A TARTALOMBÓL:

- Reakciók és hallgatók katalízise
- A van der Waals-egyenlet és az Eötvös-törvény
- Formamemóriás anyagok
- Gyógyszerészeti vizsgálómódszerek a kémiaoktatásban

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXXVIII. ÉVFOLYAM • 2023. MÁRCIUS • ÁRA: 950 FT

Nagymolekulák csavarszerkezetének felfedezése

A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap támogatja
Nemzeti Kulturális Alap

A kiadvány a Magyar Tudományos Akadémia támogatásával készült

Széchenyi Terv Plusz Építsük együtt Magyarországot!
MAGYARORSZÁG KORMÁNYA
Az Európai Unió finanszírozásával NextGeneration EU

A Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium legújabb eredményeiből:

pubs.acs.org/acscatalysis

ACS Catalysis

Research Article

CO_2 Conversion on N-Doped Carbon Catalysts via Thermo- and Electrocatalysis: Role of C–NO_x Moieties

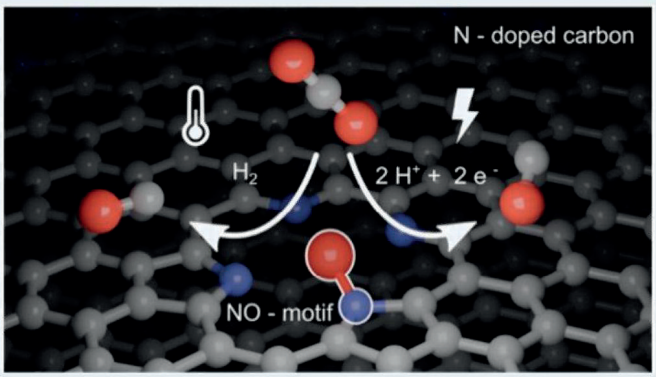
Dorottya Hursán, Marietta Ábel, Kornélia Baán, Edvin Fako, Gergely F. Samu, Huu Chuong Nguyën, Núria López, Plamen Atanassov, Zoltán Kónya, András Sápi, and Csaba Janáky*

Cite This: *ACS Catal.* 2022, 12, 10127–10140

Read Online

ACCESS | Metrics & More | Article Recommendations | Supporting Information

ABSTRACT: N-doped carbon (N–C) materials are increasingly popular in different electrochemical and catalytic applications. Due to the structural and stoichiometric diversity of these materials, however, the role of different functional moieties is still controversial. We have synthesized a set of N–C catalysts, with identical morphologies (~27 nm pore size). By systematically changing the precursors, we have varied the amount and chemical nature of N-functions on the catalyst surface. The CO_2 reduction (CO_2R) properties of these catalysts were tested in both electrochemical (EC) and thermal catalytic (TC) experiments (i.e., CO_2 + H_2 reaction). CO was the major CO_2R product in all cases, while CH_4 appeared as a minor product. Importantly, the CO_2R activity changed with the chemical composition, and the



A Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium létrehozását a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatta az RRF-2.3.1-21-2022-0009 azonosító számú projekt keretében.

Polymer Testing 115 (2022) 107759

Contents lists available at ScienceDirect

Polymer Testing

journal homepage: www.elsevier.com/locate/polytest

Developing a method for evaluating color changeover in a hot-runner multi-cavity injection mold

Dániel Török [a,b], Tatyana Ageyeva [a,b], Róbert Boros [a], Ágnes Kovács [c,d], József Gábor Kovács [a,b,*]

[a] Department of Polymer Engineering, Faculty of Mechanical Engineering, Budapest University of Technology and Economics, Müegyetem rkp. 3., H-1111, Budapest, Hungary
[b] MTA-BME Lendület Lightweight Polymer Composites Research Group, Müegyetem rkp. 3., H-1111, Budapest, Hungary
[c] Department of Biostatistics, University of Veterinary Medicine Budapest, István utca 2, H-1078, Budapest, Hungary
[d] Department of Applied Analysis and Computational Mathematics, Eötvös Loránd University, Pázmány Péter sétány 1/C, H-1117, Budapest, Hungary

ARTICLE INFO

Keywords:
Injection molding

ABSTRACT

Quality control, which nowadays almost always involves the integration of online measurement methods into the production process, is of paramount importance for injection molding. Online pressure and temperature mea-

A Megújuló Energiák Nemzeti Laboratóriumot létrehozó intézmények: Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Debreceni Egyetem, Energiatudományi Kutatóközpont, Miskolci Egyetem, Neumann János Egyetem, Pannon Egyetem, Pécsi Tudományegyetem, Széchenyi István Egyetem, Szegedi Tudományegyetem, Természettudományi Kutatóközpont.

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA
HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL
LXXVIII. évf., 3. szám, 2023. március

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

Szerkesztőség:
Felelős 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, ZÉKÁNY ANDRÁS
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:
SZÉPVÖLGYI JÁNOS, a szerkesztőbizottság elnöke, BIACS PÉTER, BUZÁS ILONA, HANCSÓK JENŐ, JANÁKY CSABA, KALÁSZ HUBA, KEGLEVICH GYÖRGY, KOVÁCS ATTILA, 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
Felelős 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 10 200 Ft
Egy szám ára: 850 Ft. Külföldön terjeszti a Batthyany Kultur-Press Kft., H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6. 1251 Budapest, Postafiók 30.
Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements: SÜLI ERIKA

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

Aktuális 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.2023.03

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

KEDVES OLVASÓK!

Vészterhes időket élünk, de legalább túl vagyunk a – szerencsére enyhe – télen. Ennek és a takarékossági intézkedéseknek köszönhetően a legtöbb intézet komoly energiamegtakarítást ért el. A BME-n kb. 40%-kal kevesebb energia fogyott. Viszont később indult az iskola, és az egyetemeken is három héttel csúszik a tavaszi félév. Próbálunk visszatérni a régi kerékvágásba, de még mindig nem hevertük ki a pandémia okozta károkat az oktatásban. A BME még 2022. november 25-én szervezett egy workshopot „BME a fenntarthatóságért” címmel, ahol egyetemünk karai és tanszékei bemutathatták kompetenciájukat a fenntarthatóság/környezetbarátság terén. Erről a jeles eseményről a Magyar Kémikusok Lapja mostani és későbbi számában is olvashatnak. Kitekintve kollegáink helyzetére, reménykedünk abban, hogy a tanárok mihamarabb megkapják a jogosan követelt fizetésemelést, amely segít az odaadóbb és eredményesebb munkában. A mi szakmánkban azonban elengedhetetlen a lelkesedés. Mi, egyetemi oktatók is „megszenvedjük”, hogy egyre több, nem megfelelő tudással rendelkező diák kerül be a képzésre. A Magyar Kémikusok Egyesülete háza táján felelősen tervezzük a jövőt: működő szakosztályokat és a régi szép idők hangulatát hozó konferenciákat szeretnénk. Ennek jegyében készülünk a nyári Nemzeti Vegyészkonferenciára. A Szerves és Gyógyszerkémiai Szakosztály „BME Szerves és Gyógyszerkémiai Napot” tervez fiatal kutatók számára június második felében azt remélve, hogy az ország valamennyi egyeteméről és kutatóintézetéből érkeznek érdeklődő diplomázók és doktoránsok.

A lap márciusi számában Hargittai István és Hargittai Magdolna tolmácsolásában érdekes ismertetést olvashatunk a biológiai nagymolekulák csavarvonalú szerkezetének felfedezéséről. Történelmi betekintést kapunk a makromolekulák helikális szerkezetének kutatási folyamatába, amelynek során olyan nagy nevek bukkannak fel, mint Harry Bateman, Horace R. Crain, Polányi Mihály és Náray-Szabó István. Az „Ígéretes fiatal kémikusaink” rovatban Novák Zoltán professzor, az ELTE TTK Kémiai Intézetében működő Katalízis és Szervetlen Szintézisek Kutatócsoport vezetője mutatkozik be. A lap „klasszikusai”, a néhai Braun Tibor mellett Inzelt György és Kutasi Csaba írásai nyújthatnak kikapcsolódást – sorrendben – a neurogasztronómiai, a Van der Waals-egyenlet és alakemlékező intelligens textíliák témában. Végül Sebestyén Zita avat be a gyógyszerészeti vizsgálómódszerek kémiaoktatásban való felhasználásába.

Remélem, hogy örömmel forgatják a Magyar Kémikusok Lapja márciusi számát.

Keglevich György egyetemi tanár
MKE IB-tag, a Szerves és Gyógyszerkémiai Szakosztály elnöke

TARTALOM

ÍGÉRETES FIATAL KÉMIKUSAINK
Reakciók és hallgatók katalízise. Beszélgetés **Novák Zoltán** professzorral 70

KITEKINTÉS
Hargittai István, Hargittai Magdolna: Biológiai nagymolekulák csavarszerkezetének felfedezése 73
Inzelt György: Kiről nevezték el? Van der Waals-egyenlet, van der Waals-erők, Eötvös-törvény 80
Kutasi Csaba: Formamemóriás anyagok, alakemlékező intelligens textíliák 83
Braun Tibor: Az ételek érzékelésének tudományos alapjai. Neurogasztronómia 86

OKTATÁS
Szólláthné Sebestyén Zita: Gyógyszerészeti vizsgálómódszerek felhasználása a kémiaoktatásban: a Rossett–Rice-teszt 88

VEGYÉSZLELETEK
Lente Gábor rovata 92

A HÓNAP KÉMIAI PUBLIKÁCIÓJA 94

KÖSZÖNTÉS
Tóth Gábor, Szűcs Mária: A 80 éves Penke Botond köszöntése 95

EGYESÜLETI ÉLET 96

A HÓNAP HÍREI 98

Címlapunkon: Kettős spirál. Gidon Graetz „Belső fény” című szobrának részlete. Weizmann Intézet, Rehovot, Izrael (fotó: Hargittai I., Hargittai M.)

Reakciók és hallgatók katalízise

Beszélgetés Novák Zoltán professzorral, az ELTE TTK Kémiai Intézetében működő Katalízis és Szerves Szintézisek Kutatócsoport vezetőjével

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

2007 óta működő kutatócsoportunk új szerves kémiai szintézisek kidolgozására fókuszál és jelen pillanatban a kutatási profilunk két fő részből áll össze. Egyrészt új katalitikus eljárások fejlesztésével foglalkozunk, másrészt új, gyógyszerkémiai szempontból érdekes szerkezeti motívumokat hordozó molekulák szintézisére törekszünk. Az általunk vizsgált katalitikus folyamatokban elsősorban átmenetifémek szerepelnek katalizátorként, melyek közül kiemelném a palládiumot. Ennek a fémnek rendkívül változatos katalitikus felhasználási módja létezik a reakciók mechanizmusát tekintve, és ezek az eljárások szintetikus szempontból hatékony megoldásokat kínálnak két reaktáns között szén-szén vagy szén-heteroatom kötések kialakítására. Ebben a kémiai viselkedésben rejlő lehetőségeket igyekszünk mi is kiaknázni annak érdekében, hogy új kémiai átalakításokat dolgozzunk ki, illetve új molekuláris motívumokat hozzunk létre. A ma már klasszikusnak mondható homogén és heterogén katalitikus körülmények között az átmenetifémek közvetlen kémiai kapcsolatot alakítanak ki a szubsztrátumok legalább egyikével, de fénybesugárzás mellett, fotokémiai körülmények között, teljesen más reaktivitást is el lehet érni ezekkel az átmenetifém-alapú rendszerekkel. Ennek köszönhetően, a fotokatalízis felhasználásával a szerves kémiai átalakítások fejlesztése terén újabb perspektívák nyíltak meg, amit a kutatócsoportban is igyekszünk kihasználni. A szerves kémiai motívumok alapján történő csoportosítás szerint főleg a fluoratom különböző formában, különböző fluoros funkciós csoportban történő beépítésére fejlesztünk eljárásokat, melyekhez új reagenseket tervezünk, állítunk elő és használunk különböző katalizált és nem katalizált folyamatokban.

