

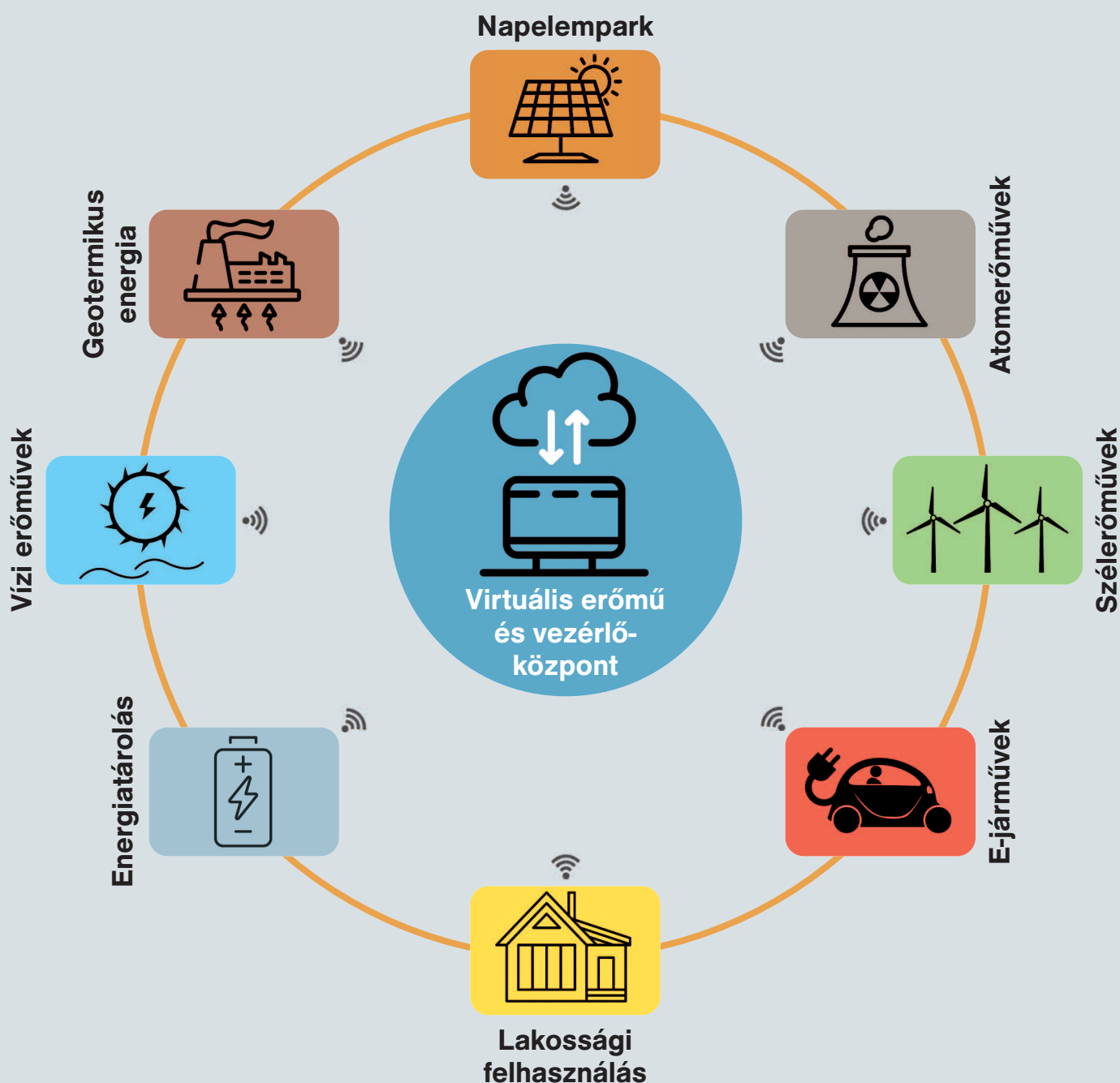
A TARTALOMBÓL:

- Kvantumeffektusok ppb pontossággal
- Út a Polányi-díjhoz
- Világszínvonalú kémiai piactér
- Egy Rátz Tanár Úr életműdíjas tanár pályája
- A hónap kémiai publikációja



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXXVII. ÉVFOLYAM • 2022. OKTÓBER • ÁRA: 850 FT



A lap megjelenését
a Nemzeti Kulturális Alap
támogatja

Nemzeti Kulturális Alap

A kiadvány
a Magyar Tudományos Akadémia
támogatásával készült

KJELDAHL-N MÉRŐ BERENDEZÉSEK

behr

Labor - Technik

Düsseldorf

Roncsolók:

- termoblokkok és infrás gyorsfeltárók
- mintahelyek: 6, 8, 12, 20, 24, 40
- feltáró térfogat: 100, 250, 400 mL
- programozás: magyar menüből
- tárolható programlépések
- manuális és automata motoros

Gázelszívó és gázmosó (scrubber):

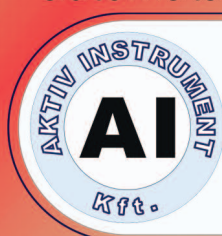
- az elszívófülke helyettesítője
- kétfokozatú gázhűtés és gázmosás
- beépített cseppfogó
- opcionális kiegészítő hűtő specialitás
- erős elszívás, könnyű kezelés

Automata vízgőzdesztillálók:

- 5 kivitel - 5-féle komfortfokozat
- Gyors egyszerű ütem: 3perc/minta
- Standard funkciók: programozható gőzteljesítmény, reakcióidő, desztillálási idő, automata lúgadagolás, USB interfész, LCD kijelző, magyar menü
- Tipusfüggő szolgáltatások: reagenskanna szintfigyelés, automata hígítás, automata leürítés, automata bórsav adagolás, titrálás
- Tárolható programok: 1-99 (tipusfüggő)

Titráló egységek:

- digitális buretták és
- automata titrálók



AKTIV INSTRUMENT Kft.

ANALITIKAI BERENDEZÉSEK, AUTOMATA ANALIZÁTOROK
1145 Budapest Pétervárad u. 14.
Tel.: (1)-789-2778, Fax: (1)-785-8489
Mail: kozpont@aktivinstrument.hu
web: www.aktivinstrument.hu



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXVII. évf., 10. szám, 2022. október



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

Szerkesztőség:

Felölös szerkesztő: KISS TAMÁS
[SZEKERES GÁBOR] örökös főszerkesztő
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE

Szerkesztők:

ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,
LENTE GÁBOR, NAGY GÁBOR,
PAP JÓZSEF SÁNDOR, [RITZ FERENC],
ZÉKÁNY ANDRÁS

Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
[ANTUS SÁNDOR], BIACS PÉTER,
BUZÁS ILONA, HANCSÓK JENŐ,
JANÁKY CSABA, KALÁSZ HUBA,
KEGLEVICH GYÖRGY, KOVÁCS ATTILA,
[LIPTAY GYÖRGY], MIZSEY PÉTER,
NEMES ANDRÁS, ifj. SZÁNTAY CSABA,
SZABÓ ILONA, 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
Felölös kiadó: ANDROSITS BEÁTA
Nyomdai előkészítés: HORVÁTH IMRE
Nyomás: Europrinting Kft.
Felelős vezető: ENDZSEL ERNŐ
ügyvezető igazgató

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete
Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank
10700024-24764207-51100005 sz.
számlájára „MKL” megjelöléssel
Előfizetési díj egy évre 10200 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 és archivált számaink honlapunkon
(mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541
HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)
HU ISSN 1588-1199 (online)
DOI: 10.24364/MKL.2022.10

A lapot az MTA MTMT indexeli, és a REAL,
továbbá az Országos Széchényi Könyvtár
(OSZK) Elektronikus Periodika Adatbázisa
és Archivuma (EPA) archiválja



Jó ideig hozzászoktunk a biztonsághoz, a kiszámíthatósághoz, így most nehéz elfogadni, hogy napjainkban sok minden dinamikus változik körülöttünk. Kijöhö-tünk-e győztesen a sokféle kihívás együttes leküzdéséből? Nincs más választásunk. Az elmúlt évtizedekben barátkoztunk a globális éghajlatváltozás jelenségével, de úgy tűnik, hogy az időről időre megrendezett klímacsúcsok nem eredményeztek áttörő sikereket ebben a vonatkozásban. Az egyhelyben toporgásnak vetett véget a világ-járvány; erre Európában a „Helyreállítási és Ellenállóképességi Eszköz” felállítása lett a válasz, és ehhez EU-s forrásokat is biztosítanak. Megszületett az „Irány az 55%!” szakpolitikai intézkedéscsomag, ami 2021-ben mintegy 11 korábbi irányelv és rendelet átirását és további 4 új irányelv létrejöttét hozta el. Ha mindez még nem lett volna elég, a szomszédunkban zajló háború végleg kizökkentette a döntéshozókat komfortzónájukból. A halmozódó kihívásokra az egyik lehetséges közös válasz az energiarendszer társadalmilag is elfogadott, fenntartható és megtérülő átalakítása, ugyanis ez új pályára állítja a gazdaságot. A REPowerEU tervet „Európa megfizethető, biztonságos és fenntartható energiaellátásáért” fogalmazták meg.

Összességében elmondható, hogy mi, vegyészek és vegyészmérnökök nem leszünk munka nélkül a következő időszakban sem. A gázellátás diverzifikálása nemcsak azt jelenti, hogy a beszállító országok számát növeljük, hanem azt is, hogy olyan energiahordozókat alkalmazunk, amelyekkel a szükséges és elégséges mértékben biztosítani lehet az energiaellátást. A térben és időben igen eltérő megújuló energiaforrásokkal rendelkező régiók összekötésére kiváló alternatívának ígérkezik a hidrogén. Nagy távolságokba lehet szállítani (pl. szintetikus, e-üzemanyag formájában), ami hozzájárul az energiaszegényebb térségek energiabiztonságának megteremtéséhez. Ezáltal az energiaellátás függetlenné válhat a fosszilis nyersanyagoktól, és ez minden bizonnyal találkozunk a szerves vegyészek igazságérzetével is. Vétek ugyanis alapanyagainkat energiaforrásként felhasználni, hiszen azokat a vegyipar jóval nagyobb hozzáadott értékkel tudja hasznosítani.

A szél- és naperőművekből származó villamos energia legjobban közvetlenül használható fel. Ugyanakkor jelenleg a villamos energia felhasználása a primer energiafelhasználásnak csak a 15–25%-át teszi ki. Kérdés, hogy lehet-e a maradék 75%-ot jelentős mértékben villamosítani. A közvetlen villamosítás ugyanis hatalmas beruházásokat igényel: többek között a villamosenergia-hálózat drasztikus bővítését, az akkumulátoros járművek töltési infrastruktúrájának kialakítását kívánja meg, amelynek költségei lineárisan nőnek a gépjárművek számával. Érdemes a gáz- és villamosenergiaszektort összekapcsolni. Az országos átviteli és elosztóhálózatokkal együttműködő kisebb helyi hálózatok megbízhatóan működő virtuális erőművé kapcsolhatók össze (intelligens hálózatok), amely megteremti az új energiarendszer rugalmasságát és megbízhatóságát. A helyben fel nem használt villamos energia tárolására, szállítására ismét csak a hidrogén lehet az egyik legalkalmasabb energiahordozó. A vegyészmérnököknek számos anyagtudományi kérdést kell megoldaniuk, hogy az energia- és anyagátalakítás egységei (pl. elektrolizáló és tüzelőanyag-cellák) elérhető áron, nagy hatásokkal működjenek és hosszú élettartammal rendelkezzenek. E teljesítménymutatók javításával lehet csak elérni, hogy az életciklus során a jelenlegi fosszilis alapú technológiákhoz képest a károsanyag-kibocsátást csökkentsük és végül nullára redukáljuk. Azt már most is érdemes hangsúlyozni, hogy a végfelhasználóknál, működés közben, a különbség tüzelőanyag-celláknak nincs kibocsátásuk, ami jelentősen javíthatja a lakosság életminőségét.

Végül nem elhanyagolható az a szempont sem, hogy az energiaátalakító egységek előállítását és újrahazszo-nosítását központosítani lehet, s így a helyben, összpontosítottan jelentkező kibocsátást megkötni, ami például szén-dioxid esetén vegyészek szakértelmét igénylő CCS/U technológiák megalapozását és alkalmazását kívánja meg.

Tompos András

Jóllehet e kérdések jelentős részben szakmaiak, de gazdasági vonatkozásaiak sem elhanyagolhatók. Ezért is tartjuk indokoltnak, hogy lapunk hasábjain akár tematikus számként, akár sorozatcikkek formájában tárgyaljuk ezeket (a felelős szerkesztő).

TARTALOM



Címlapunkon:

Virtuális erőmű modellje.
Az illusztráció L. Yavuz,
A. Önen, S. M. Mueyen,
I. Kamwa ábrája alapján
készült (IET Gener.
Transm. Distrib. (2019)
13/11, 1994–2005.)

Kvantumeffektusok ppb pontossággal. Beszélgetés Mátyus Edittel	286
Bányai István: Bemutatók, út a Polányi-díjhoz	289
Az új magyar Chemistry Europe Fellow: Kele Péter	290
Mcule: világszínvonalú kémiai piactér	292
Deák Péter, Vörös Attila, Mizsey Péter: Folyamatos áramlású reaktorok II. Ipari példák I.	295
Sarka Lajos: Pályám során a megszerzett tudást, tapasztalatokat igyekeztem továbbadni	302
Inzelt György: Kiről neveztek el? Kirchhoff törvényei, a Busen–Kirchhoff-spektroszkóp	305
Róka András: A „protonpompák” működése és következménye II.	308
Kiss Tamás: Braun Tibor utolsó köszöntése	312
Braun Tibor: Rövid betekintés az ősi római gasztronómiába Lucullustól Apiciusig	312
Vegyészleletek (Lente Gábor rovata)	314
A hónap kémiai publikációja	316
Kutasi Csaba: Búcsú Marosi József tanár úrtól	318
A hónap hírei	319



Kvantumeffektusok ppb pontossággal

Beszélgetés Máttyus Edittel, az ELTE TTK Kémiai Intézetében működő Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport vezetőjével

Mi a csoport kutatásának témája, milyen aktuális tudományos kérdéshez kapcsolódik ez?

Gyermekkorom óta két dolog érdekelt leginkább: a) a hétköznapi anyag, ami bennünket körülvesz; és b) a miért? miért? miért? ... – a miérttek „végtelen” sorozata... Ez az érdeklődés viszonylag természetes módon vezetett el a kémia és a fizika határterületére, és végül is a molekuláris anyag legalapvetőbb elméletéhez. Szakkifejezésekkel élve a csoportom kutatási témája a molekuláris kvantumdinamika, a molekulaspektroszkópia és a molekulafizika területére esik.

Melyek voltak tudományos fejlődésének fontosabb állomásai?

Egyrészt mérnök szüleim természettudományos érdeklődése meghatározó volt. Másrészt pedig a kiváló komplex általános iskolai oktatás-nevelés, és az erős gimnáziumi (Apáczai) szakismeretek után az egyetemen (ELTE) bőven volt terem arra, hogy a kíváncsiságomat „kövessem”. Nagyon bátorító és támogató csoportba kerültem a doktori éveim alatt (ELTE, Császár Attila), ahonnan sok sikerélménnyel és stabil szakmai alapokkal felvértezve vágtam neki a világnak a PhD fokozatom megszerzése után. Posztdoktori kutatómunkát folytattam (kutatással és egy kevés oktatással) 2–2 éven át az ETH Zürichen és a Cambridge-i Egyetemen. A sok-sok évnyi tanulás és világjárás után, 33 évesen, Cambridge-ből hazatérve, svájci támogatással kezdtem el önálló kutatói pályafutásomat az ELTE-n 2016 nyarán.

Kérem, kicsit részletesebben is beszéljen olvasóinknak egyik kedvenc kutatási témájáról!

Jelenlegi kedvenc kutatási témám a relativisztikus kvantummechanika.

Az ETH Zürichen Markus Reiher professzor mellett voltam asszisztens (számolási gyakorlatokat vezettem), és észrevettem pár ellentmondást a tananyagban. Ez a relativisztikus kvantumkémiai alkalmazásokat (átmenetifémek és nehéz elemek kémiája) – amelyről a tantárgy szólt – nem igazán befolyásolta, de engem nagyon zavartak ezek az apró ellentmondások. Elkezdttem ilyen témájú szakkönyveket keresni és olvasni, és ennek hatására csak még jobban összezavarodtam. Az ELTE-ről nagyon erős elméleti alapokkal mentem tovább, megbízható iránytűket vittem magammal, és minden arra utalt, hogy itt valami nem teljesen stimmel. Eközben kétféle irányról hallottam: az egyik, hogy oldjuk meg variációsán a Dirac-egyenletet atomokra és molekulák-



A csoporttal

ra, ahogyan – félig-meddig empirikusan – a relativisztikus kvantumkémiaiában szokás (itt villogott a piros lámpa a fejemben, hogy valami nem stimmel), a másik – amiről egy kísérleti, precíziós spektroszkópiai csoporttól hallottam –, hogy dolgozzunk perturbatíván (akármit is jelentsen most ez pontosan). Az utóbbi irány numerikus eredményei szinte tökéletes egyezést mutattak a világon elérhető legjobb, legnagyobb felbontású mérésekkel, de az irodalom borzasztóan komplikált, nehezen tanulható/olvasható volt. Csak nagyon speciális rendszerekre alkalmazták ezt a perturbatív elméletet (pl. hidrogénatom), és sehogy sem lehetett összehozni a nehézelemek vegyületeire végzett számításokkal (relativisztikus kvantumkémia), amelyek egész jó egyezést mutattak (a sokkal kisebb „felbontású”) kémiai tapasztalatokkal. Frusztrálóak voltak ezek az ellentmondások, és bár nagyon érdekelt a téma, nem volt olyan jól megalapozott, kutatható kérdés-irány, amelynek mentén, évi 1-2 cikket publikálva tudtam volna előre haladni. (Manapság az az általánosan elfogadott – és szerintem életszerű – tudományos módszertan, hogy évi egy-két(-néhány) szakkikben megjelentetjük a legfrissebb kutatásaink eredményét. A szakkikk a tudományos kommunikáció hivatalos, maradandó formája.)

Lassan 12 éve, hogy először szembesültem ezekkel az ellentmondásokkal, azóta viszem magammal a témát a hátizsákomban, és időről időre előveszem. Időközben kiderült, hogy nemcsak én



nem találtam meg az egyértelmű válaszokat a kérdéseimre, hanem ezek a válaszok nem is léteztek. Évek teltek el, mire erre az egyszerű felismerésre rájöttem! A következő években meg tudtam fogalmazni konkrét kutatási kérdéseket és feladatokat.

Ma ott tartok a kutatócsoportommal, hogy már fogást találunk a felismert gubancokon, és kezdjük megérteni, hogyan lehet elvileg is helyes számításokat végezni, amelyek a nagy felbontású precíziós spektroszkópiái (az atomi-molekuláris tartományra végezhető legpontosabb!) mérésekkel összevethetőek lesznek, és helytállóak lehetnek mind a könnyű, mind a nehéz elemekre.

Felszabadító érzés, hogy lassacskán, de sikerül megoldani egy (számomra) évtizedes problémát, ami kezdettől fogva nagyon érdekelt, és ami kísér, kísért, sőt: kísért, de legalábbis kísértETT. Nem láthattam előre, hogyan alakul ez a történet. Benne volt a pakliban, hogy semmit sem tudok kezdeni az ellentmondással. Még most is csak valahol félúton tartok a munkatársaimmal, és az is lehet, hogy elakadunk valahol a további alkalmazások során. De ha így lenne, akkor legalább azt szeretném majd megérteni, hogy „miért?”.

Mennyire láthatóak eredményei nemzetközi téren?

Erről a nemzetközi tér művelőit kellene megkérdezni (bár ez jó sok időbe telne, mert jó nagy ez a tér). Pillanatnyilag arról tudok beszámolni, hogy van néhány személyes ismerősöm a világ néhány nagy egyetemén, mostanában sokfelé hívnak előadni, és eddigi pályafutásom során két egyetemen voltam vendégprofesszor (ETH Zürich – 2019, Georg-August Universität, Göttingen – 2022/2023). Nagy megtiszteltetés, hogy 2021-ben az elméleti és számítási kémikusok világszervezete (World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC) nekem ítélte a(z) évente egy 40 év alatti kutatónak adható Dirac-medált.

(A tudománymetriai mérőszámokat szeretném elkerülni ebben az interjúban, mert azt gondolom, hogy az emberi megértést, „meglátást” és kreativitást lehetetlen egyetlen vagy akár csak néhány mérőszámmal jellemezni. Ezeket a mérőszámokat sok helyen használják, sok helyen részlegesen használják, sok helyen pedig egyáltalán nem használják tudományfinanszírozási döntések meghozatalában.)

Ön szerint mi kell ahhoz, hogy az itthoni kutatások is fel tudják kelteni a nemzetközi szakmai közösség érdeklődését?

Sosem a nemzetközi szakmai közösség érdeklődésének felkeltése volt az elsődleges célom, hanem alapvető fontosságú tudományos kérdések megértése és megoldása. Eddigi munkám során jellemzően nem a *mainstreamet* követtem. Mindig is szerettem olyan, látszólag „kis” dolgokkal foglalkozni, amelyekről úgy éreztem, hogy valamilyen értelemben alapvető fontosságúak. Nagyon szeretem azt a Max Planckról szóló, ismert történetet, amely szerint a 19. század végén a tehetséges, ifjú Planckot a tanárai eltanácsolták a fizika tanulásától, mondván, hogy az már egy majdnem lezárt tudományterület – egy-két „apróságtól” eltekintve. (Planck szerencsére a saját feje után ment...)

Kérem, mutassa be a csoportot!

Kezdetben (2016) attól tartottam, hogy majd én leszek az egyetemű csoport, ezért a ma általam vezetett Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport hivatalos „bejegyeztetésére” is csak kicsit később került sor (2017) az ELTE Kémiai Intézetében. Laboratóriumnak pedig végképp vakmerőségnek éreztem volna nevezni a kezdeményezést... Csodálatos módon alakult az elmúlt néhány év (fél évtized), és pillanatnyilag egészen fantasztikus

csoport van körülöttem. A jövőt illetően szeretném, ha több kiváló doktorandusz csatlakozna hozzánk.

Hogyan lehet idehaza megteremteni egy ilyen nagy csoport működési feltételeit? Mekkora a szerepe ebben az intézmény támogatásának és mennyi a csoportvezető pályázati képességének?

A Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport elmúlt 6 éves kiépülése és működtetése szinte teljes mértékben külföldi (European Research Council és Swiss National Science Foundation) finanszírozásnak köszönhető. Azt gondolom, hogy a kutatócsoport az elmúlt 6 év során már bizonyított, ezért a jövőt illetően szeretnék intézményi (ELTE) és hazai (magyar, például MTA és NKFIH) támogatást látni a finanszírozásban.

Milyen szerepe van a sikeres kutatásban a nemzetközi kapcsolatoknak?

Azt gondolom, hogy a tudomány „lényege” személyes kapcsolatokon keresztül működik, és az a szép a dologban, hogy nagyon különböző, akár a világ bármely pontjáról érkező emberek tudnak egy-egy tudományos témán együtt dolgozni. Sokszor inspirálóan hat egy-egy ilyen együttműködés. Ugyanakkor versenyben is vagyunk más kutatóhelyekkel, ezért azt gondolom, hogy fontos megbecsülni a helyben kifejlesztett („saját”) eredményeket.

Mennyire tartja hivatásának az oktatást a kutatás mellett?

Általános iskolás koromban (fizika-francia szakos) tanár szerettem volna lenni. Előfordult, hogy az osztálytársaim azt kérték a tanárainktól, hogy én magyarázhasam el nekik a tananyagot: teljes természetességgel kimentem a táblához és elmagyaráztam. (Gyermekfejjel nem is jutott eszembe, hogy ez micsoda nagy megtiszteltetés az osztálytársaim és micsoda gáláns gesztus a tanáraim részéről!) Azt hiszem, hogy ez a „tanári-tanítói” képességem sokat romlott az évek során. Legfőképpen azért, mert előbb a tanulmányi versenyeken, majd a nagyon kemény tudományos versenyben muszáj volt másra (a „saját eredményekre”) összpontosítani.

Marad kapacitása tudomány-népszerűsítésre, egyáltalán feladatának érzi ezt is?

Kevés időm marad tudomány-népszerűsítésre. Ezt nem bánom, mert azt gondolom, hogy vannak, akik ügyesebbek ebben, és úgy érzem, én jelenleg többet tudok tenni az MSc–PhD-hallgatók szintjétől kezdődően a szakmai témavezetés területén.

Hogyan tudja összeegyeztetni a munkáját a családdal?

Nőként és anyaként úgy érzem, hogy ez nagyon nehéz, tulajdonképpen lehetetlen vállalkozás. Olyan értelemben lehetetlen, hogy

A gyerekekkel





nincsen jó megoldása. De valamilyen megoldása azért van. Egy természettudományos lapban mondhatom, hogy kicsit olyan, mint egy túlhatározott egyenletrendszer. Az én életem így alakult. Mindenesetre nagyon hálás és büszke vagyok, hogy van egy szép családom.

Milyen érveket tudna mondani egy, még Önnél is fiatalabb kollégának a pályán maradás mellett?

Nem próbálnám meggyőzni. Ellenkezőleg, arról próbálnám meggyőzni őt, hogy ne mondjon le a családról (én kaptam olyan – különben őszinte és „jó szándékú” – tanácsot, hogy ha már itt tartok a pályámon, akkor felejtsem el a családalapítást...). De ha mégis úgy döntene, hogy maradna a pályán, akkor nagyon drukkolnék neki, és legfőképpen „csodálnám” az erejéért és a bátorságáért.

Évtizedes távlatban helytállni mind a tudományban, mind a családban egy nő számára nagyon nehéz, sokszor hálátlan és kockázatos út. Szerencsére a modern technológia (közlekedés, kommunikáció, mobil és háztartási eszközök, modern anyagok stb.) segít ebben – a kisgyermekemmel én már csak egy gondolat-íróra vágytam. Egy ponton túl azonban a technológia már nem tud segíteni, az emberre van szükség. Egy anyát sok mindenben lehetetlen helyettesíteni, sok mindenben viszont lehet. Ezekben a kezdeti, kihívást jelentő években a férjem és az édesanyám voltak a legnagyobb segítségemre.

Ezenkívül pedig inspirálóan hatottak – a reménytelen pillanatokban – az ismert, családok kutatóinak megszólalásai: Mildred Dresselhaus (MIT, 4 gyermek), Ursula Keller (ETH Zürich, 2 gyermek), és például egy közelmúltbeli személyes benyomás: Clotilde Fermanian (Université de Paris-Est Créteil, 4 gyermek).

Mivel tud a kutatóhely, a kollégák, a társadalom segíteni ebben?

Három dolgot gyűjtöttem össze:

1) A tudományban alapvető elvárás a mobilitás. Ha egy nő évekig külföldön, az EU-n kívül kutat, majd hazatér, gyermeke születik, akkor nem jogosult érdemi juttatásokra (TGYÁS, GYED): az ösztöndíjak kiírásakor gondolni kellene erre a „lyukra” is.

2) Óriási szükség van bölcsődékre, óvodákra az egyetemek és kutatóintézetek közvetlen közelében.

3) Szükséges támogatást (legalább részleges visszatérítést) biztosítani szakmai utazásokkal kapcsolatban felmerülő pluszköltségekre kisgyermekes anyák részére (több külföldi egyetemen létezik ilyen, például „Returning Carers Scheme” néven).

Ebből az interjúból már kiderült, hogy Ön ízig-vérig elméleti kutató. Hogyan látja ebből a perspektívából a kísérlet és elmélet kapcsolatát?

