, majd Amerika, New York. Itt mutatják be C. F. Chandlernek, a Columbia Egyetem professzorának, aki felismerve a fiatal tudós képességeit, rábeszéli, hogy maradjon inkább ezen a kontinensen. Baekeland táviratban közli lemondását a gentiekkel, akik úriemberként felajánlják neki, hogy tartsa meg tiszteletbeli címként ottani egyetemi státusát.

1891-től az Anthony & Co. fotográfiai cégnél dolgozik, mint vegyész, 1893-tól azonban már független tanácsadó. A számos területen kalandozó fiatalembert egy súlyos betegség és a nyomába szegődő anyagi nehézségek késztetik az elhatározásra, hogy minden figyelmét egy célra szentelje. Ez az egy cél a Nepera Chemical Co. Yonkersben, amelyet Leonard Jacobi segítségével alapít. Legsikeresebb termékük a „Velox” [lat. gyors] fotópapír, amelynél az ezüst-kloridot kolloidális formában viszik fel papírra, és teljes egészében elhagyják a szokásos mosási lépést, az előhíváshoz pedig mesterséges megvilágítást alkalmaznak. A terméket az új dolgok iránt fogékony, lelkes amatőr fotósok futtatják fel. 1899-re a cég olyan sikeres lesz, hogy végül az Eastman Kodak Co. kivásárolja Baekeland részesedését. Közben kidolgoz egy légkondicionáló berendezést is a laborle-

vegő páramentesítésére, valamint egy statikustöltés-mentesítő eszközt.

A cégért kapott pénzből házat vesznek a Hudson folyó fölé magasodó „Snug Rock”-on, Yonkers mellett. 35 évesen Baekeland végre teljes anyagi biztonságot élvezhet. Nem is vesztegeti az időt, egy melléképület laborrá alakít, asszisztenseket vesz fel, hogy új „hobbijának” élhessen, az elektrokémiának. Felismeri a tudományág jelentőségét (a századfordulón az alumíniumipar, a grafitgyártás, a kalcium-karbid és a nátrium előállítása is kezd alkalmazni), és 1900-ban németországi tanulmányútra megy, hogy a legfrissebb ismereteket meghonosítsa laboratóriumában. Clinton Townsend elektrolizáló celláját továbbfejlesztve – Townsend részvétellel és Elon Hooker támogatásával – megalapítják a Hooker Electrochemical Co.-t, amely NaOH és Cl₂ előállítására szakosodik. A cég a világ egyik legnagyobb elektrokémiai üzemévé válik Niagara Fallsban, miután Baekeland két kisebb, féllüzemi célján alapos és buktatókkal teli tesztek végéig, hogy a léptéknövelésnél minél több hibát kiküszöböljenek (innen a „commit your blunders on a small scale and make your profits on a large scale” – „a baklövésaid kicsiben kövesd el, a hasznodat nagyban érd el” híres mondása is).

Hogy Baekeland neve ma nem elsősorban az elektrokémia, vagy a fotózás kapcsán cseng ismerősen, az következő nagy kalandjának, a „Bakelite” feltalálásának köszönhető. Formaldehid és fenol reakcióját Bayer úttörő munkája óta számosan kutatták, mégis Baekeland öt évig tartó kemény és következetes munkája kell ahhoz, hogy iparilag használható bakelit legyen a kondenzációs termékből. Ammónia hozzáadásával és nyomás szabályozásával szakaszolni tudja a folyamatot, így a felhasználóhoz egy hőre lágyuló formát szállít, amely formázás és hűtés után véglegesen megszilárdul. A yonkersi gyár 1910-ben General Bakelite Co. néven üzemel, 1939-ben egyesül a Union Carbide and Carbon Co.-val. Baekeland ügyes szervezőkészsége lehetővé teszi, hogy továbbra is kutatásainak (75 cikke és száznál több szabadalma jelent meg) és számos hobbijának éljen (megszállottja volt az autóknak és jachtoknak, sűrűn járt moziba). 1916-ban Perkin-éremmel tüntetik ki, 1917-ben a Columbia Egyetem tiszteletbeli professzora lesz. Számos szakmai-tudományos társaság tagja, időnként elnöke (Electrochemical Society – 1909, American Institute of Chemical Engineers – 1912, ACS – 1924). Magánéletében az egyszerűséget kedveli, korán kel, korán tér nyugovóra. Floridai nyaralója alkalmat ad egzotikus növények termesztésére.

Mottója lehetne egyik mondása, amely szerint megtanult „szerényen meghajolni a tények előtt, még ha nem is egyeztek kedvenc teóriáival”. Élete végére szinte remetévé válik. 1944. február 23-án agyvérzés viszi el. (Forrás: C. F. Kettering, *Biogr. Mem. Natl. Acad. Sci.* 1946, **24**, 280–302.)

Gyermekkorától kezdve rendkívüli módon vonzódott a fotózáshoz, végső soron ennek köszönhető, hogy a Genti Egyetemen a kémiát választotta fő-tárgyként. Eltökéltetését példázza, hogy amikor korai fotográfiai kísérleteihez ezüst-nitrátra lett volna szüksége, de szűkös jövedelméből ennek beszerzésére nem tellett, megoldásként apjától kapott zsebórája ezüstláncát oldotta fel salétromsavban, s ezzel az oldattal kísérletezett. Első kémiai problémamegoldása is ehhez köthető: réz elkülönítése ezüstsó-oldatból.



TÚL A KÉMIÁN

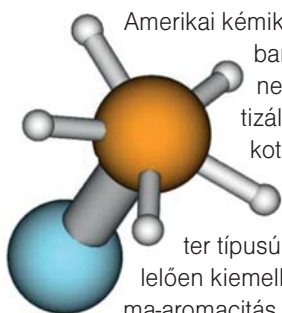
Internetcenzúra Kínában

Kína a modern világ legátfogóbb Internet-cenzúrárendszerét tartja fenn: a becslések szerint nagyjából kétmillió ember napi kötelességei közé tartozik a hírportálok és blogok ellenőrzése. Természetesen az sem nyilvános információ, hogy a cenzorok pontosan milyen szempontok szerint is döntenek egyes tartalmak törlése, mások meghagyása mellett. Három amerikai tudós éppen ezt kezdte el szisztematikusan vizsgálni. 1300 kínai szerveren bejegyzések millióit vizsgálták meg 2011 első félévében, ezek közül 127 000 további sorsát részletesebben is követték. Tapasztalataik szerint a cenzorok igen gyorsan dolgoztak: a legtöbb törölt oldalt a megjelenését követő 24 órán belül elérte sorsa. A kutatók meglepetésére azonban nem sikerült különösebben hatékonyan megjósolniuk, mely bejegyzések nem tetszenek majd az ellenőröknek: az amerikaiak által érzékenynek besorolt kommentárok között a kínai arány alig haladta meg az átlagot. Az adatok utólagos elemzése azt mutatta, hogy a cenzorok nem elsősorban a kínai vezetőkkel vagy társadalmi berendezkedéssel szemben kritikus bejegyzéseket tartják veszélyesnek, hanem azokat, amelyek bármiféle (esetenként a hatalom szempontjából semleges vagy akár pozitív!) közösségi cselekvésre buzdítanak. Úgy tűnik tehát, hogy Kína politikai vezetése nem a szavaktól, hanem a tettektől fél.

Science 345, 890. (2014)



Szigma-aromacitás



Amerikai kémikusok olyan, elméletileg már korábban megjósolt, de a gyakorlatban elő nem állított aromás vegyületet szintetizáltak, amelyben az öttagú gyűrűt alkotó hidrogénatomok közötti szigma-kötések delokalizálódnak egy síkban. A $PtZnH_5^-$ összetételű, kluster típusú anion az aromás jellegnek megfelelően kiemelkedően stabilnak bizonyult. A szigma-aromacitás kialakításában a gyűrű középpontjában lévő platinaatomnak is nagy szerepe van.

J. Phys. Chem. Lett. 5, 1596. (2014)

CENTENÁRIUM



Eduard Buchner, Kurt Langheld, Siegfried Skraup: Bildung von Acetaldehyd bei der alkoholischen Gärung des Zuckers durch Luftsauerstoff
Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft, Volume 47, pp. 2550–2555. (1914. július–december)

Eduard Buchner (1860–1917) német kémikus volt, 1907-ben kémiai Nobel-díjat kapott a fermentációval kapcsolatos tudományos munkájáért. Legfőbb felismerése az volt, hogy az erjedési folyamatok elindításához élő sejtek nem feltétlenül szükségesek, az élesztősejtek kivonata is elegendő. Az I. világháború azonban a Nobel-díjakat sem kímélte: 1917-ben Romániában, egy frontvonal közelében lévő kórházban szerzett halálos sérülést. A Buchner-tölcserít nem róla neveztek el, hanem névrokonáról, Ernst Büchner ipari kémikusról.



IDÉZET

„A regényírók többnyire úgy építik fel a meséjüket, hogy az ilyen mezzaliansz nagy konfliktusokra vezet. Ne tessék nekik hinni, tisztelt olvasó – az arany feloldódik a sósavban és a salétromsavban, az ezüst a salétromsavban, a főrangú kötelek pedig feloldódik a szerelemben – de nagyon melegnek kell lennie.”
Mikszáth Kálmán: A demokraták

Tömegspektrométer-hátizsák

Kinézetre feltűnően hasonlít a Szellemirtók című, nagy sikerű filmben a szellemek ellen használt protonhátizsákhoz, de valójában



komoly analitikai mérésekre alkalmas a Purdue Egyetemen kifejlesztett hordozható tömegspektrométer. Az eszköz hátán viselhető, nagyjából 10 kilogrammot nyomó részében van a vákuumszivattyú, az akkumulátor és a vezérlést végző számítógép, míg a kézben tartható mintavevőhöz kapcsolódik az ionforrás, az ionsapda és a tömeganalizátor. A készülékbe épített alacsony hőmérsékletű plazma (low temperature plasma, LTP) ionizációs technikához nem szükséges a minták laboratóriumi előkészítése. A műszer igen hasznos lehet környezeti analízisben és vegyi fegyverek, robbanószerek vagy kábítószerek helyszíni kimutatásában is.