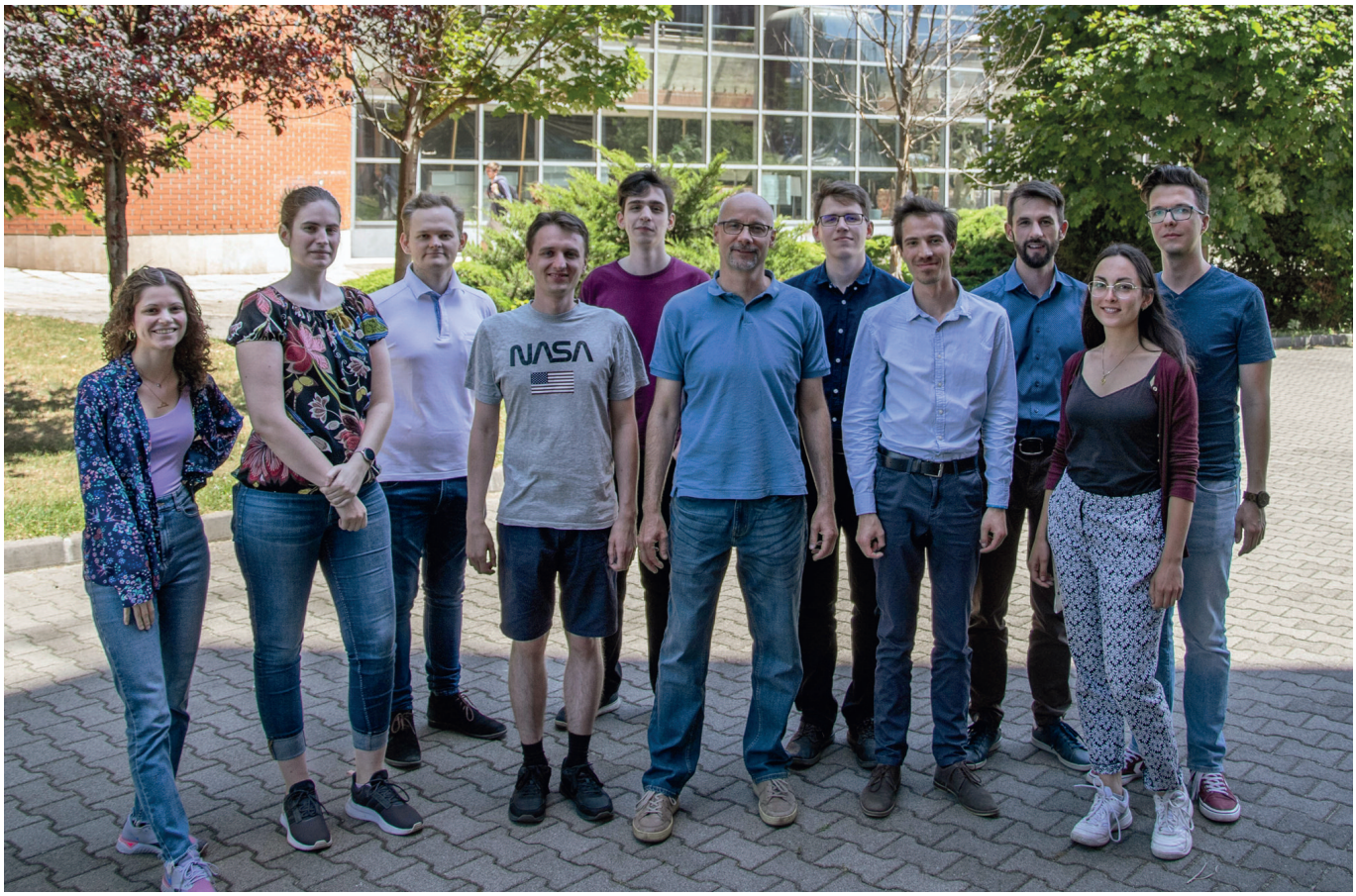
Hogyan jutott el ehhez a témához, melyek voltak tudományos fejlődésének fontosabb állomásai?

A kutatócsoport eddigi kutatásai többnyire egymásra épülnek, jól követhető a fejlődésük, illetve a kutatási területek megválasztásakor mindig figyelembe vesszük a kurrens nemzetközi tudományos kémiai eredményeket. Az átmenetifém-katalizált keresztkapcsolási reakciókkal már a doktori kutatásaim során megismerkedtem az ELTE-n, Kotschy András kutatócsoportjában. A PhD-dolgozatom témája ezeknek a reakcióknak a vizsgálatára és alkalmazására irányult. A doktori cím megszerzése után lehetőségem nyílt külföldöm posztdoktori ösztöndíjasként kutatni. Egy évet töltöttem el a Kaliforniai Műszaki Egyetemen, Brian Stoltz laboratóriumában, ahol picit más aspektusból vizsgáltam a palládiumkatalizált reakciókat, melynek eredményeként bepillanthattam a sztereoszelektív katalitikus átalakítások világába. Hazatérve posztdoktori kutatásaimat OTKA-ösztöndíjasaként az ELTE-n folytattam, szintén a palládiumkatalizált reakciók vizsgálatával, amit önálló kutatásaim kezdetén sem hagytam abba. Kutatócsoportommal jó alapokra építve, a keresztkapcsolási reakciókból kiindulva jutottunk el további átalakítások vizsgálatáig, mint például a C–H aktiválásón keresztül lejátszódó reakciókig, melyek a Lendület-pályázatom központi témáját képezték.

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

Valójában minden témánkat nagyon szeretem, és szerencsére az elmúlt időszakban sok új terület művelésére tudtunk időt szakítani. Igazából két kurrens kutatást említenék meg ezen a ponton, talán azért is, mert nem kémikusok számára ezek könnyebben értelmezhetőbbek. Az egyik az úgynevezett micelláris katalízis, melynek vizsgálatába nemrég kezdtünk bele. A szerves kémiai reakciók és a korábban említett átmenetifém-katalizált átalakítások többnyire szerves oldószerekben mennek végbe, köszönhetően annak, hogy a reaktánsok döntő többsége vízben oldhatatlan. Azonban a micelláris rendszerek megoldást kínálhatnak a szerves reakciók vízben történő megvalósítására, pontosan azon az elven, amelynek mentén a háztartásban alkalmazzuk a szappanokat és mosószereket a zsíros, vízoldhatatlan szennyezők eltávolítására. Az elv nagyon egyszerű, hiszen a vízben a felületaktív anyagok segítségével micellákat hozhatunk létre, melyek belső apoláris szférája magába zárja a szerves reaktánsokat és katalizátort, ami lehetőséget kínál a reakciók lejátszódására. Ráadásul ezekben a mikroreaktorokban a lokális koncentráció igen magas, ami sokszor nagyobb reakciósebességet eredményez a szerves közegben kivitelezett reakciókhoz képest.

A másik érdekes kutatási területünk az új fluoros reagensek fejlesztéséhez kapcsolódik. Azt vizsgáljuk, hogy a háztartásokban és az autókban alkalmazott klímaberendezések hűtőközege milyen módon használható fel szerves kémiai reagensek hatékony előállítására. Elsősorban mint könnyen, nagy tételben beszerezhető kiindulási anyagként tekintünk ezekre a vegyületekre, azonban a közeljövőben azt is érdemes lesz vizsgálni, hogy a már használaton kívülre került hűtőberendezésekben található hulladékgázokat hogyan lehet felhasználni kémiai reakciókban. Nagyon röviden úgy lehetne összefoglalni ezeket a kutatásokat,



hogy azt vizsgáljuk: lehetséges-e ezekből a hétköznapi felhasználásra készült ipari gázokból gyógyszermolekulákat gyártani.

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

A kutatási eredményeink szerencsére jól láthatóak nemzetközi szinten is. Sok múlik azon, hogy hol tudjuk végül publikálni az elért eredményeket, hiszen rangosabb szerves kémiai folyóiratban biztos, hogy nagyobb olvasottságot és idézettséget érhetünk el egy-egy új eredmény kapcsán. Ezenkívül fontos a konferenciákon történő megjelenés és prezentálás mind szóban, mind pedig poszter formájában is. Az érdeklődés felkeltéséhez igazán újat, meglepőt, hatékony és hasznos dolgot kell kidolgozni.

Kérem, mutassa be a csoportot! Egy folyosón dolgozván előrebocsátom, hogy nagyon népszerű a csoport a hallgatók körében.

A kutatócsoportunkban az elmúlt időszakban mindig dolgoztak posztdoktori kutatók és PhD-hallgatók, akik teljes állásban, kutatóként dolgozó tagokat jelentették. A kutató munkatársak mellett MSc- és BSc-hallgatók végezték a tudományos diákköri vagy szaklaboratóriumi munkájukat. Ezenkívül amikor lehetőség volt rá, technikus kolléga is segítette a munkánkat. Ez a szerkezeti felépítés ideális, az arányokat ügyesen kell kialakítani, a létszám pedig az erőforrások függvényében folyamatosan változik. Ilyen felépítés mellett az elmúlt években nagyszámú munkatárssal tudtunk közösen dolgozni.