Engem mindig a molekuláris anyag kvantitatív tulajdonságai, jellemzése érdekelt. Nem trendek vagy nagyságrendek, hanem a pontos mérés és számítás. Lenyűgözőnek találom, hogy fantasztikus pontossággal lehetséges időt mérni, időt lehet a legpontosabban mérni. Ezenkívül olyan mennyiségeket lehet nagyon pontosan mérni, amelyeket valahogyan az idő mérésével kapcsolatba lehet hozni. Egy pontos mérésből adódik egy valahány értékes jegyre meghatározott szám, ami a 0,1,2,...,9 számjegyek valamilyen sorozata. Azon kívül, hogy egy mérés bizonytalanságának egyre nagyobb leszorítása óriási intellektuális és műszaki-tervezettudományos teljesítmény, egy ilyen számsorozattal önmagában nem lehet mit kezdeni. Ahhoz, hogy értelmezni tudjuk ezt a számsorozatot, kell egy jó elmélet vagy legalább egy modell, amivel egy hasonló számot kapunk. Ha a modellünk sok rendszerre jól teljesít, konzisztens, és még néhány további elvárásnak meg-

felel, akkor jó elméletnek gondolhatjuk. Egy jó elmélet tartalmat, tudást, megértést, rendszert tehet a mérési adatsorok mögé. És fordítva, az egyre pontosabb mérési adatsorok készítenek bennünket arra, hogy tökéletesítsük a modelljeinket és az elméleteinket. A kvantitatív elméleteinkben olykor szerepel néhány fizikai állandó. A kémia számára alapvető fontosságú fizikai állandó az elektron töltése, valamint az elektron és a proton tömegének aránya. Ezeket a mennyiségeket a legpontosabb mérések és a legjobbnak gondolt elméletek alapján határozzák meg (nagyon leegyszerűsítve: az „állandók” különféle értékeit behelyettesítik az elmélet egyenleteibe, és megnézik, hogy mely értékkel adódik a legjobb egyezés az aktuálisan legjobbnak gondolt mérési eredményekkel). Rendszeresen finomhangolják ezeket az „állandókat”. Néhány éves távlatban ennek a finomhangolásnak a legtöbb alkalmazás szempontjából kicsi a jelentősége. Az így meghatáro-



Sikeres négyévnvi doktori kutatómunka megünneplése a WATOC-on, Vancouverben, Alberto Martin Santa Dariával (balra) és Ferenc Dáviddal (jobbra) 2022 júliusában

zott „állandók” az anyag modellezésének egy széles tartományán használhatók, és a számításokból akár előre jelezhetünk eredményeket a mérések számára (például, hogy hol keressük a mérési adatsorban a jelet) vagy akár mérések helyett (mert túl költséges vagy akár lehetetlen lenne elvégezni a mérést a jelenleg rendelkezésre álló laboratóriumi körülmények között).

Röviden: mérés nélkül az elmélet csak fantáziálás, elmélet nélkül a mérés csak adathalmaz.

A kutatás nemzetközisége miatt sok fiatal kutató szembesül az „ittthon vagy külföldön” dilemmával. Hozott már ilyen döntést életében? Ha igen, mi volt az érv az itthonmaradás mellett?

Ebben a tekintetben szuperponált állapotban vagyok. Állandóan elvágódom (sok konferencia- és szemináriumi meghívást, két vendégprofesszori meghívást is elfogadtam már), közben pedig úgy érzem, hogy minden, az otthon szeretetétől távol töltött perc veszteség – szakmai szempontból is. A legjobb ötletek (kreativitás), a „na, ezt most kipróbálom, és lehet, hogy zsákutca” attitűd (bátorság) abból a szeretetből és biztonságból táplálkoznak, amely az ismert, szeretett környezettől származik. A rendszeres repülőutakat mégis azért szeretem, mert olyankor hosszan, zavartalanul lehet olvasni, gondolkodni. Eddig minden természetesen alakult. Kíváncsian várom a folytatást.

Mi pedig szívből szurkolunk ehhez! Sok sikert kívánunk a további kutatásokhoz és sok örömet a család körében!

Szalay Péter



Polányi-díjas kémikusok

A Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Tudományok Osztálya és a Fizika Kémiai Tudományos Bizottság 2021. december 9-én és 10-én rendezte ünnepi üléseit, ahol pótolták az elmúlt három évben technikai okok, illetve a járványhelyzet miatt elmaradt díjátadásokat. A kitüntetetteket az adott években a MKL köszöntötte. A Polányi-díjasok listája a <https://mta.hu/vii-osztaly/a-polanyi-mihaly-dij-105427> linken tekinthető meg. A kitüntetettek egyikének, Bányai Istvánnak, a Debreceni Egyetem egyetemi tanárának gondolatait olvashatják a következőkben.

Bányai István

Bemutakozás, út a Polányi-díjhoz



Amikor a kérést megkaptam, hogy írjak magamról, a 2020. évi Polányi-díj (sajnos nem az ifjúsági) odaítélése után, hamar rájöttem, hogy több mint negyvenéves írás után ebben a műfajban még nem vagyok járatos. A kémiához való viszonyulásom, bár a tantárgy tetszett a matematika, a fizika és a történelem mellett, némi atyai ráhatással kezdődött: 14 éves ismeretség

után apám úgy döntött, hogy a gimnáziummal kár próbálkoznom, és a két debreceni technikum közül a Vegyipari Technikumba való jelentkezést támogatta. Soha nem volt otthon rejtett laboratóriumom, kis-kémikus készletem, a kémiához való hozzáállásomat a technikum alakította ki, más választásom nem volt. 1971-ben mint vegyésztechnikus jelentkeztem a Kossuth Lajos Tudományegyetem vegyész szakára, ahol az első két év után éreztem, hogy évfolyamtársaimtól eltérően jó analitikus, preparatív vagy ipari vegyész nem leszek belőlem. A találkozás Brücher Ernő docenssel azonban a kémiának egy olyan oldalát tárta fel, ami nagyon megtetszett, ez pedig az, hogy a jelenségek lényegét kell észrevenni és leírni. A jelenségek forrását, a kísérleti adatokat pedig akkor tudom igazán értelmezni, ha én mérem őket, mert ilyenkor üzenetük mellett gyengeségeiket is ismerem. Tudatosult bennem, hogy a kémia olyan részét szeretem, amit többnyire fizikai kémiának hívnak, és kevésbé csodáltam a lantanoidákat mint nagyszerű és hasznos elemeket, amelyek oldatbeli szubsztitúciós reakcióinak kinetikájában értem el eredményeket. [1]

1977-ben lettem okleveles vegyész, és éppen Pécsen kerestem munkát, amikor Beck Mihály professzor üzent, hogy volna egy kétéves szerződéses állás a Fizikai Kémiai Tanszéken, amit a megtiszteltetés mellett egy ifjú hölgy miatt is vállaltam. Amint a lantanoidák koordinációs kémiáját magam mögött hagytam, azok a magmágneses képalkotás kulcsvegyületeivé váltak, éppen azoknak a tulajdonságoknak is a révén, amelyeket Brücher Ernő irányításával kutattam. [1] Beck Mihály irányításával a nitrozil-komplexek redoxireakcióinak mechanizmusában értem el publikálható eredményeket. [2] Mire a nitrogén-monoxidról kiderült, hogy egyike a hírvívó molekuláknak az emberi szervezetben, már témát is váltottam.

1987-ben Tóth Imre kollégám, barátom közreműködésével a stockholmi Királyi Műszaki Egyetemre (KTH) kerültem, és telje-

sen új mezőkre (mágneses) tévedtem. A motiváció anyagi volt, de a szakmai következménye megmaradt. Egészen más területről érkezve kezdtem el NMR-t tanulni, és szerencsés módon úgy, hogy kutatómunkát is végezhettem vele. Az NMR-relaxáció időskálája átfedésben van a fémkomplexek gyors ligandumkicserélődési folyamatainak időskálájával, így ezzel a módszerrel hatékonyan tanulmányozhatók. Az eredmény a dinamikus NMR, tudomással első, teljes kinetikai alkalmazása lett, sajnos szerencsére ²⁰⁵Tl-NMR technikával. [3] Sajnos, mert kevesen olvassák emiatt, szerencsére, mert más NMR-aktív atommaggal nem nagyon lehetett volna ilyen teljes körű kinetikát mérni és sebességi egyenletek sokaságát megtalálni. Így annak sem lett nagy visszhangja, de engem igazán boldoggá tett, hogy látványosan bizonyítottuk azt a jól ismert kinetikai elvet, hogy egy elemi reakciólépésben csak egy kötésátrendeződés következhet be. [4]

Debrecenbe visszatérve az NMR-ismereteimet kiegészítettem az oldatbeli szerkezetvizsgálat elméleti és gyakorlati eszköztárával. Részt vehettem az akkor korát itthon messze megelőző NMR-laboratóriumrendszer kialakításában, amelyben nem mintaleadás és eredményfelvétel volt a módszer, hanem még az egyetemi hallgatók is maguk mérhettek, megtanulhatták az alapvető fogásokat, esetenként még egyetemi tanárok is kuksoltak a képernyő előtt. Ma több hazai egyetemünkön az itt tanult NMR-spektroszkópusok érnek el nagyszerű eredményeket, és tanítanak új nemzedékeket erre a rendkívül hatékony módszerre. 2003-ban sikerült bebizonyítanom, hogy ez a véletlenekkel tarkított kutatómunka koherens rendszert képezett. A Magyar Tudományos Akadémia dinamikus NMR-kutatásaim alapján doktori címet adományozott, amire azért vagyok büszke, mert az anyag kísérleti részének 80–90%-a saját munkám volt.

2005-ben sikertelenül pályáztam meg a Kolloid- és Környezet-kémiai Tanszék vezetői beosztását, amire azután 2006-ban felkértek. A kolloidok NMR-spektroszkópiájának hazai előzményei nem voltak, én egy hosszabb egyesült államokbeli kutatómunka során vettem észre a lehetőségeket ezen a területen. NMR-technikával sikerült a dendrimerek pontos hidrodinamikai sugarát és hidratációs számát meghatározni. [5] A dendrimerek alkalmazásának révén sikeres kapcsolat alakult ki a Tanszék és a sanghaji Donghua Egyetem között. Többek között sikeresen megtaláltuk az aranyat (nanorészecske) a dendrimerek sűrűjében. [6]

2010-től számolva a kolloidika szinte minden területén tudtuk az NMR-t alkalmazni. Ellentétben a korábbiakkal, ekkor a kísérleti munkát és az értékelést is már egy középgenerációs és fiatal kutatókból álló csoport végezte. 2016-ban a két tanszék egyesült,



és újra a Fizikai Kémiai Tanszék oktatója lettem. Csoportunk jelentős eredményeket ért el a diszperziós és az asszociációs kolloidok NMR-vizsgálatában is, meghonosítottuk a kisterű NMR-relaxometria és az NMR-krioprozimetria módszereit a porózus szilárd anyagok vizsgálatára. [8] A csoportunk a környezet fizikai kémiai kutatása felé fordult, és így ma már a *Környezeti Kolloidok kutatócsoport* néven működünk.

Tanítani jó. Szerencsés voltam abban, hogy a fizikai kémia szinte minden területét taníthattam. Az az érzésem, hogy a megértés folyamatát a tanítás nagymértékben elősegíti. Talán hiúságom az oka, hogy semmiképpen nem akarok leégni a hallgatók előtt, így még ma is minden órámra hosszabb ideig készülök, mint ameddig azok tartanak. A tanítás másik hozadéka a találkozás olyan fiatal emberekkel, akik tehetségesebbek nálam. Úgy érzem, hogy tőlük legalább annyit kaptam, mint a név szerint felsorolt tanáraimtól és kollégáimtól. Visszatekintve kissé dühös

vagyok az NMR-re, mert rám is érvényes lett, hogy „akinek csak kalapácsa van, az mindent szegnek néz”, és a csoportunk tagjai most hozzák helyre ezt az egyoldalúságot. Van egy másik mondas, ami egy lemergi zsidó embertől származik: „Ne járj kitaposott úton, mert elcsúszol.” A cikcakkok, sokszor rám kényszerítve, megvédték ettől, így nagyon szerencsésnek érzem magam. A Polányi-díj elnyerését, aminek alkalmából ezt a rövid cikket megírhattam, kémikus kollégáim szavazták meg, közöttük azok is, akik maguk is jelöltek voltak. Köszönöm.

IRODALOM

- [1] E. Brücher, I. Bányai: J. Inorg. Nucl. Chem. (1980) 42, 749.
- [2] K. Antal, I. Bányai, M.T. Beck: J. Chem. Soc. Dalton (1985) 1191.
- [3] I. Bányai, J. Glaser: J. Am. Chem. Soc. (1989) 111, 3186.
- [4] G. Batta, I. Bányai, J. Glaser: J. Am. Chem. Soc. (1993) 1156, 782.
- [5] I. Bányai, M. Kéri, Z. Nagy, M. Berka, L.P. Balogh: Soft Matter (2013) 9, 1645.
- [6] M. Kéri, C. Peng, X. Shi, I. Bányai: J. Phys. Chem. (2015) 119, 3312.
- [7] M. Kéri, D. Nyul, K. László, L. Novák, I. Bányai: Carbon (2022) 189, 57.

Az új magyar Chemistry Europe Fellow: Kele Péter

Kele Péter az ELKH Természettudományi Kutatóközpont tudományos főmunkatársa, az Európai Kémiai Társaság Chemistry Europe Fellows magyar kitüntetettje.

Hadd gratuláljak olvasóink nevében is a rangos szakmai elismeréshez, amelyet 2015 óta kétfévente adnak át – keveseknek. A 2020/21-es évfolyam díjazottjai közé egyetlen magyarként kerültem be. Ebből az alkalmából beszélgetünk most. Mikor indult a közös történeted a Chemistry Europe-pal, hogyan lettél a Chemistry Europe Fellows kitüntetettje?

Amellett, hogy tagja vagyok a Magyar Kémikusok Egyesületének, előszeretettel publikálunk a Chemistry Europe gondozásában megjelenő folyóiratokban, különösen a *Chemistry – A European Journal* és a *ChemBioChem* profilja áll közel a mi kutatási témáinkhoz. Kedves emlékek is kötődnek ez utóbbi folyóirathoz: az egyik cikkünk az újság címlapjára is kikerült. A címlapkép annyira megtetszett az akkori főszerkesztőnek, hogy egy konferencián odajött gratulálni hozzám, illetve később felkért minket egy összefoglaló tanulmány megírására is.

A Chemistry Europe fellow kitüntetés váratlanul ért. Az MKE ügyvezető igazgatója értesített, hogy engem javasolnak a 2020/2021-es évben a díjra. Nagy megtiszteltetés volt számomra, hogy az Egyesület választása rám esett. Később örömmel értesültem arról, hogy el is nyertem a díjat.

A Chemistry Europe által kiadott lapcsalád talán legismertebb és legnagyobb hatású lapja a Chemistry – A European Journal, Te is többször publikáltál itt, ahogy az imént említetted. Kutatóként meghatározó élmény számodra az európaiság?

Természetesen. Jó egy nagyobb, közös kultúrával rendelkező nemzetközi család tagjának lenni és e közösséghez hozzáadni a nemzeti hagyományokat, tudást. Remek kezdeményezésnek tar-



tom, hogy létrejött egy európai kémikusokat tömörítő közösség. A földrajzi összetartozáson túl olyan közösséget is jelent ez, amely mind méretét, mind szakmai kompetenciáját tekintve az Amerikai Kémiai Szövetséggel ér fel.

A tudomány világában is fontos ösztönző a verseny, de az is érzékelhető, hogy erősödik az együttműködés a kutatók, kutatócsoportok között. Te versengő típusnak tartod magad, vagy más ösztönzők fontosabbak számodra?

Persze, van bennem versengés is, de ez nem ellenséges, az együttműködést nem zárja ki, sőt. A pályám jelenlegi szakaszában azonban a versengésnél már fontosabbnak tartom a tudás átadását a következő generációnak, de azt is, hogy a kutatócsoportommal, csapatként érjünk el sikereket. Itt is megjelenik a versengés motívuma, de nem egyéni szinten, és csak annyiban célként, hogy az általunk elért eredményeket, többévi munka után, a mi nevünkhöz kössék. A kutatómunka mozgatórugója



mégis az, hogy egy sikeres kísérlet után azt érezzük: megértettünk valamit a természet jelenségeiből és képesek vagyunk azt a saját szolgálatunkba állítani.

Örök kérdés, hogy mennyit tegyünk közzé abból, amit megtapasztaltunk. Legtöbbször a sikereinkről számolunk be, de tudjuk, hogy a történetívek ritkán lineárisok. A Te szakmai karrieredben volt olyan pont, amikor azt mondtad, hogy most aztán elég, föl-adod? Ha igen, mi segített tovább?

Mint minden hivatásnak, a kutatómunkának is vannak árnyoldalai. Aki kutatómunkára adja a fejét, annak számolnia kell azzal, hogy rengeteg kudarccal fog szembenézni. Én is többször voltam „alkotói válságban”, ahogy a kollégáimnak szoktam nevezni az ilyen időszakokat. Ilyenkor mindig jön valami, egy sikeres reakció, egy ötlet vagy egy motiváló előadás, cikk, ami átlendít a nehézségeken. A szakmai kudarcok egyébként – noha régebben talán nem így gondolták, ezért gyakran el is hallgatták – legalább annyira fontosak és előre vivők, mint a sikerek, hiszen rengeteget tanulhatunk belőlük. Szerencsére ezt egyre többen látják így, és mostanában gyakrabban merik felvállalni a kutatók a kudarcaikat.

Az eredmények közvetlen hasznosulása meghatározó szerephez jut egy kutató megítélésében, pályázati sikerességében. Neked milyen tapasztalataid vannak? Egyáltalán, mit tartasz a legfőbb értékmérőnek?

Attól függ, mit értünk közvetlen hasznosuláson. Az alapkutatásban elsősorban egy kiváló publikáció az, amit annak tekinthetünk, hiszen az eredmények nagyobb ívű, pl. társadalmi jelentőségű hasznosulásához legtöbbször éveknek, évtizedeknek kell eltelniük. Egy kutató szakmai megítélését leginkább az általa elnyert szakmai, kutatási pályázatok, illetve a rájuk adott értékelések mutatják. Az alkalmazott kutatási témáknál rengeteg egyéb szempont is bejön a képbe, például a társadalmi hasznosulás mellett a gazdasági szempontok is előtérbe kerülnek.

Mi a legfontosabb érték? A szakmai korrektség. Legyen szó az eredmények prezentációjáról vagy egy pályázat elbírálásáról.

A tudományos ismeretterjesztés kemény dió, és egy szakmabeli számára talán nem is túl kifizetődő, mert ritkán szolgál közvet-

lenül karriercélokat. Mindent átítatott a digitalizáció, egészen más források állnak rendelkezésre egy mai fiatal érdeklődő számára. Hogyan látod az ismeretterjesztés helyzetét és jövőjét?

A tudomány népszerűsítése kiemelt fontosságú nálam és a csoportunkban. Rengeteget ötletelünk azon, hogyan lehetne eredményesen beszámolni arról, mit és miért csinálunk, miért lehet másoknak is fontos, nem csak nekünk, akik műveljük. Hiszen nem magunkért, nem öncélúan tesszük. Esetünkben emellett alapvető, hogy magát a kémiát mint tárgyat, tudományterületet, próbáljuk meg közelebb vinni a hétköznapi emberhez, hiszen ez az egyik, ha nem a legnagyobb mumus a tantárgyak között. Gyakran járok én is középiskolákba, általános iskolákba előadást tartani. Ilyenkor mindig van kísérleti rész is, hiszen a kémia alapvetően kísérleti tudomány. Az utóbbi időben sajnos egyre kevesebben köteleződnék el a természettudományok mellett, egyre több kihívással kell megküzdenünk, hogy akár pár percre is, de felkeltsük a fiatalok figyelmét a kémia szépségei iránt. Azon túl, hogy alkalmazkodni kell a hallgatóság szakmai előképzettségéhez, manapság az általad említett trendeket is figyelembe kell venni. Egy Mecenatúra pályázat keretében most is gőzerővel dolgozunk azon, hogy egy olyan, a szerves kémiai kutatómunkát bemutató kisfilm-sorozatot csináljunk, mely alkalmas a középiskolások szélesebb körének és az érdeklődő laikusoknak a megszólítására is. A filmet a közösségi felületeken, videómegosztó oldalakon át lehet majd megtekinteni. Az első részt az őszi Kutatók éjszakájára tervezzük.

Mik a további terveid? Merre tovább?

Szakmailag most nagyon izgalmas időszak áll előttünk. Az elmúlt években tett megfigyeléseink, eredményeink felhasználásával igyekszünk a fényt a gyógyászat szolgálatába állítani, és segítségével még hatékonyabbá tenni a terápiás eljárásokat. Emellett ugyanilyen fontos, hogy gondoskodjunk a szakmai utánpótlásról is. E célból újabb és újabb ötletekkel kell előállnunk, folyamatosan alkalmazkodva a célcsoport változó szokásaihoz, igényeihez.

Köszönöm a beszélgetést!

Pap József Sándor



**Chemistry
Europe**
European Chemical
Societies Publishing

Please join us in congratulating
Chemistry Europe Fellows Class 2020/2021












































Világszínvonalú kémiai piactér



A gyógyszerkutatót segítő mcule.com Kft. (továbbiakban: Mcule) 2021-ben és 2022-ben is az egyik leggyorsabban növekvő európai cégnek bizonyult a Financial Times összeállítására szerint. Az egymilliárd forint körüli nettó árbevételű produkáló kkv egyik alapítójával és ügyvezető igazgatójával, Kiss Róberttel, valamint értékesítési vezetőjével, Prikler Gergelyvel beszélgettünk.

MKL: Milyen szerepet tölt be az Mcule a gyógyszerfejlesztésben?

Kiss Róbert: Egy új hatóanyag felfedezése lassú, költséges folyamat, ennek során nagyon sok vegyületet tesztelnek, néha csak *in silico*, molekulamodellezési eszközökkel, máskor „fizikailag”, például sejtes assay-vel vagy állatkísérletben. Ezeket a teszteléseket igyekszünk támogatni azzal,



KISS RÓBERT

hogy minden olyan vegyületet összegyűjtünk, amely a kismolekulás gyógyszerkutatásban hatóanyagként szóba jöhet, és az adatbázisunkat a gyógyszerkutató cégek rendelkezésére bocsátjuk, emellett a kiválasztott vegyületeket be is szerezzük. Az adatbázisban az online platformunkon lehet keresgélni. A platformon bizonyos molekulaszimulációkra is mód van: ezzel már a fejlesztési folyamat tesztelési szakaszához csatlakozunk.

Mi különbözteti meg az Mcule rendszerét a vetélytársakétól?

Prikler Gergely: A cég neve a molekulákra utal, de a szlogenünk: „more than molecules”, mert end-to-end megoldásokat kínálunk: egészen addig el tudjuk kísérni a kutatókat, amíg kézhez nem kapják a ki-

választott vegyületeket már a mérésre alkalmas formában. Tehát nemcsak a beszerzést intézzük el a különböző gyártóknál, hanem akár a kísérletet is előkészítjük, tesztelésre kész állapotba hozzuk a vegyületeket: például oldatban, egyetlen plate-en szállítjuk őket.



PRIKLER GERGELY

De nemcsak a kémiai beszállítóknál elérhető vegyületekkel foglalkozunk, hanem partnereinkkel együtt igyekszünk új, szintetikusan előállítható molekulákat is piacra vinni és ezzel növelni a gyógyszerkutatók rendelkezésére álló kémiai teret.

KR: Az Mcule tulajdonképpen online kémiai piactér: nemcsak egyetlen beszállító könyvtárait, molekuláit áruljuk, hanem mindent igyekszünk összegyűjteni. Egy gyógyszerkutató cégnek sokkal előnyösebb lehet ez a megoldás, mint egyedi beszállítókkal, adatokkal dolgozni. Energiát, időt, erőforrást takarít meg. A több piactérrel szemben, ahogy Gergely is említette, nagy előnyünk az ULTIMATE adatbázisunk, amelyben az általunk tervezett molekulák szerepelnek; ezek máshol nem állnak rendelkezésre.

Hogyan jött létre az ULTIMATE rendszer?

KR: A gyógyszerkutatás részben a polcra kerülő vegyületekre épül, ilyenből kb. tízmilliót lehet megvásárolni. Azonban vannak „virtuális vegyületek” is, amelyekről a beszállító tudja, hogy igény esetén robusztus, régóta használt reakciókkal képes előállítani a meglévő reagensből. Az ilyen virtuális vegyületeket tartalmazó adatbázisok tipikusan sokkal nagyobbak, mint a polcra elérhető vegyületek tere, és több milliárd molekulát tartalmazhatnak.

Az utóbbi időben a virtuális molekulák egyre nagyobb teret kaptak az iparágban, egyre többen terveztek virtuálistmolekulakönyvtárakat. Ez azért is előnyös, mert

addig nem kell előállítani egy vegyületet, amíg nem érkezik rá igény. Néhány beszállító megtervezte a saját virtuális könyvtárát, de sok vállalkozás még ma is csak a polcon levő vegyületeit árusítja. Ez hosszú távon nem versenyképes modell a virtuális vegyületekkel szemben, amelyek nagy számban elérhetőek. Mi felismertük ezt a „piaci rést”, és összeállítottuk az ULTIMATE rendszert: azt a kémiai informatikai struktúrát, amely segít a vegyületek tervezésében, építve a beszállítók „építőköveire” és a velük végrehajtható reakciókra. Az ULTIMATE tehát olyan virtuális molekulákat tartalmaz, amelyeket a beszállítók, a tapasztalatok alapján, nagy valószínűséggel elő tudnak állítani.

Számítások is segítik a végrehajtható reakciók validálását, a lehetőségek bővítését?

KR: Az ULTIMATE adatbázis első verzióját kémiai informatikai alapokon nyugvó szabályrendszerrel hoztuk létre, de géptanulási-módszereket alkalmazva már dolgozunk a sikeres szintézisek arányának növelésén és a kémiai tér bővítésén.

Ellenőrzik a vegyületek újdonságát vagy azt, hogy nem sértenek esetleg szabadalmat?

PG: Igen, igyekszünk biztosítani, hogy a virtuális vegyületek újszerűek legyenek, a felhasználók szabadalmi szempontból „szabad térben” dolgozzanak. Ezért szabadalmi adatbázissal szemben is vizsgáljuk a tervezett vegyületeket, illetve minden mással szemben, amiről tudjuk, hogy már elérhető a piacon.

Hogyan használhatja valaki az Mcule platformját, illetve a vegyületeket tartalmazó adatbázisokat?

PG: Többféle felhasználói magatartást is tapasztalunk. Nagyon tipikus, hogy a felhasználók letöltik az egész adatbázist vagy annak valamilyen logika alapján leválogált részét, és a saját rendszerükben választják ki a megfelelő vegyületeket. Például egy virtuális szűrés során a vegyületeket belepróbálgatják abba a fehérjébe, amelynek a működésébe be akarnak avatkozni, és a legpotensebbeket megrendelik. De a mi platformunkon is le lehet keresni akár nagyobb vegyületlistákat vagy egy-egy vegyületet. Sokszor már egy ismert



molekulához hasonló vegyületeket, analógokat keresnek. Nálunk olyan analógokat is találnak, amelyeket más terekben nem: ezekkel például újabb hatásmechanizmusokat lehet felderíteni.

Hogyan működnek együtt más rendszerekkel, mondjuk a Pharmittel, amely virtuális szűrést kínál?

KR: A Pharmit molekulamodellező eszközével farmakofórokat terveznek. Mi elérhetővé tesszük számukra az ULTIMATE adatbázisunkat, ők pedig beépítik a rendszerükbe. Ebben az esetben náluk valósul meg az integráció, de mi is beépítjük mások modellező szoftverét az Mcule platformjába.