Anal. Chem. 86, 2900. (2014)

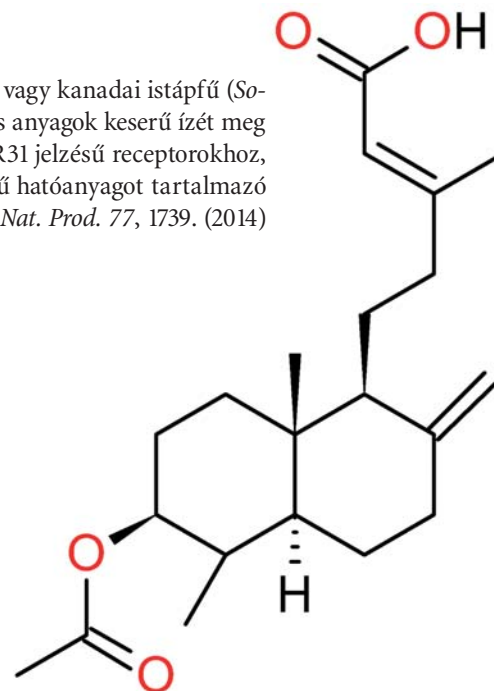
Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg.mkl@science.unideb.hu.



A HÓNAP MOLEKULÁJA

A 3 β -acetoxikopálsav (C₂₂H₃₄O₄) újonnan felfedezett vegyület, a kanadai aranyvessző vagy kanadai istápfű (*Solidago canadensis*) nevű növényből izolálták. Igen érdekes tulajdonsága, hogy bizonyos anyagok keserű ízét meg tudja szüntetni. Ennek oka, hogy nagy affinitással kötődik a nyelvben lévő hTAS2R31 jelzésű receptorokhoz, amelyeknek nagy szerepük van az ízérzékelésben. Az ilyen vegyületek nagyon keserű hatóanyagot tartalmazó gyógyszerekészítményekben lehetnek fontos adalékanyagok.

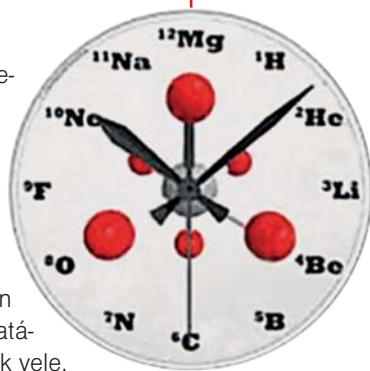
J. Nat. Prod. 77, 1739. (2014)



Molekuláris órák

Ha létezik atomóra, miért ne létezhetne molekulaóra is? Manapság nagyon pontos időmérésre atomórákat lehet használni, de német tudósok elméleti számításai szerint ugyanilyen elven molekulaórák is készíthetők. Ezek nem volnának megbízhatóbbak az atomóráknál, viszont segítségével a proton és az elektron tömegének aránya minden korábbi eredménynél pontosabban meghatározható lenne, s emellett azt is tesztelhetnék vele, hogy a protonok tömege mennyire állandó időben. A becslések szerint egy ilyen molekulaórában az egyetlen elektront tartalmazó HD⁺-molekula rezgési frekvenciái 5×10⁻¹⁶% pontossággal mérhetőek lennének.

Phys. Rev. Lett. 113, 023004. (2014)
J. Mol. Spectrosc. 300, 37. (2014)



Reakció-fényképezés kamerával

Tajvani tudósok a kereskedelemben fellelhető alkatrészekből olyan videokamerát építettek, amely kémiai reakciók lefolyását egyszerre tudja térben és időben követni. A reakciók időbeli követésére használt legtöbb spektroszkópai eszköz a minta homogenitását feltételezi, így a térbeli eloszlásról gyakran nehéz információt szerezni. Az újonnan kifejlesztett műszer különböző hullámhosszú fényt kibocsátó LED-ek fényimpulzusainak segítségével világítja meg a mintát, majd a képet videokamerán rögzíti. A villanások ismert sorozatának és a kamera által felvett képnek az összevetésével több komponensre egyszerre is végezhető mennyiségi analízis az idő- és térkoordináták függvényében. A módszer teljesítőképességét a berendezés készítői a Beluszov–Zsabotyinszkij-reakció segítségével bizonyították.

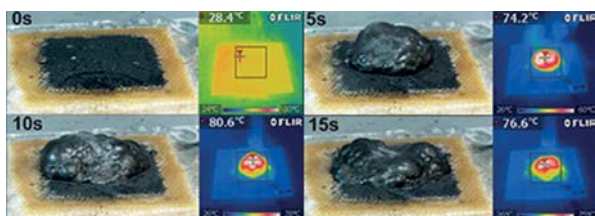
RSC Adv. 4, 31094. (2014)



Habzó szájú bankautomaták

A pöfögő futrinka nevű bogár szervezete veszély esetén kataláz hatású enzimet termel és kever össze hidrogén-peroxiddal, s ez kellemetlen hatású habbal önti el a környezetet. Ez a megfigyelés adta az alapötletet a bankautomaták új típusú védelméhez. A mesterséges változat is hidrogén-peroxid bontását használja habképzésre, a katalizátor viszont mangán-dioxid. A reaktáns és a katalizátor akkor keveredik, ha egy jelentősebb rázkódás a két között lévő vékony falat átszakítja. A komponensek közé festék vagy más jelzőanyag is keverhető, így a képződő forró hab akár az automatában lévő pénz is használhatatlanná teheti. Az új találmány olcsóbb, mint az ilyen célra használható elektromos eszközök, s nem igényel sem elektromos áramot, sem emberi felügyeletet.

J. Mater. Chem. A 2, 8425. (2014)



A malária illata

A malária szó ugyan rossz levegőt jelent, de a kísérleti bizonyítékok szerint ez a leírás aligha találkozik a szúnyogok ízlésével. Korábban már embereken végzett megfigyelések is arra utaltak, hogy a malária kórokozója, a *Plasmodium* parazita megváltoztatja a gazdaszervezet által kibocsátott il-



lékony vegyületek összetételét, és ez a szagváltozás vonzza a szúnyogokat. A legújabb kísérletek egereken is igazolták ugyanezt a hatást, s az érte felelős vegyületek egy részét is sikerült azonosítani. Az új eredményeknek mind az orvosi diagnosztika, mind a betegség terjedésének megállítása szempontjából nagy jelentősége lehet.

Proc. Natl. Acad. Sci. USA 111, 11079. (2014)



TUDOMÁNYOS ÉLET

EuCheMS-ülés

Sarkadi Livia professzor asszony, az MKE elnöke és egyben a EuCheMS Élelmiszerkémiai Divíziójának elnöke meghívására a divízió 2014. szeptember 30. és október 1. között Budapesten, az MKE székhelyén tartotta 38. éves ülését. Az ülésen Vatai Gyula, a Corvinus Egyetem Élelmiszertudományi Karának dékánja is köszöntötte az európai küldötteket, és bemutatta az egyetem, valamint a kar fő tevékenységeit.



Amerikai–magyar együttműködés

Az Amerikai Kémikus Egyesület (ACS) és a Magyar Kémikusok Egyesülete együttműködése alapján szerveztük meg az ACS Chem Course Study Tour Group Budapestre látogatását. A csoport Mary Virginia Orna (The College of New Rochelle kémiaprofesszora) vezetésével töltött egy szűk hetet Budapesten 2014. október 5. és 9. között. A szakmai programok keretében látogatták meg október 6-án az Öntödei Múzeumot Csibi Kinga múzeumvezető irányításával. Az MKE nevében az elnök, Sarkadi Livia professzor



asszony és Androsits Beáta ügyvezető igazgató köszöntötte a vendégeket, majd Széchy Gábor docens tartott előadást Magyarország történetéről 1918–2014 között címmel, amit nagy érdeklődéssel hallgattak az amerikai csoport. A műszaki múzeumok megtekintése mellett Budapest szépségeit is élvezhették. A program megszervezésében Vámos Éva kiemelt munkát végzett, amiért külön köszönetet mondunk neki.

MEGEMLÉKEZÉS

Szabényi Imre (1930–2014)



2014. augusztus 25-én elhunyt Szabényi Imre. Személyében egy igaz embert és a hazai kémiai technológiai és környezetvédelmi oktatás és kutatás kiemelkedő, és nemzetközileg ismert képviselőjét veszítettük el.

Szabényi Imre 1930-ban született Pécsen. Középfelsőiskoláit a ciszterci rend pécsi gimnáziumában végezte, majd a budapesti Műegyetemen folytatta tanulmányait. Vegyészmérnöki oklevelét 1952-ben szerzte meg, és még ebben az évben felvették aspiránsnak a Műegyetem Kémiai Technológiai Tanszékére, amellyel egész további élete, szakmai pályafutása összefonódott. Aspiráns-vezetője az európai hírű Varga József professzor lett, aki jelentős hatással volt egész további kutatói és oktatói szemléletére.