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

Nagy csoportot csak nagyobb időtartamot felölelő alaptámogatás mellett lehet felépíteni és fenntartani. A legfontosabb a kutatások vegyszer- és eszközigényének biztosítása és a PhD-val rendelkező kollégák alkalmazása. Ha ez nincsen, akkor nincs nagynak mondható kutatócsoport. Ezenkívül szükség van PhD-hallgatókra, akik teljes értékű kutatóként végzik kutatásaikat egy adott területen. A PhD-hallgatók ösztöndíja az egyik legfontosabb intézményi támogatás. Azonban elengedhetetlen a doktori ösztöndíjak kiegészítésének megteremtése is, mert az állami PhD-ösztöndíj ma már nem igazán biztosítja a hallgatók megélhetését, és ennek következtében sajnos egyre kevesebben vágnak bele az egyetemen a doktori kutatásokba. Ezeket a kiegészítéseket pályázatokból, illetve ipari kutatások bevételéből tudtuk eddig fedezni, melyek megszerzése a csoportvezető pályázati képességén és a hallgatók tanulmányi és kutatási eredményein múlik. Intézményi anyagi támogatás nagyon ritkán jelent meg a kutatócsoport életében. Egy esetben az egyetem kiemelt pályázati utófinanszírozást biztosított 2 évre, ami nagyban segítette a munkánkat. Az intézményi támogatásnak persze a közvetlen anyagi támogatáson túl ki kell terjednie a kutatási feltételek megteremtésére, a megfelelő biztonságos infrastruktúra, a kutatási környezet és az üzemeltetés biztosítására, a könyvtári adatbázisok elérhetőségére, a gazdasági, pályázati adminisztrációs támogatásra is. Ezeknek az alapoknak a megteremtésében nagy szerepe van az intézménynek, de a működéshez és a fejlesztésekhez szükség van a csoportvezető problémamegoldó, szervező és kommunikációs képességeire is.

Milyen szerepe van a sikeres kutatásban a nemzetközi kapcsolatoknak?

Valójában nemzetközi egyetemi kapcsolatok nem játszottak kiemelkedő szerepet az elért sikerekben. A fejlesztések többnyire itthon születtek, hazai forrásból. A közvetlen kapcsolatok inkább

már az elért eredményeinkre épültek, amikor más kutatócsoportok kívánták alkalmazni a laboratóriumunkban kifejlesztett szintetikus eszközöket, és ezt bizonyos esetekben együttműködésben valósítottuk meg.

Az Önök kutatásában jelentős szerepet játszanak az ipari kapcsolatok. Hogyan lehet megtalálni az egyensúlyt az ipari „megrendelések", illetve a tudományos kíváncsiság és a szakmai előmenetel között?

Az ipari kapcsolatok nagy jelentőségűek a kutatásaink alakulásában, és lehetővé tették, hogy egyes megbízások keretein belül szintetikus fejlesztésekkel is foglalkozzunk az ipari partnerekkel közösen. Ennek köszönhetően a megrendelések teljesítése mellett tudományos eredményeket is el tudtunk érni, melyek mindkét fél számára rendkívül előnyösek. Az ipari megbízások egyben útmutatóként is szolgálnak, hogy milyen területek fejlesztésére van igény, így a nemzetközi kutatási trendek figyelemmel kísérése mellett az ipari szemlélet is meghatározza az új kutatási területek megválasztását. Összességében azt tudom mondani, hogy nagyon jó egyensúly érhető el a két terület között, és az eredmények így biztosan nagyobb figyelmet kapnak mindkét szektorból.

Mennyire tartja hivatásának az oktatást a kutatás mellett?

Teljes mértékben. Az oktatás része a mindennapjainknak, így a témavezetéstől a BSc-gyakorlatok megtartásáig az oktatás minden aspektusa megjelenik nálunk. Hogyan kutassunk, prezentáljunk, hogyan írjunk cikket, hogyan irodalmazzunk, hogyan tanuljunk szerves kémiát vagy akár az, hogy hogyan fogjunk meg egy lombikot, hogyan mérjünk be egy anyagot, mind-mind része az oktatásnak, és ezekre csak megfelelő hivatástudattal lehet figyelni, a hallgatókkal és a munkatársakkal való megfelelő kapcsolaton keresztül.

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

Természetesen ez is a feladatunk része, de a rengeteg lehetséges fórum között mostanában már szelektálni kell, mert az idő és az energia véges. A nagyobb intézeti események keretében azért mindig jutott idő a kémia, az intézetben folyó kutatások és az oktatás népszerűsítésére.

Hogyan tudja összeegyeztetni a munkáját a családdal?

Ez sosem jelentett gondot. Mindig adta magát egy-egy helyzet, és egy nagyobb időtartamban jól tartható az egyensúly. Vannak fontos momentumok, teendők, amikor napokig fókuszálni kell egy adott szakmai feladatra, amit mindig megoldottunk, és a hétköznapok beosztása sem okozott soha nehézséget. Persze, ehhez jó és harmonikus családi háttér kell.

A kísérlet-elmélet kapcsolatáról mit gondol?

Elválaszthatatlan. A szerves kémiai és katalízisproblémák megoldása nemcsak gyakorlati, hanem szellemi kihívás is egyben. Ha csinált valami újat, legyen az egy új eljárás kidolgozása, vagy egy új kémiai jelenség észlelése, akkor meg is kell tudni magyarázni ezeket mind kísérleti úton, mind pedig elméleti módszerek segítségével. Kutatásunknak ez az aspektusa kiváló kapcsolódási pontot biztosít az elméleti kémiával foglalkozó kollégákkal, és szerencsére az elmúlt évtizedben rendkívül gyümölcsözően alakult számunkra ez az összetettség.

A kutatás nemzetközisége miatt sok fiatal kutató szembesül az „itthon vagy külföldön" dilemmával. Hozott-e ilyen döntést életében? Ha igen, mi volt az érv az itthonmaradás mellett?

Az én esetemben dilemma sosem volt. A külföld kötelező egy időre akadémiai vonalon, utána pedig bármi lehetséges. Én itthon érzem magam otthon, és szerencsésen alakultak az elmúlt években a hazai akadémiai lehetőségeim, hogy azt és úgy csináljam, amit és ahogy szeretek.

Köszönöm a beszélgetést, további sikereket kívánok olvasóink nevében is.

Szalay Péter

Lesz-e energiánk?

A CEU Határtalan Tudás sorozatának januári programja napjaink egyik legaktuálisabb kérdésköréről szólt: Lesz-e energiánk? A terület szakavatott előadói a következő címmel tartottak előadást:

Holoda Attila energiapolitikai szakértő, korábbi energetikáért felelős helyettes államtitkár: *Az európai földgázellátás és földgázpiac alakulása, 2013–23;*

Aszódi Attila, a BME Nukleáris Technikai Intézet oktatója, a Paksi Atomerőmű kapacitásának fenntartásáért felelős korábbi államtitkár: *Diverzifikáció, elektrifikáció, dekarbonizáció;*

Ürge-Vorsatz Diana, a CEU oktatója, a Nobel-békedíjas Éghajlat-változási Kormányközi Testület (IPCC) mérsékléssel foglalkozó munkacsoportjának alelnöke: *Klímaváltozás és energiahatékonyság növelése. Az épületek energiahatékonyságának növelése, nullaenergiás épületek tervezése.*

A képen az előadók (balról jobbra): Holoda Attila, Aszódi Attila és Ürge-Vorsatz Diana

Az előadásokat rövid kerekasztal-beszélgetés követte, majd az előadók válaszoltak a közönség kérdéseire. A rendezvény teljes anyaga megtekinthető az interneten (CEU Határtalan Tudás: Lesz-e energiánk? https://www.youtube.com/watch?v=hRX0xqbKg1I).

Kiss Tamás

Hargittai István és Hargittai Magdolna

BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

Biológiai nagymolekulák csavarszerkezetének felfedezése

A szerzők történelmi perspektívába helyezik a biológiai makromolekulák helikális szerkezete felfedezésének néhány vonatkozását. Többek között bemutatják a felfedezés eddig kevésbé ismert két közreműködőjét, Harry Bateman matematikust és Horace R. Crane fizikust. Az 1920-as években Berlinben két magyar kutató is vizsgálta szálas anyagok szerkezetét: Polányi Mihály (1891–1976) és Náray-Szabó István (1899–1972). Egymástól függetlenül végzett munkájukat a helikális szerkezet felfedezése előfutárának is tekinthetjük. Ebben a dolgozatban nem szerepelnek, de úttörő munkájuk elismeréseként írásunkat az ő emléküknek ajánljuk.

Amikor J. Desmond Bernal először készített röntgendiffrakciós képet fehérjemintáról, órákig rótta az éjszakai Cambridge utcáit. Álmatlanul tartotta az a gondolat, hogy egy nap sikerülhet meghatározni a fehérjék szerkezetét, és az majd közelebb visz az élet titkának a feltárásához. A világ legjobb krisztallográfusai, köztük Linus Pauling a kaliforniai Pasadenában, valamint W. Lawrence Bragg, Max Perutz és John Kendrew az angliai Cambridgeben dolgoztak ezen a problémán.

William T. Astbury és csoportja már az 1930-as évek elején felismerte a (keratin) peptidlánc két formáját, a nyújtott bétaredőt és a feltekeredett alfa-keratint. Pauling akkor úgy döntött, hogy az alfa-keratinnal fog foglalkozni. Stratégiája az volt, hogy először szerkezeti kémiai ismereteinek felhasználásával a peptidlánc méreteit tárja föl. Azután a lánc lehetséges konformációinak vizsgálatát tervezte, hogy kiválassza a röntgendiffrakciós adatokat legjobban megközelítő modelleket. A legfontosabb információ, amelyet az alfa-keratin meglehetősen életlen diffrakciós képéből ki lehetett nyerni, az volt, hogy a szerkezeti egység a lánc tengelye mentén 5,1 angström távolsággal ismétlődik.

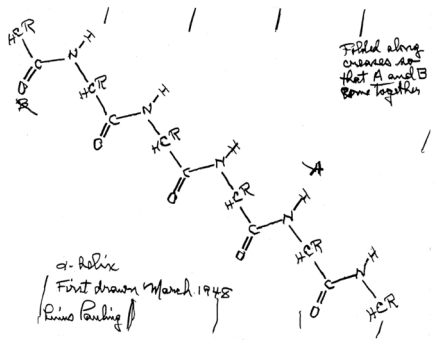
Más kutatókkal szemben a szerkezeti kémia alapos ismerete Pauling fontos előnye volt, ami elsősorban a röntgenkrisztallográfia és az akkor új módszer, a gázfázisú elektrondiffrakció alkalmazásából származott. Tudta, hogy a peptidekben a szén és a nitrogén közötti kötés jóval rövidebb, mint az egyes kötés, és a kötés jelentős mértékben kettős kötés jellegű. Ebből az is következett, hogy a szén-nitrogén kötés és négy szomszédos atomja mind ugyanabban a síkban vagy közel ugyanabban a síkban helyezkedik el. Ez az ismeret a rezonanciaelmélet alkalmazásából származott, amelynek Pauling volt az egyik fő kidolgozója. A peptidlánc szerkezetére azonban az 1930-as évek végén nem tudott kielégítő megoldást találni, és úgy döntött, hogy több információra lesz szüksége a lánc egyes tagjainak geometriájáról. Ennek megfelelően kezdeményezte további egyszerű molekulák szerkezetének meghatározását. Közben egyéb kutatásokkal is foglalkozott és a második világháború idején más feladatok kötötték le a figyelmét.

A peptidlánc szerkezetének problémájához csak egy évtizeddel később, 1948-ban, oxfordi tartózkodása idején tért vissza.