Így nyilván magasabb szintű szolgáltatást nyújthatnak.

KR: A gyógyszerkutatók szeretik ezt az „árulkapcsolást”, mert a molekulák mellett olyan eszközökre van szükségük, amelyekkel intelligensen kereshetnek. Az integrálással a felhasználók és a fejlesztők is jól járnak.

Tegyük fel, hogy sikerült találni egy jó virtuális molekulát. Ilyenkor a felhasználó maga is nekiáll a szintézisnek vagy inkább megrendeli?

PG: Tipikusan megrendeli a kiválasztott vegyületet tőlünk, mivel így sokkal gyorsabban és olcsóbban kapja meg, mintha saját maga próbálná meg előállítani. Mi elküldjük a szintézist végző partnereinknek azokat a reagenseket, amelyekből előállít-

hatják a célvegyületet, és megadjuk a reakciók végrehajtásához szükséges eljárásokat is. Az „eredményt” visszaküldik nekünk, mi pedig – esetleg más termékekkel együtt – vizsgálatra kész állapotban szállítjuk a megrendelőnek. A felhasználó tehát nem szintetizál, ő a célvegyületet kapja meg.

Kik gyártják a megrendelt vegyületeket, például kisebb magánvállalkozások?

PG: Sok nagy, multinacionális, szerves kémiai szintézisre specializálódott céggel dolgozunk együtt, de igyekszünk mindent megtalálni és kisebb cégekkel is együttműködni. Globális hálózatot építettünk ki, és szerencsére vannak magyar cégek is, amelyek szerves kémiai szintézissel foglalkoznak. A magyar kapcsolatoknak egyrészt külön örülünk, másrészt a közelség megkönnyíti a logisztikát.

KR: Magyarország földrajzilag tökéletes helyszín arra, hogy kémiai piacra lépjenek, mivel a beszállító cégek sokszor tőlünk keletre találhatók, a felhasználóink pedig Nyugat-Európában vagy Amerikában. Mi így hivat tudunk képezni a kereslet és a kínálat között.

Mit ért „kelet” alatt?

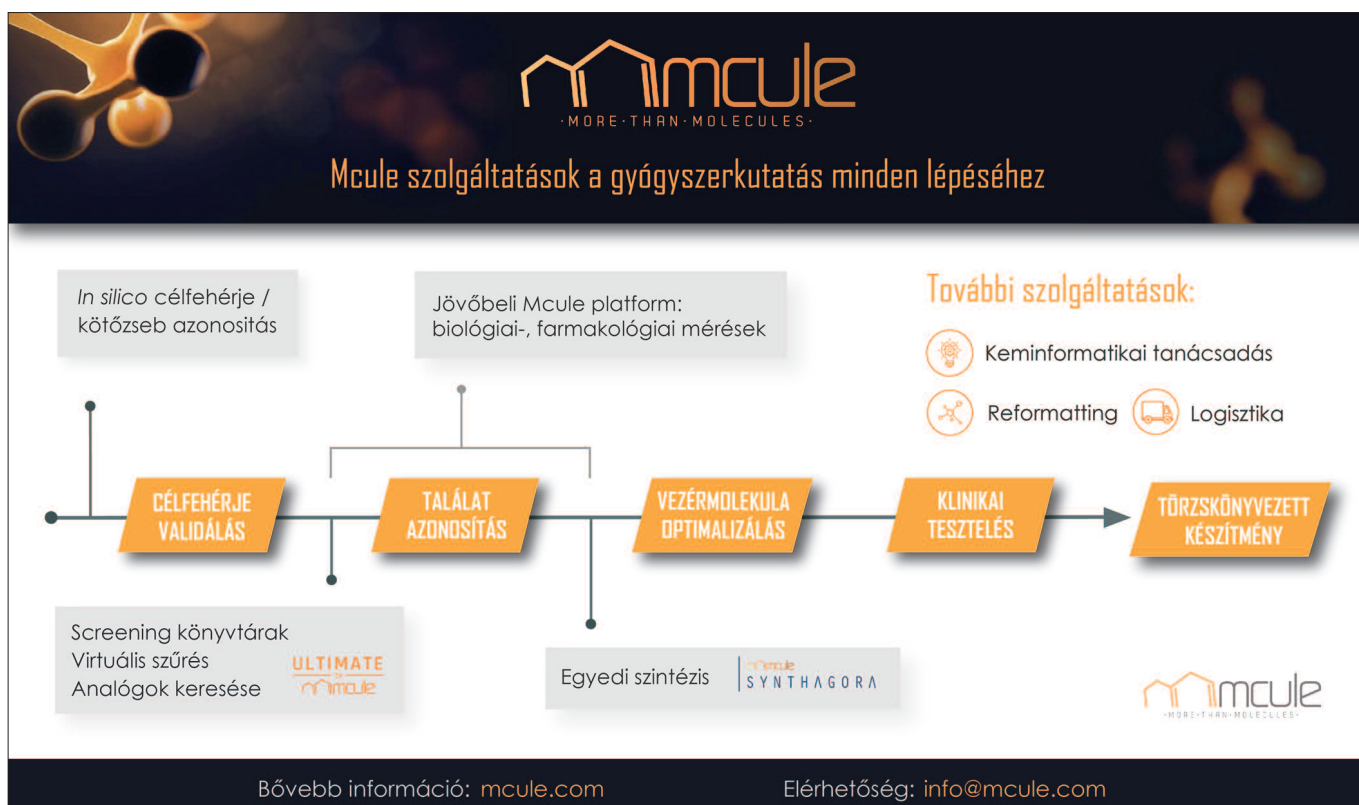
KR: Részben Ázsiát, főleg a kínai és indiai régiót, de a gyógyszerkutatás számára Ukrajna és Oroszország a legnagyobb beszállító. Ezért a globális történések és a két ország közti konfliktus alaposan érintenek bennünket. Most például nagy kihívás, hogy

ellássuk a gyógyszerkutatást fenntartó láncolatot, és a vegyületek célba érjenek. De természetesen a legnagyobb kihívással az ukrán beszállítók néznek szembe, akik a harcok közepette dolgoznak.

A koronavírus-járvány első időszakában is leálltak egyes logisztikai útvonalak; ezeket újra kellett terveznünk.

Ki engedheti meg magának, hogy a piacon vásároljon?

PG: A platformunk sok funkciója teljesen ingyenes. Ingyen lehet keresni az adatbázisban, és sok olyan egyszerűbb virtuális szűrés, molekulamodellzési lehetőséget kínálunk, amelyet bárki használhat. A kiválasztott vegyületeket azonban meg kell vásárolni, és az a célunk, hogy minél több terméket vegyenek meg rajtunk keresztül. Ezért nagyon sok kutatóintézetrel is kapcsolatban állunk a biotech cégeken és a nagy gyógyszergyártókon kívül – persze mindenki a költségkeretéhez mérten vásárol. Az ár mindig az adott vegyület függvénye: vannak nagyon olcsó, akár egy-két dolláros vegyületek, amelyek már régebb óta elérhetők, sokan kipróbálták őket, és olyan újszerű vegyületek is, amelyek akár pár ezer dollárba kerülhetnek; nagyon széles a skála. Amikor csak lehetséges, igyekszünk több ajánlatot is készíteni egy vegyületre és akár olyan változatot is felajánlani, amelyben lassabban leszállítható, de olcsóbb vegyületek vannak. Mindenképpen az a célunk, hogy költséghatékonyabbá te-





Működik a home-office



Az irodákhoz laborok csatlakoznak

gyük a gyógyszerkutatót, ami az iparági szereplők közös felelőssége.

Nem beszéltünk még az Mcule alakulásáról: mikor jött létre, és mi volt a kezdeti elképzelés?

KR: Tizenegy évvel ezelőtt alapítottuk a céget, öt tulajdonossal. Egyikünk befektető (magánember), négyen pedig a kémia, gyógyszerkutatás, információs technológiák felől érkeztek, és még fiatalnak számítottunk.

Ma is azok...

KR: Az alapkonceptió hasonló volt a maihoz: szeretnénk volna összegyűjteni a gyógyszerkutatás szempontjából szóba jövő vegyületeket és logisztikai rendszerrel összekapcsolni, egyesített adatbázist létrehozni. A hatékonyabb keresés érdekében minél több molekulamodellezési eszközt akarunk integrálni. Időközben többször változott az irány, mert egy kis cégnek általában abba az irányba kell elmozdulnia, ahol fizetőképés igény merül fel, hiszen talpon kell maradnia. Az új vegyületek tervezése, az ULTIMATE-projekt már érdekes új irányt adott a cégnek.

Előbb-utóbb a gyógyszerfejlesztés kísérleti részét is szeretnénk támogatni: a vegyületek piacterét azoknak a szolgáltatásoknak, műveleteknek a piacterével egészítenénk ki, amelyekkel a molekulákat tesztelik. Elérhetők lennének az *in silico* kísérletek (ennek a rendszernek egy része már elkészült) és az is, hogy hol milyen kísérleteket lehet megvalósítani. A bővítés után egy – akár teljesen virtuális – biotech cég a fejlesztés egészét lebonyolíthatja majd a platformunkon, hiszen a munkájához nincs feltétlenül szükség nagy épületre, sok berendezésre és emberre: a vegyületek és a

kísérletek rendelkezésre állnak, a logisztikát pedig az Mcule teremti meg.

Akár állatkísérleteket is kínálnak majd?

KR: Igen, azt szeretnénk, ha a preklinikai gyógyszerkutatás minden eleme szerepelne a palettán.

Elég rögtön pályára lépnek, hirtelenjében a szellemi tulajdon védelmének problémája jut az eszembe.

PG: Természetesen sokféle kérdés merülhet fel. Egy ilyen platform használatakor értékes adatok keletkeznek, és nekünk nagyon kell vigyáznunk arra, hogy ezek ne kerüljenek ki a rendszerünkből vagy ne jussanak olyan felhasználó birtokába, aki nem rendelkezik megfelelő jogosultsággal. De az újdonság védelme már inkább a felhasználóra tartozik. A közreműködésünkkel keletkező szellemi termékek tulajdona a vásárlót illeti, ez most is így van. Például az ULTIMATE adatbázisból származó minden kismolekula és eredmény a vevők tulajdonába kerül, hiába találtuk ki mi a vegyületet, és hiába nem csinálta meg soha senki a megrendelés előtt.

Hogyan jelölik ki az irányokat?

KR: Az elmúlt években az Mcule-nak olyan networkje jött létre, amelynek segítségével nagyon jó iparági információkat, tippet kap. A piactér természetéből adódóan gyakran beszélgetünk az ügyfelekkel és a gyártókkal, beszállítókkal is. Ez hozzájárul ahhoz, hogy ráérezzünk az új trendekre, irányokra, de az is hasznos, ha többen értékelnek egy-egy helyzetet.

Voltak persze hullámvölgyek a cég életében. Induláskor egy tőkebefektetés hatására kicsit úgy éreztük, hogy miénk a világ, biztosan mindenki rajongani fog az ötletünkért, és volt, amikor néhány tízezer

forinton múlt a cég sorsa. Nagyon keményen dolgozunk a sikerért, és rengeteget kellett tanulnunk, amíg olyanná nem formáltuk a platformunkat, hogy valóban támogatja a gyógyszerkutató cégeket.

Szerencsére most már az Mcule az egyik legjobban fejlődő, leggyorsabban növekvő cég Európában. A *Financial Times* évente megjelenő listája objektív bevételi adatokon alapszik, és erre a listára sorozatban másodszor kerültünk fel, elég előkelő helyen.

Az Mcule jó példa lehet arra, hogy Magyarországról is együtt lehet működni a legnagyobb gyógyszerkutató cégekkel, számukra is nyújthatunk piacépítő szolgáltatást.

Hány munkatárssal dolgoznak?

KR: Jelenleg huszonöt munkavállalónk van, és kb. ugyanennyi megbízásos kolléga, illetve diák segíti a munkánkat.

Ők hol dolgoznak, Magyarországon vagy szerte a világban?

KR: Magyarországon; itt működik az irodánk, egy nagyon szép irodaházban, amely 2019-ben készült el. Néhány labort is itt rendeztünk be. Aki teheti, részben home office-ban dolgozik. Egyetlen munkatársunk van csak Amerikában.

PG: Az amerikai piac nagyon jelentős, és egy amerikai alvállalattal sokkal széleskörűbben ki tudjuk szolgálni az ottani biotech és pharma cégeket.

Mi a legközelebbi üzleti cél?

KR: A következő három-öt évben szeretnénk piacvezetővé válni a kémiai piacterek között. Úgy gondolom, van hozzá stratégiánk, és reméljük, sikerül megvalósítani az elképzelésünket.

SV



Deák Péter¹ – Vörös Attila² – Mizsey Péter^{1,3}

¹ BME Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék – ² EUROAPI Hungary Kft. – ³ Miskolci Egyetem, Kémiai Intézet Mizsey Péter | mizsey@edu.bme.hu

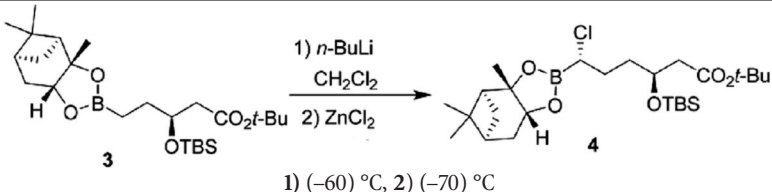
Folyamatos áramlású reaktorok és folyamatos gyártások a gyógyszeriparban II.

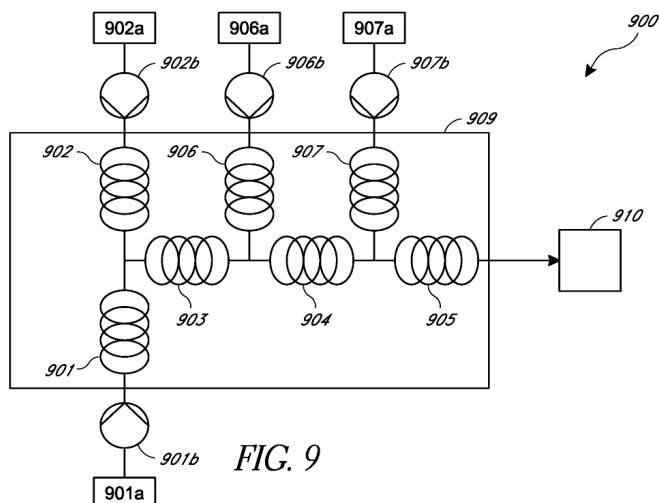
Ipari példák folyamatos szintézisre a 2015 utáni szabadalmak tükrében I.

Háromrészes cikksorozatunk a kémia egy viszonylag új innovációjával foglalkozik, melynek alkalmazása teljesen átrihthatja/átírja a kutatás és a vegyipari alkalmazások, jellemzően a gyógyszeripari alkalmazások területét, és további új fejlesztési lehetőségeket nyit mind a kutatás, mind technológiák területén.

A teljesség igénye nélkül bemutatunk néhány folyamatos üzemmódban megvalósított szintézist és itt alkalmazott mikroreaktort. Táblázatos formában felsoroljuk az előnyöket, hátrányokat és az elért eredményeket.

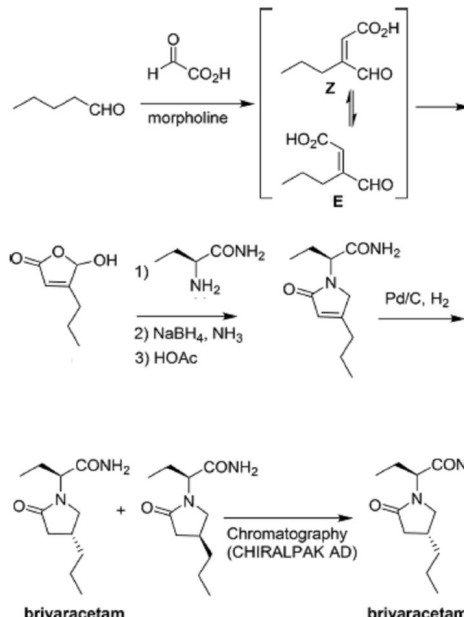
1. Vaborbactam [13]

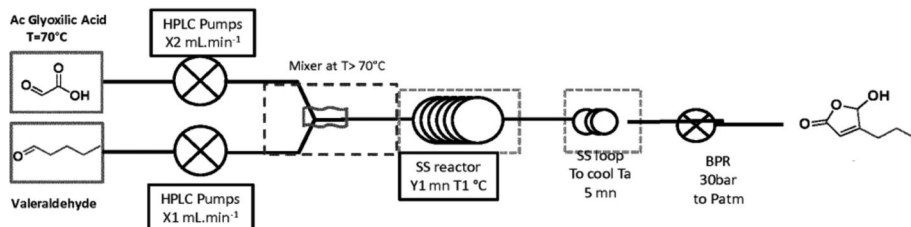
Szabadalom birtokosa	Szabadalom birtokosának székhelye	Gyógyszer neve	Hatóanyag neve	Terápia, felhasználás
Rempex	USA (Megvásárolta a <i>Medicines Company</i> [USA], 2013; a <i>Medicines Company</i> -t megvásárolta a <i>Novartis</i> [Svájc], 2020.)	Vabomere® (kombinált gyógyszer)	vaborbactam	β -laktamáz inhibitor, antibiotikus hatás
A folyamatos technológia előnye	Jobb diasztereomer-szelektivitás, tisztaság, reprodukálhatóság és kitermelés.			
Elért eredmények	Nyolc mintasorzs, összesen több mint 880 kg termék, $\eta > 90\%$, diasztereomer-felesleg 95:5.			
A kivitelezett reakció	 Egy intermedier előállítása, Matteson-szintézissel			
Leírás	A reaktorok 1 mm belső átmérőjű spirál alakban föltekert acélcsövek voltak. A bemenő anyagok előhűtésére felhasználtak ½ m hosszúságúak, a 903 , 904 6 m, a 905 pedig 1,5–3 m hosszúságúak voltak (15. ábra); Gilson 307 HPLC pumpákat alkalmaztak. A 910 ponton a cink-kloriddal végzett megbontást kevert tartályreaktorban végezték. Reaktáns betáplálása: 3,2 g/perc.			



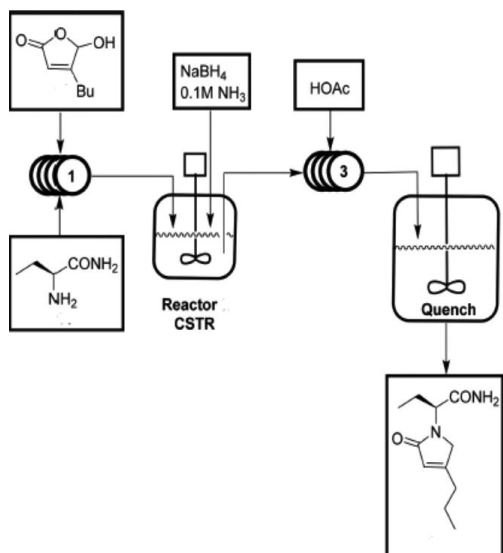
15. ábra. Az alkalmazott folyamatos technológia sematikus ábrázolása a Rempex szabadalmi leírásából [13]

2. Brivaracetam [14]

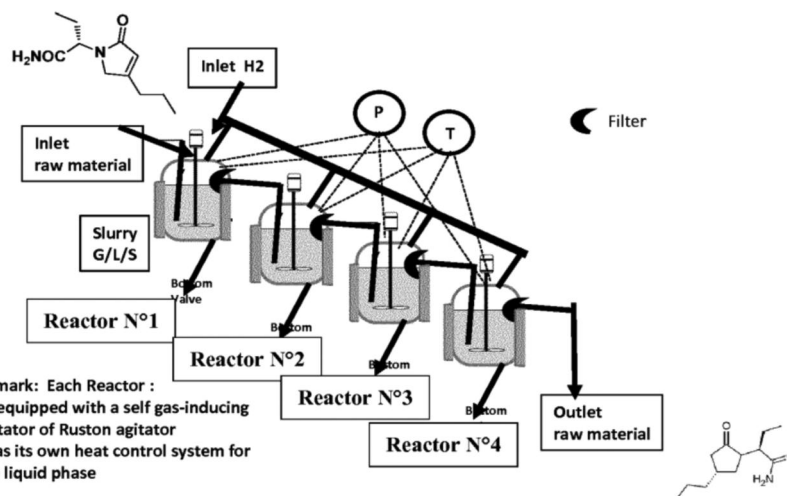
Szabadalom birtokosa	Szabadalom birtokosának székhelye	Gyógyszer neve	Hatóanyag neve	Terápia, felhasználás
UCB	Belgium	Briviact®	brivaracetam	antiepileptikum
A folyamatos technológia előnye	Jobb termelékenység mellett kevesebb hulladék és kisebb ökológiai lábnyom.			
Elért eredmények	I. $\eta = 88\%$, 5–9% <i>E</i>	II. $\eta = 96\%$,	III. $\eta = 99\%$, diasztereomer-arány: 80:20.	
A kivitelezett reakció				
Leírás	A szabadalom nem részletezi a reaktorok méreteit, anyagát, kivitelezését. Az első reakciót a 16. ábra szerinti csőreaktorban hajtották végre 180 °C-on, oldószer és katalizátor nélkül, 5 perc tartózkodási idővel. Feldolgozás: kevert tartályreaktorban (víz, n-heptán, izopropil-acetát). A második lépést a 17. ábra szerinti hajtották végre: az 1) reakciót csőreaktorban (40 °C, 5 perc), a 2) redukciót kevert tartályreaktorban (40 °C, 10 perc), a 3) reakciót ismét csőreaktorban (105 °C, 9 perc, 6 bar), majd kven-cselés következett kevert tartályreaktorban (ezt nem részletezték). Harmadik lépésben a hidrogénezést négy, kaszkádba kapcsolt, kevert tartályreaktorban, 5% palládium csontszé-nen katalizátorral, 20 bar nyomáson, a diasztereomer-szelektivitást növelendő 10% citromsav vizes oldatának je-lenlétében végezték (18. ábra). Negyedik lépésben a diasztereomerek elválasztása végett kromatografálták a nyersterméket CHIRALPAK AD-val töltött oszlopon (25 °C, eluens: heptán–etanol 45/55), majd átkristályosítás következett izopropil-acetátból. A kro-matográfiát is megkísérelték folytonosan végezni.			



16. ábra. Glioxilsav és valeraldehid reakciójának folyamatos technológiájú megvalósítása – sematikus ábrázolása az UCB szabadalmi leírásából [14]



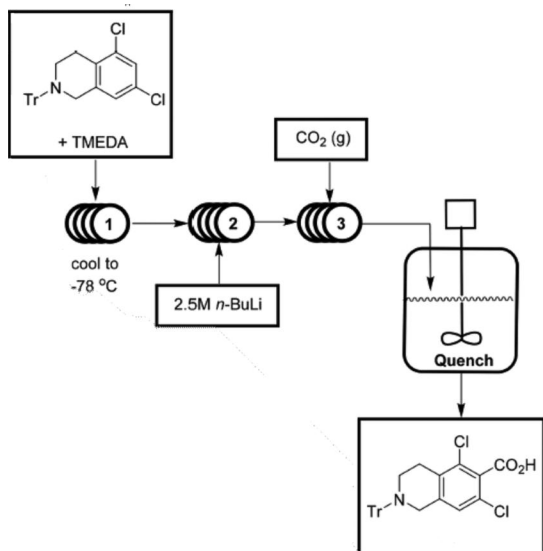
17. ábra. A technológia második lépésének összefoglaló ábrája: redukív aminálás [11]



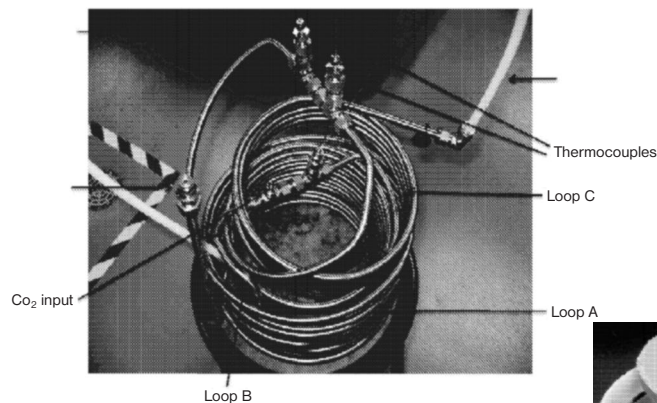
18. ábra. Hidrogénezés kaszkádszerűen kapcsolt kevert tartályreaktorokban – sematikus ábrázolás az UCB szabadalmi leírásából [14]

3. Lifitegrast [15]

Szabadalom birtokosa	Szabadalom birtokosának székhelye	Gyógyszer neve	Hatóanyag neve	Terápia, felhasználás
SARcode	USA (Megvásárolta 2013-ban a Shire [USA]; a Shire-t megvásárolta 2018-ban a Takeda Pharmaceutical Co. [Japán]; 2019-ben a Novartis [Svájc] megállapodást kötött a lifitegrasthoz kapcsolódó jogok megvásárlásáról.)	Xiidra®	lifitegrast	kerato-conjunctivitis sicca elleni szer
A folyamatos technológia előnye	Javult a kitermelés, a tisztaság és az alacsony hőmérsékletű reakció reprodukálhatósága.			
Elért eredmények	4–5 kg-os méretben 97–98%-os tisztasággal, $\eta = 88$ –91%, összesen 22 kg.			
A kivitelezett reakció				
Leírás	A reaktorok anyaga rozsdamentes acél cső, belső átmérőjük 5/16" (kb. 7,9 mm). A 19. ábrán lévő 1. reaktor hossza 14 láb (kb. 4,3 m), a 2. reaktoré (20. ábra) 22 láb (6,7 m). A 3. reaktor hosszát nem közölték. A 2,5 M <i>n</i>-butil-lítium minősége állandóbbnak bizonyult az 1,5 M-os reagenshez képest, ezért a töményebbet alkalmazták, de csak szűrés után, mert a benne lévő szennyeződések tönkretették volna a HPLC-pumpákat. Oldószer: tetrahidrofuran, kiinduló: $w = 10\%$. Hőmérséklet: $-78\text{ }^{\circ}\text{C}$, aceton–szárazjég fürdőben (21. ábra). A 2. és a 3. reaktor után 3-3 statikus keverőt is alkalmaztak. Az 1. reaktor az oldat hűtésére, a 2. a lítium-organikus vegyület képzésére, a 3. reaktor a szén-dioxiddal való reakcióra szolgál. A kvencselést kevert tartályreaktorban végezték 2 M sósavban, a terméket etil-acetáttal extrahálták. A melléktermék [$\text{BuLi} + \text{CO}_2 \rightarrow \text{valériánsav}$, $\text{op.} = (-20\text{ }^{\circ}\text{C})$] nem optimált áramlási sebesség mellett belefagy a 3. reaktorba, és ez dugulást okoz. Áramlási sebesség: 1. reaktor: 102 ml/perc, 2. reaktor: 120 ml/perc, 3. reaktor: > 120 ml/perc.			