1967-ben kinevezték a Kémiai Technológia Tanszék vezetőjévé, és a tanszékot csaknem negyedszázadon át, 1991-ig vezette. Pályafutásának legfontosabb részét ezek az évtizedek jelentették. Azokban az időkben a Kémiai Technológia Tanszék teljes személyzete több mint 60 emberből (köztük 35 diplomásból) állt, vagyis a mai fogalmak szerint egy nagyobb kutatóintézetnek felelt meg. Ilyen nagy tanszék vezetni nem könnyű, különösen, hogy ott a műszaki kémia több, egymástól meglehetősen eltérő területe képviselve volt, a kőolaj-feldolgozástól az izotóptechnikán keresztül a szilikátiparig. Vezetése alatt a tanszék fénykorát élte. Szabényi Imre irányította a kiterjedt technológiai kutatásokat, és személy szerint főként a kőolaj-feldolgozáshoz és a szénkémiahoz kapcsolódó kutatásokkal foglalkozott.

A kémiai tudomány kandidátusa fokozatot 1957-ben, az egyetemi doktori címet 1960-ban, a kémiai tudomány doktora fokozatot 1978-ban szerezte meg. Kandidátusi értekezésében a gázolajok katalitikus kéntelenítésével foglalkozott, ami igen előremutató téma volt, hiszen igazi fontossága csak az elmúlt 25 évben vált nyilvánvalóvá. Akadémiai doktori értekezésében a benzínreformálásnál képződő nagyobb molekulájú aromásokkal foglalkozott, amelyek az erősen térhálós, hőálló polimerek előállításában játszanak szerepet.

Kutatói és oktatói munkájáról 7 könyv, 185 publikáció 27 egyetemi jegyzet és 10 szabadalom tanúskodik, amelyeknek szerzője, illetve társszerzője volt. Tanszéki munkáján kívül tíz éven át, 1964-től 1974-ig a Vegyészmérnöki Kar dékánhelyettese, 1970-ben néhány hónapig megbízott dékánja is volt.

Vezetése alatt a Kémiai Technológia Tanszék több ezer vegyész-, gépész- és közlekedésmérnök-hallgatónak oktatott műszaki kémiai, technológiai és környezetkémiai tárgyakat, formálta mérnöki szemléletüket. Maga is sokat oktatott. Kiemelem, hogy a Vajta László professzorral együtt írt „Kémiai technológia” című tankönyvből mérnökhallgatók ezrei tanultak, és későbbi kiadása alapműnek számít ma is.

Az oktatási feladatok maradéktalan, megalkuvás nélküli teljesítését mindig szigorúan megkövetelte, az egyszerűbb oktatási formák esetében is.

Szívesen foglalkozott oktatási koncepciókkal, oktatásszervezési kérdésekkel, nemcsak kari, hanem egyetemi, sőt országos szinten is. Nemzetközi összehasonlításban is tanulmányozta a tan-

területi kérdéseket, és a tanterv kidolgozásában is aktív szerepet vállalt. Szabényi Imre munkásságát és életművét a Magyar Kémikusok Lapja emlékszerkesztésében foglalkoztatjuk.

Az oktatási feladatok maradéktalan, megalkuvás nélküli teljesítését mindig szigorúan megkövetelte, az egyszerűbb oktatási formák esetében is.



terveket, például az Európai Vegyész-mérnök Szövetség (EFCE) keretében, ahol tagja volt a szövetség oktatási bizottságának.

Igen korán felismerte a környezetvédelmi oktatás fontosságát. Jelentős részben fáradozásának eredményeképpen indult meg 1974-ben az országban egyik elsőként a környezetvédelmi szakmérnök-képzés a Műegyetemen. Oktatómunkájában kiemelte a környezetvédelmi szempontokat már akkor, amikor ezek még nem álltak a társadalmi érdeklődés előterében, sőt szó is alig esett róluk.

Egész oktatói és kutatói mentalitására nézve meghatározó volt, hogy fiatal éveiben a Varga-iskola tagja lehetett, így a műszaki kémia kérdéseire, technológiáira mindig komplex módon, nagyon reálisan, a gazdasági és környezeti szempontokra erősen figyelve tekintett.

Nagyon alapos ember volt. A Tanszéken készült minden kutatási jelentést mondatról mondatra elolvasott, megjegyzéseit átbeszélte a jelentés készítőivel. Igen nagy dicséretnek számított, ha néha megjegyzések helyett (vagy mellett) egy kis cédula volt a jelentés elejére betéve, s rajta: „Szép munka! Szabényi”.

Rendkívüli emlékezőtehetséggel rendelkezett, és ez is segítette a hazai és nemzetközi szakmai közéletben való széles körű tájékozódásban. Kiterjedt kapcsolatait igyekezett munkatársai javára kamatoztatni, őket tanulmányutak esetére tanácsokkal ellátni.

Hosszú lenne felsorolni azokat a hazai és nemzetközi tudományos és szakmai testületeket, egyesületeket, amelyeknek tagja volt. Így csak néhányat említek: a Magyar Tudományos Akadémia egyes szakbizottságai, munkabizottsága, a Szent István Tu-

dományos Akadémia rendes tagja, a Magyar Környezetvédelmi Egyesület alelnöke. Az Európai Vegyész-mérnöki Szövetség tagja és ott az MKE képviselője is volt. A Magyar Kémikusok Egyesülete Oktatási Bizottságának évekig elnöke volt. Haláláig tagja volt a Magyar Kémikusok Lapja szerkesztőbizottságának. Tiszteletbeli taggá választotta a Magyar Mérnöki Kamara és az Energia-gazdálkodási Tudományos Egyesület.

Nyugalomba vonulása után is oktatott az akkori Államigazgatási Főiskolán, több felsőoktatási intézményben állam-, illetve záróvizsga-bizottsági tag volt, továbbá számos, főleg környezeti és energiagazdálkodási témájú pályázati rendszer véleményező bizottságának tagjaként is működött.

Munkásságát számos hazai és külföldi kitüntetéssel, többek között Varga József-éremmel, Friedrich List-éremmel (Drezda), Környezetünk Védelméért Díjjal, Pázmány Péter Felsőoktatási Díjjal, Kiváló Felhalálító kitüntetéssel, Környezetvédelmi Műszaki Felsőoktatásért kitüntető oklevéllel, Than Károly Emlékéremmel és 2002-ben Széchenyi-díjjal ismerték el.

Szabényi Imre mindig hű volt önmagához, és így – magától értetődően – másokhoz is őszinte volt. Véleményét igen udvariasan, higgadtan, de – ha kellett – keményen elmondta. Nagy tudású, széles látókörű és erkölcsi kérdésekben megközelíthetetlen ember volt, akinek tanácsaira – és nem csak szakmai tanácsaira – érdemes volt nagyon odafigyelni.

Mint 25 éven át közvetlen munkatársam, szomorúan búcsúzom. Isten áldjon, Imre! Nyugodjál békében!

Széchy Gábor

FELHÍVÁS

HAZAI KÉMIAI KUTATÓHELYEK, ISKOLÁK, MŰHELYEK ÉS INTÉZMÉNYEK BEMUTATKOZÁSÁRA

Kérdőíves felmérésünkéből kiderült, hogy olvasóink szívesen olvasnának a fenti témáról. A lap szerkesztőbizottsága úgy határozott, hogy 1999 után újraindítja ezt a sorozatot.

Az eltelt 15 év elegendőnek tűnik, hogy a hazai kémiai kutatásokban bekövetkezett változásokat jelezzük és bemutassuk a szakma részére, különös figyelemmel arra, hogy a sikeres, nagy múltra visszatekintő iskolák mellett az új kutatási területek, interdiszciplináris témák felfutása, új támogatási formák kialakítása jelentős mértékben megújította a múlt század legvégének kutatási palettáját.

Készülve a sorozat újraindítására, átlapoztuk az 1999 és 2003 között futott sorozat beszámolóit, és jó érzéssel, büszkeséggel állapíthattuk meg, hogy milyen eredményes kutatások, alapkutatások, K+F fejlesztések folytak a hazai kutatóhelyeken. Ez folytatódott ebben az évezredben is, és most szeretnénk olvashatóvá tenni a szélesebb szakmai közvélemény számára.

A közleménysorozat tartalmi szerkesztését szerkesztőbizottságunk két tagja volt szíves elvállalni: Keglevich György egyetemi tanár, a BME Szerves Kémiai és Technológiai Tanszékének vezetője és Dormán György c. egyetemi tanár, az MTA TTK Enzimológiai Intézet szakmai tanácsadója.

Első körben önkényesen kiválasztottunk jó néhány műhelyt, kutatóhelyet, melyek vezetőinek a sorozat szerkesztői a felkéréseket folyamatosan megküldik.

Célunk a sorozattal, hogy az egyes műhelyek röviden, közért-

hetően mutassák be kutatóhelyüket, kutatásaikat, eredményeiket, fejlesztéseiket, sikereiket, jövődö terveiket.

A terjedelem 5–6 normál A4 oldal (Times New Roman betűtípus, 12 pontos betűméret, 1,5 sorköz), beleértve a táblázatokat, ábrákat, fotókat. A kézirat előkészítésére vonatkozó egyéb kéréseket/előírásokat a felkérő levéllel együtt a sorozatszerkesztők megküldik.

Budapest, 2014. szeptember 1.

Kiss Tamás
felelős szerkesztő

Keglevich György
sorozatszerkesztő

Dormán György
sorozatszerkesztő





OKTATÁS

Kémszámítábor

2014. augusztus 17–24.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karán működő Szent-Györgyi Albert Szakkollégium idén augusztusban rendezte meg tizedszer a kar frissen felvett elsőéves hallgatói számára a Kémszámítábor. A tábor célja, hogy a hallgatók átismételjék a középiskolás kémia- és matematika-tananyagot, így az egy hét során délelőtt és délután is tanórákon vesznek részt, lelkes felsőbb éves hallgatók vezetésével. Mindenki szintfelmérőt ír a tábor elején, így tudásának megfelelő csoportban tanulhat. Akinek szükséges, egész nap kémia-órákat hallgat, ahol az alapoktól kezdve jutnak el az egyetemen szükséges számításokig, míg vannak csoportok, ahol lehetőség van akár a tananyagon is túlmutatató érdekességek, példák bemutatására. A tanórákat laborlátogatásokkal, kísérletezésekkel teszik szívesebbé a szervezők.