Ava és Linus Pauling. Néhai Karl Maramorosch felvétele és szívességéből

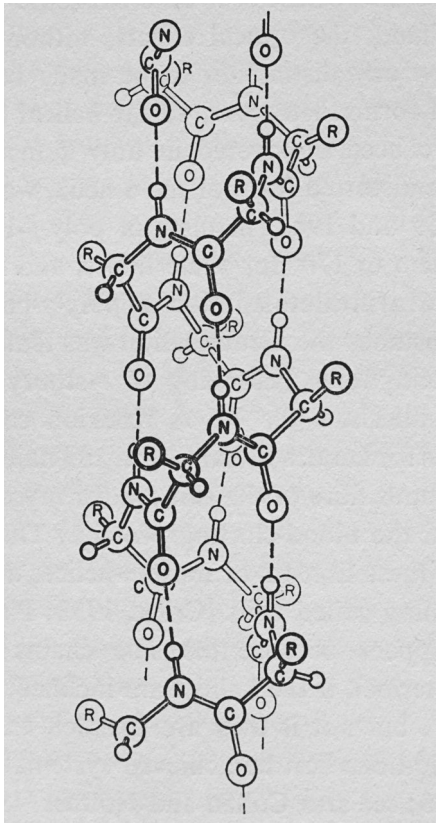
A lánc szerkezeti modelljére egyszerűsítő feltételezéseket fontolgatott, hogy megkönnyítse a szerkezet felderítését. Figyelmen kívül hagyta a peptidláncot felépítő aminosavak közötti különbségeket és a lánc szerkezetének modellezése szempontjából egyenértékűnek tekintette őket. Ezzel hasznos szimmetria-szempontot vezetett be a vizsgálatba.

Nagy előrelépést jelentett, amikor Pauling visszaemlékezett 25 évvel korábbi matematikai tanulmányaira a Kaliforniai Műszaki Egyetemen, ahol kémikus doktoráns volt. A matematika előadója, az angol Harry Bateman (1882–1946) professzor Manchesterben tanult, az angliai Cambridge-ben szerzett doktori fokozatot. Tanult Göttingenben és Párizsban is, tanított az angliai Liverpoolban és Manchesterben, valamint az Egyesült Államokban a Bryn Mawr Főiskolán és a Johns Hopkins Egyetemen. 1917-ben nevezték ki oktatónak az akkori Throop Műszaki Főiskolára, amely 1920-ban alakult át a Kaliforniai Műszaki Egyetemmé. Bateman szerint a legáltalánosabb művelet, amely egy aszimmetrikus elemet (például egy aminosavmolekulát) az eredetivel egyenértékű aszimmetrikus elemmé transzformál, a tengely körüli elfordítás a tengely mentén történő eltolással kombinálva. Ennek a kombinált műveletnek az ismétlésével csavarvonal (hélix) alakul ki.



Pauling alfa-hélixláncának rajza 1948 márciusából [1]

Ennek megfelelően vázolta fel Pauling a peptidláncot, amelyet az alfa-szénatomhoz tartozó két egyszeres kötés körül elforgatott. Az elfordítás mértéke peptidcsoportról peptidcsoportra azonos mértékű volt, és a műveletet, legalábbis gondolatban újra és újra megismételte. A peptidcsoportokat síkbelinek tételezte fel, a kismolekulák szerkezetében meghatározott geometriai méretekkel és az NH és CO csoportok között kialakuló hidrogénkötések esetében tartotta magát egy feltételezett hosszhoz. Az ábrán látható párhuzamos vonalak mentén feltekerte a peptidláncos papírlapot. Két olyan szerkezetet talált, amely megfelelt a feltételezéseinek. Az egyiket, amely fordulatonként 4,6 aminosavmolekulát tartalmazott, alfa-hélixnek nevezte el.



Jobbkezes alfa-hélix Max Perutz könyvéből [2], Low és Edsall nyomán [3]

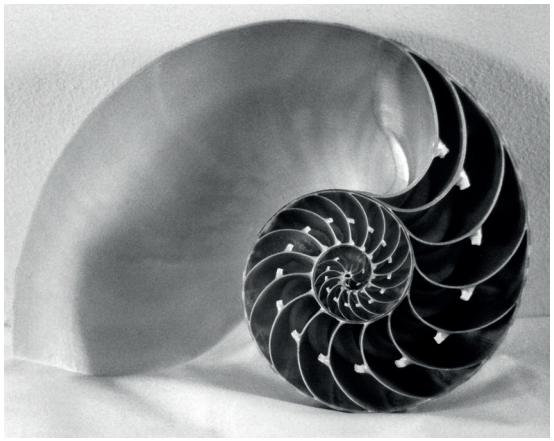
Pauling és munkatársai, R. B. Corey és H. R. Branson két közleményben [4 és 5] publikálták az alfa-hélix szerkezetét. Max Perutz 1961-ben kiadott könyvében [2] ezt csigalépcsős szerkezetként jellemzi, amelyben a lépcsőfokokat az aminosavak jelentik. A lépcsők magassága 1,5 angström, az elfordulás magassága a már említett 5,4 angström, és egy-egy elfordulás 3,6 lépcsőfoknak felel meg. Összesen 18 lépcsőfok után kerülünk vissza pontosan a kiindulási pont fölé. A lépcsőt, tehát a hélixet, az egyik aminosav karbonilcsoportja és a lánc mentén a hozzá képest negyedik aminosav imincsoportja közötti hidrogénkötés tartja össze.

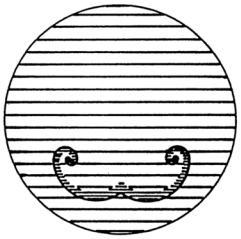
Az 5,4 angström ismétlődési távolság Pauling modelljében zavaró körülmény volt, mert eltért a fentebb említett 5,1 angströmös ismétlődési távolságtól. Az eltérés azonban nem tántorította el Paulingot a folytatástól, mert bízott a modell helyességében. Idővel Pauling és tőle függetlenül Francis Crick ezt az eltérést a hélixek szorosabb illeszkedésével értelmezte, ami a hélixek további tekeredésével és közöttük kialakuló kölcsönhatásokkal jöhetett létre. Crick szerint ez a gyenge kölcsönhatások hatására megvalósuló szimmetriasértés szép példája [6]. Időközben Bragg, Kendrew és Perutz mintegy 20 lehetséges modell adatait publikálta [7], amelyek azonban egytől egyig alkalmatlannak bizonyultak az alfa-keratin szerkezetének leírására. Ezek a modellek nem használták ki a peptidcsoport síkbeliségére vonatkozó ismereteket.

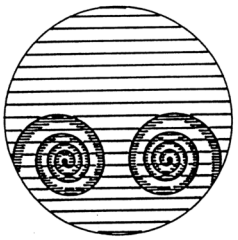
Ezen a ponton megszakítjuk az események leírását, hogy megjegyzést fűzzünk az [1] hivatkozáshoz, Pauling posztumusz megjelent tanulmányához. Pauling 1982-ben a W. H. Freeman and Company felkérésére „Az alfa-hélix felfedezése” címmel készített egy kéziratot. Ez lett volna az egyik fejezet Donald Voet biokémia-monográfiájában, amelyből idővel máig is forgalmazott sikeres tankönyv lett. Pauling 1994-ben meghalt, és Dorothy Munro, Pauling korábbi titkárnője és asszisztense 1995-ben kiderítette, hogy a kéziratot nem használták fel a könyvben, de erről Paulingot nem értesítették. Munro lehetőséget keresett az írás megjelentetésére, és a *Chemical Intelligencer*hez, a kémia kultúrájával foglalkozó, nemrég indult magazinhoz fordult. Egyikünk (IH) volt a magazin alapító szerkesztője, és örömmel jelentette meg a tudománytörténeti jelentőségű dolgozatot [1]. Így maradt meg az utókor számára az alfa-hélix felfedezésének részletes története, ami a szokásos folyóiratcikkekben nem szerepelt. Megkérdeztük Donald Voetot, mit tud hozzátenni a sztorihoz. Arra emlékezett, hogy könyvük szerkesztője felkérte Paulingot a fejezet megírására, de semmi továbbiról nincs tudomása [8].

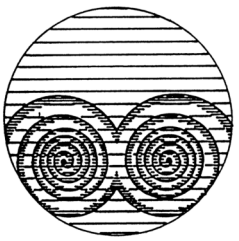
Figyelemre méltó eltérés volt a fentebb már hivatkozott, 1950-ben [4] és 1951-ben [5] megjelent két Pauling-dolgozat címe között. Az elsőben a „spirál”, a másodikban pedig a „hélix” szó szerepelt. Még ma is gyakran használják felcserélhetően a két szót a szakirodalomban, pedig jelentésük között lényeges különbség van. Spriálokra mutat példát a 75. oldalon balra fent látható három ábra.

A spirálok átmérője szabályszerűen változó, míg a hélixeké állandó. Ezért a biológiai makromolekulák szerkezetét helyesen hélixnek vagy csavarnak nevezzük. A hétköznapi beszédben a hélixes szerkezeteket gyakran nevezik spirálnak, példa erre a spirálfüzet és a csigalépcső. Nem is javasoljuk ezeknek a neveknek a megváltoztatását, mert a nyelv autonóm módon működik, de a tudományos szövegekben elvárható a pontos szóhasználat.





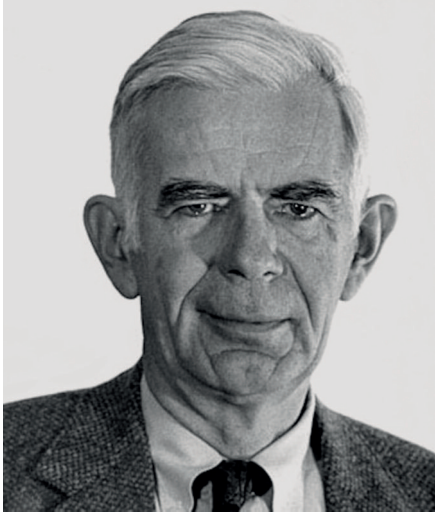




Példák spirálra. Balra fent: Nautilus-héj. Lloyd Kahn felvétele és szívességéből [9]. Jobbra fent: Kettős spirál. Gidon Graetz „Belső fény" című szobra (részlet) a Weizmann Intézet kertjében, Rehovot, Izrael. A szerzők felvétele
Lent: Spirális mintázat időbeli kialakulása Kőrös Endre kutatásaiból (Belouszov–Zsabotyinszkij-féle oszcilláló reakciók) [10]

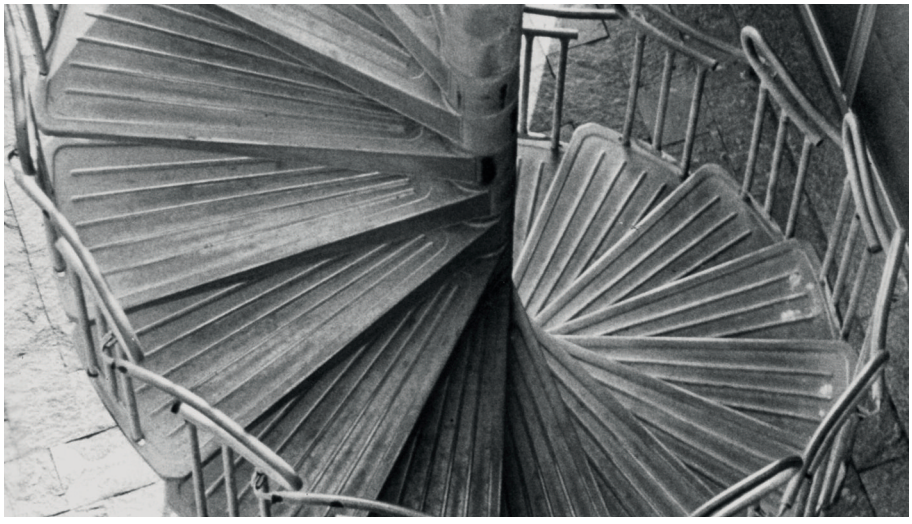
Amint a [4] és [5] hivatkozás címei jelzik, Pauling is felismerte a spirál és a hélix közötti különbséget. A neves krisztallográfus, Jack D. Dunitz 1948 és 1951 között a Kaliforniai Műszaki Egyetemen, Pauling csoportjában dolgozott, és közelről követhette az alfa-hélix szerkezetének felfedezését. Amikor Pauling Dunitznak beszélt a modelljéről, „spirálnak" nevezte. Dunitz felhívta Pauling figyelmét arra, hogy „hélix" lenne a helyes kifejezés. Dunitz szerint Pauling ettől kezdve következetesen a „hélix" névvel jellemezte a modellt. Dunitz szerint ő (Dunitz) segített nevet adni az alfa-hélixnek és ezt személyes hozzájárulásának tekintette a molekuláris biológiához [11].