19. ábra. A lifitegrast egy intermedierének szintézise [11]



20. ábra. A 19. ábrán látható 1–3 reaktorok – fénykép a SARcode szabadalmi leírásából [15]

21. ábra. A 20. ábra feltekereselt reaktorainak hűtésére szolgáló edény – fénykép a SARcode szabadalmi leírásából [15]

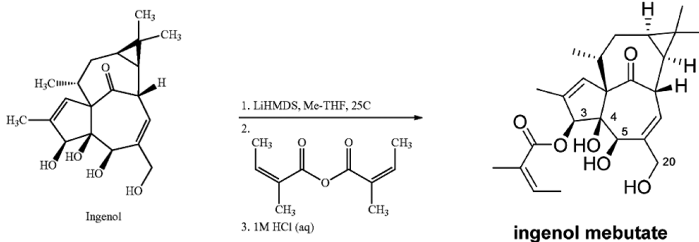


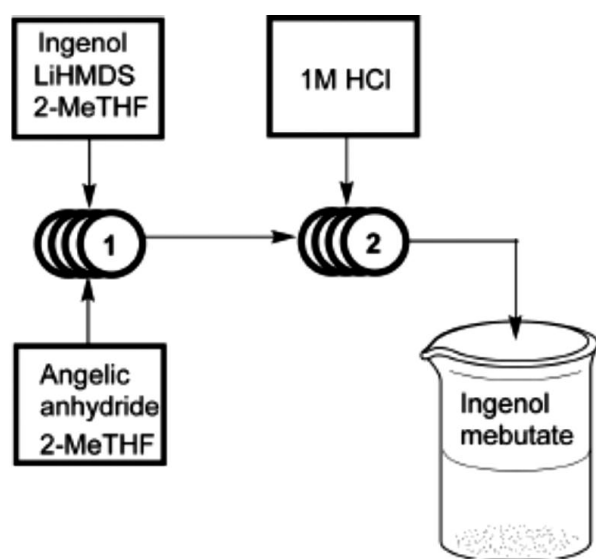
4. Crizotinib [14]

Szabadalom birtokosa	Szabadalom birtokosának székhelye	Gyógyszer neve	Hatóanyag neve	Terápia, felhasználás
Asymchem	(USA) Kína	Xalkori® (Pfizer [17])	crizotinib	kemoterápiás szer, ALK-inhibitor; nem kissejtes tüdőrák esetén alkalmazható
A folyamatos technológia előnye	Jobb kitermelés, nagyobb kapacitás és kedvezőbb anyagfelhasználás.			
Elért eredmények	I. η = 80–90%, 93% -os tisztaság mellett		II. η = 83%, 99% -os tisztaság mellett kb. 40 dkg	
A kivitelezett reakció	The reaction scheme shows the synthesis of Crizotinib in two steps. Step I: A Boc-protected piperidine derivative (4-(tert-butoxycarbonyl)piperidine) reacts with 5-bromopyridine in THF using KO-<i>t</i>-Bu as a base. The yield is 80–90%. Step II: The intermediate reacts with (i-PrO)₃B and <i>n</i>-BuLi in THF to yield the final product, Crizotinib, in 83% yield.			
Leírás	A Pfizer közleményéhez [17] képest jóval olcsóbb kiinduló anyagokból egy intermedier gyártására folyamatos szintézismódszert dolgoztak ki kis méretben. I. lépés. Oldószer: hangyasavtartalmú tetrahidrofurán. Reaktor: csőreaktor feltekereselt csőből. Hőmérséklet: 50–60 °C, tartózkodási idő: 1–10 perc. Kvencselés kevert tartályreaktorban vízzel, majd extrakció etil-acetáttal. Bepárlás. II. lépés. Oldószer: tetrahidrofurán. Reaktor: feltekereselt csőreaktor. Hőmérséklet: (–25)–(–30) °C, tartózkodási idő 1–10 perc. Kvencselés kevert tartályreaktorban vízzel, kémhatás beállítása sósavval pH = 3–5 közé, majd extrakció etil-acetáttal. Bepárlás. Átkristályosítás metil-<i>tert</i>-butil-éter–etil-acetát keverékből. További információ csak a kínai szabadalomban elérhető.			

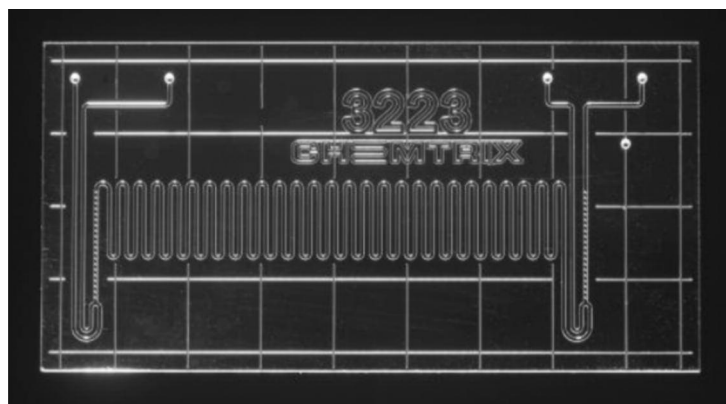


5. Ingenol-mebutát [18]

Szabadalom birtokosa	Szabadalom birtokosának székhelye	Gyógyszer neve	Hatóanyag neve	Terápia, felhasználás
Alphora	Kanada (Az Eurofins CDMO leányvállalata)	Picato® [19] (LEO Laboratories Ltd. <i>Engedély visszavonva.</i>)	ingenol-mebutát	<i>aktinikus keratózis</i> kezelésére
A folyamatos technológia előnye	Javított regioszelektivitás.			
Elért eredmények	Pusztán mg-os tételeben, szerény kitermeléssel (40%), de a szakaszoshoz képest jobb regioszelektivitással.			
A kivitelezett reakció				
Leírás	Az ingenol növényi eredetű anyag, melynek acilezését folyamatos kémiai eljárással is megvalósították. A reakcióvezetés nehézsége, hogy kizárólag a 3-as hidroxilcsoport acileződjen, ezt korábban aceton alkalmazásával, az 5-ös, 20-as hidroxilcsoportok védelmével valósították meg (22. ábra). A reakciót lítium-bisz(trimetilszilil)-amid (0,25 M) és angelikasav-anhidrid (0,25 M) használatával 0 °C-on, sósavas (1 M) megbontással (25 °C) hajtották végre. Alkalmazott oldószer: 2-metil-tetrahidrofuran. Eddig feltáratlan okokból a folyamatos reaktorban végzett reakció regioszelektívebb volt (40%-ban a várt termék), mint a szakaszos eljárásban végrehajtott reakció; valamint így mellőzni lehetett a védőcsoportok alkalmazását is. A reaktorokról részleteket nem közöl azon felül, hogy többek között alkalmaztak Chemtrix <i>Labtrix Microreactor</i> #3223-at is (23. ábra).			



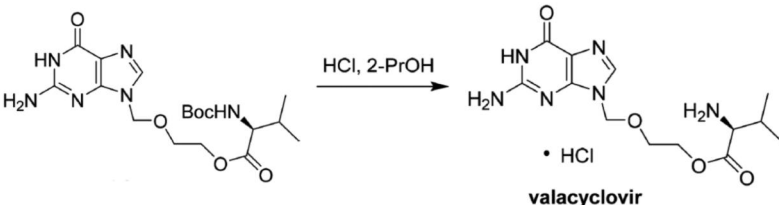
22. ábra. Az ingenol-mebutát előállítása laboratóriumi méretben [11]



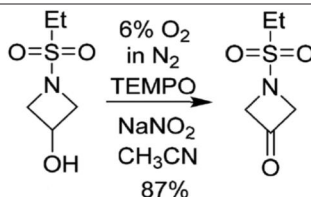
23. ábra. Chemtrix Labtrix Microreactor #3223 [20]



6. Valacyclovir [21]

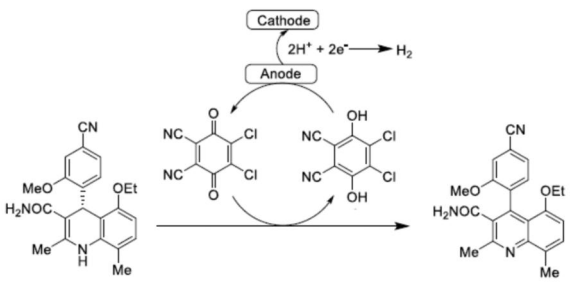
Szabadalom birtokosa	Szabadalom birtokosának székhelye	Gyógyszer neve	Hatóanyag neve	Terápia, felhasználás
Aurobindo	India	Valtrex®	valacyclovir	antivirális szer
A folyamatos technológia előnye	Javult a tisztaság és a kitermelés.			
Elért eredmények	31 g termék $\eta = 65\%$, 99% -os tisztaság mellett.			
A kivitelezett reakció	 valacyclovir			
Leírás	Herpeszvírus elleni generikus hatóanyag. Az alkalmazott reaktorról csak annyi tudható, hogy mikroreaktor volt. Az utolsó reakciólépést végezték folyamatos technológiával: egyszerre védőcsoport-eltávolítás és sóképzés. <i>Reakciókörülmények:</i> Boc-L-valaciklovir 10%-os metil-alkohol–metilén-kloridos (1:3) oldatát 8 ml/perc és 2½ M sósav metil-alkoholos–vizes (1:4) oldatát 5,5 ml/perc áramlási sebességgel egyszerre vezették be a mikroreaktorba, ami 80 °C-os volt. Tartózkodási időt nem közölték. A feldolgozást szakaszosan végezték, 0–5 °C között tartva a folyamatot: a vizes fázis kémhatását trietil-aminnal pH = 2,5–2,8 közé állították be, majd etil-alkohol hozzáadásával kikristályosították a terméket, melyet szűréssel választottak el.			

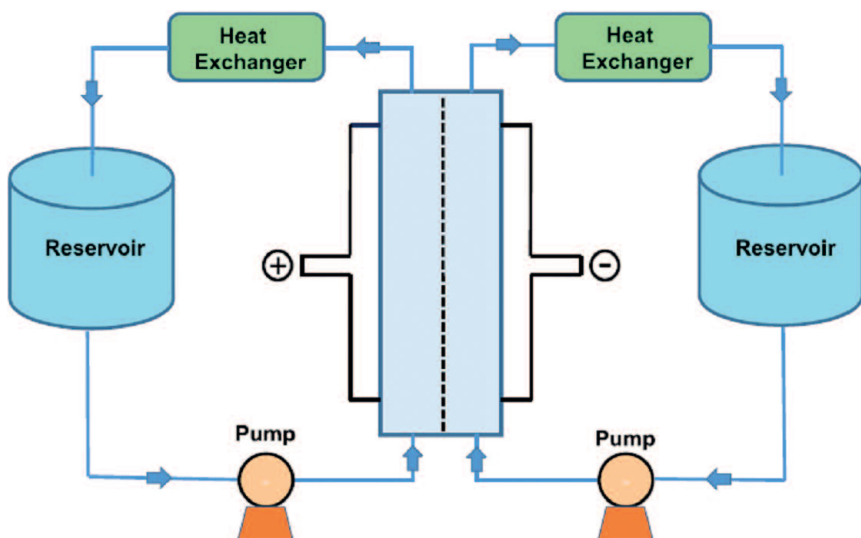
7. Baricitinib [22], [23]

Szabadalom birtokosa	Szabadalom birtokosának székhelye	Gyógyszer neve	Hatóanyag neve	Terápia, felhasználás
Lilly	USA	Olumiant®	baricitinib	közepes és súlyos <i>rheumatoid arthritis</i> és <i>atópiás dermatitis</i> kezelésére
A folyamatos technológia előnye	Biztonságosabb és hatékonyabb oxidálás, nincs szükség nagy berendezésekre.			
Elért eredmények	19 g, $\eta = 87\%$			
A kivitelezett reakció				
Leírás	Szelektív immunszuppresszáns, JAK (Janus-kináz) inhibitor. Igen erős szer, 2 és 4 mg/dózis. [24] Egy fontos intermedier egy lépéses szintézisét kísérleti méretben folyamatos technológiával is megvalósították, és a szabadalomban ezt is publikálták. Érdekesége: oxidáció folyamatos technológiájú megvalósítása oxigéngázzal. A reaktorról nem közöltek részleteket. <i>Körülmények:</i> négy betáplálás 1. TEMPO (2,2,6,6-tetrametilpiperidin-1-oxil) acetonitriles oldata, 12,3 µl/perc. 2. Nátrium-nitrit vizes oldata, 36 µl/perc. 3. Kiinduló anyag ecetsavas-acetonitriles (1:6) oldata, 11,6 µl/perc. 4. 6,259% oxigén és nitrogén elegye, 5,791 mmol/perc. Back pressure: 3447,38 kPa (500 psi). Tartózkodási idő: 12 óra. Nyers termék $\eta = 98\%$, feldolgozás szakaszos technikával (vízre öntés, DIPEA-val kémhatás beállítása pH = 7-re, extrakció etil-acetát–heptán 9:1 elegyével, majd a szerves fázisok egyesítése, oldószercserre: izopropil-alkoholra).			



8. Finerenon [25]

Szabadalom birtokosa	Szabadalom birtokosának székhelye	Gyógyszer neve	Hatóanyag neve	Terápia, felhasználás
Bayer	Németország	– (Klinika II.)	finerenon	nemszteroid mineralokortikoid antagonist, II. típusú cukorbetegség kezelésére
A folyamatos technológia előnye	Elektrokémiai oxidáció és redukció folyamatos reaktorban megvalósítva; tisztább elegyek, méretnövelhető elektrokémiai megvalósítás. Antropizomerek keverékének szétválasztása után a melléktermék újrahasznosítása.			
Elért eredmények	Összesen kb. 200 kg, klinikai vizsgálatokhoz, $\eta = 96\%$, $> 99,5\%$ tisztaság mellett.			
A kivitelezett reakció				
Leírás	Több példát írtak le 10–36 g-os méretek között. Mind az elektrokémiai oxidáció, mind a redukció megvalósítására alkalmas, a 24. ábra szerinti, <i>Nafion</i>® membrános készüléket alkalmazták. <i>Körülmények:</i> 2% DDQ (5,6-diciano-2,3-diklór-1,4-benzokín) és 10 mmol Ag^+ ($n/n = 1:100$) alkalmazása mellett 300 mV feszültségen 180 °C töltést engedtek át a rendszeren 2 óra alatt. Oldószerek: acetonitril tetraetilammónium-[tetrafluoroborát]-tal vagy metanol-dimetilformamid (1:4) tetraetilammónium-[tetrafluoroborát]-tal (0,055 M) és ecetsavval (0,17 M). Elektrodok: 100 cm²-es platinázott titán munkaelektrod, grafit segédelektrod. Tömegáram: 50 kg/óra cellánként.			



24. ábra. Áramlós elektrokémiai cella vázlata a finerenon szintézisének oxidációs vagy redukciós lépéséhez [12]

IRODALOM

- [11] D. Hughes, Applications of Flow Chemistry in Drug Development: Highlights of Recent Patent Literature Org. Process Res. Dev. (2018) 22/1, 13–20.
- [12] D. Hughes, Applications of Flow Chemistry in the Pharmaceutical Industry–Highlights of the Recent Patent Literature Org. Process Res. Dev. (2020) 24/10, 1850–1860.
- [13] vaborbactam: WO2016/100043
- [14] brivaracetam: WO2017076737
- [15] lifitegrast: WO2016049509
- [16] crizotinib: CN105906656
- [17] A Pfizer metódusa: Org. Process Res. Dev. (2011), 15, 1018–1026.
- [18] ingenol mebutate: US20170190652
- [19] EMEA-határozat: EMEA/H/A-20/1489/C/002275/0030: <https://www.ema.europa.eu/en/medicines/human/referrals/picato>
- [20] reactor #3223: Continuous Flow Chemistry 1.1.2.1./fig.1.4.: <https://repository.library.northeastern.edu/files/neu:cj82q387p/fulltext.pdf>
- [21] valacyclovir: WO2017/149420
- [22] baricitinib folyamatos: WO2016205487
- [23] baricitinib szakaszos: Incyte Co., U.S. Patent 8,158,616B2
- [24] EMA Olumiant® alkalmazási előírás: https://www.ema.europa.eu/en/documents/product-information/olumiant-olumiant-epar-product-information_hu.pdf
- [25] finerenone: WO2017032678
- [26] copanlisib: US20170327505
- [27] copanlisib: US20180282337
- [28] canagliflozin: CN106866645
- [29] metronidazole: CN110156694
- [30] flibanserine: WO2020026162
- [31] flibanserine: Bana P., Szigetvári Á., Kóti J., Greiner I. Flow-oriented synthetic design in the continuous preparation of the aryl piperazine drug flibanserine, React. Chem. Eng. (2019) 4, 652–657.

A linkek utolsó elérése: 2022. január 24.

Pályám során a megszerzett tudást, tapasztalatokat igyekeztem továbbadni

Sarka Lajos Rátz Tanár Úr életműdíjas tanár vallomása pályájáról



1958. február másodikán születtem Baktalórántházán. Édesapám pénzügyőr, édesanyám tanítónő volt. Az általános iskolai tanulmányaimat szülőfalumban végeztem, ahol a matematika mellett a természettudományok iránti érdeklődésemre figyeltek fel tanárain. A házunk közelében lévő rétten és a közeli erdőben sokat csatangoltam. Gyűjtöttem a növényeket, megfigyeltem az állatokat, gyűjtöttem a lepkéket. Akkor arra gondoltam, hogy vadász vagy erdész leszek, aki az egész

életét a szabadban tölti, gondozza az állatokat és az erdőt.

Középiskolai tanulmányaimat már Nyíregyházán végeztem a Vasvári Pál Gimnáziumban. Itt a természettudományos tárgyak közül a kémia ragadott meg leginkább, így az érettségi megszerzése után matematika-kémia szakra jelentkeztem a Bessenyei György Tanárképző Főiskolára, Nyíregyházára. A matematika-kémias csoport rendkívül lelkes volt, egymást segítve készültünk az előadásokra és a gyakorlatokra, s hamar közösséggé formálódtunk. (Sajnos a mostani egyetemi rendszerben egyre kevésbé érzékelhető ez a „csoportszellem”, aminek okaira most nem kívánok kitérni.) A szakmai tárgyak tanulása mellett Nagy Zsuzsa szakmódszertanos tanárom biztatására igyekeztem elsajátítani a kémiai ismeretek átadásának, tanításának fortélyait. Tanárnő támogatott minden új kezdeményezést, legyen szó új kísérleti eszközök megtervezéséről és használatáról vagy az akkor még viszonylag kis mértékben alkalmazott oktatófilmek készítéséről. Közös munkánk eredményeként a TDK-konferencián különdíjat nyertem az általam tervezett és a segítségével elkészített oktatófilmmel. Ez a siker is motivációt jelentett számomra, hogy a későbbiekben is legyek nyitott az újdonságokra, az új tanítási módszerekre és az új eszközök használatára.

A tanítási gyakorlatomat a főiskola Eötvös Gyakorlóiskolájában teljesítettem, ahol Kulcsár Katalin tanárnő mutatott példát a különböző módszerek alkalmazására, s ezeket nekünk is el kellett sajátítanunk. A főiskolai mikrotanítások, amikor csoportársaink „játsszák” el a tanulókat és mi próbáljuk őket tanítani, majd megvitatjuk az „óra” tapasztalatait, nagyon jó alapot adtak a „valódi” tanításhoz, de be kellett látnunk, hogy a gyakorló iskolai órák nagyon mások. Az óra felépítésének megtervezése,

a fogalmak kialakításának részletes végiggondolása, az egymásra épülés fontossága, a tanulók munkájának irányítása, figyelemük lekötése, változatos módszerek alkalmazása a figyelem fenntartására, a tanultak megfelelő rögzítése a füzetbe, munkafüzetbe, a következő óra megfelelő előkészítése bizony nem kevés feladatot jelentett. Szerencsére a gyakorló iskolai órák elemzése is hozzájárult ahhoz, hogy bizonyos rutint szerezzünk az előbb felsorolt tervezési és kivitelezési feladatokban. Mint később kiderült, ez nekem azért is volt nagyon fontos, mert a végzés után iskolába kikerülve a saját óráim megtartásában is sokat segített, illetve mint szakfelügyelő, majd még később, mint módszertan oktató tanár rengeteg tapasztalattal rendelkeztem.

A diplomaszerezés után Ófehértóra kerültem, ahol négy évig tanítottam matematikát és kémiát, végeztem az osztályfőnöki tevékenységet, túráztam az osztályommal, s próbáltam alkalmazni a főiskolai tanulmányaim során elsajátított módszertani ismereteket.

A tanítás során szerzett tapasztalataimat bemutató órák segítségével igyekeztem továbbadni, majd egy viszonylag újonnan épült nyíregyházi általános iskolába bekerülve modern körülmények között is kipróbálhattam azokat. Munkám elismeréseként, viszonylag fiatalon, szakfelügyelői, majd szaktanácsadói megbízást kaptam. Előbb 15-20 iskola tartozott hozzám, majd az évek múlásával egyre több megyei iskolában kellett segítenem a tanárkollégák munkáját. Az általam látogatott órákon újabb tapasztalatok sokaságát gyűjtöttem össze: melyik kolléga milyen módszerrel dolgozik, melyik osztályban hogyan fejleszti tanítványait, hogyan tudja kihasználni a tárgyi feltételeket (szertár, szaktanterem, írásvetítő, később oktatófilmek, majd a számítógépes programok), illetve hogyan dolgozik ezek hiányában. Az ötleteket magam is kipróbáltam, illetve továbbképzéseken a kolléga bemutatta a többieknek.

A segítségnyújtás a hivatalos ellenőrzések és tanácsadás mellett a versenyek szervezésével teljesedett ki. A 80-as években nyíregyházi kezdeményezésre, a TIT támogatásával, Kis Kémikus Baráti Körök jöttek létre a megyében, majd országosan is. Az ebben részt vevő tanulók számára megyei, majd országos versenyt szerveztünk. Ebből a versenyből „nőtt ki” a Hevesy György Országos Kémiaverseny, melyet azóta is minden évben megrendezünk. A verseny megyei fordulójának megszervezése most is az én feladatom. A versenyek során, míg a tanulók a feladatlapok megoldásával foglalatoskodtak, a kollégákkal kötetlen szakmai fórumot tartottunk. Megbeszéltük, kinek milyen problémája van a tananyag megtanításával, milyen új módszert próbált ki, az ho-



gyan vált be, mit ajánl a többieknek. Ezek a spontán beszélgetések sokszor többet nyújtottak, mint egy szakmai konferencia. Már csak azért is, mert később egy-egy konferenciára eljutni és azon részt venni egyre költségesebb lett, és kevésbé támogatták.

Visszatérve az előző gondolathoz: amikor bekerültem Nyíregyházára, egy újonnan épült és felszerelt általános iskolába, nagyon szerencsésnek éreztem magam. Ugyanis az új munkahelyemen rendkívül innovatív tanítói és tanári közösségbe kerültem. A tanítók rengeteg ötlettel igyekeztek felkelteni a tanulók érdeklődését a matematika és a magyar nyelv iránt. Abban az időben érkeztek meg Magyarországra az első (elérhető áru) személyi számítógépek, de csak néhány játékprogram volt hozzájuk. A tanítónők unszolására Estók Gáborral és még néhány kollégával nekiláttunk megtanulni a gépek programozását, majd ezzel egy időben úgynevezett oktatóprogramokat írtunk. Igyekeztünk tanfolyamokkal és egyéni segítségadással megtanítani mindenkit programozni, de rá kellett jönnünk, hogy ez nem okoz mindenkinek egyformán örömet. Sokan csak használni akarták a gépeket és a programokat a tanítási órákon. El is készítettünk kb. 20 oktatóprogramot, melyet módszertani konferenciákon is bemutattunk. Sok dicsőretet kaptunk a munkánkért, és mások is szívesen használták.

A programírás több kémia szakos kollegát is „megfertőzött”, így egyre több kémiai programot tudtunk bemutatni a továbbképzéseken, s közösen gondolkodhattunk a számítógép ilyen alkalmazásáról.

Ebben az időben sok továbbképzés és foglalkozás szólt a számítógépek tanórai és tanítási órán kívüli alkalmazásáról. Ahogy az iskolák számítógépekhez jutottak, egyre több kolléga próbálta ki a kész programok alkalmazásának lehetőségét.

1988-ban középiskolai kémia tanári oklevelet szereztem Debrecenben, a Kossuth Lajos Tudományegyetemen, mely feljogosított a középiskolában való tanításra. Nagy Zsuzsa hívására 1994-ben elfogadtam az adjunktusi állást a Bessenyei György Tanárképző Főiskolán, amely újabb kihívást jelentett számomra. Egyrészt a tanárképzés szakmai és módszertani óráit kellett tartanom, másrészt felvételt nyertem a KLTE doktori iskolájába, hogy megszerezsem a PhD-fokozatot. Koordinációs kémiai kutatásaimat Brücher Ernő irányításával végeztem. Tudományos kutatásaimról három kiemelten magas impaktfaktorú folyóiratban jelent meg első szerzős cikkem, melyeknek idézettsége száz fölötti. A rengeteg tanulás és munka után abszolutóriumot szereztem, de a befejezés még várat magára.

2008 és 2013 között a nyíregyházi Zrínyi Ilona Gimnázium és Kollégium óraadó középiskolai tanárjaként is gyűjtöttem a tanítási tapasztalatokat, s így ráláthattam az általános iskolai, a kö-

zépiskolai és a főiskolai-egyetemi oktatás teljes spektrumára. Megismerhettem a tanítás lehetőségeit és problémáit. Tapasztalataimat magyar és külföldi konferenciákon adtam közre, illetve tanfolyamok és cikkek segítségével publikáltam is.

Külön öröm volt számomra, hogy minden korosztályból kikerültek olyan tanítványaim, akik a Hevesy-, az Irinyi-, az OKTV-versenyeken kiválóan szerepeltek, illetve főiskolás tanítványaim az OTDK-n díjazottak lettek, majd tanárként – és előadóként – részt vettek a Kémia tanárok Országos Konferenciáján.

A felsőoktatás megújítása, átszervezése során lecsökkent az érdeklődés a természettudomány tanári szakok iránt, ami az oktatói létszámcsoökkentést vonta maga után, így a Nyíregyházi Egyetem Eötvös Gyakorlóiskolájában folytatódott pályafutásom. Sikertelenül beilleszkedtem és lendületet adni a kémia tanítása segítségével a versenyzésnek, a kísérletező foglalkozásoknak.

Tanítványaim kiváló eredményeket értek el (lásd a képeket).



Gábor Gergő, az OKTV 6., majd 5. helyezetteje és egyéb országos versenyek döntőse, helyezettje



Répási Marcell, az OKTV 7., majd 11. helyezetteje és egyéb országos versenyek döntőse, helyezettje

Science on Stage (2016)



A tanulókkal közös kísérleti bemutatók, melyekre nemcsak az iskolában, hanem az egyetemen is sor került, rendkívüli népszerűségnek örvendenek. A továbbtanulásban, pályaválasztásban, iskolaválasztásban is segítjük evvel a résztvevőket, s a tanulóim is sikerélményhez jutnak, hiszen nagyközönség előtt „szerepelve” maguknak és másoknak is bizonyítják, hogy a kémia érdekes és megtanulható természettudomány.



Kutatók éjszakája (2015)



Kísérleti bemutató 2021-ben 10-es tanítványokkal a Nyíregyházi Egyetemen

A fakultációs csoportokból többen orvosnak, gyógyszerésznek készülnek, vagy a továbbtanulásukhoz szükséges emelt vagy középszintű érettségit kémiából teszik le.