Az oktatást követően a kikapcsolódáson, közös játékon, ismerkedésen van a hangsúly. Idén az augusztus 20-i tűzijátékot is



együtt nézték a résztvevők, emellett a csapatprogramok során lehetőségük volt megismerni a Kopaszi-gátat, a Margit-szigetet, a Gellért-hegyet és a Feneketlen-tó környékét. Részt vehettek továbbá a Magyar Kémikusok Egyesületének bemutatkozó előadásán, és megismerkedhettek több, a karon működő öntevékeny kör munkájával is. A hét végén záró felmérőt írtak a diákok, így saját maguk is meggyőződhetnek arról, mennyit fejlődtek a héten, mik azok a pontok, amire tanulmányaik során jobban oda kell figyelniük. A tábor közös buli zárta, ahol az egyhetes munkát és tanulást követően a jól megérdemelt szórakozás volt a középpontban. A visszajelzések alapján hasznos, jó hangulatú táborban vettek részt elsőéveseink, és egy év múlva többen újra szívesen eljönnének – akkor már szervezőként.

Gubicza Krisztina és Janzsó-Berend Péter Zoltán
az idei tábor főszerzői



HÍREK AZ IPARBÓL

475 millió eurót fektet be Magyarországon az Apollo Tyres

Az Apollo Tyres a következő öt évben 475 millió eurós befektetéssel Gyöngyöshalász közelében építi fel első európai zöldmezős beruházását. Az új üzem évente 5,5 millió személyautó- és kiste-



herjarmú-, valamint 675 000 darab tehergépjármű-abroncsot fog előállítani. Az Apollo Tyres meglévő, hollandiai üzemének termelését kiegészítő létesítményében Apollo és Vredestein márkájú abroncsok is készülnek majd az

Oroszországot és Törökországot is magában foglaló európai piac számára.

Miután a cég igazgatótanácsa jóváhagyta egy Kelet-Európában létrehozandó, zöldmezős beruházás tervét, az Apollo Tyres 2014. szeptember 17-én bejelentette, hogy a projekt Magyarországon fog megvalósulni. Magyarországra különböző tényezők mérlegelése után, néhány kelet-közép-európai és ázsiai ország helyett esett a választás.

Neeraj Kanwar, az Apollo Tyres Ltd. ügyvezető igazgatója így kommentálta a döntést: „Ez a projekt lesz az első, Indián kívüli zöldmezős beruházásunk, így igazi mérföldkőnek számít cégünk nemzetközi terjeszkedésének történetében. Célunk, hogy olyan, példa értékű gyárat hozzunk létre, mely tovább erősíti az európai piacon elfoglalt szilárd pozíciókat.”

Szijjártó Péter akkori külügyminiszter-helyettes elmondta: „Magyarország újraiparosításának fontos állomása az Apollo Tyres magyarországi beruházása.”

A kiválasztott helyszín alig 100 km-re van az ország fővárosától, Budapesttől, és minden tekintetben megfelel az Apollo Tyres igényeinek – például a közelében található több OEM gyártó és a potenciális vevők egy része is. A vállalat hamarosan megindítja az építkezéshez szükséges engedélyezési eljárást és megkezdí a környezetvédelmi hatástanulmány elkészítését is. A gyár alapkövetelére várhatóan 2015 tavaszán kerül sor, az első kész abroncs pedig 2017 elején gördül majd le a gyártósorokról.

Neeraj Kanwar hozzátette: „Amellett, hogy 975, főleg helyiekkel betöltendő munkahelyet hozunk létre, az új gyár a közvetett munkahely-teremtésben és az egész régió fejlődésében is jelentős szerepet vállal majd. Vállalati filozófiánk fontos elemét képezi a társadalmi felelősségvállalás, így aktívan részt fogunk venni a közösséget érintő egészségügyi, biztonsági és környezetvédelmi célok elérésében.”

Az Apollo Tyres jelenleg négy gyártóüzemet működtet Indiában, hármat Dél-Afrikában és egyet Hollandiában. Ezek teljes kapacitása meghaladja a napi 1700 tonnát. *(A ProfitLine.hu nyoman)*

ZA



**„Vége az aranykornak”
Interjú a Richter-vezérigazgatóval**

A gyógyszeripar számára egyértelműen véget ért az aranykor, ami azonban nem jelenti azt, hogy az iparág előtt ne állna reményteljes jövő – állítja Bogsch Erik. A Richter vezérigazgatója a társaság jövőjét a nemzetközi terjeszkedésben látja, míg szerte az egészségügy, de az egész ország szempontjából is az elvándorlás megállítása a legfontosabb feladat.

– Az Oroszország elleni embargó szerencsére nem érinti a gyógyszereket, de bármi megtörténhet. Fel lehet-e készülni erre egy olyan cégnél, amelynek legnagyobb külpiaca az orosz?

– Minimális az esélye annak, hogy a gyógyszerekre is kiviteli tilalmat rendeljen el az EU. Valószínűbbek az orosz piac védelmét



szolgáltató intézkedések. Ezért is nagy jelentőségű az oroszországi üzemünk megalapítása, majd fokozatos bővítése, amelynek révén immár az ottani értékesítés mintegy 15 százalékát a helyben gyártott készítményekből tudjuk biztosítani, és ez a volumen feltehetőleg tovább nő.

– *A nyugat-európai terjeszkedés, a latin-amerikai akvizíciók, esetleg a kínai piacra lépés ellensúlyozhatja-e a Richter számára az orosz és az ukrán forgalom visszaesését?*



– A nőgyógyászati termékek nyugat-európai forgalma fokozatosan nő, meg fogja haladni a 70 millió eurót. Ez ugyan nem tudja teljesen kompenzálni az orosz, ukrán veszteséget, de Kínában és Latin-Amerika gyógyszerpiacain is növekedés várható.

– *A Richter magyarországi eladásai az utóbbi években folyamatosan csökkentek, miközben az egészség- és ezen belül a gyógyszeripart „kitörési pontnak” minősítette korábban a kormány, és több stratégiai partnerségi megállapodás is született Magyar-sz-tagvállalatokkal.*

– Szomorú dolog, hogy a tavalyi hazai árbevételünk körülbelül egyharmaddal alacsonyabb volt, mint a kétezres évek elején, és az árbevételünkben a magyar piac részesedése 30 százalékról 10 százalékra esett. Összességében a magyar gyógyszerpiac értékében stagnál, de ez a jellemző egész Európára is. A biztosítók mindenütt szigorúan fogják a költségkiáramlást az egyik oldalról, miközben nagyon nehezen fogadják be új eredeti készítményt megfelelő áron. Ugyanakkor van egy nagyon erős árverseny, ami sok esetben már ellátási gondokat okoz az olcsó kínai, indiai forrásból származó gyógyszerek térnyerése miatt.

– *Az a veszély fenyeget, hogy az európai tradicionális gyárak készítményeit kiszorítják az olcsó távol-keleti, ázsiai gyógyszerek?*

– Ez már nem is veszély, sok tekintetben tény. A legnagyobb gond, hogy miközben egyre-másra kerülnek forgalomba Európában ellenőrizetlen gyártású gyógyszerek, az európai gyártókat egyre inkább ellehetetlenítik az európai előírások. A farmakovigilancia (mellékhatás-figyelés és -jelentés) például horribilis összegeket emészt fel, sok esetben teljesen értelmetlenül. Nyilvánvaló, hogy még a több ezer fővel folytatott klinikai vizsgálatok során sem jön ki egy-egy készítmény összes mellékhatása. De szabad-e azért, mert százezer beteg közül 1-nél jelentkezik valami speciális mellékhatás, 99 999 beteget megfosztani egy egyébként hatékony készítménytől? Ez abba az irányba kényszeríti a gyógyszergyárat, hogy jogilag védjék magukat az esetleges kártérítési perek ellen, amelyek főként az Egyesült Államokban jellemzőek. Miközben rendelkezésünkre állnak már azok a diagnosztikai módszerek, amelyekkel ki lehet szűrni azokat a betegeket, akiknek az esetében esetleg felmerülhet egyáltalán speciális mellékhatás. Ez a nagy kutatási költségeket felvállaló cégekre értelemszerűen nagyobb terhet ró, és meggyőződésem, hogy akár az

is bekövetkezhet, hogy az ilyen extremitások miatt bizonyos betegségekre egyszerűen nem lesz gyógyszer, mert senki sem fogja vállalni a kockázatot a kutatásra.

– *Hasonlóan feleslegesen túlzó intézkedésnek tartja, hogy egyedi azonosítóval kell hamarosan ellátni minden egyes doboz gyógyszerrel?*

– Ez egy át nem gondolt intézkedés, melyet ahelyett vezetnek be, hogy elzárják az olyan illegális értékesítési csatornákat, mint például az internet. Az ön által említett intézkedésnél egyelőre még nincs meghatározva az érintett készítmények köre, de az biztos, hogy ha bevezetik, hihetetlen mértékben növelni fogja a cégek költségeit.