A vírusok szerkezetének úttörő kutatójától, Donald Caspartól [12] hallottunk arról, hogy Horace R. Crane (1907–2007) atomfizikus volt az első, aki kutatta a hélix-szerkezetek azonos egységek összekapcsolódásából történő kialakulását [13]. Crane hosszú pályafutását a Michigani Egyetem fizikaprofesszoraként töltötte. 1986-ban megkapta a tudósoknak adható legmagasabb amerikai kitüntetést, a Nemzeti Tudományos Érdemérmet „a szabad elektronok és pozitronok mágneses momentumának és spinjének első meghatározásáért". A második világháborúban a Massachusettsi Műszaki Egyetemen vett részt a radar kifejlesztésében, a Carnegie Intézetben és a Michigani Egyetemen pedig a robbanóeszközök gyújtószerkezetének tö-



Horace R. Crane (Horace R. Crane – National Science and Technology Medals Foundation, nationalmedals.org)

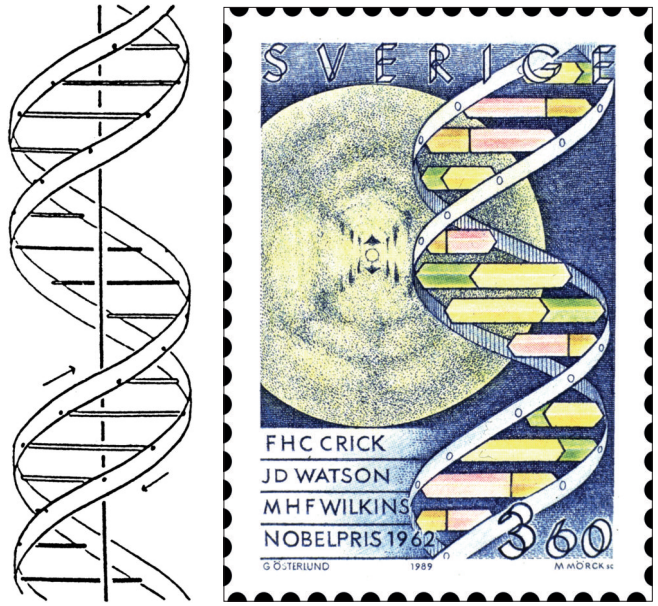
Csigalépcsők (hélixek). A jobb oldali képen a csigalépcső és árnyéka megkettőzött hélix (de nem kettős hélix), amely a brit Molekuláris Biológiai Laboratórium, Cambridge, egykori épületének falához kapcsolódik. A szerzők felvételei



kéletesítésén dolgozott. Kevésbé ismert, hogy a futószalagok hatékony működésének problémáival is foglalkozott. A háború után ezeknek a tapasztalatoknak a nyomán ismerte fel, hogy a biológiai növekedés analóg a részegységek összeszerelésének gyártási folyamatával. Crane szerint a vírusok (fehérjeburka) és más fehérjék reprodukálásának kérdése minden tudomány egyik legizgalmasabb témája [13]. Egyszerű modelleket épített például gyufásdobozokból, melyeket azonos módon, a páronkénti kapcsolatokat ismételve fűzött össze, és így hélixhez jutott. Felismerte, hogy a hélix szimmetriája szempontjából nincs szükség arra, hogy egész számú fordulathoz egész számú építőelem tartozzék [14]. A hélixes szerkezetek diffrakciójának elméletét W. Cochran, Francis Crick és V. Vand dolgozta ki [15].

Odile és Francis Crick egykori otthonának bejárata fölött ma is áll az általuk tervezett egyes hélix. Portugal Place 19–20, Cambridge. A szerzők felvétele

Crick az egyes hélixet választotta „Aranyhélix” címmel egykori cambridge-i otthonuk díszítésére, amikor házuk bejárata fölé egyszerű, sárgára festett fémhélixet emelt. A Nobel-díjas Arthur Kornberg könyvet adott ki a biotechnológiai vállalkozásokról, és ugyancsak az Aranyhélix címet adta neki. Ebben az esetben azonban a cím a kettős hélixre vonatkozott, ami egyértelmű az előszó következő mondatából: „A DNS-hélix aranyá alakítása újabb alkimista álomnak tűnt” [16]. Kornberg Nobel-díját 1959-ben Severo Ochoával megosztva kapta „a ribonukleinsav és a dezoxiribonukleinsav biológiai szintézise mechanizmusának felderítéséért”.

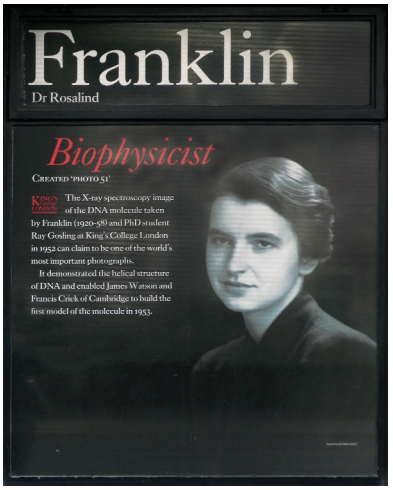


A DNS kettős hélixének egyszerűsített ábrázolása az eredeti *Nature*-cikkben [17] és svéd bélyegen. A háttérben Rosalind Franklin és doktoránsa, Raymond Gosling híres, 51-es számú röntgendiffrakciós felvétele látható, de nevüket a bélyeg nem tünteti fel

Balra: Odile és Francis Crick, 2004, kaliforniai otthonukban
Jobbra: James D. Watson, 2000, a szerzők budapesti otthonában. A szerzők felvételei

Kornberg könyvének említése már elvezetett bennünket a DNS kettőshélix-szerkezetéhez, amelyet James D. Watson és Francis Crick javasolt 1953-ban egyoldalas *Nature*-cikkében [17]. A rövid beszámolót a kettős hélix egyszerűségében is fenséges rajza illusztrálta. Sokáig azt gondoltuk, hogy a művészi hajlamú Odile Crick készítette. Amikor 2004-ben meglátogattuk Crickéket, kiderült, hogy a rajz egy bonyolultabb illusztráció kontúrvonalának másolásával készült.

Balra: Rosalind Franklin és Raymond Gosling 51-es számú röntgendiffrakciós felvételének képe Larry Kirkland freskójának részeként, amely a Keck Központ előcsarnokát díszíti. 500 5th Street NW, Washington, D.C. A Központ az amerikai tudományos akadémia, mérnökakadémia és orvosi akadémia közös hivatala [18]. Jobbra: Rosalind Franklin arcképe a King’s College, London, egyik kiállításán. A szerzők felvételei



A „Májusfa” nevű pub kerítésébe font vízszintes kettős hélix. A pub, Portugal Place 20A, közvetlenül Crickék egykori otthonának szomszédságában volt. A képet a szerzők 2000-ben készítették

Watson és Crick első *Nature*-cikkét hamarosan követte egy második, valamivel hosszabb, amely a kettős hélix genetikai vonatkozásairól szólt [19]. Az első közlemény egyszerű rajzát a másodikban is reprodukálták. A két Watson–Crick-dolgozatból nem derül ki, hogy felfedezésüknek a következő négy előzménye volt [20]: 1. Oswald Avery és két munkatársa felfedezése, hogy a DNS az öröklődés anyaga [21]. 2. Erwin Chargaff megfigyelése, hogy a purin- és pirimidinbázisok 1:1 arányban fordulnak elő minden szervezet DNS-ében [22]. 3. Linus Pauling alfa-hélix fehérjeszerkezete [5]. 4. Rosalind Franklin röntgendiffrakciós mérései [23], amelyek jelezték a DNS-szerkezet C_2-szimmetriáját.

A Crickék házának bejárata fölött emelt hélix jobbkezes, akárcsak a DNS, de a képen látható pub kerítésének kettős hélixe balkezes [24]. Ez a pub tulajdonosának tévedése volt, míg maguk a méretek helyesek, azok Cricktől származtak, aki a pubot rendszeresen látogatta. Hamarosan a kettős hélix népszerű ikonná vált, és ma már a tudomány egyik legismertebb szimbóluma. A szoborállítás nem egyszerű dolog, mégis sok kettőshélix-emlékművel találkozhatunk. A modell sikerének azonban nem mindenki örült. Erwin Chargaff, akinek a DNS-bázispárokra vonatkozó felfedezése döntő szerepet játszott a kettős hélix felfedezésében, a modell népszerűsítését gátlástalan propagandakampánynak tartotta [25]. A cikkben négy DNS-szobrot mutatunk be.