2018-ban a Nyíregyházi Egyetemen

Az elmúlt években a tanítás mellett több módszertani kutatásban is részt vettem, melyek során a tapasztalatszerzés és a tapasztalatok átadása egyformán fontos szerepet játszott. Ezek például: a „Regionális Pedagógusképző és Továbbképző Hálózat és Adatbázis az Észak-Alföldi Régióban” TÁMOP-pályázat; a „Ké-

miatanárok szak módszertani továbbképzése” TÁMOP-pályázat keretében módszertani foglalkozások kidolgozása és megvalósítása; „A Köznevelés Módszertani megújítása a végzettség nélküli iskolaelhagyás csökkentése céljából – Komplex Alapprogram bevezetése a köznevelési intézményekben, a pedagógusok módszertani felkészítése a végzettség nélküli iskolaelhagyás megelőzése érdekében” EFOP-pályázat; a „JEEP!” – Junior Engineer Education Program; a „Pályorientáció – matematika, természettudományos, műszaki és informatikai szakok népszerűsítése a Nyíregyházi Egyetemen” EFOP-pályázatban kísérleti bemutató-



Gimisek titrálás közben az MTMI élményközpontban

kat, laboratóriumi gyakorlatokat, terveztem és tartottam. Szalay Luca, az ELTE Kémiai Intézet szak módszertanos oktatója irányításával részt vettem az MTA „Megvalósítható kutatásalapú kémiatanítás” projekt végrehajtásában, melynek során 4 éven keresztül (2016–2021) vezettem kísérletező tanítási órát a megadott feltételekkel. Az „MTMI Élményközpont Nyíregyházán” EFOP-program „Kémia”-programfelelőseként az élményközpont kémiai laboratóriumának berendezéséért, a foglalkozások megtervezéséért és azok megtartásáért vállaltam felelősséget.

Külön öröm számomra, hogy 1987 óta 31 alkalommal sikerült megszervezni a „Kémia-fizika szaktáborot”, ahol alkalmanként 20–40 általános, illetve középiskolai tanuló hallgatott előadásokat főiskolai oktatóktól és végzett laboratóriumi gyakorlatokat a főiskola kémia, illetve fizika tanszék laboratóriumaiban. A foglalkozásokon előadóként és gyakorlatvezetőként magam is részt vettem.



Kémia-fizika szaktáborosok (2015)

Módszertani konferenciákon az elmúlt években tíznél több előadásban számoltam be eredményeinkről, tapasztalatainkról, módszertani fejlesztési elképzeléseinkről.

Az elmúlt negyven év sikerei és néha kudarcai mindig arra ösztönöztek, hogy szakmai és módszertani tudásomat folyamatosan bővítssem és a megszerzett tudást, tapasztalatokat továbbadjam tanítványaimnak, főiskolai hallgatóimnak és kollegáimnak. Remélem, hogy erre még sok lehetőségem adódik. ●●●



KIRÓL NEVEZTÉK EL?

Inzelt György

■ ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A Kirchhoff-törvények, Kirchhoff sugárzási törvénye, Bunsen–Kirchhoff-spektroszkóp

Kirchhoffot fizikusként tartjuk számon, és a Kirchhoff-törvényeket is a fizikai tanulmányaink során tanuljuk. Mindazonáltal egy fizikokémikus is gyakorta dolgozik bonyolult áramkörökkel, hálózatokkal, amikor is az áram, a feszültség és az ellenállások számításához elengedhetetlen ezeknek a törvényeknek az ismerete és alkalmazása. Egy másik fontos szempontunk pedig az, hogy fizikaprofesszorként szorosan együttműködött a kémikusprofesszor Bunsennel, ami később hihetetlen gyümölcsözőnek bizonyult a kémiában is. Főleg kettőjük miatt lett Heidelberg 1854 és 1874 között a kémikusok és a fizikusok zarándokhelye, ahová egyetemi hallgatóként, doktoranduszként minden országból érkeztek olyan tanítványok, akikből később a világ (D. I. Mengyelejev, G. Lippmann, H. Kamerlingh Onnes) és többek között hazánk (Than Károly, Lengyel Béla, Wartha Vince, Ilosvay Lajos, Eötvös Loránd – a vegyészek inkább Bunsennel dolgoztak) vezető kutatói lettek.

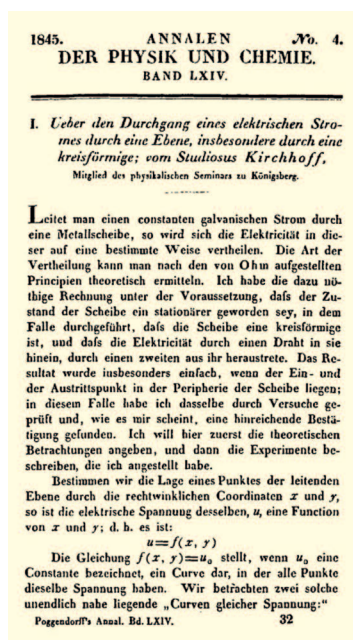
Megjegyzendő, hogy Helmholtz is itt tanított 1858 és 1871 között fiziológiaprofesszorként, de egyre inkább már a fizika felé fordult, és fizikakurzust is tartott. Kirchhoff más alapvető összefüggéseket is levezetett, ezek közül talán a legjelentősebb a róla elnevezett sugárzási törvény. Ezért az áramkörtörvényei mellett ezzel fogunk még foglalkozni.

A Kirchhoff-törvények

Azokat a törvényeket, amelyeket egyszerűen csak Kirchhoff-törvényeknek hívunk, 1845-ben, 21 évesen (!) még mint a königsbergi Albertus Egyetem hallgatója publikálta (1. ábra). A törvények alapvetően Georg Simon Ohm az áram folyását leíró elméletét általánosítják.

Kirchhoff I. törvénye

Elágazó áramköröknél az elágazásnál (az ún. csomópontnál) nincs töltésfelhalmozódás, tehát a csomópontba befolyó áramok



1. ábra. A Kirchhoff-törvényeket ismertető cikk első lapja

összege megegyezik a feszültségesések összegével.

Egy huroknál

$$E_g = E_{R1} + E_{R2},$$
 ahol E_g a feszültségforrás.

Ezek alapján minden csomópontra és hurokra felírható a megfelelő összefüggés, és az ismeretlen áram, feszültség vagy ellenállás kiszámítható a nem aktív elemekre (ellenállásokra) felhasználva az Ohm-törvényt ($E = I \times R$).

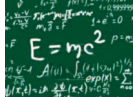
összege megegyezik az onnan elfolyó áramok összegével. A csomópont elektromos potenciálja egy másik csomópontéhoz képest mérhető. Ennek értéke függ az összekötő elem ellenállásának értékétől (R) és az áram nagyságától.

Tehát egy csomópontnál

$$-I_1 + I_2 - I_4 + I_3 = 0,$$
 ahol I pozitív a befolyó, illetve negatív az elfolyó áramokra.

Kirchhoff II. törvénye

Egy zárt hurokban a feszültségek előjeles összege nulla. Az előjel lehet pozitív és negatív attól függően, hogy milyen irányban nézzük végig („járjuk körül”) az áramkört. Zárt hurokban a feszültségforrások összege



Kirchhoff sugárzási törvénye

A róla elnevezett sugárzási törvényt Kirchhoff 1859-ben, a kísérleti tapasztalatokat figyelembe véve, elméleti megfontolások alapján vezette le. Sugárzási törvénye szerint bármely testnél egy adott hullámhosszon (λ) és hőmérsékleten (T) a spektrális emisszióképeség (E) és az abszorpcióképeség (A) hányadosa (K) állandó:

$$E(T, \lambda) / A(T, \lambda) = K(T, \lambda)$$

A sugárzás termodinamikai értelmezését Kirchhoff a Fraunhofer-féle D-vonalakkal (lásd később) foglalkozva dolgozta ki. Ugyanekkor bevezette az abszolút feketetest-sugárzás fogalmát (1862), vagyis az olyan testét, amely minden ráeső sugárzást teljesen elnyel [$A(T, \lambda) = 1$ és $K(T, \lambda) = 1$]. Az ilyen test emisszióképesége is a legnagyobb. Ez a fogalom nagy szerepet játszott abban, hogy Max Planck (1858–1947) kifejlesztette a kvantummechanikát, ezért ezzel kapcsolatban kerül a legtöbbször szóba. Mindazonáltal azt a felismerést, hogy egy jó abszorbens egyúttal jó sugárzó (emitter) is, illetve egy jó visszaverő (reflektor) anyag gyenge abszorbens, a gyakorlatban is alkalmazzuk. Például bal-esetek során azt látjuk, hogy a sérültet fényes fémbevonatú, könnyű takaróba burkolják azért, mert így minimális a sugárzási hővesztés.

Gustav Robert Kirchhoff



2. ábra. Kirchhoff a Kirchhoff-törvényekkel egy bélyegen

Gustav Robert Kirchhoff [Poroszország, Königsberg (ma Kalinyingrád, Oroszország), 1824. március 12. – Németország, Berlin, 1887. október 17.] apja, Friedrich Kirchhoff ügyvéd volt [1, 2]. A gimnázium elvégzése után Kirchhoff az Albertus Egyetemen folytatta tanulmányait, ahol elsősorban matematikát és fizikát hallgatott. Matematikatanára Friedrich Julius Richelot (1808–1875), későbbi apósa volt. A legnagyobb hatást azonban Franz Ernst Neumann (1798–1895) gyakorolta rá, aki matematikai fizikával és elektromágnesességgel foglalkozott, és akit a matematikai fizika megalapítójának tekintünk. Neumann, aki eredetileg geodéta volt, kiváló tanártársai, a csillagász, geodéta és matematikus, Friedrich Wilhelm Bessel (1784–1846) (*Bessel-függvények*), valamint Carl Gustav Jacob Jacobi (1804–1851) matematikaprofesszor hatására kezdett el témákkal foglalkozni. (Kirchhoff javaslatára Eötvös Loránd is egy évet töltött 1868-ban Neumannnál, de matematikai felkészültsége nem volt elegendő ahhoz, hogy igazából profitáljon a tanulmányútból.) Kirchhoff 1847-ben kapta meg a diplomáját. Berlinbe mentek a feleségével, ahol két évig fizetés nélkül tanított az egyetemen. 1850-ben kinevezték Breslauba (magyarul Boroszló, ma Wrocław) a fizika professzorának. 1851-ben érkezett ide Robert Bunsen (1811–1899), aki egy év múlva ugyan a Heidelbergi Egyetemen folytatta, de hosszú barátságuk itt kezdődött. Két év múlva Kirchhoff is követte, akit fi-

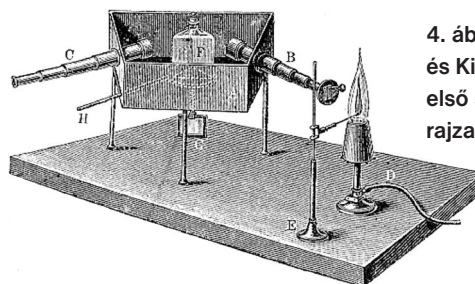
Az a portré, amelynek rajza egy bélyegen is megjelenik (2. ábra), idősebb korában készült, nem a törvény megalkotásakor. Fiatalabb képét Bunsennel együtt is láthatjuk (3. ábra). Közös képeiken Kirchhoff áll, Bunsen ül. Ennek feltehetően az az oka, hogy Kirchhoff alacsony növésű volt, míg Bunsen magas.

Gustav Robert Kirchhoff [Poroszország, Königsberg (ma Kalinyingrád, Oroszország), 1824. március 12. – Németország, Berlin, 1887. október 17.] apja, Friedrich Kirchhoff ügyvéd volt [1, 2]. A gimnázium elvégzése után Kirchhoff az Albertus Egyetemen folytatta tanulmányait, ahol elsősorban matematikát és fizikát hallgatott. Matematikatanára Friedrich Julius Richelot (1808–1875), későbbi apósa volt. A legnagyobb hatást azonban Franz Ernst Neumann (1798–1895) gyakorolta rá, aki matematikai fizikával és elektromágnesességgel foglalkozott, és akit a matematikai fizika megalapítójának tekintünk. Neumann, aki eredetileg geodéta volt, kiváló tanártársai, a csillagász, geodéta és matematikus, Friedrich Wilhelm Bessel (1784–1846) (*Bessel-függvények*), valamint Carl Gustav Jacob Jacobi (1804–1851) matematikaprofesszor hatására kezdett el témákkal foglalkozni. (Kirchhoff javaslatára Eötvös Loránd is egy évet töltött 1868-ban Neumannnál, de matematikai felkészültsége nem volt elegendő ahhoz, hogy igazából profitáljon a tanulmányútból.) Kirchhoff 1847-ben kapta meg a diplomáját. Berlinbe mentek a feleségével, ahol két évig fizetés nélkül tanított az egyetemen. 1850-ben kinevezték Breslauba (magyarul Boroszló, ma Wrocław) a fizika professzorának. 1851-ben érkezett ide Robert Bunsen (1811–1899), aki egy év múlva ugyan a Heidelbergi Egyetemen folytatta, de hosszú barátságuk itt kezdődött. Két év múlva Kirchhoff is követte, akit fi-



3. ábra. Kirchhoff Bunsennel Heidelbergben

zikaprofesszornak hívtak meg. 1859 és 1862 közötti együttes munkájuk eredménye lett a spektrumanalízis módszere, amely a következő évtizedekben forradalmasította a kémiai elemek kimutatását. Ők maguk két új elemet fedeztek fel, a céziumot és a rubídiumot 1861-ben [1, 3, 4]. Bunsen lángfestéssel kísérletezett. Ehhez fejlesztették ki a róla elnevezett *Bunsen-égőt*, amely szabályozható hőmérsékletű lángot adott, és nagy hőmérsékletet lehetett vele elérni. Világító lángja kiváló volt a célra. Színezett üvegeket is használt hasonló színű lángok megkülönböztetésére. Kirchhoff javasolta azt, hogy prizmán át vezessék a láng fényét. Megépítették a spektroszkópot (4. ábra), és szisztematikusan mérni kezdték különböző anyagok (fémek, sók stb.) színképét. Világossá vált, hogy minden elem jellemző vonalakat, színképét produkál. Kirchhoff arra is rájött, hogy a sötét vonalak a szín-



4. ábra. Bunsen és Kirchhoff 1859-es, első spektroszkópjának rajza [5]

képben [például a Nap sugárzásánál is, amit Joseph Fraunhofer (1787–1826) már 1814-ben leírt] attól származnak, hogy a fényabszorpció ugyanannál a hullámhossznál történik, ahol az elem gerjesztés hatására a fényt kibocsátja. Tehát a nátrium által kibocsátott hullámhossznál a fény elnyelődik, ha nátrium (vagy vegyülete) van jelen a levegőben. Ezeket a jelenségeket a tudósok már évtizedek óta vizsgálták, és értelmezték is. Így érthető volt, hogy Kirchhoff és Bunsen (5. ábra) elsőbbségét, eredetiségét vitták, főleg az angolok. Igaz, hogy az első közleményükben William Swan (1818–1883) skót fizikus munkáján kívül mást nem is idéztek. Az elődök munkáját Kirchhoff csak a következő, 1863-as cikkében méltatta.

Mindenesetre megállapítható, hogy Kirchhoff és Bunsen fejlesztette ki a módszert, bizonyította széleskörűen annak analitikai alkalmazását, és így is terjedt el. Hamarosan – még Angliában – is az ő nevükkel árulták a spektroszkópot [4].

1861-ben a dürkheimi ásványvizet vizsgálva az tapasztalták, hogy két új kék vonal jelenik meg. 44 tonna ásványvíz feldolgozásával az új elem különböző vegyületeit sikerült előállítaniuk, és azt tapasztalták, hogy a tulajdonságaik nagyon hasonlóak a nátrium és a kálium vegyületeiéhez. Az új elemnek a cézium nevet adták (coesius latinul égszínkék). Még ugyanebben az évben a százszori lepidolit ásványban szintén felfedeztek egy új elemet, amelyet – színképvonalai után – rubídiumnak neveztek el (rubidus latinul sötétvörös) [6]. A színképelemzés elterjedésével sorban fedeztek fel új elemeket [tallium (üde zöld színű) – W. Crookes, 1861, indium (indigószínű), F. Reich és T. Richter, 1863]. Az évtized végére már 63 elem volt ismert, ami lehetőséget adott Mengyelejevnek és L. Meyernek a periódusos rendszer megalkotásához.

Planck Kirchhoff tanítványa volt, majd utódja lett a Berlieni Egyetem Fizika Tanszékén, ahová Kirchhoffot 1875-ben nevezték ki. Planck rendkívül tisztelte Kirchhoffot és Helmholtzt, de előadásait kritizálta. Kirchhoffról így írt: „Kirchhoff viszont rendszerint elővett egy pontosan kidolgozott iskolai füzetet, amelyben minden tétel gondos mérlegelés után a maga helyén volt. Egy szóval sem több, egy szóval sem kevesebb. Az egész azonban úgy hatott, mintha kívülről betanulta volna szárazon és egyhangúan. Csodáltuk az előadót, de azt nem, amit mondott.” [7]

Robert Wilhelm Bunsen

Robert Wilhelm Eberhard Bunsen (Hannover választófejedelem-ség, Göttingen, 1811. március 31. – Németország, Heidelberg, 1899. augusztus 16.) (5. ábra) édesapja a Göttingeni Egyetemen dolgozott mint filológiai professzor és fő-



5. ábra. Bunsen portréja a *Zeitschrift für physikalische Chemie* első számának elején

könyvtáros. Bunsen ott tanult kémiát, fizikát és geológiát. Kémiatanára Friedrich Stromeyer (1776–1835), a kadmium felfedezője (1817) volt. 1831-ben szerzett doktori fokozatot. Ezután következett a peregrináció, amelynek állomásai Berlin, Párizs (Gay-Lussac) és Bécs voltak. 1836-ban a kasseli főiskola tanára, majd 1839-ben a Marburgi Egyetem professzora lett. Itt még szerves kémiai kísérleteket végzett, amelyek során egy robbanás következményeként az egyik szeme világát elvesztette. Egyéves breslaui kitérő után 1852-ben lett a Heidelbergi Egyetem professzora, ahol 1889-ig tanított. Itt már majdnem ki-

zárólagosan analitikai, fizikai és szervetlen kémiával foglalkozott. Magával ragadó előadó volt, és ott dolgozott tanítványai között a laboratóriumban. Tanítványa és munkatársa, H. C. Roscoe (1833–1915) angol tudós ezt mondta róla: „Nagy volt, mint kutató, mint tanító még nagyobb volt, de emberként és barátként volt a legnagyobb” [9]. (Roscoe tankönyvéből, amely magyarul 1871-ben jelent meg Lengyel Béla fordításában, tanultak kémiát a budapest tudományegyetemen, amíg Lengyel, illetve Than könyvei meg nem jelentek.) De Wilhelm Ostwald is így írt: „Bunsen volt számomra a tudós ideálja” [10]. A *Zeitschrift für physikalische Chemie* első számának elején is a mester portréjával tiszteleg a nagy tudós előtt. Bunsen széles körű tevékenységeinek ismertetésétől el kell tekintenünk, de megemlítjük az 1,9 V-os *Bunsen-elemet* (pórusos, kiégetett agyagszeparátorral elválasztott cink–híg kénsav anód és szén–salétromsav vagy krómsav ka-

tód), amely olcsó volt, és népszerű a 19. században, amivel ő maga is különböző fémeket állított elő.

Magyar kapcsolatok

Than Károly éppen akkor volt Heidelbergben, amikor a színképelemzéssel kapcsolatos munkák kezdődtek. Ő használt először spektroszkópot hazánkban: 1862-ben kimutatta, hogy a tölgyfa hamujában van rubídium. Than olyan hálás volt és annyira tisztelte Bunsent és Kirchhoffot, hogy új kémiai épületében, amely 1872-re készült el, a nagy előadóban a fő helyen az ő domborműves portréjukat helyeztette el. Sok kiváló tudós hasonló reliefje díszíti az épületet, de Bunsen és Kirchhoff annyiban kivétel volt, hogy ők még éltek, és ezért csak a születési dátumuk szerepel.

Bunsent az MTA tiszteleti tagjának választották 1858. december 16-án. Kirchhoff 1872. május 24-én lett az MTA külső tagja. Érdekesség: Wartha Vince (1844–1914), aki Heidelbergben doktorált [8] akadémiai székfoglalóját „A Bunsen-féle jégcaloriméterről” címmel tartotta 1875-ben. Némi ellentmondás van Szabadváry másik könyvével [4], mert ott ez áll: „Bunsennél nem doktorál soha senki” [4]. Valóban Bunsen nem fordított nagy gondot arra, hogy diszertációk születessenek nála, de „a soha senki” így nem igaz. Például ő maga írta, hogy Lengyel és Wartha ott szerzett doktorátust, de németek és angolok is [11]. Eötvös Lorándot hárman szigorlatoztatták: Bunsen, Kirchhoff és Leo Königsberger (1837–1921) matematikus. Bunsen és Kirchhoff jó kapcsolatba kerültek Eötvös Józseffel (1813–1871) egy 1867-es Bad Ragaz-i nyaralás kapcsán. Eötvös József fiához írt leveleiben mindig üdvözlétét küldi nekik [12]. Például a betegeskedő Kirchhoffnak a következőt ajánlja (1868. május 27.): „Mondd Kirchhoffnak, hogy jöjjön Pöstyénbe, ott bizonyosan kigyógyul.” Vagy tellúrt szerzett Bunsennek (1868. július 27.): „Kérdőzködj, kérlek, Bunsen Karlsbadba jön-e?” „Tellurom van 2 mázsa, mint kívántad.” „... tegnap a finánc-minisztériumtól árjegyzéket kaptam, melyben 2 mázsa tellúrérc aranyát 4760 ft (osztrák) értékben számítják ... beszéld el az adatot Bunsennek. Azon esetre, ha, miután elébb Than az érc valóságos becstét megvizsgálta, ő a heidelbergi laboratórium részére az egész mázsát vagy annak részét a valóságos érték lefizetése mellett átvenni kívánná, én azt számára fenntartom.” [A tellúr aranytartalmú ércekben található. Felfedezője Müller Ferenc József (1742–1825) is aranyércben találta.] Eötvös Loránd hallgatta Kirchhoff, Bunsen és Helmholtz előadásait, kémiai és fizikai laboratóriumukban is dolgozott. 1870. július 8-án írt levelében örömmel értesíti apját, hogy *summa cum laude* fokozattal megszerezte a doktori fokozatát.

IRODALOM

- [1] A. Z. Inan, What did Gustav Robert Kirchhoff stumble upon 150 years ago? Proceedings of 2010 IEEE International Symposium on Circuits and Systems. 2010, 73–76.
- [2] R. von Helmholtz, „A memoir of Gustav Robert Kirchhoff”, translated by J. de Perott. Annual Report of the Board of Regents of the Smithsonian Institution, 1890, 527–540.
- [3] A. Findlay, T. I. Williams, A kémia száz éve. Gondolat, Budapest, 1969.
- [4] Szabadváry E, Az analitikai kémia módszereinek kialakulása. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1960, 321–331.
- [5] G. Kirchhoff, R. Bunsen, Poggendorf Annalen (1860) 110, 160.
- [6] Zsákó J, Az elemek története. Tudományos Könyvkiadó, Bukarest, 1964.
- [7] M. Planck, Tudományos önéletrajz. Válogatott tanulmányok. Gondolat, Budapest, 1965, 42.
- [8] Szabadváry E, A kémia története Magyarországon. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1972, 204.
- [9] H. C. Roscoe, J. Chem. Soc. (1900) 77, 513.
- [10] Wilhelm Ostwald, The Autobiography (szerkesztők: F. Scholz, R. Smail Jack). Springer Int. Publ. AG, 2017, 104.
- [11] P. R. Jones, Contrasting mentors for English speaking students in Germany in the 19th century.
- [12] Eötvös József levelei fiához, Eötvös Lorándhoz, Szépirodalmi Kiadó, Budapest, 1988.



Róka András

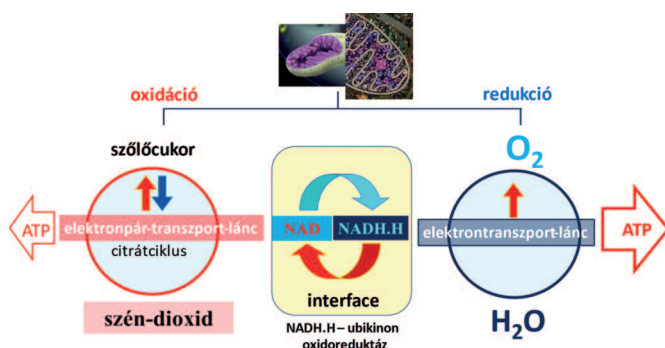
■ ELTE TTK Kémiai Intézet

A „protonpumpák” működése és következménye

A mitokondrium funkcionális elektro-biokémiája (Második rész)

Inzelt György köszöntésére

Az első részben vázoltuk, hogy a mitokondrium funkcióját tekintve folyamatos üzemű, bio-üzemanyagcella, amiben a citrátciklus (a piroszőlősav átalakulásával együtt) az oxidációs térfelet, a terminális oxidáció pedig a redukciós térfelet alkotja (1. ábra).



1. ábra. A mitokondrium térben elválasztott oxidációs és redukciós folyamatai folyamatos üzemű bio-üzemanyagcellát alkotnak

Mitchell nem tekintette a mitokondrium egészét üzemanyag-cellának, csak az elektrontranszport-lánc és a hidrogénüzemű tüzelőanyag-cella hasonlóságát ismerte fel, amikor a folyamatot tüzelőanyagcella-szerűnek nevezte [1]. Annak ellenére, hogy szinte átláthatatlan irodalma van azoknak az eredményeknek, amelyek alátámasztják Mitchell elméletét, a mechanizmusok tekintetében még mindig vannak hiányosságok [2]. Ilyen például a protonpumpák működése, a protontranszport mechanizmusa vagy az ozmózis „chemi” jellegének magyarázata. Előző cikkem folytatása néhány hiányosság magyarázatára tesz kísérletet olyan eredmények figyelembevételével, melyeket Mitchell még nem ismerhetett, ilyen például:

- Oláh György szupersavakra vonatkozó munkássága és a két-elektronos-háromcentrumos kötés jelentősége,
- a Nafion polielektrolit protonvezető membrán alkalmazása az üzemanyagcellákban,
- a redoxi félvezetők mechanizmusának megismerése a ciklikus voltammetriával egybekötött kvarckristály-nanogravimetria segítségével.

A mátrix és a membránok közötti tér eltérő kémhatása alapján Mitchell hipotézisének egyik posztulátuma, hogy az elektrontranszport-lánc enzimei hidrogénionokat „pumpálnak” a memb-

ránok közötti térbe, és ezáltal koncentrációgradiens alakul ki. A „pumpa” elnevezés találó, mert kifejezi, hogy a protonok növekvő koncentráció irányába történő transzportja munkát igényel. A protonpumpák mechanizmusa azonban ismeretlen volt. Furcsa azonban, hogy Mitchell nem azt a hajtóerőt nevezte el „protonmotive force”-nak, ami a koncentrációgradienst hozza létre, hanem a következmény-folyamatot, mert a ATP-szintézis kapcsolása érdekében a protontranszporhoz külön hajtóerőre volt szüksége.

Javaslat a protonpumpák működésére

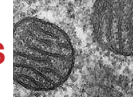
Az elektroneutralitás törvénye a redoxireakciók során szigorúan teljesül. Töltés sohasem halmozódik fel, még a galvánelemekben sem. A töltéskiegyenlítődség előbb-utóbb bekövetkezik, különben hátráltatja a folyamatot. Ennek az a következménye, hogy a mitokondrium belső membránja nem válik kondenzátorrá. Az elektromos télerősség kialakulása ugyan kedvező lenne a „megmaradó” energiaátalakulás magyarázata szempontjából, de a termodinamika kezdeti és végállapoton alapuló törvénye nem mondhat semmit a mechanizmusról. Úgy gondolom, hogy a „protonpumpákra” vonatkozó ismeretek azért hiányosak, mert a töltéskiegyenlítődség nem olyan triviálisan játszódik le, mint az oldatokban. Ennek megértéséhez nyújt segítséget a redoxi félvezetők vezetési mechanizmusának megismerése.