– *Az iparágat sújtó különadók maradtak, a finanszírozási rendszer továbbra is a rövid távú érdekeket, a megtakarítást tartja szem előtt. Milyen kutatás-fejlesztési tevékenység, beruházás várható el ezek után a hazai gyógyszeripartól?*

– Korlátozott. Míg a hozzánk hasonló méretű európai cégek, például Spanyolországban, a kutatási-fejlesztési ráfordításaitak nem kis mértékben a hazai eladásokból fedezik, nálunk nemcsak belső piacvédelem nincs, de a hazai gyógyszeripari vállalatok számára szinte lehetetlen az uniós forrásokhoz való hozzáférés, így jóval nagyobb prioritással bírnak a hazai pályázati rendszeren keresztül elérhető források. A magyar adórendszer a K+F költségeket elismeri ugyan és ez nagyon pozitív, de a pályázati források rendkívüli módon korlátozottak, valamint a pályázati feltételrendszer a gyógyszeripari nagyvállalatok esetében sokszor nehezen alkalmazható.

– *A következő időszakban sem reménykedhet ebben a gyógyszeripar?*

– Ezt nem tudhatjuk, de bizakodóak vagyunk, mert miután a tervek szerint az EU is sokkal többet szán K+F-re. Kérdés, hogy a központi, úgynevezett brüsszeli pénzekből milyen lesz a hozzájutási lehetőség például a Richter számára, mert ez eddig gyakorlatilag zérus volt.

– *Nemcsak az egészségügyet, de az egészségipart is sújtja az elvándorlás, bár erről kevesebbet hallani. A Richter, amely termékeit részben orvosokon keresztül juttatja el a betegekhez, más-*



részt aktív K+F tevékenységet végez, komolyan veszíthet, ha nem tudunk érdemben tenni ez ellen.

– Az elvándorlás ma az egészségügy legsúlyosabb problémája. Az értelmiség elvándorlása pótolhatatlan veszteséget okoz. Erkölcsi kérdés, hogy erre megoldást találjunk, és én talán mondhatok olyat, hogy ha már a gyógyszer-támogatásra nem költenek többet, akkor legalább az egészségügy kapjon több pénzt. Nekem is az a meggyőződésem, mint oly sokaknak, hogy nem lehet halogatni a kiegészítő biztosítás, vagy a co-payment bevezetését. Azt az



egyensúlytalanságot, amely a gazdasági lehetőségek és a modern technológiák/gyógyszerek között fennáll, az állami költségvetés képtelen egymaga orvosolni. Ezzel együtt azt a tévhitet, hogy mindenkinek minden jár, ki kellene verni a fejkéből. Ebben az összes politikai pártnak konszenzusra kell jutnia.

– *A gyógyszeripar napjainkban jelentős átalakuláson megy át. Ön hogyan látja az ágazat és ezen belül a Richter közeljövőjét?*

Szinte bizonyos, hogy az aranykornak vége, komoly áttörést már nem fogunk tudni elérni. De fülembre csengenek az egyik neves amerikai bank elemzőjének szavai, aki egy konferencián azt találta mondani, hogy „ha Önök ennyi beteg emberből nem tudnak megélni, akkor jobb, ha abbahagyják”. Vagyis sajnálatos módon azért a betegek száma, főleg az életkor növekedésével, nő, és a gyógyszerekkel nemcsak gyógyítunk, hanem életminőséget is javítunk, tehát a termékeinkre mindig szükség lesz. A Richter jövője szempontjából egyértelműen létkérdés a nemzetközi terjeszkedés. Meg kell tartani a generikus profilt, az jelenti jelenleg a legkisebb üzleti kockázatot. Ugyanakkor a biohasonló termékek piacán is jelen kell lennünk, még ha ez nagyobb befektetést és ezzel nagyobb rizikót is jelent. Emellett pedig a központi idegrendszerre ható készítmények terén továbbra is folytatnunk kell az eredeti kutatást. Ezekből próbálunk egy olyan termékportfóliót összeállítani, amellyel reményeink szerint sikerrel tudjuk továbbvinni a céget a következő tíz-húsz évben is. *(A Világgazdaság.hu nyomán)*

Zékány András

Vegyipari mozaik

Az Akadémia és a felsőoktatási intézmények közti kapcsolat egyre szorosabbá válik. „Az Akadémia sokféle eszközzel támogatja az egyetemeken folyó kutatómunkát” – mutatott rá Lovász László a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem tanévnyitói ünnepségén. Arra emlékeztette az egybegyűlteket: az akadémiai kutatócsoportok – ahol tapasztalt kutatók, doktoranduszok és diákok dolgoznak együtt – olyan műhelyek, amelyek mind az Akadémia, mind az egyetemek számára kölcsönösen előnyösen biztosítják a kutatói utánpótlást. 2013-ban a támogatott kutatócsoportok száma 79-ről 89-re emelkedett, az MTA és a BME közötti gyümölcsöző együttműködést pedig az itt dolgozó 15 akadémiai kutatócsoport, valamint a hat, a nemzetközi kutatási térben is kimagaslóan versenyképes tevékenységet folytató Lendület-csoport léte bizonyítja. „A 2009-ben indított

Lendület program célja a nemzetközileg kiemelkedő fiatal tehetségek itthon tartása, illetve hazahívása külföldről” – idézte fel Lovász László az egyedülálló pályázati modellt életre hívó szándékot. Szintén a hazai versenyképes kutatások erősítését, a tudományos kapcsolatok elmélyítését szolgálja az Akadémia vendégkutatói programja, amelynek révén külföldi egyetemek legnagyszerűbb professzorai kapcsolódnak be a hazánkban folyó kutatásokba – emlékeztetett az Akadémia elnöke: „Magyarország jövője szempontjából kulcsfontosságú, hogy minél több magyar kutató vegyen részt a nemzetközi tudományos együttműködésben, együtt dolgozva más nemzetiségű tudósokkal.” Hozzátette: „Ha egy közös kutatás itthon folyik, az különleges lehetőséget nyújt a diákoknak, fiatal kutatóknak a modern kutatási témák és módszerek megismerésére.”

Lovász László arra bátorította a diákokat: ne féljenek kérdezni, és – a jól bevált módszerek mellett – a tudomány eszközeivel törekedjenek új megoldások, eredeti ötletek felmutatására, hiszen minden megoldott probléma izgalmas, új kérdések sokaságát veti fel. Az Akadémia elnöke rámutatott, fontos, hogy a nem kutatói pályára készülő, hanem a gyakorlati közgazdász és mérnöki hivatást választó szakemberek is tisztában legyenek a tudomány



főbb kutatási irányjaival, lehetőségeivel és korlátaival. „Ami ma kutatási téma, 10 vagy 20 év múlva mindennapi technológia lehet” – hangsúlyozta, és arra biztatta a hallgatókat: tegyék az egyetemet igazi tudományos műhellyé, hogy az „ne csupán kurzusok és vizsgák színhelye legyen”.

Palkovics László, az Emberi Erőforrások Minisztériumának felsőoktatásért felelős államtitkára egyebek mellett arról beszélt, a kormány egyértelmű szándéka az, hogy nem csökkenti a felsőoktatási férőhelyek számát, és a kabinet elkötelezett az elitképzés jogi, szervezeti és gazdasági feltételeinek megteremtése mellett.

Nagy István, a Földművelésügyi Minisztérium államtitkára köszöntőjében többek között hangsúlyozta, hogy a jövő magyar agrárfejlesztései elképzelhetetlenek magasan képzett műszaki értelmiség nélkül, valamint emlékeztetett arra, hogy a BME kiemelt szakmai programja több kérdésben is találkozik a minisztérium feladataival. A környezetvédelem, a megújuló energiák felhasználása, az innováció, a fenntartható élelmiszeripar kialakítása kivitelezhetetlen az agrártárca és a Műegyetem hatékony együttműködése nélkül.

Péceli Gábor, a Műegyetem rektora az intézmény tevékenységét jellemezve elmondta: az oktatók nemcsak órákat tartanak, ismereteket adnak át a diákoknak, hanem tudományos kapacitással, az itt dolgozók tapasztalatával és szakértelmével az ország háttérintézményét is működtetik. *(Az MTA nyomán)*





Megkezdte munkáját az MTA újjáalakult Közoktatási Elnöki Bizottsága. Az MTA elnöke megválasztását követően bejelentette: kezdeményezi a tanítási módszerekkel foglalkozó kutatások újraindítását. „Ilyen típusú tudományos munka már korábban is folyt az Akadémia egyes szellemi műhelyeiben” – utalt rá Lovász László, hozzátéve, hogy nem csupán a régebbi kutatások felújítását tartja szükségesnek, hanem teljesen újszerű vizsgálatok indítását is. Az elnök a tervezett program eredményes megvalósítása érdekében a bizottság tagjainak aktív közreműködését kérte.

Csépe Valéria akadémikus, aki Lovász László kérésére folytatja a Közoktatási Elnöki Bizottság elnökeként korábban megkezdett munkáját, úgy fogalmazott: a közoktatás érdekében a hagyományok megőrzésére és a megújításra egyaránt szükség van. „Mindenként mindenre meg lehet tanítani, csak idő, módszer és mester kérdése” idézte a 17. századi pedagógust és gondolkodót, Comenius Csépe Valéria. Mint elmondta, az Akadémia tantárgypedagógiai kutatási programjának középpontjában ezúttal a módszer áll majd. Az MTA az általa kiírandó pályázaton induló kutatócsoportoktól azt várja, hogy hatástanulmányokkal kiegészített koncepcióban mutassák be, miként taníthatók hatékonyan a különböző tudományos tárgyak.