Balra: Bror Marklund alkotása, 1997, az Uppsalai Egyetem orvosi kara előtt
Jobbra: Marino Di Prospero „A bölcsesség temploma” című alkotása, 2002, a L’Aquilai Egyetem kampuszán. A szerzők felvételei

Balra: Tom Otterness alkotása, 2001, a Manhattan, New York, déli részén található szoborparkban. Ez a kép szerepelt az MKL 2017. októberi számának címlapján
Jobbra: „A spirál ideje – az idő spirálja.” Charles A. Jencks alkotása a Cold Spring Harbor-i Laboratórium kampuszán, a háttérben James D. és Elizabeth L. Watson otthonával. A spirál szó a szobrász által adott címben szerepel, de Watsonék otthonának közelsége is a DNS szerkezetére utal. Felfelé haladva a szobor átmérője fokozatosan csökken. A felső végen a szobor lezárása láthatóan problémát okozott a művésznek. A szerzők felvételei

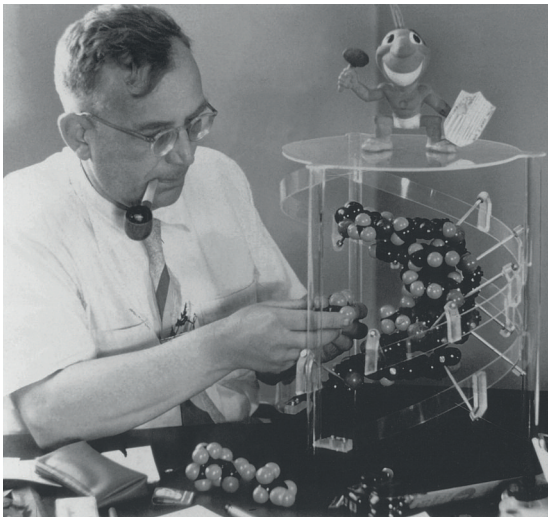
Az uppsalai szobor nagy és gyönyörű. A felső végén kettéválik, mintha a szaporodásra készülne. Közelebbről szemügyre véve a gerincen kívül látszanak a bázisok. Paulingnak is volt egy ilyen hibás DNS-modellje, amikor, kissé megkésve, ő is bekapcsolódott a nukleinsavak szerkezetkutatásába. Marklund esetében ez lehetett a művész vagy tanácsadóinak tévedése, az alkotói szabadságnak is tulajdoníthatjuk. A L’Aquilai Egyetem szobrának eleganciájához nagyban hozzájárul a fehér carrarai márvány. Itt is kettéválik a felső rész.

Azon kívül, hogy a manhattani szobor kettős hélixe a felső végén felhasad, a kettévált szálak új kettős hélix kialakulására is utalnak. Ez összhangban van a híres Meselson–Stahl-kísérlettel, amely a DNS másolásának ún. félkonzervatív mechanizmusát bizonyította [26], és amelyet sokan a biológia legszebb kísérletének tartanak.

Az alfa-hélix és a kettős hélix felfedezésének nélkülözhetetlen eleme volt a modellalkotás. Nem sokkal a DNS szerkezetéről megjelent *Nature*-publikációk után a nagy fizikus, George Gamow Watsonnak és Cricknek írt levelében felvetette a nukleinsavaktól a fehérjékhez vezető információátvitel kérdését. Ő volt a genetikai kód kutatásának egyik kezdeményezője, bár a molekuláris biológusok előszeretettel hangsúlyozzák elképzeléseinek ténybeli hibáit ahelyett, hogy elismernék mennyire ösz-

Matthew Meselson és Franklin Stahl sok évvel híres kísérletük után. Franklin Stahl szívességéből

George Gamow kettőshélix-modellel. Néhai Igor Gamow, George Gamow fia szívességéből



James D. Watson bal kezében kettőshélix-modellel. Cold Spring Harbor Laboratórium, 1953. június.
Néhai Karl Maramorosch felvétele és szívességéből

tönzők voltak a felvetései. Gamow is elkötelezett modellező volt.

Watson 1953 júniusában, a Cold Spring Harbor Laboratóriumban tartott előadóülésen mutatta be szerény méretű kettőshélix-modelljét, vagyis nem sokkal azután, hogy a felfedezés áprilisban megjelent a *Nature*-ben. A brit Molekuláris Biológiai Laboratórium Pauling példája nyomán kifejlesztette a modellkészítés művészetét, de a DNS szerkezetének kutatása során még nem volt nyilvánvaló, hogy történelmi jelentőségű modellt alkottak. Évek múltán sem volt könnyű összerakni az eredeti modell részeit, hogy kiállítsák a londoni Science Museumban [27], de ma ott van, megérdemelten, mint tudománytörténeti mérföldkő.

IRODALOM

[1] Linus Pauling, "The Discovery of the Alpha Helix." Chem. Intell. 1996, 2(1), 32–38. Utánközlés: B. Hargittai and I. Hargittai, eds., Culture of Chemistry: The Best Articles on the Human Side of 20th-Century Chemistry from the Archives of the Chemical Intelligencer. New York: Springer, 2015, 161–167. További tárgyalását lásd: Hargittai István és Hargittai Magdolna, Szimmetriák a felfedezésben. Budapest: Vince Kiadó, 2003, 5. fejezet, "Linus Pauling," 87–119.

[2] M. F. Perutz, Proteins and Nucleic Acids. Amsterdam: Elsevier, 1962, 13.

[3] B. W. Low and J. T. Edsall, "Aspects of protein structure." In D. E. Green, ed., Currents in Biochemical Research, New York: Interscience, 1956, 378–433.

[4] L. Pauling and R.B. Corey, "Two Hydrogen-Bonded Spiral Configurations of the Polypeptide Chain." J. Am. Chem. Soc. 1950, 72, 5349 (1 oldal).

[5] L. Pauling, R.B. Corey, and H.R. Branson, "The Structure of Proteins: Two Hydrogen-Bonded Helical Configurations of the Polypeptide Chain." Proc. Natl. Acad. Sci. USA 1951, 37, 205–211.

[6] Francis Crick, What Mad Pursuit: A Personal View of Scientific Discovery. Basic Books, New York, 1988, 59.

[7] W. L. Bragg, J. C. Kendrew, and M. F. Perutz, "Polypeptide Chain Configuration in Crystalline Proteins." Proc. R. Soc. 1950, 203A, 321–357.

[8] E-mail-váltás Donald Voettal (University of Pennsylvania), 2022. december 27-én.

[9] I. Hargittai and M. Hargittai, Symmetry: A Unifying Concept. Bolinas, California: Shelter Publications, 1994, 163.

[10] E. Kőrös, "Oscillations, Waves, and Spirals in Chemical Systems." In I. Hargittai and C.A. Pickover, eds., Spiral Symmetry. Singapore: World Scientific, 1992, 221–249; 241.

[11] I. Hargittai, "Jack D. Dunitz (1923–2021): a chemists' crystallographer." Struct. Chem. 2022, 33, 291–297.

[12] I. Hargittai, "Donald L. Caspar (1927–2021) – pioneer of virus structures." Struct. Chem. 2022, 33, 993–995.

[13] H. R. Crane, "Principles and Problems of Biological Growth." Sci. Month. 1950, 70, 376–389; H. R. Crane, „Biological Growth." In Donald B. Wetlaufer, The Protein Folding Problem. New York: Routledge, 1984, 8. fejezet.

[14] Publikálatlan beszélgetés Donald L. Casparral, 1996, Tallahassee, Florida. A beszélgetés több részlete megtalálható: Hargittai István és Hargittai Magdolna, Szimmetriák a felfedezésben. Budapest: Vince Kiadó, 2003, 23, 65, 98, 158, 181, 182.

[15] W. Cochran, F. H. C. Crick, and V. Vand, "The Structure of Synthetic Polypeptides. I. The Transform of Atoms on a Helix." Acta Crystallogr. 1952, 5, 581–586.

[16] Arthur Kornberg, The Golden Helix: Inside Biotech Ventures. University Science Books, Sausalito, California, 1995.

[17] J. D. Watson and F. H. C. Crick, "Molecular Structure of Nucleic Acids: A Structure for Deoxyribose Nucleic Acid." Nature 1953, 171, 737–738.

[18] I. Hargittai and M. Hargittai, "Science in Washington, DC. An Introduction to Memorials (a Pictorial Essay). European Review, megjelenés alatt, doi:10.1017/S1062798722000515.

[19] J. D. Watson and F. H. C. Crick, "Genetical Implications of the Structure of Deoxyribonucleic Acid." Nature 1953, 171, 964–967.

[20] I. Hargittai, "Francis Crick (1916–2004)." Struct. Chem. 2004, 15, 545–546.

[21] O. T. Avery, C. MacLeod, and M. McCarty, "Studies on the Chemical Nature of the Substance Inducing Transformation of Pneumococcal Types: Induction of Transformation by a Desoxyribonucleic Acid Fraction Isolated from Pneumococcus Type III." J. Exper. Med. 1944, 79, 137–158.

[22] E. Chargaff, "Chemical specificity of nucleic acids and mechanism of their enzymatic degradation." Experientia 1950, 6, 201–209.

[23] R. E. Franklin and R. G. Gosling, "Molecular configuration in sodium thymonucleate." Nature 1953, 171, 740–741.

[24] I. Hargittai and M. Hargittai, "A Unique Venue of Discoveries in Structural Chemistry: the 75-Year and 60-Year Jubilees of the MRC Laboratory of Molecular Biology–A Personal Tribute." Struct. Chem. 2022, 33, 281–289.

[25] E. Chargaff, Heraclitean Fire: Sketches from a Life before Nature. The Rockefeller University Press, New York, 1978, 106.

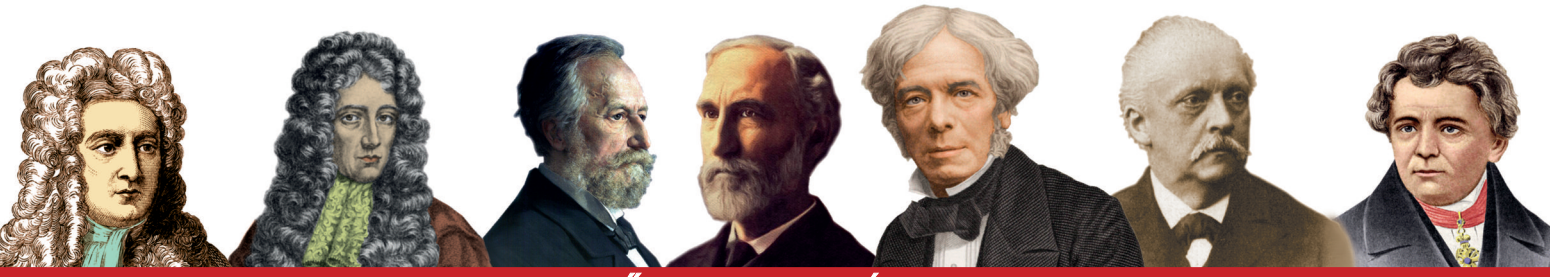
[26] Matthew Meselson and Franklin Stahl, "The Replication of DNA in Escherichia Coli." Proc. Natl. Acad. Sci. 1958, 44(7), 671–682.

[27] Hargittai István és Hargittai Magdolna, Londoni séták a tudomány körül. Budapest: Akadémiai Kiadó, 2021.

Olvasnivalót ajánlanék

Szilárd Leó és az atombomba. Néha ajánlok olvasóinknak más folyóiratokban megjelent cikkeket – nemcsak ismereteik bővítése céljából, hanem mert úgy érzem, emberi létünk fejlődéséhez is hozzájárulhatnak. Ezt teszem most is. Hargittai István hívta fel figyelmemet a *Physics World* 2023. január 23-i számának „feature"-cikkére, amely arról szól, hogyan változott a 125 éve született Szilárd Leó véleménye, talán meglepően, a maghasadás nukleáris fegyverekben való felhasználásának lehetőségéről. (Leo Szilard: the physicist who envisaged nuclear weapons but later opposed their use, https://physicsworld.com/a/leo-szilard-the-physicist-who-envisaged-nuclear-weapons-but-later-opposed-their-use/)

KT



KIRŐL NEVEZTÉK EL?