A hexaciano-ferrátok redoxi elektrontranszport-lánca

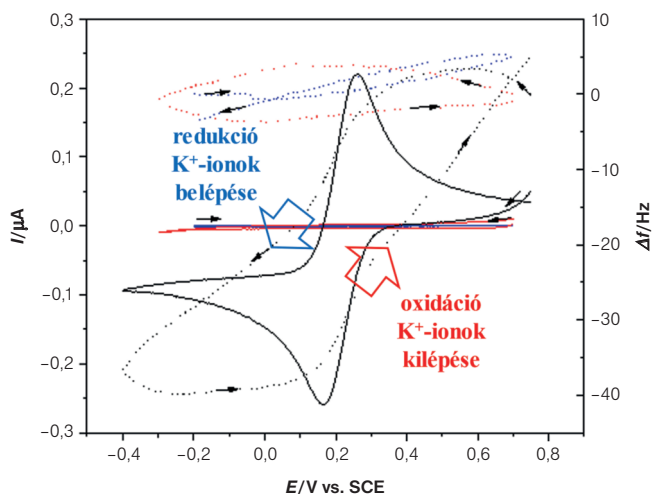
A vasionok cianidionokkal alkotott komplexei önmagukban is nagy stabilitásúak (kálium-hexaciano-ferrát (II) és (III)). Redoxreakcióik során a ligandumszféra sértetlen marad, ezért a központi ion töltésváltozását az elektrolit kationjainak kell kompenzálnia. Oldatban ennek nincs különösebb jelentősége, mert az ionok mobilitása észrevétlenül biztosítja a gyors töltéskiegyenlítődséget. Valószínűleg ezért nem is gondolunk arra, hogy más a helyzet szilárd fázisban, mert a kristályrács helyhez kötöttsége következményekkel jár.

A vas(III)ionok a kálium-hexaciano-ferrát(II)-vel oldhatatlan csapadékot alkotnak. A Berliini kék, és a hozzá hasonló hexaciano-ferrátok olyan többmagvú multikomplexek, amelyekben maguk a komplexionok is ligandumokká válnak (pl. ittrium-hexaciano-ferrát(II)). A komplex ionok közé ékelődő kationok – híd-ként – lehetővé teszik az elektronszerkezet sávyszerkezetté szerveződését [3].

A vékony rétegek különleges tulajdonsága, hogy potenciálkülönbség hatására – a tovaterjedő redoxreakció eredményeképp-



pen – vezetőkké válnak. Vezetési mechanizmusukat tekintve redoxi félvezetők, mert az elektronok „átugrása” a centrumokban redoxireakciót idéz elő, és a „lyukak” az elektronokkal ellentétes irányba vándorolnak. Mivel a koordináló cianidionok száma és töltése nem változik, a redoxi reakciólánc során a töltések kompenzációja szükségszerűen az elektrolitoldat kationjaival történik. Csak az arannyal bevont kvarckristály felületére leválasztott Berlini kék-réteg nanogravimetriás vizsgálata mutatja ki a vékony réteg tömegváltozását, ami azt bizonyítja, hogy a redukciós ciklusban az elektrolitoldatból ellenionok épülnek be a szilárd fázisba, melyek az oxidációs ciklus során távoznak [3, 4] (2. ábra).



2. ábra. Aranyfelületre elektrokémiai úton leválasztott vas(III)-hexacianoferrát (II) vékony réteg ciklikus voltammetriával kombinált kvarckristály-nanogravimetriás vizsgálata 0,5 mol/dm³ koncentrációjú kálium-szulfát-oldatban. A kvarckristály saját-frekvenciájának változása bizonyítja a felületi tömegváltozást. A redukciós fázisban káliumionok épülnek be a szilárd fázisba (pontosított vonal kék nyíllal), míg az oxidációs ciklusban a káliumionok távoznak (pontosított vonal piros nyíllal). Az ábrán összehasonlításként az alkalmazott elektrolitoldatok által okozott tömegváltozás is fel van tüntetve

A redukciós ciklusban a központi ion pozitív töltésének csökkenése mellett a ligandumszféra negatív töltése változatlan marad, ezért a kiegyenlítődség érdekében a töltésfelesleg kationokat vonz a rétegbe. Az oxidációs ciklusban ennek ellenkezője történik: A központi ionok pozitív töltésének növekedése a ligandumszféra változatlansága miatt most kitaszítja a korábban belépő (pozitív töltésű) ellenionokat, ezáltal a töltés újra kiegyenlítetté válik. A redoxilépéseket a ligandumszféra változatlansága miatt töltéskiegyenlítő iontranszport követi, aminek a hajtóereje a töltésfelesleg által kiváltott elektrosztatikus vonzás, illetve taszítás.

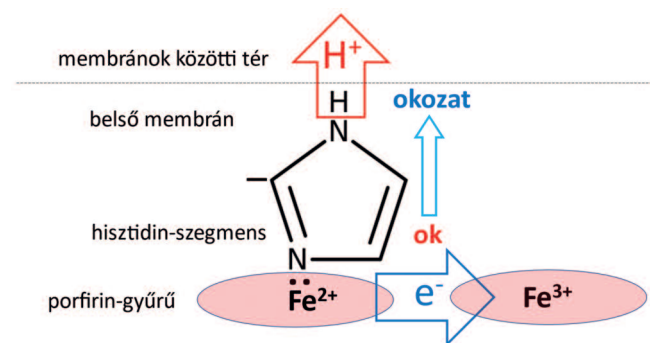
A citokrómok mint biológiai redoxi félvezetők

A multikomplexeknél szerzett tapasztalatok azért hasznosíthatók a citokrómok esetében is, mert a szerkezet és a betöltött funkció között nagy a hasonlóság. A belső membrán a folyadékkristályos szerkezet miatt szilárd vékony rétegnek tekinthető, ami ugyanúgy a redoxicentrumok helyhez kötöttségével jár, mint a hexacianát-rétegek esetében. A citokrómok éppúgy hatos koordinációjú, nagy stabilitású komplexek, mint a hexacianátok. A központi vasionok töltése ugyanúgy reverzibilisen változik 2+ és 3+ között,

mint hexacianátokban. A citokrómok éppúgy readoxireakciók láncával vezetik az elektronokat, mint például a Berlini kék vékony rétege. Ezért az elektroneutralitás szintén nem az oldatokra, hanem a szilárd vékony rétegekre jellemzően valósul meg.

A citokrómokban azonban az egyhangú cianidionok helyett változatos a ligandumszféra. A porfirinyűrű nitrogénjei mellett a fehérje két aminosavszegmense adja a másik két ligandumot. A citokróm-oxidáz Hem₃ egysége például két imidazol jellegű nitrogénligandummal köt (hisztidin 61 és hisztidin 378) [5]. Ez a változatosság nemcsak a citokrómok redoxipotenciáljának „hangolhatóságát” eredményezi, hanem a töltéskiegyenlítődségben is meghatározó szerepet játszik. A citokrómok hisztidin N-H csoportjának köszönhető, hogy a redoxireakció során a ligandumszféra töltése – a cianidionokkal ellentétben – megváltozhat. Ezért a töltéskiegyenlítődség ellenionok vándorlása nélkül is bekövetkezik. Az aktív centrumok redoxiváltozását a citokrómok esetében savbázis reakcióval történő töltéskiegyenlítődség követi. Az oxidációs lépés során a központi ion pozitív töltésének növekedését – egy proton „letaszításával”, de leginkább átadásával, a ligandumok negatív töltésének növekedése kompenzálja.

Az aromás szerkezet miatt az imidazolgyűrű N-H csoportja eleve savas tulajdonságú. Az elektronpádonor nitrogénatom Fe²⁺-ionokkal történő komplexképzése miatt a gyűrű elektronelátottsága csökken, ezért az N-H csoport savassága nő. A központi ion oxidációjakor az indukált effektus és vele a savasság tovább fokozódik (3. ábra). A sáverősség oxidáció által kiváltott növekedése válik a „protonpumpa” hajtóerejévé, ami nagyobb „hidrogénion-koncentrációjú” tér felé is képes távozásra készíteni a protonokat.



3. ábra. A töltésszétválás érzékeltetése a citokróm aktív centrumában az oxidációs elemi lépés során. A központi ion oxidációjakor a Fe³⁺-ionok megnövekedett elektronpárvonzása miatt a hisztidinligandum N-H csoportjának savassága, protonálókészsége fokozódik

A jelenség megfelel az Oláh György által alkalmazott „mágikussav-effektus” biológiai megvalósulásának: A fluorkénsav azért válik „szupersavvá”, mert az antimon-pentafluorid a fluoridionnal egy elektronpárt vonz el a központi kénatomtól. A hatás tolvaterjedésével az O-H kötés még polárisabbá válik. A Lewis-sav fokozza a Brönsted-sav erejét: H⁺ → OSO₂ → F⁺ → SbF₅. A Fe²⁺-ion elektronvesztése szintén fokozza a Lewis-sav erősséget, ami által a Brönsted-sav is erősebbé válik.

A fizikai kémiai folyamatok mellett ekkor jut szerephez a biológia, a mitokondrium speciális felépítése: a kettős membrán tér-elválasztása és az enzimek elhelyezkedése. Mivel a belső membrán enzimkomplexei (a II. komplex kivételével) a membrán közötti tér felé helyezkednek el, a kitaszított protonok csak a „zárt térbe” távozhatnak. Ezáltal növekedhet a „hidrogénion-koncent-



ráció”, ami valójában az oxóniumionok, de leginkább a hidratált oxóniumionok koncentrációjának felel meg.

A redukciós lépés során hasonló a helyzet, csak ekkor a központi ion pozitív töltésének csökkenése miatt az induktív effektus csökken, valamint a negatív töltés marad feleslegben. A hisztidinszegmens anionjának bázikussága növekszik, és a fokozott elektrosztatikus vonzás eredményeképpen protonot vonz magához. Csakhogy nem a membránközi térbe „taszított” protonok közül, hanem például a citokróm-oxidáz esetében felfedezett D és K protoncsatornának mint „protonszivattyúk” segítségével a mátrix felől [6].

Az ubikinon-ubikinol átalakulás protonpumpa-járuléka

Az ubikinon-ubikinol reverzibilis átalakulása kettős szerepet tölt be: Egyrészt a NADH.H-ubikinon oxidoreduktáz (I.) enzimkomplex tagja a protonpumpa sorozatnak. Másrészt összeköti a citrátciklus elektronpártranszport-láncát az oxigénmolekulák citokrómok által támogatott redukciójának egy elektronos lépésével.

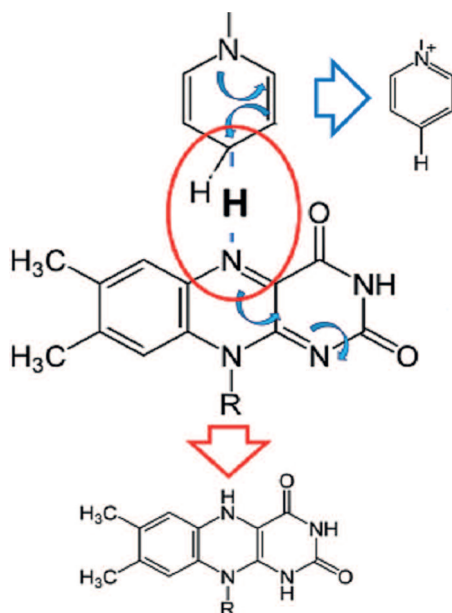
Az ubikinol molekulának azért kedvező az oxigénmolekulák párosítatlan elektronjai által igényelt mechanizmus, mert az egy elektron leadásával keletkező szemikínonyok még aromás marad, és párosítatlan elektronja konjugációs kölcsönhatásba lép a delokalizált elektronszerkezettel. Ezáltal a többlettöltés megoszlik [7]. A kinoidális szerkezet csak a második elektron elvesztése után alakul ki, és a molekula karbokationok által segített elektronpár-átrendeződéssel stabilizálódik. A második elektron elvesztése után már nincs lehetőség a többlettöltés megosztására, és az amúgy is nagy elektronegativitásával, ráadásul elektronhiánnyal váló oxigénatom egy elektronpár elvonásával megbontja az aromás szerkezetet. A második elektron eltávolítása ezért több energiát igényel. Minden bizonnyal ez indokolja a növekvő redoxipotenciálú redoxicentrumok, a vas-kén fehérjék, valamint a citokróm b és c₁ szükségességét [8, 9].

Az ubikinon redukcióját a NADH.H hidridion, illetve elektronpár átvitele indítja el. Annak ellenére, hogy a reakciót a NADH.H egy lépésben, közvetlenül is megoldhatná, és az ubikinon a hidridiont fogadhatná, a folyamat több lépésben, a FAD és a vas-kén fehérjék hozzájárulásával történik [8, 9].

A reakciócentrumok elhelyezkedésének sorrendje és funkciója ugyan ismert, de a molekuláris mechanizmus ok-okozati összefüggésének feltárása még továbbfejlesztést igényel.

Ilyen például a FAD átalakulásának mechanizmusa. Ha a FAD-ot a NADH.H redukálja [8, 9] hidridion, vagyis elektronpár átvitelével [10], akkor a redukció során nem keletkezhet belőle szemikínon-gyökénion [8]. Mivel a hidridion vizes közegben éppúgy nem jelenhet meg, mint az izocitromsav dehidrogéneződése során, ezért átvitelében újból szerepet játszhat a kételektronos-háromcentrumos kötés. A proton ebben az esetben is hidat képez a NADH.H szénatomja és a FAD nitrogénatomja között az elektronpár átköltözéséhez, és átlépése után már a nitrogénatomhoz köti a protont (4. ábra). Az érkező elektronpár taszítása elindítja az szinkron elektronpár-átrendeződést, melynek következtében kialakul a redukált FADH.H forma és a NAD aromás szerkezete (4. ábra).

A FADH.H-ről – az átmeneti szemikínonállapot kialakulásának lehetősége miatt – már egyesével haladnak tovább az elektronok a vas-kén centrumokon keresztül az ubikinon felé. A több redoxicentrum mögött rejlő lehetőség elemzésére – terjedelmi okok



4. ábra. A NADH.H hidridion átvitele a FAD-ra egy kételektronos-háromcentrumos kötés segítségével játszódhat le. A proton hidat képez a NAD szénatomja és a FAD nitrogénatomja között az elektronpár átköltözéséhez. Az érkező elektronpár taszítása indítja el a két molekulára kiterjedő szinkron elektronpár-átrendeződést

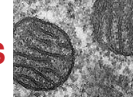
miatt – itt nem térhetünk ki, de ha lehetséges, még egy következő fejezetben visszatérnék a több centrum funkciójára a vas-kén fehérjék és a citokróm-oxidáz esetében.

A 2Fe–2S vagy 4Fe–4S klasztereket tartalmazó vas-kén fehérjék éppúgy egyesével, reverzibilis lépésekkel továbbítják az elektronokat, mint a citokrómok. A vascentrumok oxidációs állapota szintén +2 és +3 között változik. Ezért ugyanúgy szükségszerű a töltéskiegyenlítő kísérő folyamat, mint a citokrómok esetében. A töltésváltozás kompenzációja történhet ellenionokkal, de a vas-kén fehérjék egyik fontos funkciója, hogy részei a protonpumpasorozatnak [8, 9]. Ezek a centrumok azonban – a citokrómokkal ellentétben – nem rendelkeznek disszociálható ligandummal. Ezért felmerül a kérdés, hogy ennek ellenére van-e lehetőség protonok leadására.

A 4Fe–4S vas-kén fehérjékben a vascentrumok töltését a „szervetlen kénatomok” (szulfidionok) mellett a fehérje négy cisztein-oldallánca kompenzálja. A ciszteinszegmens peptidkötésének N–H csoportjában a hidrogén eleve poláris kötéssel kapcsolódik. A vas(II)ion oxidációja során az induktív effektus még éppen elérhető távolságban fejtheti ki a polaritást, és ezáltal a sávoerősítő fokozó hatását. Ezért az erősödő Lewis-sav éppúgy fokozhatja a Brösted-sav (az N–H csoport) protonáló erejét, mint a citokrómpumpák esetében.

Az elektrontranszport-lánc következménylánc

A membránok közötti tér elsavasodása egyszerre több következménnyel jár. Azáltal, hogy a membrán két oldalán megváltozik a koncentráció, a membrán külső és belső felszíne is különbözővé válik. A mátrix felől, neutrális közegben a diszperziós erők mellett a kalciumionok és a disszociált állapotú foszfocsoportok között kialakuló ionos jellegű elektrosztatikus erők, „sóhidak” stabilizálják a membránt. A kalciumionok egy része tehát a foszfocsoportok által kötött állapotba kerül. A membránok közötti sa-

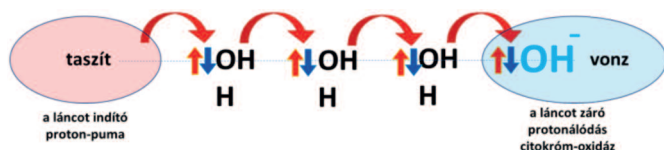


vas térben viszont – a zeolitok és a műgyanták ioncseréjéhez hasonlóan – a kalciumionok hidrogénionokra „cserélődhetnek”, és a „sóhid” helyett a hidrogénkötés veszi át a stabilizáló szerepet. Vagyis a protonok „feldúsulása” valóban megtörténik, de nem kompenzálatlanul, kondenzátor módjára, hanem a hidrogénionok membránba történő beépülésével. Ezáltal ugyanannak a kettős membránnak a belső és külső felszíne különböző szerkezetűvé, tulajdonságúvá, sőt funkciójúvá válik.

Az elsavasodó membránfelszín funkciója

A kardiolipinben gazdag membránban [11] a protonált foszfo csoportok között (szükség esetén vízmolekulák közvetítésével) hosszú távú hidrogénkötés-hálózat alakulhat ki. Véleményem szerint ez a szerkezet – a hidrogénüzemű üzemanyagcella polielektrolit Nafion membránjához hasonlóan – alkalmas a protonok membrán felszínén történő, célirányos transzportjára az ATP-szintázhoz és annak protonvezető csatornáján keresztül a citokrom-oxidázhoz.

Az elektrokémiában közismert, hogy a savas oldatok vezetése a prototróp vezetés miatt nagyobb, mint a sóoldatoké [12], mert a proton az asszociátumokon belül hidrogénkötés-láncban vándorol. A membrán felszínének hidrogénkötés-hálózatában szintén prototróp vezetés alakulhat ki. Mivel az összes sav-bázis reakció vagy a víz autoprotolízise hidrogénkötésen keresztül játszódik le, a protonvezetés elemi lépései éppúgy modellezhetők sav-bázis reakciók láncával, mint a vízmolekulák között lejátszódó prototróp vezetés (5. ábra). Így a redoxi reakciólánc sav-bázis reakciólánccal párosul, ami végül a foszfátionok és az oxigénből képződő ionok protonálódásához vezet.



5. ábra. A protonok transzportja a sav-bázis reakcióláncban. A láncot protonálással a protonpumpa kezdi és a protonálódás fejezi be. A protonok célirányos vándorlását a záró, irreverzibilis lépés kezdeményezi. Az oxigénből keletkező hidroxidion átvonz egy protont a szomszédos pillératomtól. A keletkező hidroxidion „láncvivővé” válik, mert másik protont vonz el a következő láncközi vízmolekuláról és így tovább

Amíg az elektrontranszportot az oxigénmolekulák elektronfelvétele, a protonok folyamatos és célirányos vándorlását a záró, irreverzibilis lépés kezdeményezi. A sav-bázis reakciólánc végén például az oxigénből keletkező hidroxidion elektrosztatikusan át-

vonz egy protont a szomszédos pillératomtól. Vízmolekulák láncával modellezve, a keletkező hidroxidion „láncvivővé” válik, mert másik protont vonz el a következő láncközi vízmolekuláról (vagy protonált foszfocsoportról) és így tovább (5. ábra). Mivel a közbenső „láncvivő” lépések reverzibilisek, a funkciós csoportok, molekulák folyamatos protonugrások következtében át- és visszaalakulnak.

Az elektrosztatikus vonzóerő tehát molekuláról molekulára haladva újjászületik. Mitchell koncentrációs eleme helyett az így kialakuló, atomi szintű erőcentrum válik láncközi „protonmotoros” erővé, és határozza meg pontról pontra a protonvándorlás irányát. Ezért fontos a hidrogénkötés-hálózat sértetlensége, folytonossága. A membránfelszín kristályrétegszerű rendezettsége miatt ráadásul a protonok átvezetése szinkron módon is bekövetkezhet. A protonvezető rétegben az elektronpárokat hordozó „pillératomok” helyben maradnak, és közöttük csak a „hídprotonok” mozdulnak el egyszerre, ugyanabba az irányba, a protonálódás helyszíné felé. Véleményem szerint a hosszú távú rendezettség miatt ez a mechanizmus még a vizes oldatok prototróp vezetésénél is gyorsabb, ami az eredő reakciósebesség szempontjából fontos tényező. Feltételezem, hogy az összes felfedezett vagy felfedezésre váró protonvezető csatornában szinkron prototróp vezetéssel történik a protonok transzportja a protonálódás irányába (pl. a citokrom-oxidáz protoncsatornáiban [6] és az ATP-szintáz enzimkomplex F_0 protonvezető csatornájában [8]). Az elektrontranszport-lánc által indukált protontranszportra, halmozott következményként – a következő fejezetben részletezett – élettani funkciók épülnek.

IRODALOM

- [1] P. Mitchell: David Keilin's respiratory chain concept and its chemiosmotic consequences, Nobel Lecture, 8 December, 1978.
- [2] A. M. Morelli, S. Ravera, D. Calzia, I. Panfili: An update of the chemiosmotic theory as suggested by possible proton currents inside the coupling membrane. *Open Biology*, 10 April, 2019.
- [3] Róka A.: Ittrium-hexacianoferrát és ruténium-triklorid – polipirrol nanokompozit felületi rétegek kialakítása és vizsgálata elektrokémiai piezoelektromos nanogravimetriával, PhD-értekezés, Budapest, 2010. Témavezető: Prof. Dr. Inzelt György, ELTE, Elektrokémiai és Elektroanalitikai Laboratórium.
- [4] A. Róka, I. Varga, G. Inzelt: Electrodeposition and dissolution of yttrium-hexacyanoferrate layers. *Electrochimica Acta* (2006) 51, 6243-6250.
- [5] Cytochrome oxidase Chemistry Libre text. Letöltés: 2021. 01. 25.
- [6] V. Sharma, M. Wikström: The role of the K-channel and the active-site tyrosine in the catalytic mechanism of cytochrome c oxidase. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Bioenergetics* (2016), 1857/8, 1111–1115. Letöltve: 2021. 02. 13.
- [7] Ruff F., Csizmadia G. L.: Szerves reakciómechanizmusok vizsgálata. Nemzeti Tankönyvkiadó Rt. Budapest, 2000.
- [8] L. Stryer: Biochemistry. W. H. Freeman and Company, 1995.
- [9] Simonné Dr. Sarkadi L.: Biokémia, Terminális oxidáció, ppt. Letöltve: 2021. 01. 31.
- [10] Kajtár M.: A szénhidrátok szerepe az élő szervezetben, Bruckner Gy.: Szerves kémia 1–2. átdolgozott, ötödik kiadás. Tankönyvkiadó, Budapest, 1974, 1166–1247.
- [11] Nyitrai L., Pál G.: A biokémia és a molekuláris biológia alapjai, e-tankönyv, 2013.
- [12] Inzelt Gy.: Az elektrokémia korszerű elmélete és módszerei I–II. Nemzeti Tankönyvkiadó Rt. Budapest, 1990.

Úrtudományi képzés indul

A Magyar Űrstratégia célkitűzéseivel összhangban 17 magyar egyetem konzorciumi megállapodást kötött, hogy a UniSpace program keretében négy önálló, de összehangolt és koordinált űrtudományi szakirányú továbbképzést indítson.

A szakirányú továbbképzés során az űrtudomány és űrtechnológia, az űr-élettan és -táplálkozás, valamint a nemzetközi jog és az űrgazdaság alapjaival foglalkoznak a hallgatók. A képzésre műszaki, természettudomány vagy informatika területen szerzett, legalább BSc-diplomával lehetett jelentkezni.





Braun Tibor utolsó köszöntése



Braun Tibor 1932-ben a bánáti (Románia) Lugoson született. Vegyész diplomát Kolozsváron szerzett 1954-ben. Előbb Marosvásárhelyen dolgozik vegyészként, majd tudományos kutató Bukarestben, az Atomfizikai Intézetben. 1963-ban Magyarországra költözik, és Budapesten az ELTE adjunktusa lesz. Kémikusi pályája itt teljeseedik ki: radioanalitikával kezd foglalkozni, majd érdeklődése a fullerénkémia felé fordul. Az egyetemi ranglétrán is halad: 1963-ban egyetemi docens, 1968-tól egyetemi tanár. 1980-ban a tudományok doktora fokozatot is megszerzi. 2006-ban a Kolozsvári Műszaki Egyetem tiszteletbeli doktorává fogadják.

Tudományos pályája tudományometriai számokban is figyelemre méltó: az MTMT szerint 277 közleményben számolt be tudományos eredményeiről, 7 könyvet jelentetett meg, négynek szerzője, háromnak szerkesztője. Munkáira közel 4000 független hivatkozást kapott. Hirsch-indexe 33. Három folyóiratot is indított és szerkesztett éveken át, az egyiket a nukleáris analitika, a másikat a szcientometria, a harmadikat a fullerének kémiaja területén.

Nagyon jelentős a szakmai/tudományos ismeretterjesztő tevékenysége. Nagyon sokat tett és tesz a kémia népszerűsítése, presztízse növelése, visszanyerése érdekében. Különös figyelmet fordít arra, hogy a fiatalok, az iskolások figyelmét a természettudományok, a kémia felé irányítsa, írásaival felhívja figyelmüket a természet jelenségeiben levő érdekességekre és felkeltse érdeklődésüket a kémia mint jövődő szakmájuk iránt. A tudomány népszerűsítése iránti elkötelezettségét mi sem bizonyítja jobban, mint az utóbbi években megjelent növekvő számú cikke az ilyen irányú lapokban, a Természet Világában, az Élet és Tudományban és a Magyar Kémikusok Lapjában.

Megtiszteltetésnek vesszük, hogy lapunkban eddig közel 100 közleménye jelent meg. Kiváló „orra” van a témaválasztáshoz. Mindig friss, az érdeklődés előterében álló témát dolgoz fel írásaiban, igen olvasmányosan, érdekesítő stílusban. Ennek is köszönhető, hogy 2000 óta, mióta megszavaztatjuk olvasóinkat az év legjobb cikkéről, 13 cikke volt a legjobb három között. Cikkei közül több gyűjteményes kötetekben is megjelent.

A nevezetes évforduló alkalmából volt és mai munkatársai, barátai és olvasói nevében köszöntöttük volna a 90 éves Braun Tibort – de közvetlenül a lap nyomdába kerülése előtt értesültünk halálhíréről. Következő lapszámunkban hosszabban megemlékezünk róla. Ezután csak azokat az írásait adhatjuk közre, amelyeket az előző hónapokban jutottat el szerkesztőségünkbe.

KT

Braun Tibor

■ ELTE, Kémiai Intézet, MTA Könyvtár és Információs Központ | dr.braun.tibor@gmail.com

Rövid betekintés az ősi római gasztronómiába Lucullustól Apiciusig

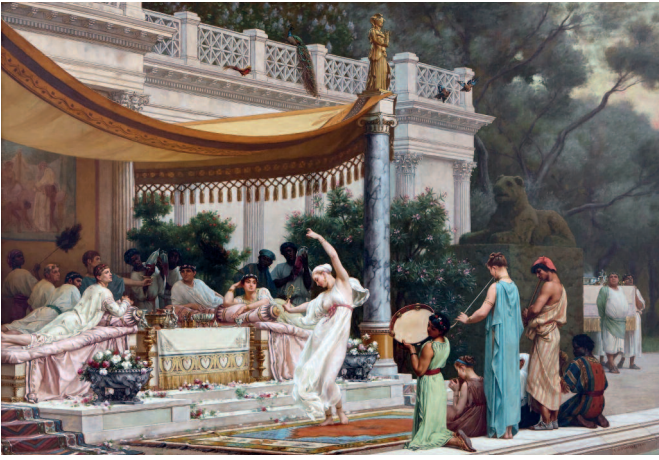
Bár a gasztronómiáról meglehetősen gyakran és aránylag sokat publikáltunk, itt egy nagyon egyszerű és rövid definíciót ismétlünk meg: „a gasztronómia a kultúra és az étel közötti összefüggés tudománya, vagy művészete.” Jean Anthelme Brillat-Savarin szerint a gasztronómia mindannak intelligens ismerete, ami összefügg a táplálkozással.