Az MTA Közoktatási Elnöki Bizottsága a tervek szerint havonta ülésezik majd, hogy tudományosan megalapozott válaszokkal segítse a döntéshozók munkáját. További három testület működik az MTA elnöki bizottságaként: a Környezettudományi Elnöki Bizottság, elnöke Németh Tamás agrokémikus, az MTA rendes tagja, a Kutatási Infrastruktúra Elnöki Bizottság, elnöke Faigl Gyula fizikus, az MTA rendes tagja, valamint a Magyar Tudományosság Külföldön Elnöki Bizottság, elnöke Kocsis Károly földrajztudós, az MTA levelező tagja. (Az MTA nyomán)



UPPP néven új tehetségfejlesztő programot indít a MOL-csoport. „Csatlakozz, ha mersz!” Az UPPP nemzetközi vetélkedő a kiválasztott egyetemek földtudományi és olajipari műszaki tudományokat hallgató diákjai számára. Az első három csapat összesen 20 000 eurót nyer, lehetőséget kap arra, hogy csatlakozzon a MOL-csoporthoz, és tagjai szakmai pályafutásukat az „UPPP Tehetségfejlesztő Program” keretében kezdhessék el. Az UPPP online szimulációs vetélkedőre október 1. és 23. között lehet jelentkezni. A vetélkedőn Magyarországról a Miskolci Egyetem, a Szegedi Egyetem és az ELTE hallgatói vehetnek részt további 24 külföldi egyetem mellett.

A hallgatók 14 ország kiválasztott egyetemeiből érkeznek az Egyesült Királyságtól Közép-Európán át Közél-Keletig, és 3 fős csapatokat alkotva jelentkezhetnek az online vetélkedőre. Először egy online szimulációs játékban vesznek részt, ennek során különböző iparági és stratégiai feladatokat kell megoldaniuk virtuális forgatókönyvek szerint. A feladatok között lesznek a MOL portfóliójából vett valóságos helyzeteken alapuló, az életből vett esettanulmányok. A második szakaszban lesz az élő döntő.

Az UPPP-ről további információt, valamint egyéb díjnyertes tehetségtoborzó programokat itt talál: www.facebook.com/moluppp, www.uppp.info. (MOL)



Új, ingyenes tudományos adatbázis fejlesztése indult az Akadémiai Könyvtárban. A tudományos publikációkhoz való nyílt hozzáférésben (Open Access) jelent új lehetőséget az a felhasználói igények nyomán elkészített elektronikus adatbázis-gyűjtemény, amelyet az MTA Könyvtár és Információs Központban (MTA KIK) fejlesztettek ki. A COMPASS segítségével bárki szabadon böngészhet a jelenleg 150 tételből álló online adatbázisban.

A Magyar Tudományos Akadémia az Elektronikus Információs Szolgáltatás (EISZ) Nemzeti Program keretében már eddig is folyamatosan bővülő elektronikus tartalomszolgáltatással segítette a kutatókat. A leg-
rangosabb tudományos folyóiratokban megjelenő cikkekkel elérhetővé tévő EISZ elsősorban az intézményalapú (IP) hozzáférést teszi lehetővé. Az MTA Könyvtár és Információs Központban működő EISZ Titkárság által létrehozott COM-
PASS a tervek szerint – az EISZ-hez szorosan kapcsolódó, de attól függetlenül is bővülő adatbázis-gyűjteményként – személyi alapú (ID), térítésmentes szolgáltatást nyújt majd a felhasználóknak.



A minden tudományterületet magában foglaló COMPASS összegyűjti és rendszerezi a nyilvános könyvtárakban elektronikus formában elérhető tudományos adatbázisokat, és egy böngészhető térképen, grafikus formába rendezve, teszi őket szabadon hozzáférhetővé. Így minden érdeklődő számára naprakész információt nyújt a hozzáférhető tudományos tartalmak elérési lehetőségeiről és módjáról. Ezáltal nagyban erősíti az információhoz való egyenlő hozzáférés esélyeit, és csökkenti a területi egyenlőtlenségekből fakadó hátrányokat. A COMPASS sikeres működéséhez a közkönyvtárakon túl adatokat várnak minden magyarországi és határainkon túli, magyar állománnyal rendelkező nyilvános – felsőoktatási intézményekben, országos hatáskörű intézményekben, nonprofit kutatóhelyeken, múzeumokban, egészségügyi intézményekben, kórházakban található – könyvtártól. Az adatbázis az MTA Könyvtár és Információs Központ anyagának és az EISZ körébe tartozó adatbázisok adatainak feltöltésével indult, a következő lépés az MTA kutatóintézetek adatszolgáltatása nyomán várható.

Ezenfelül számos olyan értékes, egyéni fejlesztésű adatbázis létezik az MTA kutatóintézteiben, a közkönyvtárak helyismereti gyűjteményeiben, a felsőoktatási intézmények speciális szakterülettel foglalkozó egységeiben, amelyek az érdeklődők előtt nem vagy csak kevéssé ismertek. A COMPASS kiterjesztésével ezek a rejtett kincsek közkinccsé válhatnak.

A különböző adatbázisok között az egyszerű és összetett keresés lehetőségeit azonos mezőben ötvöző keresővel lehet böngészni, akár több feltétel megadásával. A jelenleg 46 tudományos adatbázist tartalmazó, de folyamatosan gyarapodó gyűjteményben való eligazodást a COMPASS ismertetőikkel segíti. A legfontosabb aktuális információkat tartalmazó összefoglalókban az adatbázis rövid leírása, direkt linkek, a szolgáltató és/vagy a kiadó neve, egyes esetekben az intézmény elérhetősége található meg. (MTA)

Az adatbázisok között az egyszerű és összetett keresés lehetőségeit azonos mezőben ötvöző keresővel lehet böngészni, akár több feltétel megadásával. A jelenleg 46 tudományos adatbázist tartalmazó, de folyamatosan gyarapodó gyűjteményben való eligazodást a COMPASS ismertetőikkel segíti. A legfontosabb aktuális információkat tartalmazó összefoglalókban az adatbázis rövid leírása, direkt linkek, a szolgáltató és/vagy a kiadó neve, egyes esetekben az intézmény elérhetősége található meg. (MTA)

Banai Endre összeállítása



■ Visszhang

Hélix mátrix, az elemek spirális periódusos rendszere

Az elemek fizikai jellemzőik, például növekvő atomtömege, illetve rendszám alapján sorba rakhatók, az így rendezett sorban a hasonló tulajdonságot mutató elemek periodikusan ismétlődnek. A sorokat a hasonló tulajdonságú elemekkel újratekintve táblázat készíthető.

Többféle periódusos rendszert szerkesztettek, a Mengyelejev-táblázat sorai a periódusok, oszlopai pedig a hasonló fizikai, kémiai tulajdonságokat (vegyületképző képességet) mutató elemeket tartalmazzák. A periódusos rendszerek az atomszerkezet megismerése után, hiányosságai ellenére is hasznosíthatóknak bizonyultak, például az elektronaffinitás, az elektron héjak-számok és vegyértékek összefüggésének, a vegyületek képződésének, a molekulaszervezetek kialakulásának tisztázásában [1].

A klasszikus táblázatokban a rendszám növekedtével, a 20. Ca után mellékoszlopok bevezetése vált szükségessé. Később az 56. Ba után a lantanidák, a 88. Ra után az aktinidák számára már nem volt hely az adott csoportokban, ezért a napjainkban népszerűbb hosszú periódus rendszerek is külön, táblázat alatti sorokban sze-

repeltették ezeket az eltérő tulajdonságaik mellett hasonlóságot is mutató elemek sorozatait.

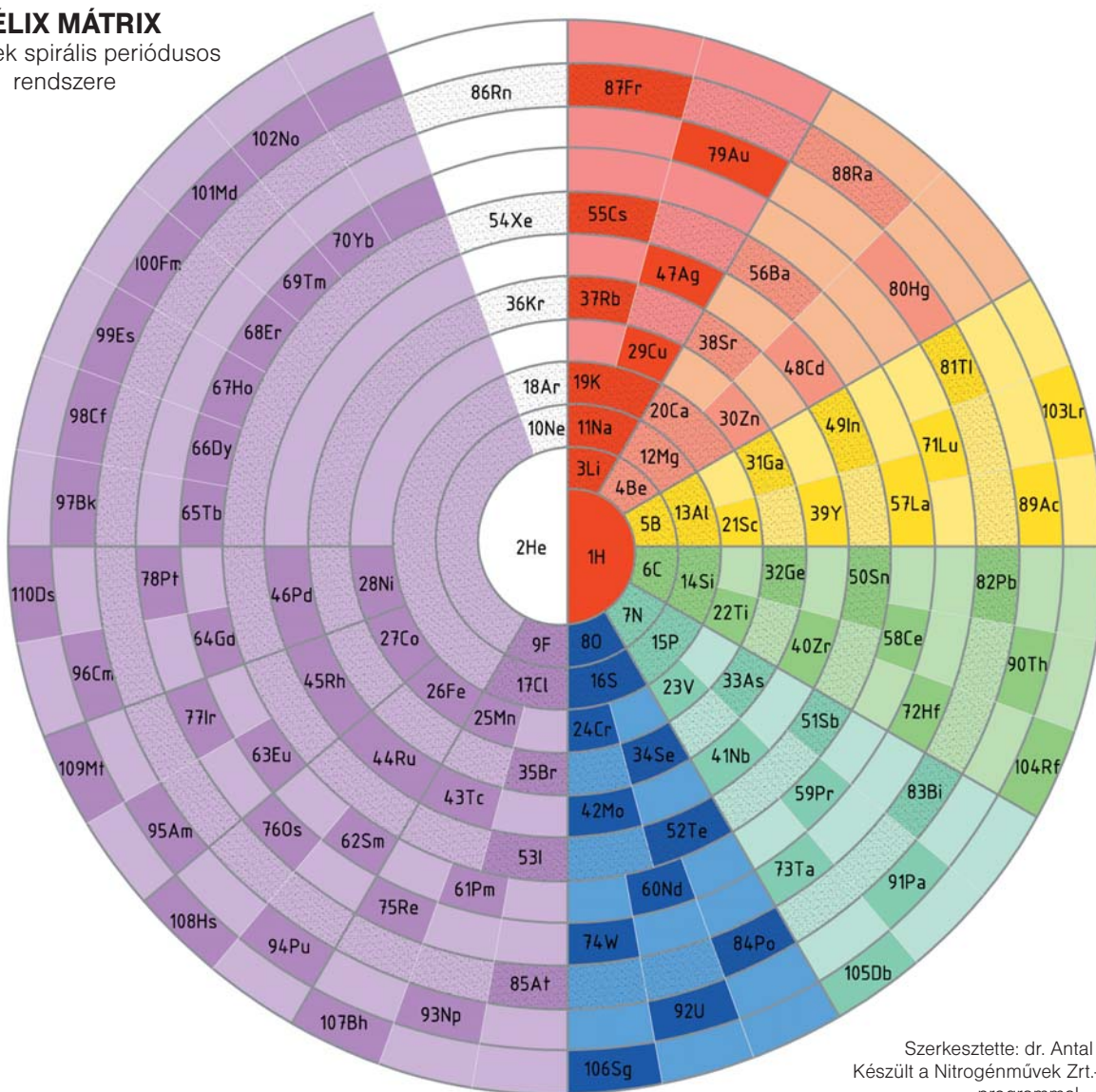
Egységes, rendszám szerinti képet mutat az MKL 2014. márciusi számának borítóján bemutatott kerek periódusos rendszer [2], azonban a 18. Ar után a hasonló tulajdonságú elemek oszlopa szétcsúszott, az egy csoportba tartozó elemek eltávolodtak egymástól, így éppen a hasonlóság átlátása, az ebből származó előnyök hasznosítása veszett el. Bár a színezés javított a helyzeten, a tarkabarka árnyalatok téveszthetősége továbbra is nehezíti az áttekinthetőséget, használatát a kémiatanításban.