Inzelt György
ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

Van der Waals-egyenlet, van der Waals-erők, Eötvös-törvény

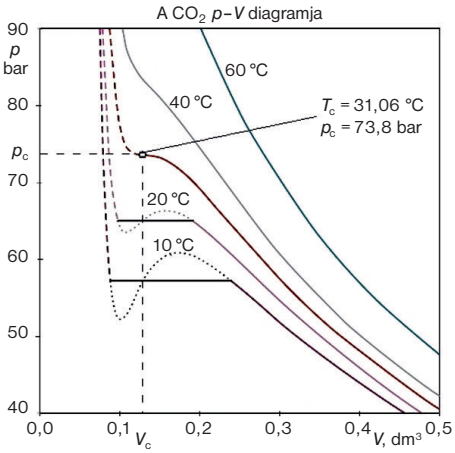
A gázok csak bizonyos nyomás- és hőmérséklet-tartományban viselkednek ideális (tökéletes) gázként. A viselkedésük általában nem írható le az ideális gázokra vonatkozó gáztörvényekkel. Ilyenkor reális gázokról beszélünk. A reális gázok viselkedését Johannes Diderik van der Waals kísérelte meg először leírni 1873-ban abból a koncepcióból kiindulva, hogy a gázmolekulák, illetve gázatomok között vonzó kölcsönhatás lép fel, valamint van térfogatuk is, azaz nem pontszerűek [1, 2]. A gázrészecskék között működő **vonzóerőket van der Waals-erők**nek nevezzük. Ezen erők (kölcsönhatások) jellegét később tisztázták, így beszélünk indukált és diszperziós erőkről, illetve dipólus kölcsönhatásokról. A diszperziós kölcsönhatások annak következtében lépnek fel, hogy az atomban (molekulában) a másik atom (molekula) elektronjainak rezgései gerjesztett elektronrezgéseket indukálnak. E vonzóerők létét az is bizonyítja, hogy minden gáz tud kondenzálódni, kis hőmérsékleten és nagy nyomáson. A van der Waals-erők az elsőrendű kémiai kötéseknél nagyságrendekkel kisebb energiát képviselnek. Van der Waals két korrekciót alkalmazott. A részecskék közötti vonzás miatt a nyomás kisebb, mint tökéletes gázok esetén, ezért a/V^2 nyomáskorrekciót használt. A rendelkezésre álló térfogatot pedig a gázrészecskék saját térfogatával kell csökkenteni, erre szolgál a b korrekció. Ezeket figyelembe véve a következő egyenletet nyerte:

$$\left(P+a\frac{n^2}{V^2}\right)(V-nb)=nRT,$$

ahol p a reális gáz nyomása (Pa), V a reális gáz térfogata (m^3), T a hőmérséklet (K) és n az anyagmennyiség (mol). Az a ($kPa \cdot dm^6 \cdot mol^{-2}$) és a b ($dm^3 \cdot mol^{-1}$) anyagi minőségtől függő állandókat **Van der Waals-állandók**nak nevezik.

Néhány gáz a és b állandói: hélium 3,45 és 0,0237, argon 136,3 és 0,0322, hidrogén 24,7 és 0,0266, nitrogén 140,8 és 0,0391, oxigén 137,8 és 0,0318, klór 657,4 és 0, 0562.

A kisebb hőmérsékletekhez tartozó izotermák **(1. ábra)** esetén a görbéknek lokális minimuma és maximuma is van: ez azt jelentené, hogy a térfogat csökkenése adott viszonyok között nyomáscsökkenéssel jár, ami a gyakorlatban nem fordul elő. A reális gázok esetében viszont a gyakorlatban is megfigyelhető, hogy a térfogat csökkentése nem eredményez nyomásváltozást mindaddig, amíg a reális gáz (gőz) teljes mennyisége nem cseppfolyósodik. A $p-V$ görbék e szakasza a valóságban egyenes, nem pedig harmadfokú görbének megfelelő.



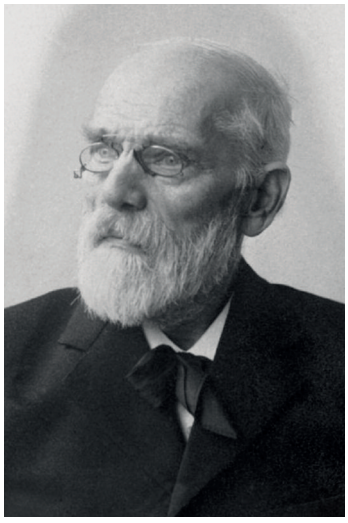
1. ábra. A szén-dioxid $p-V$ diagramja a van der Waals-egyenlet alapján különböző hőmérsékleten (Dr. Báder Imre munkája – https://hu.wikipedia.org/wiki/Van_der_Waals-egyenlet)

A reális gáz anyagi minőségétől függően egy adott hőmérsékletnél (ezt nevezzük kritikus hőmérsékletnek, T_c) a harmadfokú görbének inflexiós pontja van, ennél nagyobb hőmérsékleten pedig egyre jobban közelíti a görbemenet a tökéletes gázokra vonatkozó, Boyle–Mariotte-törvénynek megfelelő hiperbolát, a gáz állapota pedig a tökéletes gáz állapotát. A reális gázoknak e hőmérséklethez tartozó állapotát kritikus állapotnak, e hőmérséklet inflexiós pontjához tartozó nyomást és térfogatot pedig kriti-

kus nyomásnak (p_c), illetve kritikus térfogatnak (V_c) nevezzük. A kritikus állapotjelzők segítségével definiáljuk az ún. redukált állapotjelzőket (p/p_c), (V/V_c), (T/T_c), amelyek segítségével megalkotható a redukált állapotegyenlet, és az alapján a megfelelő állapotok tétele. Ez utóbbi azt jelenti, hogy ha két anyag adott állapotában a redukált paraméterek értékei megegyeznek, akkor a két anyag egymásnak megfelelő állapotban van. Azt az állítást, hogy létezik olyan állapotegyenlet, amely minden anyagra közös, és amely egyértelműen kapcsolja össze a redukált állapottényezőket, és ezeken kívül csak olyan számtényezők fordulnak elő, amelyek függetlenek az anyagi minőségtől, a megfelelő állapotok tételének nevezzük. Ezt a tételt van der Waals 1880-ban publikálta.

A Van der Waals-egyenlet jó közelítéssel leírja a gőz-folyadék átmenetet, a kritikus viselkedést, megmagyarázza a Joule–Thomson-hatást (a lehűlést gázok adiabatikus kiterjesztésénél). Ez a tétel szolgált vezérfonalul 1898-ban a hidrogén cseppfolyósításakor James Dewar (1842–1923) skót professzornak (az ő nevét a **Dewar-edény**, -palack őrzi, amelyet 1872-ben talált fel; ennek dupla fala között vákuum van, és ezáltal kiváló hőszigetelő), majd 1908-ban a cseppfolyós hélium előállításánál Heike Kamerlingh Onnes (1853–1926) leydeni professzornak. Ő a cseppfolyós hélium segítségével fedezte fel a szupravezetés jelenségét 1911-ben. 1913-as Nobel-díja („az anyag viselkedésének vizsgálatáért kis hőmérsékleten és a cseppfolyós hélium előállításáért") átvételekor ezt hangsúlyozta is.

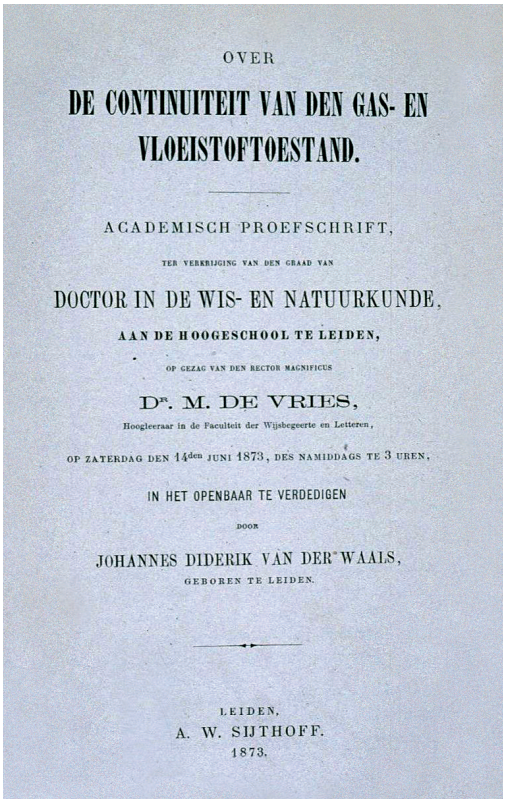
Johannes Diderik van der Waals



2. ábra. Johannes Diderik van der Waals

Johannes Diderik van der Waals (Leiden, Hollandia 1837. november 23. – Amszterdam, 1923. március 8.) **(2. ábra)** apja, Jacobus van der Waals ács volt. Johannes volt a legidősebb a tíz gyerek közül. A kor szokásának megfelelően, mint munkás szülők gyermeke, nem középiskolát végzett, hanem az úgynevezett haladó általános iskolát fejezte be 15 éves korában. Ezzel viszont nem mehetett egyetemre, például azért sem, mert nem tanult klasszikus nyelveket. 1856 és 1861 között elvégezte a tanítói tanfolyamokat, és tanítóként kezdett el dolgozni. 1862-től látogatta a Leideni Egyetem matematikai, fizikai és csillagászati előadásait, mint nem beíratkozott hallgató. Megszerezte a középiskolai tanári diplomát, és Hágában fizikatanárként tanítani is kezdett. 1865-ben megnősült. (Három lányuk és egy fiuk született, de felesége 34 éves korában meghalt tüdőbajban.) Szerencsés módon megváltoztatták a törvényt, és így Van der Waals rendes hallgatóként beíratkozhatott az egyetemre, letehette a vizsgákat, és diplomát szerezhetett.

Van der Waalst doktori témaválasztásában főként két korábbi munka inspirálta. Az egyik a nagy német termodinamikus, Rudolf Clausius (1822–1888) „A mozgás egyik fajtája, amit hőnek hívunk" című publikációja [3], a másik Thomas Andrews (1813–1885) ír orvos, majd kémiaprofesszor írása a gázok és a folyadékok közötti fázisátmenetekről; Andrews vezette be a kritikus hőmérséklet és a kritikus nyomás fogalmát is [4]. Van der Waals 1873-ban védte meg doktori disszertációját. Ennek címe „Átmenet a gáz- és a folyadékállapot között" (**3. ábra**) volt. Ebben be-



OVER

DE CONTINUITEIT VAN DEN GAS- EN VLOEISTOFTOESTAND.