Most arról szeretnénk írni, amit még nem említettünk előző írásainkban, mert a messzi távolra vonatkozik. Annak ellenére, hogy Lucius Licinius Lucullus (Kr. e. 118–56) római hadvezér (tábornok) már több mint 2000 éve nem él, neve még mindig világszerte ismert a lucullusi lakomák, a fényűző étkezések, *ínyenc* és különleges fogások révén. Lucullusra mindenki *gourmet*-ként (ínyencként) emlékezik, de ő nem csak az volt. Életrajzírói igazi római arisztokrataként, értelmiségiként jellemzik (tökéletesen beszélt két nyelven: latinul és görögül) amellet, hogy filozófusként

és esztétaként is elismerték. Mint azonban említettük, nevét különösképpen jellegzetes étkezéseivel és ingyencségével társították.

Lucullus gazdag politikuscsaládba született, nagyapja konzulként tevékenykedett. Nemcsak ebből az okból, de élete végéig nagyon közel állt a római arisztokrácia értékeihez. Nagyon alapos képzést kapott, amit eredményesen és hasznosan használt. Szónok, sőt költő is volt, verseiben gyakran hozta össze a katonai témákat és a poézist. Esztétaként számos szépen díszített villát épített rendkívül vonzó kertekkel. Talán érdemes szót ejteni katonai sikereiről is. Röviden annyit jegyzünk meg, hogy több háborúja is volt a nagy Pontusi Mithridatésszal, és azok mindegyikét megnyerte.

Most azonban visszatérnénk arra, ami Lucullus gasztronómiai érdeklődésére vonatkozott, miután katonai pályafutását befejezte. Egy későbbi korra utalva felvetjük a Tiberius császár (Kr. e. 14–29) idejében élt Marcus Gavius Apicius nevét, aki szintén római



Gustave Boulenger: Nyári lakoma Lucullus házában (1877)

ínyencként az antikvitás klasszikus – azóta is világhírű – szakácskönyvének (*De re coquinaria* – *A konyha művészete*) szerzője volt. Apicius kivételes ízléséről volt híres és arról, hogy hatalmas összegeket költött élelmiszerekre, amelyekből ígync szakácsként mindenkit csodálatba ejtő ételeket hozott létre.

Hogy a fentiek mit jelentenek, illetve mit jelentettek, arról csak röviden teszünk említést. Emlékek vannak például azokról a mártásokról, amelyekben mindig otthonra talált a bors, a menta, a kömény, a zeller, a méz, az ecet, a bor, a garum szósz (napon erjesztett apró halakból). Ezekből mindenre és mindenhez tettek, miután megfelelően keverték a savanyú, csípős, sós, kesernyős ízekkel, amikor valamilyen ételfogás vonzerejét igyekeztek emelni. Apicius receptjeinek jellemzője többek között a változatosságuk, sokoldalúságuk és ízgazdagságuk, céljuk az ételleket fogyasztók elragadtatása. Receptjei rendkívül sok alapanyagot is magukba foglaltak, amelyekben szembetűnően jelentkezett a ritkaságok iránti vonzalom is. Persze itt nem sorolhatjuk ezeket részletesen fel, de megemlíthetünk néhányat, például: galamb, strucc, daru, flamingó, fogoly, páva, fácán; sertés, marha, juh, vaddisznó, őz, gödölye, nyúl, bárány; tengeri sünn, rája, langusza, angolna, kalmár, tintahal, osztriga, polip, kagylók. Apicius receptjei rendkívül sok egzotikumot is tartalmaztak. Gyakori volt például a pácolt papagájnyelv vagy a sertéshússal töltött állatka, a pele. Még egy példa: borsot korianderrel, kevés mézzel és húslevessel keverték, amit borral egészítettek ki, és latin szóval *tractának* nevezték. Talán innen ered a magyar *trakta* (bőséges vendéglés) kifejezés. Nem szólunk itt külön az ünnepi étkezésekről, sőt az ősi római bankettekről sem, de futólag megemlíthetjük a parázson pirított állatherét, amiről nem ritkán rajongással írt Apicius. Apró halakat erjesztettek (garum), fűszerekkel mártássá pépesítették, és elragadtatással fogyasztották.

Különleges gasztronómiai érdeklődése folytán Lucullusról ínyencként számos történet – részben legenda – maradt az utókorra, amelyeket szóban, de írásban is terjesztettek. Például *Plutarkhosz Párhuzamos életrajzok* (Lucullus, 38–41) c. művében mesél ilyen történeteket, megemlítve, hogy *Crassus* és *Pompeius*, tábornoktársai gyakran provokálták és gúnyolták Lucullust, amiért annyira odaadóan hódolt étrendi extravaganciáinak. Egy másik történet szerint *Cicero* és *Pompeius* megkérték Lucullust, hogy hívja meg őket és szolgáltassa fel nekik ugyanazokat az ételfogásokat, amiket ő aznap kívánt vacsorázni. Lucullus ezt elfogadta, de javasolta a vacsora másnapra halasztását. Ezt azonban *Cicero*ék visszautasították, sőt még azt is kérték, hogy a vacsorát anélkül tálalják, hogy *Lucullus* előzőleg megállapodott volna szakács rabszolgájával a fogyasztandó fogásokról és az egyik Lu-

cullus-villa több ebédlője közül a vacsora az *Apolló* nevűben valósuljon meg. Ehhez hozzá kell tenni, mármint az ebédlőkhöz, hogy Lucullustól a szakácsok (rabszolgák) rendszeres képzést kaptak arról, hogy mit, mikor és melyik ebédlőben szolgálhatnak fel. Csak érdekességként említhetjük, hogy az *Apolló* ebédlőben felállított vacsorához felhasznált nyersanyagok körülbelül 50 000 drachmába kerültek (mai ár: kb. 90 000 dollár). A vacsoránál a meghívottak (*Cicero* és *Pompeius*) attól is el voltak ragadtatva, hogy a személyzet milyen gyorsan készítette el és szolgáltatta fel a fogásokat. Érdemes megemlíteni, hogy Lucullus étkezéseinek az ételeket elegáns porcelánedényekben tálták.

Ahogy írtuk, a rómaiak nagyon sokféle különlegességet fogyasztottak, és Apicius szakácskönyvében sok részlet jelent meg ezekről. Feltehetjük magunknak a kérdést, hogy az Apicius-könyvben melyik étel receptje szerepelt a leggyakrabban. Ehhez érdekességként egy gondolat kísérletet kell végezzünk, ami könnyen megvalósítható. *G. K. Zipf*, a Harvard Egyetem professzora bebizonyította, hogy ha egy elég hosszú szöveg szavait összeszámoljuk, és előfordulási gyakoriságuk sorrendjében rangsorba rendezzük őket, akkor a gyakoriság fordítottan arányos a ranggal. Ezt *James*



Apicius szakácskönyvének
18. századi
kiadása

Joyce Ulysses című könyvében mutatta ki Zipf, de később a *Bibliában* és sok más írásban is bizonyították helyességét. A fentebb említett gondolat kísérletben ugyanezt elvégezhetjük *A konyha művészetével* is. Valószínűnek tartjuk, hogy abban a leggyakoribb szónak a *garum*nak kellett lennie. A garumot a rómaiak nemcsak szószként, de a legfontosabb ételízesítésként is használták. Esetenként nagyon változatos fűszereket is hozzáadtak, gazdagítva az ízt. Nyugodtan állíthatjuk azt is, hogy a garum a római birodalom legkedveltebb ételadaleka volt, szinte mindenhez használták, például zöldségekhez, salátanövényekhez, húsokhoz, sőt furcsa társulásként desszertekhez is. Természetesen a garum megjelent *Lucullus* lakomáin, és bőségesen fogyasztották a kor bankettjein is.

Rövid betekintésünk végén még egy kis történet *Plutarkhosz* nyomán: Amikor Lucullus egyik bankettjén a vendégek valamilyen okból nem jelentek meg villájában, a felszolgáló rabszolga megkérdezte, hogy az elkészített hosszú és változatos ételsorból mit szolgáljon fel, miközben Lucullus egyedül evett. Azóta is elhíresült válasza: *a mai estén Lucullus Lucullusszal vacsorázik*.

Érdekességként még talán megemlíthetjük, hogy a Lucullus utáni évezredekben a fentebb említett garum használata lassan visszaszorult, és például az olasz konyhában később a szardellaszósz vezették be.

IRODALOM

- Almudena Villegas Becerril, *Culinary Aspects of Ancient Rome: Ars Cibalia*. Cambridge Scholars Publishing, 2021.
Vida Andrea, *Egy kétezer éves szakácskönyv: Apicius, De re coquinaria*. University of Szeged, 1986.
Marvin Tameanko, *Lucullus, a Second Best Hero of the Roman Republic*. The Journal of Ancient Numismatic (2009) 3/1.
K. Keaveney, *Lucullus a Live*. Georgias Press, 2013.



TÚL A KÉMIÁN

Ősi maja naptár

A Guatemalában, San Bartolomo közelében lévő, 30 méter magas Las Pinturas maja piramis tudományos kutatása látványos eredményre vezetett a közelmúltban. Az évszázadok során fokozatosan kibővített épületben egy olyan maja naptárra bukkantak, amely i. e. 300 és 200 között készült, vagyis mintegy 150 évvel idősebb az eddig ismert legkorábbi leleteknél. A vele egykorú szövegmaradványokkal együtt megtalált másik részlet az épület-együttes egy korai változatának a falán volt, amelyet később maguk a maják romboltak le egy bővítéskor. Ábrái a tzolkin nevű naptárrendszert mutatják, amely 260 napos ciklusokat használ: elsősorban rituális célokat szolgálhatott.

Sci. Adv. 8, eabl9290. (2022)



Rovar-DNS a teában

A környezeti DNS vizsgálata egyre gyakrabban fontos bizonyíték annak eldöntésében, milyen élőlények népesítenek be egy adott területet. Ilyen kimutatásokat sikerrel végeztek egy elég meglepő mintában, a száraz teafűben is: egyetlen filterben rovarfajok számainak nyomát sikerült megtalálni. Korábbi kísérleti munkából már világossá vált, hogy a sötétben tárolt, száraz növényi részek



ideális környezetet teremtenek a DNS-molekulák fennmaradásához. A kifejlesztett analízismódszernek nagy szerepe lehet az élővilág korábbi állapotának vizsgálatában is, mert jó pár herbáriumban őriznek pontosan ismert forrású és korú növényi részeket.

Biol. Lett. 18, 20220091. (2022)

Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt

Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lente1206@gmail.com.

A rovatszerkesztő korábbi írásait is tartalmazó blog elérhető a következő internet-oldalon: http://lente.ttk.pte.hu/ScienceBits/index_magyar.html

CENTENÁRIUM



Herr Prof. Dr. Victor Moritz Goldschmidt:
Der Stoffwechsel der Erde
*Zeitschrift für Elektrochemie und
angewandte physikalische Chemie* Vol.
28, pp. 411–421. (1922. október 1.)

Victor Moritz Goldschmidt (1888–1947)

norvég ásványszakértő volt, a modern geokémia és kristály-kémia atyjának tekintik. Röntgenkristallográfiai módszerekkel számos ásványt tanulmányozott, ennek alapján atomsugárérték-skálát határozott meg, s kidolgozta Gibbs fázisszabályának ásványtani változatát.

Molekuláris
dinoszaurusz-hőmérő

Sokáig azt gondolta a tudomány, hogy a dinoszauruszok mind hidegvérűek voltak. Ezt a véleményt az utóbbi fél évszázadban melegvérű, madárszerű lények képe váltotta fel. Új kutatások még tovább finomították a képet annak a tanulmányozásával, hogy a

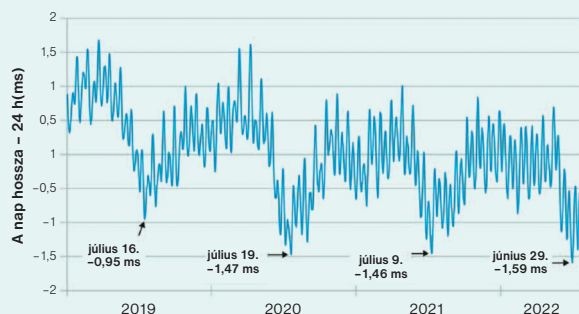


fosszilis maradványokban fennmaradt molekulák mit árulnak el az egyes élőlények anyagcsere-sebességéről. Elsősorban a kén- és nitrogéntartalmú biomolekulák keresztkapcsolási reakcióinak termékei bizonyultak informatívnak, ezek előfordulási gyakoriságának korrelációját a testhőmérséklettel ma élő állatokon figyelték meg. A hosszú nyakú *Diplodocus* például egyértelműen melegvérűnek bizonyult, a *Tyrannosaurus rex* az adatok szerint inkább lehetett hatalmas testű, de lassúcska dögevő, mint hatékony vadász. A növényevő *Stegosaurus* és *Triceratops* pedig elsősorban a mai gyíkokra és kígyókra emlékeztető sajátságokat mutatott.

Nature 606, 522. (2022)

APRÓSÁG

2022. június 29. a pontos időmérések kezdete óta a legrövidebb nap volt a történelemben: a Föld tengely körüli fordulata ekkor 1,59 ms-mal volt gyorsabb 24 óránál.

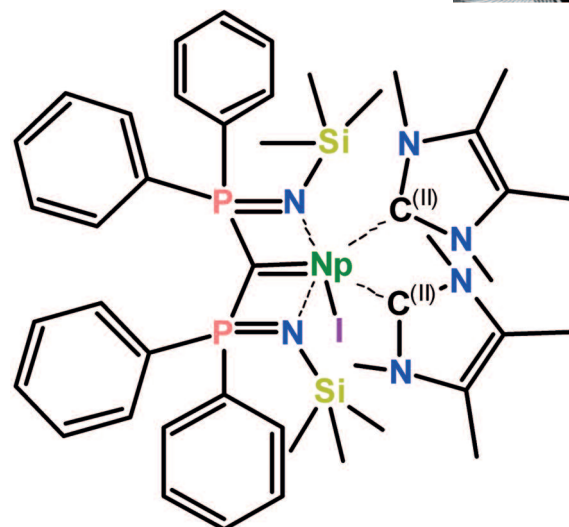




A HÓNAP MOLEKULÁJA

Az ábrán látható neptúniumkomplex ($C_{45}H_{62}IN_6NpP_2Si_2$) egyszerre tartalmaz fém–szén kettős kötést és karbén típusú ligandumot; mindkét saját-ságára ez az első ismert példa a transzurán elemek világában. A vegyület előállítása azért is fontos, mert ilyen típusú anyagokra már rengeteg számítási kémiai eredmény született úgy, hogy kísérletekkel való összehasonlításra kevés lehetőség volt. Az idézett a munkában még két, ehhez hasonló vegyület teljes jellemzéséről is beszámoltak.

J. Am. Chem. Soc. 144, 9764. (2022)



Geohistória ősi cirkon- kristályokból

A Földön az aktív lemeztektonika általában megsemmisíti a régi geológiai folyamatok bizonyítékait. Ezért számít jelenős felfedezésnek, hogy mintegy 3,8 milliárd éve keletkezett cirkonkristályokat ($ZrSiO_4$) sikerült a közelmúltban részletesen megvizsgálni. A mintát Dél-Afrika

egy geológiai szempontból ősi részén találták; az oxigén, illetve az ásványban szennyezésként lévő hafnium izotóp-összetételéből lehetett érdekes új következtetéseket levonni. Máshonnan származó cirkonkristályokkal összevetve az derült ki, hogy az ősi minta nagyjából abban a korban keletkezhetett, amikor a lemeztektonikai folyamatok elkezdődtek a Földön.

AGU Adv. 3, e2021AV000520. (2022)



A fekete halál mai nyomai

A fekete halál az ismert történelem legpusztítóbb pestisjárványa volt, mintegy 200 millió ember életét követelte 1346 és 1353 között. DNS-analízissel sikerült kideríteni, hogy a járvány minden bizonnyal a mai Kirgizisztán területén kezdődött. A Kara-Djigach és Burana temetőknél a kutatóknak feltűnt, hogy 1338-ban és 1339-ben sokkal több síremlék készült, mint más években. A temetőben fellelhető emberi maradványokat még a 19. század végén Szentpétervárra szállították, ezek most elvégzett analízisével meg is találták benne a betegséget okozó *Yersinia pestis* baktérium genetikai nyomait. Ezek azokra a pestistörzsekre emlékeztettek leginkább, amelyek a kirgiz temető körül előforduló rácsálókban mind a mai napig megtalálhatók. *Nature* 606, 718. (2022)

Ritkaföldfémek gyorsan pörkölve

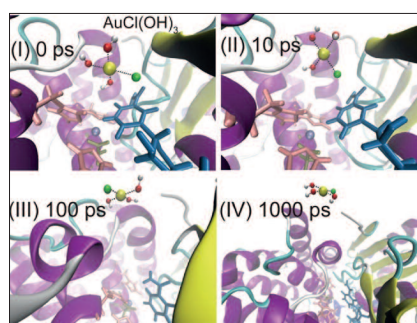
A ritkaföldfémek hozzáférhetősége egyre fontosabb a modern technológiák elterjedéséhez. Ezért lehet nagyon fontos az az új hulladékkezelési módszer, amelyet a közelmúltban dolgoztak ki egy texasi laboratóriumban. Az eljárás lényege, hogy ultragyors elektromos hőközléssel (flash Joule heating, FJH) egyetlen másodperc alatt akár 3000 °C-ig hevítik a feldolgozandó mintát. Ilyen körülmények között a legtöbb ritkaföldfém-vegyület olyan kémiai változásokon megy át, amelyek után sokkal könnyebben oldhatóvá válik akár híg savakban, például 0,1 mol/dm³-es sósavban is. A módszer hasznát szénporon, bauxitmaradványokon, illetve elektronikai hulladékokon is bizonyították, elektromos energiaigénye jelenleg tonnánként 600 kWh.

Sci. Adv. 8, eabm3132. (2022)



Bakteriális aranybányászat

Az aranyércekben fellelhető *Erwinia sp. IMH* baktériumfajból sikerült egy nagyon hasznosnak tűnő, GolR-nak elnevezett arany reduktáz enzimet izolálni. Az Au(III)-vegyületek általában mérgezőek, és az újonnan felfedezett fehérje ez ellen védi a mikrobát



úgy, hogy elemi aranyat állít elő nanorészecskék formájában. Az enzimet kódoló részt a kutatás kiterjesztésével sok más baktérium genomjában is megtalálták, így könnyen elképzelhető, hogy ezek az aranyrögök természetes keletkezésében is szerepet játszanak. A felfedezésnek gazdasági jelentősége lehet az elektronikai hulladékok aranytartalmának visszanyerésében.

JACS Au 2, 1435. (2022)

Válogatás

A Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Tudományok Osztálya 2021. május óta honlapján havi rendszerességgel, közérthető formában mutat be a kémia szakterületét és határterületeit érintő friss és kiemelkedő jelentőségű, már publikált közleményeket (<https://mta.hu/vii-osztaly-a-honap-publikacioja>). A beküldött munkákat egy szakmai bizottság választja ki közzétételre. A bizottság válogatása során a tudományos színvonalon kívül súlyt fektet a kémia életünket minden szinten átszövő szerepének bemutatására az alaptudományoktól az alkalmazásokig. Célunk az, hogy hatékonyabban ismertessük meg a kémia új és érdekes eredményeit a szakemberek és kollégák mellett a szakújságírók, a vállalkozók, a kémia iránt érdeklődő vállalatokkal és üzletemberekkel is. Külön öröm számunkra, hogy a Magyar Kémikusok Lapja is szerepet vállal ebben a munkában a válogatott cikkek méltatásával.

Perczel András osztályelnök, az MTA rendes tagja

László Krisztina, az MTA doktora

Penke Botond, az MTA rendes tagja

Vancsó J. Gyula, az MTA külső tagja

Peter J. Stang, az MTA külső tagja

.....

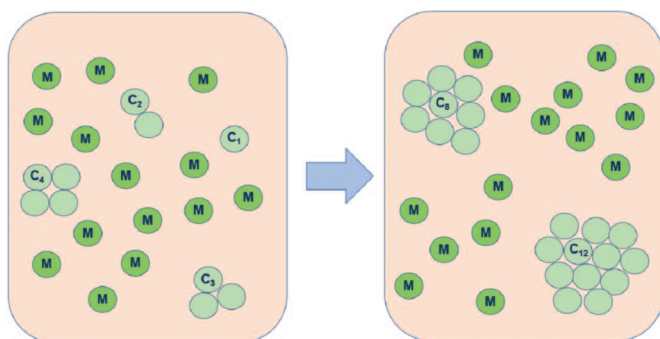
Determinisztikus közelítés
gócképződés-növekedés típusú
nanorészecske-képződési modellekben:
összevetés sztochasztikus szimulációkkal

Chemical Engineering Journal, 2022, 445

Szabó, R¹; Lente, G¹

¹University of Pécs, Department of General and Physical Chemistry, Hungary

A Pécsi Tudományegyetem Matematikai Reakciókinetikai csoportja egy új módszer kidolgozásával megtalálta egy olyan egyenletrendszer korábban nem ismert megoldását, amelynek használata a vegyiparban és a kutatásban egyre nagyobb szerepet betöltő nanorészecskék keletkezésének leírásában alapvető jelentőségű. Az eredmények elősegítik új, előre eltervezett tulajdonságú anyagok előállítását.



Új típusú homogén és heterogén
kationcserélő membránok
stabilitásvizsgálata abiotikus és mikrobiális
elektrokémiai rendszerekben

Journal of Membrane Science, 2022

Ferrofluidok és bio-ferrofluidok:
hátratekintés és előrelépés

Nanoscale, 2022, 13

Koók, L¹; Rosa, F. M, L²; Harnisch, F²; Žitka, J³; Otmar, M³; Nemestóthy, N¹; Bakonyi, P¹; Jörg Kretschmar, J⁴

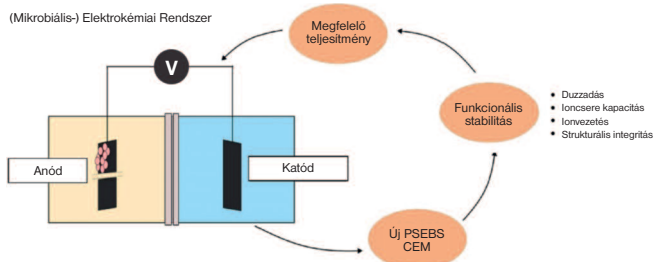
¹Research Group on Bioengineering, Membrane Technology and Energetics, University of Pannonia, Egyetem u. 10, 8200, Veszprém, Hungary

²Helmholtz-Centre for Environmental Research GmbH – UFZ, Department Environmental Microbiology, Permoserstrasse 15, Leipzig, 04318, Germany

³Institute of Macromolecular Chemistry, AS CR, Heyrovsky Sq. 2, 162 06, Prague 6, Czech Republic

⁴DBFZ Deutsches Biomasseforschungszentrum Gemeinnützige GmbH, Biochemical Conversion Department, Torgauer Strasse 116, Leipzig, 04347, Germany

A munkában innovatív kationcserélő membránok (PSEBS SU és CF22R14) stabilitásvizsgálatát végeztük el nagy és kis áramsűrűségű abiotikus és mikrobiális elektrokémiai cellában. Megmutattuk, hogy az áramsűrűség jelentős szerepet játszik a membránok stabilitása szempontjából, valamint hogy a PSEBS SU membrán a kereskedelmi forgalomban lévő referenciával szemben kiemelkedően stabil mindkét rendszerben. Az eredmények hozzájárulhatnak a (mikrobiális) elektrokémiai cellák membrán-központú fejlesztéséhez.



Pt nanorészecskék és kobalt-oxid hordozó határfelületi kölcsönhatása és ennek hatása a $\text{CO}_2 \rightarrow \text{CH}_4$ reakcióra

Applied Surface Science Volume, 2022

Efremova, A¹; I Szent, I¹; J Kiss, J^{1,2}; Szamosvölgyi, A¹; Sági, A¹; K Baán, K¹; Olivi, L³; Varga, G⁴; Fogarassy, Z⁵; Pécz, B³; Kukovecz, A¹; Kónya, Z^{1,2}

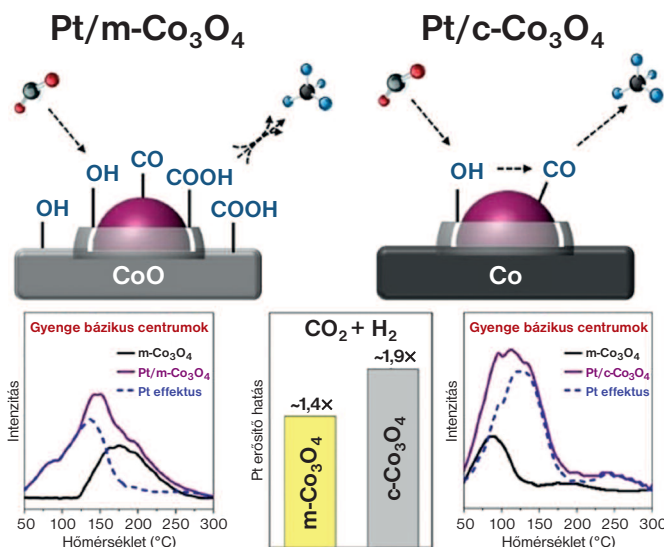
¹ University of Szeged, Interdisciplinary Excellence Centre, Department of Applied and Environmental Chemistry, H-6720, Rerrich Bela ter 1, Szeged, Hungary

² MTA-SZTE Reaction Kinetics and Surface Chemistry Research Group, Rerrich Bela ter 1, Szeged H-6720, Hungary

³ Elettra Sincrotrone Trieste, Strada Statale 14 – km, in AREA Science Park, 34149 Basovizza, Italy

⁴ Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged, Rerrich Bela ter 1, Szeged H-6720, Hungary

⁵ Centre for Energy Research, Institute for Technical Physics and Materials Science, Konkoly-Thege M. út 29-33., Budapest 1121, Hungary



Atomenergia

Cikkajánló

Az utóbbi időben mindannyiunkat foglalkoztatnak a zaporizsszjai atomerőműben zajló események, hosszabb távon pedig az atomerőművek sorsa, az atomenergia felhasználása.

Ezekről a témákról kérdezték szeptember elején Aszódi Atillát, a BME Természettudományi Karának dékánját az Inforádióban, aki többek között elmondta: „Csernobilban nagy mennyiségű grafit volt a reaktorban, ami meggyulladt a balesetben, és utána tíz napig égett, és ez nagyon nagymértékben járult hozzá ahhoz, hogy nagy mennyiségű radioaktivitás jusson ki a környezetbe, ráadásul föl, a magas légkörbe, mert 2000 fokról magasabb hőmérsékleten égett a grafit hosszú időn keresztül. Ilyen tűz nem tud lenni Zaporizsszjában, mert nincsen grafit a reaktorokban, tehát önmagában már a robbanás sem tud úgy bekövetkezni, a védőépület nagyon komoly védelmet jelent és nem tud benne lenni a tűz, aminek következtében hosszú ideig lehetne kibocsátás. Nekem nagyon nem tetszik, hogy mindkét oldal azzal hibáztatja a másikat, hogy a tevékenysége következtében csernobili nagyságú katasztrófa lehetne. Valójában ezeknek a fenyegetéseknek a címette, szerintem, Európa.”