A kör forma megtartása, illetve spirálszerkezetté alakítása, valamint a körök-oktávok alkalmazása az eddigi ismeretek integrálását teszi lehetővé. Ugyan 1960-ban Theodor Benfey készített egy spirális periódusos rendszert, amelyben a főcsoport elemeit körökbe sorolta [3], azonban az átmenetifémeket, lantanidákat, aktinidákat elkülönült szigetként ábrázolta. Ezáltal deformálódott a szerkezet, áttekinthetetlen lett a hasonló tulajdonságú elemek csoportja.

Az alábbi ábrán spirálvonalon óramutató járása szerint előre haladva az első köröktől a nyolcadikig minden periódusban a rendszám, azaz az elektronszám töretlenül/folytonosan növelhető, nem kell kihagyni a lantanidákat, aktinidákat, hiszen a spirál sugarának növekedésével a kerületen egyre több elem helyez-

HÉLIX MÁTRIX

Az elemek spirális periódusos rendszere



Szerkesztette: dr. Antal József
Készült a Nitrogénművek Zrt.-nél, Autocad programmal



hető el. Úgy, ahogyan a rendszám (elektronszám) növekedésével a mag-tól távolodva a nagyobb sugarú gömb is egyre több elektron helyfoglalását teszi lehetővé; mutatják ezt a telített héjak elektronszámjai: 2, 8, 18, 32.

A *körcikk-oktávok* megtartását indokolja, hogy a mobilis, kémiai kötések létesítő elektronok száma a vegyületképző partnerek térbeli elhelyezkedése miatt is korlátozott, például: $(\text{IO}_6)^{-5}$, IF_7 , Na_3PaF_8 . A stabilis nemesgáz-konfigurációk legkülső burkolatán is 8 elektron található.

A kisebb rendszámú lantanidák és aktinidák (1–6 mobil, f mezőbe feltöltődő elektront tartalmazók) besorolását a hasonló tulajdonságú elemek csoportjához korábban is megkísérelték: jellemző vegyértékeik alapján a Ce-t, Th-t a negyedik, a Pa-t az ötödik, a Nd-t és U-t a hatodik csoporthoz hasonlították [1]. További nagyobb rendszámú társaiknál az f mezőbe feltöltődő, mobil elektronok számának növekedése, a beépülő elektronok kis energiaszint-különbsége miatt alig észrevehető tulajdonságváltozások mellett inkább az eseti szimmetriák okoznak eltéréseket [4]. Mivel tendenciózus különbségek nincsenek, illetve a további elektronok hozzáférhetetlensége miatt, a hatnál több mobil (legutoljára feltöltődött) elektront tartalmazó lantanidákat a hetedik csoportba soroltam. Analóg a korábbi besorolások Mn–Fe sorához, Pt/Pd csoportjaihoz, azok d mezőjének elektronszámához. A formális elektronszerkezet tehát itt jelöli ki helyüket, ugyanis a 43. Tc – 46. Pd elemek telített héjat jelző 18 elektronnal különböznek a 61. Pm – 64. Gd sortól, analóg a Kr-nal és a Xe-nal, illetve a közvetlen előttük levő periódussorok fő- és mellékcsoportjainak elemeivel.

Ezzel a besorolással a körcikkben egymás alá kerülhettek (a hosszú periódusos táblához hasonlóan) a lantanidáknál 32-vel (telített e héjjal) nagyobb rendszámú aktinidáparjai is.

A lantanidák–aktinidák csoportjában az f elektronok feltöltődése a 70. Yb-mal és 102. No-mal befejeződik, ezért a csoportba sorolt 71. Lu, és 103. Lr az új d elektron megjelenése, illetve stabil 3 vegyérték alapján egyszerűen a 3. csoportba sorolhatók, ahogyan azt a hosszú-hosszú periódusos táblában is ábrázolták [5, 6]. Egyúttal megoldódik az a kérdés is, hogy a kiegészítő táblázatban az f elektronhéj szerinti 14 vagy az IUPAC-besorolás szerinti 15 lantanidát/aktinidát szerepeltessük, és a La-t vagy a Lu-t a főtáblában. Hiszen a spirálrendszerben a lantanida/aktinida periódus a 3. csoportban kezdődik és ott is ér véget.

A hélix mátrix szerinti besorolás helyességét a legújabb mérések is alátámasztják [7], amelyek szerint a 91. Pa nem az aktinidasorban előtte (90. Th) és utána (92. U) következő elemekhez hasonlít, hanem az 5. csoport/körcikk szerint elvárható vegyületeit is előállították.

Nem jelöltem az ábrán a következő lehetőséget: a feltöltött 4f/5f héj (14 e) stabilitása miatt a 70. Yb és 102. No esetenként csak két külső kötőelektronjával alkot vegyületeket (az aktinidák/lantanidák leggyakoribb 3 vagy több vegyértéke mellett ezeknél a 2 is előfordul), így a 2. oszlopba/körcikkbe is helyezhetők. A természethez hasonlóan az elektronszám folytonosságára, periodikus ismétlődésére épülő rendszer rugalmasságát, stabilitását jelzi, hogy ezáltal nem borult semmi.

Az aktinidákat követő nehéz elemeket mobilis elektronjaik száma/hasonlósága révén a 4., 5., 6., 7. csoport alá szokták írni, mivel a 72. Hf –78. Pt sortól egy telített héj (32 db) elektronszámával különbözik a 104. Rf –110. Ds külső sor, a spirálrendszerben is egymás alatt ábrázolhatók.

A 111. rendszámtól a 118.-ig folytatható a spirálsor (sőt tovább is). Az elemek az utolsó számok véletlen egybeesése folytán, a megfelelő 1–8. körcikkben feltüntetethetők, azonban az újabb elektronok energiaszintje még kevésbé különbözik egymástól, így tulajdonságaik, vegyületképző hajlamuk bizonytalan, továbbá a mesterségesen, igen kis mennyiségben előállított, rövid életű elemek meghatározása is nehézségekbe ütközik, ezért a hélix mátrixot csak a 110. elemig töltöttem ki.

A színezéssel, a fehér fény felbontása szerint (1: vörös, 2: narancs, 3: sárga, 4: zöld, 5: türkiz, 6: kék, 7: ibolya) jelöltem a körcikkeket, a hasonló elemek csoportját. Ezenkívül különféle tulajdonságok, szempontok kiemelésére is hasznosíthatjuk, például az s/p mezők feltöltődését jelző főperiódusok sötétítése a körcikk főtáblájának elemeit is kiemeli.

Antal József

IRODALOM

- [1] Bodor Endre: Szervetlen Kémia, Bp. TK. 1968.
- [2] MKL (2014) március
- [3] http://en.wikipedia.org/wiki/Periodic_table
- [4] L. V.Petrjanov, Szokolov: Radioaktív elemek, Bp. MK. 1979.
- [5] www.ptable.com/?lang=hu
- [6] <http://www.webelements.com>
- [7] MKL, 2014. június, 202. o.

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

Kozmetika szimpózium 2014 – „A kozmetikai tudomány elvei és gyakorlata”

2014. november 13.

Hotel Bara Budapest, Hegyalja út 34.

A szimpózium fő témakörei:

- Új ható- és segédanyagok
- Hatás- és mellékhatás-vizsgálatok
- Analitikai és stabilitásvizsgálatok
- Technológia és technikai adalékok
- Szabályozás

A rendezvényre a szimpózium honlapján lehet online módon regisztrálni: <http://www.mke.org.hu/events/conferences/national/713-kozmetikai-szimpozium-2014.html>

A szimpózium részletes programja az alábbi linken található: http://www.mke.org.hu/images/downloads/rendezvenyek/Kozmetika2014_program.pdf

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix,
beatrix.schenker@mke.org.hu

Hungarocoat–Hungarokorr, 2014

2014. november 25–26.