Az interjú meghallgatható és el is olvasható az Inforstarton (Aszódi Attila: alaptalanul fenyegetik Európát csernobili szintű katasztrófa veszélyével, <https://infostart.hu/interju/2022/09/02/aszodi-attila-alaptalanul-fenyegetik-europat-csernobili-szintu>



katasztrófa-veszelyevel?utm_source=infostart&utm_medium=email&utm_campaign=hirlevel).

Érdekes követni Aszódi Attila blogját is, a Láncreakciót (<https://aszodiattila.blog.hu/>), ahol a nukleáris szakember időről időre kifejti nézetét egy-egy kérdésről.

Ugyancsak szeptember elején nyilatkozott Pázmándi Tamás, az Energiatudományi Kutatóközpont (korábban KFKI) Sugárvédelmi Laboratóriumának vezetője a HVG360-nak. Az összeállítás címe: „Egy zaporizsszjai atombaleset lehetséges hatásai – modellszámítások a hvg360-on”, a modellszámítások néhány eredményét bárki megnézheti a hálón, az interjú előfizetéssel olvasható (Miért nem ismétlődhet meg a csernobili tragédia a zaporizsszjai erőműnél?, https://hvg.hu/360/20220902_zaporizsszjai_atomero_mu_csernobil_katasztroufa_Pazmandi_Tamas_interju).



A Nemzetközi Atomenergia Ügynökség zaporizzsjai atomerőműben tett látogatásával kapcsolatosan újra nyilatkozott Aszódi Attila az Inforádióban, sok érdekes információt osztott meg hallgatóival. Ajánljuk ezt a forrást is olvasóinknak (Erdogan ajánlatot tett Putyinnak a zaporizzsjai atomerőművel kapcsolatban, https://infostart.hu/kulfold/2022/09/03/erdogan-ajanlatot-tett-putyinnak-a-zaporizzsjai-atomeromuvelkapcsolatban?utm_source=infostart&utm_medium=email&utm_campaign=hirlevel.)

Javasoljuk a hírportálok figyelemmel kísérlését, mert naponta frissülnek a hírek a zaporizzsjai atomerőmű biztonságával kapcsolatosan.

Búcsú Marosi József tanár úrtól (1929–2022)

93. életévében eltávozott közölünk a textilkészítő szakma kiváló tanára, a Könyvüipari Minisztérium Módszertani és Továbbképző Intézetének létrehozója és egykori igazgatója, a nemzetközileg is elismert textilkémiai szaktekinetly. A Magyar Kémikusok Lapja 2020. novemberi számában, a „70 éve alapították a Than Károly Könyvüipari Vegyészeti Technikumot” című írásban munkásságát részletesebben ismertettük.



Emlékezünk. Mi 1966 őszén ismertünk meg Téged, tanár úr (aki okleveles vegyész-mérnök és textilvegyész szakmérnök tanított is), a Than Károly Könyvüipari Vegyészeti Technikum textilszakos tanulóiként. Azok a felettünk járók, akiket már oktattál, felhívták figyelmünket, hogy fel kell kötni, amit lehet, mert a szerves kémiai ismeretek terén kérlelhetetlen vagy.

Az első szeptemberi kémiai technológia órák a napló beírása után az ablakhoz mentél, és bemutatkozásod után annyit mondtál: „Kíváncsi vagyok a harmadik textiles osztály szerves kémiai tudására, hogy milyen alapokról indulhatok”, s kérted, vegyünk elő egy papírt, majd már diktáltad: „A” csoport – első feladat: írjuk fel a „para-paravessző-diamino-difenil-karbamid” szerkezeti képletét stb. Nemcsak a Lajos utcai, hanem a Lukács utcai házak technikum felé néző belső udvarának lakásaiban is megállt a levegő. A röpdolgozatok eredményhirdetése során lesújtó véleményed ismeretében folytatódott okosításunk.

Apróság, de aztán következetesen érvényt szerezte annak is, hogy precízen a benzolgyűrű szabályos hatszög, és benne körrel kell feltüntetni a π -szextettet, a vegyértékvonalat pedig pontosan az illetékes elem vegyjeléhez illik húzni. Alkalmas, naprakész ismereteket nyújtó tankönyv híján megtanultunk órai előadásod során jegyzetelni.

Rettegtünk, amikor a naplóban lapozva kerestél a feleltetendő diák nevét – az elől ülők megnyugtatta jeleztek, már a névsor felén túl vagy –, majd kihívtad például egy „D” betűs társunkat számonkérésre.

Persze gyarapodtunk a szálanyag- és színezékkémia területén, negyedikben pedig a szálanyagok színezését és a textilnyomással történő kémiai mintázás rejtelmét ismertük meg nagyszerű előadásaid során. Már végzésünk után olyan nagyszerű textilkémia- és mechanikai technológia tankönyveket írtál, amelyeket a szakirányú felsőoktatásban is hasznosítottak, sőt

használnak ma is. Számtalan szakcikked jelent meg a textiles folyóiratokban.

Akkor még nem tudtuk, hogy annak idején a negyedikes labor feladatait is Te dolgoztad ki, ill. a textilkészítő műhely eszközeit Neked köszönhattuk a síkfilmnyomó szoba lehetőségeinek bővítésével.

Azután, ahogyan telt-múlt az idő, találkoztunk Veled – az országos szakfelügyelői hálózat minisztériumi vezetőjével – az üzemből kihelyezett felnőttképzés vizsgálónőként is, ahol mi próbáltuk átadni a Tőled tanult ismereteket a munka mellett padba ülő dolgozóknak. Mindig szigorú voltál, de rendkívül igazságos. Akiknek nehezebben ment a vizsga, azokat a gép melletti fizikai munkájukról faggattad, akik pedig meg nem engedett eszközökkel próbálkoztak, megizzasztottad.

Életed utolsó napjaid – idővel a mozgásban korlátozottként az interneten és telefonon – követték a textilkészítési innovációt, a Textilipari Műszaki és Tudományos Egyesületi rendezvényen elhangzottakról azonnal érdeklődtél és mindvégig bíztál abban, hogy talán lesz újra számottevő textilipar hazánkban. Még idén júliusban is, mint kiderült, utolsó telefonhívásodban színezési témáról beszélgettünk, amikor – mint mindig – fantasztikus szakmai eszmefuttatás következett.

Rendszeres névnap felköszöntéseid mindig kedves élményt jelentettek, sok ismerősöd és volt diákid mindig örömmel fogadta szeretetteljes gratulációt, amelyek még a tengerentúlra is eljutottak.

Csak utólag tudtuk meg a zeneirodalom iránti szeretetedet és aktív zenei tevékenységedet. Énekese voltál a Sík Sándor Kamarakórusnak, tagja a Magyar Bach- és Richard Wagner Társaságnak.

2017. március 15-én kiemelkedően eredményes szakmai tevékenységed elismerésül Magyar Gazdaságért Díjjal tüntettek ki. 65 éven át kifejtett kiváló mérnöki tevékenységedet a Műegyetem 2020 novemberében vas díszoklevéllel ismerte el.

Fájdalommal, de a Teremtő akarát tudomásul véve búcsúztunk Tőled – aki nemcsak a szakmára, hanem az életre is felkészített minket – az Óbudai Temetőben. Emlékedet kegyelettel megőrizzük, nyugodjál békében!

Kutasi Csaba

A HÓNAP HÍREI

Kitüntetések augusztus 20. alkalmából

Csák János kultúráért és innovációért felelős miniszter, Vitályos Eszter, a tárca parlamenti államtitkára és Hoppál Péter kultúráért felelős államtitkár a Pesti Vigadóban adta át az állami kitüntetések.

A miniszter köszöntőjében hangsúlyozta, a másik ember méltóságának elismerése abszolút és állandó, amit meg kell őrizni „a történelem változó divatjai és téveszméi viharában” is. Ha ezt feladjuk, minden emberit feladunk.

Kitüntetést kapott többek között:

Magyar Érdemrend középkereszt polgári tagozat

DR. SZALAY PÉTER Széchenyi-díjas kémikus, az MTA doktora, az ELTE TTK Kémiai Intézete Fizikai Kémiai Tanszékének tanácskezető egyetemi tanára, a felsőoktatás területén folytatott ki-magasló, példaértékű szakmai elhivatottsággal végzett oktatói

tevékenysége, tudományos kutatóként elért, nemzetközileg is kimagasló eredményei, valamint szakmai és egyetemi közéleti szerepvállalása elismeréseként.

Magyar Érdemrend tisztikereszt polgári tagozat

DR. BALÁZS MARGIT vegyész, az MTA doktora, a DE ÁOK Népegészség- és Járványtani Intézetének egyetemi tanára, Egészségtudományok Doktori Iskolájának titkára, az oktatás és kutatás területén több évtizeden át végzett, nemzetközi jelentőségű szakmai munkája, valamint példaértékű vezetői és szakmai közéleti tevékenysége elismeréseként,

DR. E. KÖVÉR KATALIN vegyész, az MTA rendes tagja, a DE TTK Kémiai Intézete Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének egyetemi tanára, a Kémia Doktori Iskola vezetője, a spektroszkópiai szerkezetkutatás területén elért kimagasló, nemzetközileg is elismert tudományos eredményei, valamint az oktatásban és az utánpótlás-nevelésben végzett magas színvonalú munkája elismeréseként,

DR. SIPOS PÁL MIKLÓS kémikus, az MTA doktora, az SZTE TTK Kémiai Intézete Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének egyetemi tanára kiemelkedően sikeres, nemzetközileg is jelentős kutatói-oktatói munkája és tudományos közéleti tevékenysége, valamint az utánpótlásképzés területén elért eredményei elismeréseként.

Magyar Érdemrend lovagkereszt polgári tagozat

DR. NAGY JÓZSEF vegyészmérnök, a BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Karának volt dékánja, valamint Szerves Kémia és Technológia Tanszékének egyetemi docense, négy évtizedes, kiemelkedően eredményes kutatói-oktatói pályája, valamint jelentős oktatás- és kutatásszervezői, illetve szakmai közéleti tevékenysége elismeréseként,

DR. PAPP GÁBOR CSABA vegyész, a DE TTK Kémiai Intézete Fizikai Kémiai Tanszékének egyetemi docense, a fizikai kémia területén végzett magas szintű oktatói munkája, valamint nemzetközileg is elismert kutatási eredményei elismeréseként.

Magyar Arany Érdemkereszt

DR. HANÁK LÁSZLÓ vegyészmérnök, a Pannon Egyetem Mérnöki Kar Bio-, Környezet- és Vegyészmérnöki Kutató-Fejlesztő Központja MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszékének egyetemi docense, a mérnökképzésben és a tudományos utánpótlás-nevelésben végzett kiemelkedő munkája elismeréseként.

Magyar Ezüst Érdemkereszt

DR. DÓBÉNY CSERJÉS EDIT, a BMSZC Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Technikumának oktatója, a tanulók oktatása-nevelése iránt elhivatott, sokak vegyész szakemberré válását elősegítő, csaknem négy évtizedes, példaadó szakmai munkája elismeréseként,

DR. KERÉNYI ZOLTÁN vegyészmérnök, a BCE Szőlészeti és Borászati Intézetének nyugalmazott igazgatója, a borászat és az élelmiszer-biztonság területén végzett több mint négy évtizedes, kiemelkedő kutatói-oktatói, illetve szakírói munkája elismeréseként.

A kitüntetetteknek gratulálunk és mind a szakmájukban, mind a magánéletükben további sikereket, örömteli eseményeket kívánunk!



Akadémiai tagság

Szalay Pétert, az ELTE egyetemi tanárát az Academia Europaea (The Academy of Europe) 2022 májusában tagjává választotta. Gratulálunk e magas tudományos elismeréshez, és munkájában további sikereket kívánunk!

Vegyipari mozaik

Új szakmai díjat alapít a Richter. Richter Gedeon, a vállalat alapítójának születésének 150 éves évfordulójának alkalmából, a



Magyar Orvosi Kamara szakmai támogatásával, létrehozzák a Richter Érdeméremet. A kezdeményezés célja, hogy méltó módon jutalmazza a hazai orvostársadalom kiemelkedő munkáját, szem előtt tartva a mondást, miszerint: *Honos alit artes*, vagyis az elismerés táplálja a tudományt.

A jelentős jutalommal járó díj célja, hogy az orvosok mindennapi munkáját elismerje, támogassa az innovatív ötletek, jó gyakorlatok adaptálását, amelyek elősegíthetik az egészségügy további modernizációját, az orvosi hivatás hatékonyságának növelését.

Az első évben az alapellátásban dolgozó háziorvosok nyerhetik el a Richter Érdeméremet, de további tervek között szerepel a szakorvosok és a gyógyszerészek elismerése is. (www.gedeonrichter.com)



RICHTER GEDEON

Új pályázat természettudományos mesék írására. Ebben az évben is várja a természettudományos elemeket tartalmazó meséket, novellákat a TETT-mesepályázat, amelyet a 6–18 éves korosztály számára hirdettek meg.



2021-ben több mint 500 alkotás érkezett a Természettudományos Oktatásért Szabó Szabolcs Emléke Közhasznú Alapítvány (Sz2A) által kiírt, a Richter Gedeon Nyrt. kezdeményezésével és támogatásával, illetve a Döbrentey Ildikó–Levente Péter művészpár védnökségével létrejött „TETT: Te és a természettudományok – mesés történetek” elnevezésű pályázatra. A pályázat célja, hogy a fiatalok érdeklődését felkeltse a kémia, a fizika, a biológia, a földrajz és általában a természettudományok iránt.

Az idei pályázatok benyújtási határideje: 2022. november 8. (<https://www.gedeonrichter.com/hu-hu/media/220830>)



FITT-Fiatal természettudományos tanár alkotói díj. Első alkalommal adták át a Fiatal természettudományos tanár (FITT) alkotói díjat, amelyet tíz kiváló fiatal pedagógusnak ítél meg a Richter Gedeon Nyrt. Centenárium Alapítvány kuratóriuma.

35 év alatti tanárok kapták a díjat, mely azok támogatását és pályán maradását szolgálja, akik a természettudományos tan-



anyag magas szintű, innovatív, a tanulók aktív részvételén alapuló átadását végzik, továbbá személyes kisugárzásukkal, „pedagógiai varázserejükkel” nevelő, inspiráló, személyiségformáló hatást gyakorolnak diákjaikra. A FITT-díj személyenként havi 80 000 Ft összegű, tíz hónapon át folyósított anyagi támogatást jelent.

„Rendhagyó módon a pályázatokat rövid, saját készítésű videó formájában kértük a pályázóktól. Nem túlzás azt állítani, hogy a beérkezett pályázatok lenyűgözőek voltak! Valamennyi karakteres intenzitást, egyéniséget, víziót, kreativitást, újító szándékot, lelkesedést sugárzott! Minden pályázó más módon csillantotta meg egyéni tanári hitvallását, kedvenc tanításmódszertani gyakorlatait és a jövőre vonatkozó oktatási terveit. Kifejezett öröm, sőt meglepetés volt azt látni, hogy a tanári professzió iránti szenvedélyes elköteleződés ezekben a fiatal tanároknak nemcsak létezik, de ilyen erővel lobog. Ugyanakkor a pályázatokból az is jól érződött, ezeknek a tanároknak milyen nagy szüksége van minden lelki és materiális támogatásra, ami ezt a lobogást segít életben tartani. Ha a FITT-díj érdemben hozzá tud járulni ehhez a lobogáshoz, mindannyian nyertünk! Mi több: összekapcsolódtunk!” – fogalmazott Prof. Dr. Szántay Csaba, a Richter Gedeon Nyrt. Centenárium Alapítvány kuratóriumának elnöke.

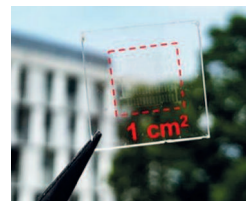
A díjazottak: **Barabás Gergő**, Budapesti Műszaki Szakképzési Centrum Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Technikum, általános, szakmai kémia, kémia angol nyelven és vegyipari alapozó gyakorlat; **Csiki-Faludi Andrea**, Újpesti Könyves Kálmán Gimnázium, kémiatanár; **Formanné Kiss Andrea**, Szent István Gimnázium, kémiatanár; **Kovács Olivér**: Budapesti Műszaki Szakképzési Centrum Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Technikum, fizika-kémia szakos tanár; **Kuti Sándor**, Szolnoki Szakképzési Centrum Pálffy – Vízügyi Technikum, kémia, környezet-tan; **Seres Zoltán**, Budapest VIII. Kerületi Vörösmarty Mihály Gimnázium, földrajz-történelem szakos tanár; **Szabó Bence Farkas**, ELTE Bolyai János Gyakorló Általános Iskola és Gimnázium, kémiatanár; **Szabó Róbert**, Kiskőrösi Petőfi Sándor Evangélikus Óvoda, Általános Iskola, Gimnázium és Technikum, fizikatanár; **Szívós Ádám**, Szegedi Radnóti Miklós Kísérleti Gimnázium, kémiatanár; **Tóth Kristóf**, Czuczor Gergely Bencés Gimnázium és Kollégium, fizika-matematika tanár. (<https://www.gedeonrichter.com/hu-hu/media/220824>)



Szinte teljesen átlátszó napelemes cellát hoztak létre japán kutatók. A Tóhokui Egyetem kutatói indium-ón-oxid és volfrám-diszulfid segítségével egy szinte teljesen áttetsző fotovoltaiikus cellát hoztak létre úgy, hogy indium-ón-oxidot fújtak

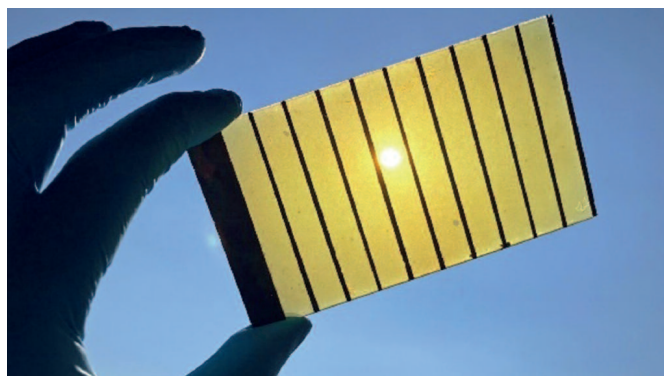
egy kvarchordozóra, majd az egyrétegű volfrám-diszulfidot kémiai gőzfázisú leválasztással vitték fel.

A normál indium-ón-oxid elektródákat használó cellához képest ezerszeres hatékonyságot ért el a fejlesztett cella. Az új fejlesztés gyakorlati alkalmazása még nem kidolgozott, de az eredmények így is hozzájárulhatnak az átmenetifém-dikalkogenideken alapuló, közel áttetsző napelemek fejlesztéséhez. (<https://www.tisztajovo.hu/megujulo-energia-forrasok/2022/08/14/japan-kutatok-szinte-teljesen-atlatszo-napelemet-alkottak>)



Magyar kutatók megduplázzhatják a napelemek hatásfokát. Technológiai újítás a napelemek területén a nemrégiben felfedezett, metil-ammónium-ólom-halid-perovszkit család, amely rendkívüli fotovoltaiikus tulajdonságokkal bír, könnyű és olcsón előállítható, és felválthatja a szilíciumalapú napelemeket.

A hagyományos anyagok hatásfoka 15% körüli, míg az új anyagcsalád használatával laboratóriumi körülmények között



már 30%-os hatásfokot is elértek, mely a szakértők szerint tovább növelhető. A BME munkatársai a rekombinációs időt és a gerjesztett töltéshordozó mennyiségét elemezték. (<https://www.tisztajovo.hu/kornyezetvedelem/2022/08/16/magyar-kutatok-megduplazhatjak-a-napelemek-hatasfokat>)



A hőbontás lehet a megoldás a vegyes műanyag hulladék kezelésére. A Roland Berger vegyi alapú újrahasznosítást vizsgáló tanulmánya alapján a vegyes műanyag hulladék kezelésére a pirolízis, vagyis a hőbontás lehet a megoldás, mert kiválthatja a hulladéklerakást és égetést.

Az utóbbi 5 évben az Európai Unió lakossága 33 millió tonna műanyag hulladékot termelt, melynek csupán 40%-át hasznosítják újra, a maradék hulladéklerakókban vagy égetőkben végzi. Az Eurostat 2019-es adatai szerint Magyarországon a műanyag hulladék 33%-át hasznosították újra.

A műanyag hulladékok esetében a pirolízis viszonylag új eljárás, de a vegyes műanyagok esetében például a benzin, a különböző párlatok vagy a viasz előállítására alkalmas. Ezek a termékek értékesíthetők, ezért a tanácsadó cég úgy gondolja, hogy a pirolízis felválthatja a hulladéklerakást és az égetést.

A pirolízis alkalmazása megszüntetheti a mezők, folyók és óceánok közvetlen szennyezésének kockázatát, illetve azt, hogy a vegyes műanyag hulladék mikroműanyagként kerüljön az embe-



rek és az állatok szervezetébe. (<https://www.tisztajovo.hu/kornyezetvedelem/2022/08/28/a-hobontas-lehet-a-megoldas-a-vegyes-muanyag-hulladek-kezelesere-egy-tanulmany-szerint>)



A MEKH anyagilag is támogatja az energiaátmenet megvalósítását. A Magyar Energetikai és Közmű-szabályozási Hivatal (MEKH) 8 millió forintos támogatást nyújt az Energiaszabályozók Regionális Egyesületének (ERRA) az „ERRA Energiaátmenet Projekt” megvalósításához.

Az Energiaszabályozók Regionális Egyesülete (Energy Regulators Regional Association – ERRA) jelenleg 34 ország energiaszabályozóit tömöríti, melynek székhelye 2000 óta Budapest. Az alapító tagok egyike a MEKH, mely egyesületnek az alelnöke Ságvári Pál, a hivatal nemzetközi kapcsolatokért felelős elnökhelyettese 2024-ig. Az „ERRA Energiaátmenet Projekt” legfőbb célja, hogy napjaink meghatározó energetikai témái (például: megújuló energiaforrások, a hidrogén bővülő szerepe, az okosmérés, az e-mobilitás) jelentős szerepet kapjanak.

Az „ERRA Energiaátmenet Projekt” keretein belül az energiaátmenettel kapcsolatos kiadványok jelennek meg, illetve rendezvényekre, valamint továbbképzési és tudományos-oktatási programok megvalósítására kerül sor; az egyesület szakértő alkalmazását is tervezi a projekttel kapcsolatos feladatok koordinálására. (<https://www.tisztajovo.hu/megujulo-energiaforrasok/2022/08/29/a-mekh-anyagilag-is-tamogatja-az-energiaatmenet-megvalositasat>)



MAVESZ Vegyipari Konferencia 2022. A Magyar Vegyipari Szövetség újra megrendezi hagyományos konferenciáját, melynek neve 2022-től MAVESZ Vegyipari Konferencia.

A konferencia időpontja: 2022. október 19–20., helyszíne: Eger.

A konferencia programja négy szakaszból épül fel, melyek témaköre jól elkülöníthető:

A MAVESZ, a Technológiai és Ipari Minisztérium és külföldi meghívott előadók az Európai Unió és Magyarország vegyiparának helyzetéről, átalakulásáról, a magyar kormányzat energetikai és környezetvédelmi stratégiájáról adnak elő.

A REACH és a CLP rendelet felülvizsgálatához kapcsolódó témakörökben hallhatók előadások (CEFIC, NNK Kompetens Hatóság), valamint bemutatják a kémiai kockázatértékelés gyakorlatát egy vállalati példán keresztül.

A hagyományos hatósági szekciót idén kiegészítik egy-egy gyakorlati példával a robbanásvédelem és a körforgásos gazdaság témakörében. Itt mutatkozik be a Magyar Hidrogénteknológiai Szövetség és ismertetik a Responsible Care program aktualitásait.

A szakmai utánpótlás képzésről fognak beszélni a digitalizáció és a klímasemlegesség szempontjából. Bemutatják a MAVESZ szakmai utánpótlás stratégiáját, valamint a kormányzat és a vezető egyetemek fejtik ki álláspontjukat a kérdéskörben. (<https://mavesz.hu/mavesz-vegyipari-konferencia-2022-tajekoztato/>)

Dobó Dorina összeállítása



Felhívás Gábor Dénes-díj felterjesztésére

A Gábor Dénes-díj a civil szféra legnevesebb műszaki alkotói elismerése ma Magyarországon.

Információk: <http://www.gabordenes.hu/palyazati-felhivasok>

Határidő: 2022. október 11.

MKE-HÍREK

Rendezvénynaptár (2022)

október 17–19.	Őszi Radiokémiai Napok	Balatonszárszó
november 24.	Kozmetikai Szimpózium	Budapest
	Biztonságtechnika Szeminárium 2022	
november	Borsodi Vegyipari Nap	Miskolc

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXVII. No. 10. October

CONTENTS

<i>Quantum effects at the level of ppb accuracy. An interview with Edit Mátyus</i>	286
PÉTER SZALAY	
<i>The way towards Polányi Prize</i>	289
ISTVÁN BÁNYAI	
<i>The new Hungarian Chemistry Europe Fellow: Péter Kele</i>	
An interview by JÓZSEF SÁNDOR PAP	290
Mcule: a world-class chemical marketplace	
An interview by VERA SILBERER	292
<i>Continuous flow reactors and continuous pharmaceutical processing. Part II. Industrial examples. Part I</i>	295
PÉTER DEÁK, ATTILA VÖRÖS, and PÉTER MIZSEY	
<i>I have always tried to pass on my knowledge and experience</i>	302
LAJOS SARKA	
Whom was it named after? Kirchhoff's circuit laws, Kirchhoff's law of thermal radiation, the Kirchhoff-Bunsen spectroscopy	305
GYÖRGY INZELT	
<i>Action and effect of proton pumps. Functional electro-biochemistry of mitochondrion. Part II</i>	308
ANDRÁS RÓKA	
<i>A last tribute to Tibor Braun</i>	312
TAMÁS KISS	
<i>A brief insight into the ancient Roman cuisine from Lucullus to Apicius</i>	312
TIBOR BRAUN	
<i>Chembits</i>	314
GÁBOR LENTE	
<i>Publication of the month</i>	316
Obituary. József Marosi (1929–2022)	318
<i>News of the Month</i>	319

Megbízható Mennyiségi Meghatározás

Minden komponens, mátrix és felhasználó esetében

A tudományos és üzleti célok elérése csak megbízható eredmények birtokában lehetséges.

A felhasználási területtől függetlenül a Thermo Scientific™ TSQ hármass kvadrupol tömegspektrometriás rendszerei kiemelkedő precizitást biztosítanak a mennyiségi meghatározási feladatokra. Nagy felbontású SRM üzemmód, robusztusság, megbízhatóság és érzékenység egy készülékben, mely segítségével minden felhasználó a mérendő komponenstől vagy a mátrixtól függetlenül megbízható mérési eredményekhez juthat.



Thermo Scientific™ TSQ Altis™
hármass kvadrupol tömegspektrométer



Thermo Scientific™ TSQ Quantis™
hármass kvadrupol tömegspektrométer



Thermo Scientific™ TSQ Fortis™
hármass kvadrupol tömegspektrométer

További információk:

thermofisher.com/confidentquantitation

Kizárólagos képviselő:

UNICAM Magyarország Kft.
1144 Budapest, Kőszeg utca 25.
Telefon: +36 1 221 5536
E-mail: unicam@unicam.hu
Web: www.unicam.hu

UNICAM