ELTE, Budapest, Pázmány Péter stny. 1/a

További információk: Schenker Beatrix,
mail@hungarocoat.hu
www.hungarocoat.hu

Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny

Szeged, 2015. április. 24–26.

Versenykiírás: www.irinyiverseny.mke.org.hu

**16th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry – 16BDSHC**

2015. június 14–17.

Hotel Ramada, Balatonalmádi, Bajcsy-Zsilinszky u. 14.

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.

Online jelentkezés:

<https://www.mke.org.hu/conferences/16bdshc/registration/>További információk: Schenker Beatrix, info@16bdshc.hu**Felhívás fiatal analitikusoknak!**

Az MKE Analitikai Szakosztálya
Szerves- és Gyógyszer-analitikai Szakcsoportja
2014. november 7-én, pénteken

rendezi meg hagyományos konferenciáját pályakezdő és fiatal analitikusok részvételével.

A konferencia helye az MKE Hattyú utcai előadóterme. Az előadók nevét, az előadás címét és rövid tartalmát a szakcsoport elnökének vagy szervezőjének küldjék meg:

tompepet@t-online.hu

dr. Tömpe Péter
elnök

Meszlenyi@richter.hu

dr. Meszlényi Gábor
vezetőségi tag, szervező

MEGHÍVÓ

A Magyar Kémikusok Egyesülete BAZ Megyei Területi Szervezete és a Miskolci Akadémiai Bizottság Vegyészet Szakbizottsága tisztelettel meghívja a MAB székházba (Miskolc, Erzsébet tér 3.) a 2014. november 19-én 9.30-kor kezdődő

OLCSÓBB ENERGIA–VERSENYKÉPESEBB VEGYIPAR
témakörű
31. BORSODI VEGYIPARI NAPRA

A részletes programot az MKE honlapján, www.mke.org.hu, tesszük közzé.

MKE egyéni tagdíj (2015)

Kérjük tisztelt tagtársainkat, hogy a **2015. évi tagdíj** befizetéséről szíveskedjenek gondoskodni annak érdekében, hogy a Magyar Kémikusok Lapját 2015 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

Tagdíj-befizetési 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.

Előfizetés a Magyar Kémiai Folyóirat 2015. évi számaira

A Magyar Kémiai Folyóirat 2015. 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 2014-ben kettős előfizetéssel hozzájárultak a határon túli magyar kémikusoknak küldött Folyóirat terjesztési költségeihez. Kérjük, aki teheti, 2015-ben is csatlakozzon a kettős előfizetés akcióhoz.

MKE Titkárság**Nobel-díj, 2014**

Az idei kémiai Nobel-díjat Eric Betzig, Stefan W. Hell és William E. Moerner kapta a szuperfelbontású mikroszkópia kidolgozásáért. A Nobel-díjas felfedezések ismertetésére később vizsaterünk.


**HUNGARIAN
CHEMICAL JOURNAL**
LXIX. No. 11. November 2014

CONTENTS

<i>On-line condition monitoring of water-based metalworking fluids</i>	330
GERGELY MOLNÁR, BARNABÁS HORVÁTH, ISTVÁN SZALAI, ANTAL NAGYMÁNYAI, JÁNOS TAKÁCS	
<i>Discoveries with interweaving stories</i>	334
ISTVÁN HARGITTAI	
<i>Electronic structure of f-elements</i>	339
PETER POGÁNY, ATTILA KOVÁCS	
<i>A real professional appreciation. An interview with Rátz Professor Prize winner chemistry teachers Gábor Cs. Nagy and Gábor Péter Oláh</i>	343
TAMÁS KISS	
<i>Molecular background and new potentials of food pairing</i>	347
TIBOR BRAUN	
<i>Science on stamps. Atmospheric chemistry: the ozone shield</i>	352
LÁSZLÓ BOROS	
<i>Chemistry calendar (Edited by JÓZSEF SÁNDOR PAP)</i>	353
<i>Chembits (Edited by GÁBOR LENTE)</i>	354
<i>The Society's Life</i>	356
<i>News of the Month</i>	358

Nívódíjak – 2014

A Magyar Kémikusok Egyesülete 2014. évi pályázatára beérkezett 32 színvonalas pályamunka közül a Műszaki–Tudományos Bizottság a következő 13 pályázatot jutalmazta Nívódíjjal:

A pályázó neve	Egyetem	Témavezető	A diplomamunka címe
Démuth Balázs	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	Dr. Bakó Péter	L-Treitól alapú koronaéterek szintézise és enantioszelektív reakciók vizsgálata
Fehér Péter Pál	Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kar	Dr. Purgel Mihály	A szulfonált alizarin és palládiumkomplexének elméleti vizsgálata: funkcionált tesztelések és spektrumszimulációk
Horváth Barbara	Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	Dr. Secenji Aleksandar	Optikai nanoszenzor fejlesztése intracelluláris pH-méréshez és képalkotáshoz
Kiss Melitta Patrícia	Pannon Egyetem Mérnöki Kar	Dr. Valicsek Zsolt Dr. Horváth Ottó	Szamárium(III)-porfirinek képződésének reakciókinetikai vizsgálata
Kunsági-Máté Éva	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	Dr. Hórvölgyi Zoltán	Mezopórusos TiO ₂ vékonyrétegek előállítása és vizsgálata
Mesterházy Edit Éva	Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	Dr. Jancsó Attila Dr. Pascale Delangle	Interaction of copper(I) with 12-mer peptides mimicking the metal binding domain of CueR, a copper-efflux regulator
Mikle Gábor	Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kar	Dr. Kollár László	Szteránvázas jódkén palládium-katalizált diasztereoszzelektív aminokarbonilezése
Németh Tamás	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	Dr. Huszthy Péter Dr. Tóth Tünde	Enantiomertiszta akridino-18-korona-6-éter szelektort tartalmazó királis állófázisok előállítása és vizsgálata
Palotai Balázs	Pannon Egyetem Mérnöki Kar	Dr. Varga Zoltán	Alacsony hőmérsékletű technológiai áramok hasznosítása
Remete Attila Mórió	Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar	Dr. Kiss Loránd Dr. Wöfling János	Új, fluortartalmú funkcionizált ciklusos β-aminosavszármazékok szintézise
Tóth Zsuzsanna	Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézet	Szabados Ágnes	Alsó becslés molekulák energiaszintjeihez
Varró Gábor	Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	Dr. Kádas István	A transz-dihidro-narciklazin sztereoszzelektív totálszintézise
Vörös Tamás	Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Intézet	Dr. Tarczay György	[H, C, N, Se]-izomerek vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával

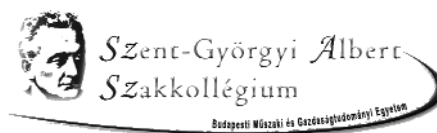
Szakkollégiumi Napok, 2014

A Szent-Györgyi Albert Szakkollégium idén is izgalmas programsorozattal várta az érdeklődőket. Szeptember 9-én közel 18 gyár fogadta a kar hallgatóit. Mindenki megtalálhatta a saját érdeklődési körének megfelelő gyárat, eljuthattak a MOL-ba, a Coca-Colába, a Bálint Analitikába, a Buszeszhez, és még lehetne sorolni.

A kedd egy igazán izgalmas előadást tartogatott: Topál József a kutyaelme sajátosságairól mesélt, bemutatta a kutya társas-elméképességeinek sajátosan „emberi” vonásait a legújabb viselkedéskutatási eredmények tükrében. Szerdán, kerekasztal-beszélgetés keretében, A megújuló és nem megújuló energiaforrásokról vitatta meg nézeteit Pátzay György moderátor segítségével Munkácsy Béla,

Aszódi Attila, Lontay Zoltán, Szarka László és Szlávik János. Ezt követően csütörtökön az Országos Mentőszolgálat szóvivője, Gyórfi Pál előadásával pillanthattunk be a mentősök mindennapjaiba. A programsorozat végül egy Activity-esttel zárult, ahol nem maradhatott el a felhőtlen szórakozás. A hét sikerességét mi sem bizonyíthatja jobban, mint a hatalmas érdeklődés, az előadások változatossága és a pozitív visszajelzések.

Bezzeg Klaudia
szervező



Macherey-Nagel GmbH. Tradíciókra és tapasztalatokra építkezve. Több mint egy évszázada az Önök és a minőség szolgálatában!



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

FILTRIER-PAPIER
 in Bögen und Rollen
 Rundfilter
 Aschenfreie Filter
 MACHEREY, NAGEL & Co. KG
 DÜREN-RHLD.

tuv CERT
CERTIFICATE
 The TÜV CERT Certification Body of TÜV Anlagentechnik GmbH
 hereby certifies in accordance with TÜV CERT procedures that
MACHEREY-NAGEL GmbH & Co. KG
 Neumann-Neander-Strasse 6-8
 D-51525 Düren
 has established and applies a quality management system for
Filtration - Testing - Chromatography Bioanalysis.
 An audit was performed, Report No. 5507
 Proof has been furnished that the requirements according to
DIN EN ISO 9001:2000
 are fulfilled.
 The certificate is valid until January 2005
 Certificate Registration No. 01 100 5507

SZÜRŐPAPIROK
SZÜRŐKARTONOK
MEMBRÁNSZÜRÖK
MEMBRÁNSZÜRŐK
MACHEREY-NAGEL

100 Blatt
 9 x 11,5 cm
Wägepapier MN 226
MACHEREY-NAGEL

100 FALTENFILTER
 FOLDED FILTERS
MN 615 1/4 18,5cm Ø
MACHEREY-NAGEL

100 FALTENFILTER
 FOLDED FILTERS
MN 640 d 15 cm Ø
MACHEREY-NAGEL

100 FALTENFILTER
 FOLDED FILTERS
MN 616 1/4 18,5 cm Ø
MACHEREY-NAGEL