ACADEMISCH PROEFSCHRIFT,

TER VERKRIJGING VAN DEN GRAAD VAN

DOCTOR IN DE WIS- EN NATUURKUNDE,

AAN DE HOOGESCHOOL TE LEIDEN,

OP GEZAG VAN DEN RECTOR MAGNIFICUS

Dr. M. DE VRIES,

Hoogleeraar in de Faculteit der Wijsbegeerte en Letteren,

OP ZATERDAG DEN 14den JUNI 1873, DES NAMIDDAGS TE 3 UREN,

IN HET OPENBAAR TE VERDEDIGEN

DOOR

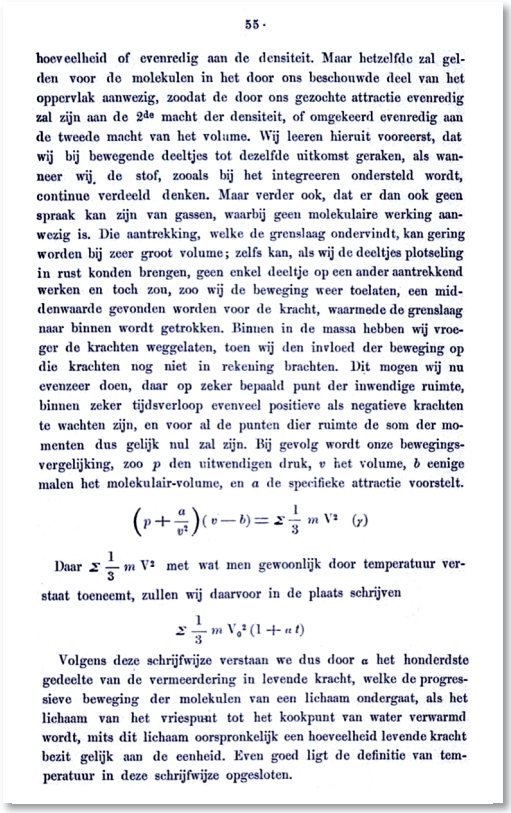
JOHANNES DIDERIK VAN DER WAALS,

GEBOREN TE LEIDEN.

LEIDEN,
A. W. SIJTHOFF.
1873.

3. ábra. Van der Waals disszertációjának címlapja (http://rbx-exhibit2000.scs.illinois.edu//vanderwaals.htm)

4. ábra. Van der Waals disszertációjának egyik oldala az egyenlet levezetésével



55.

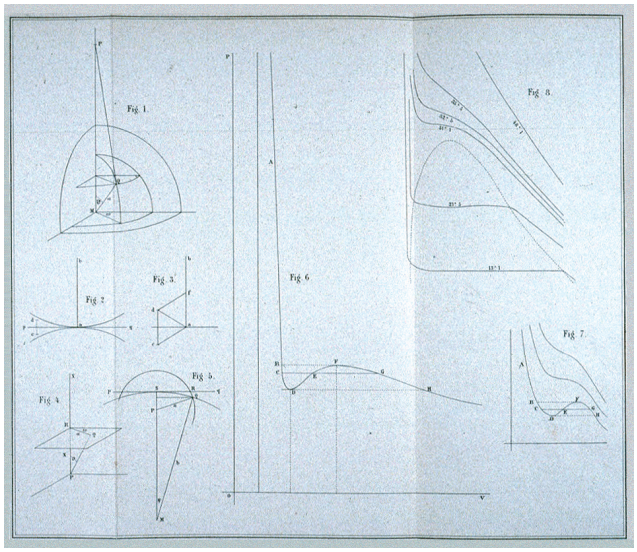
hoeveelheid of evenredig aan de densiteit. Maar hetzelfde zal gelden voor de molekulen in het door ons beschouwde deel van het oppervlak aanwezig, zoodat de door ons gezochte attractie evenredig zal zijn aan de 2de macht der densiteit, of omgekeerd evenredig aan de tweede macht van het volume. Wij leeren hieruit vooreerst, dat wij bij bewegende deeltjes tot dezelfde uitkomst geraken, als wanneer wij de stof, zooals bij het integreeren ondersteld wordt, continue verdeeld denken. Maar verder ook, dat er dan ook geen spraak kan zijn van gassen, waarbij geen molekulaire werking aanwezig is. Die aantrekking, welke de grenslaag ondervindt, kan gering worden bij zeer groot volume; zelfs kan, als wij de deeltjes plotseling in rust konden brengen, geen enkel deeltje op een ander aantrekkend werken en toch zou, zoo wij de beweging weer toelaten, een middenwaarde gevonden worden voor de kracht, waarmede de grenslaag naar binnen wordt getrokken. Binnen in de massa hebben wij vroeger de krachten weggelaten, toen wij den invloed der beweging op die krachten nog niet in rekening brachten. Dit mogen wij nu evenzeer doen, daar op zeker bepaald punt der inwendige ruimte, binnen zeker tijdsverloop evenveel positieve als negatieve krachten te wachten zijn, en voor al de punten dier ruimte de som der momenten dus gelijk nul zal zijn. Bij gevolg wordt onze bewegingsvergelijking, zoo p den uitwendigen druk, v het volume, b eenige malen het molekulair-volume, en a de specifieke attractie voorstelt.

$$\left(p+\frac{a}{v^2}\right)(v-b)=\Sigma\frac{1}{3}\,m\,V^2 \quad (\gamma)$$

Daar $\Sigma\frac{1}{3}\,m\,V^2$ met wat men gewoonlijk door temperatuur verstaat toeneemt, zullen wij daarvoor in de plaats schrijven

$$\Sigma\frac{1}{3}\,m\,V_0^2(1+\alpha t)$$

Volgens deze schrijfwijze verstaan we dus door α het honderdste gedeelte van de vermeerdering in levende kracht, welke de progressieve beweging der molekulen van een lichaam ondergaat, als het lichaam van het vriespunt tot het kookpunt van water verwarmd wordt, mits dit lichaam oorspronkelijk een hoeveelheid levende kracht bezit gelijk aan de eenheid. Even goed ligt de definitie van temperatuur in deze schrijfwijze opgesloten.



5. ábra. Van der Waals disszertációjának egyik oldala ábrákkal

vezette a molekulák térfogatának és kölcsönhatásának elképzelését, és itt közölte híres egyenletét és a megfelelő izotermákat is (**4.** és **5. ábra**). James Clerk Maxwell (1831–1879) azonnal felismerte a munka jelentőségét. Így írt róla: „Kétségtelen, hogy Van der Waals neve hamarosan a molekuláris tudomány legkiválóbbjai között fog szerepelni” [5].

Pedig, ahogy van der Waals maga is említette a Nobel-előadásában, komoly ellenszélben kellett dolgoznia, hiszen akkor még sokaknak kétségei voltak a hő mibenléte és a részecskék mozgásának kapcsolata tekintetében, olyan neves tudósok, mint Ernst Mach (1838–1916) vagy Wilhelm Ostwald (1853–1932) pedig egyenesen tagadták az atomok és a molekulák létezését. Van der Waals viszont erre az elképzelésre építette fel az elméletét, sőt meg is tudta becsülni a molekulák méretét és a köztük fellépő kölcsönhatás nagyságát. 1877-ben kinevezték fizikaprofesszornak az Amszterdami Egyetemre. Itt dolgozott 70 éves koráig. Kollégája volt Jacobus Henricus van ‘t Hoff, utódja fia, ifjabb Johannes Diderik van der Waals lett.

A teljesség kedvéért még megemlítjük további fontos munkáit: „Theory of Binary Solutions” (1890), kapilláris elméletét (1893) és Philip Kohnstamm-mal (1875–1951) írt könyvét (Lehrbuch der Thermodynamik; 1908).

Már nyugdíjas volt, amikor 1910-ben megkapta a fizikai Nobel-díjat a „gázok és folyadékok állapotegyenletéért”.

Az Eötvös-törvény

Az Eötvös-törvény tiszta folyadékok felületi feszültségének (γ) hőmérsékletfüggését írja le.

$$\gamma V^{2/3} = k_E (T_k - T),$$

ahol k_E az ún. Eötvös állandó, V a móltérfogat ($V^{2/3}$ = az 1 mól anyagmennyiség által elfoglalt felület), T_k a korrigált kritikus hőmérséklet (általában $T_k = 6$) és T a mérési hőmérséklet.

Eötvös Loránd (1848–1919) több mint 20 évig foglalkozott a folyadékok felületi feszültségének mérésével, és ez volt a fő tudományos témája a gravitációs vizsgálatainak megkezdéséig. A témát Franz Neumanntól (1798–1895) kapta a Königsbergi Egyetemen. (Kirchhoff küldte 1869-ben egy szemeszterre Heidelbergből egykori tanárához elméleti fizikát tanulni.) Ezt a törvényt 1885-ben állapította meg [6, 7, 8]. Ez volt az 1889-es akadémiai elnöki székfoglalójának témája is, amelyet „A folyadékok felületi feszültségeinek összefüggése a kritikai (sic!) hőmérséklettel” [9] tartott. Eötvös Loránd életét és tevékenységét nem fogjuk e helyütt tárgyalni, mert bőséges magyar nyelvű irodalom áll rendelkezésre. De hogy miért vettük be van der Waals-ról szóló írásunkba ezt a törvényt, az alábbiakban megmagyarázzuk. Sőt, át is adom a szót Eötvösnek [7, 8]:

„Körülbelöl tíz évvel ezelőtt egy módszert gondoltam ki a kapillaritási állandó megfigyelésére, mely lehetővé tette a nyugvó folyadékok felületének teljes kiterjedésükben való vizsgálatát, és mely nekem ezért a kapillaritás-elmélet eredményeinek vizsgálatára különösen alkalmasnak látszott. Az utóbbi volt tulajdonképpen a cél, amire eredetileg törekedtem, de nemsokára vizsgálódásaim területe kibővült: az elektrokapillaritás jelensége, az úgynevezett hatósugár kérdése merültek fel akaratlanul, és részben meg is oldódtak.

Közben sikerült a folyadékok felületi feszültségét tetszés szerinti időtartamon át változatlanul tartanom, úgyhogy *valódi* értékeit biztosan meg tudtam állapítani. Ennek a legfőbb akadálynak az eltávolítása után, kiváltképpen *Van der Waals úr kutatásai által ösztönözve*, neki tudtam merészkedni e terület legfontosabb kérdésének, nevezetesen annak, hogy tanulmányozzam a felületi feszültség összefüggését a folyadék vegyi összetételével.” Az elméleti tárgyalásnál is hivatkozott a van der Waals-féle megfelelő álapotok tételére és méréseire. Van der Waals is megállapított egy lineáris hőmérsékletfüggést, de az állandót nem tudta meghatározni. Eötvös és idővel fiatal munkatársai – Klupathy Jenő (1861–1931), Pekár Dezső (1873–1953) és a későbbi kíváló szerves kémikus, Zemplén Géza (1883–1956) (doktori értekezés: „Vizes oldatok felületi feszültségéről”, 1904) – mérései sokkal pontosabbak voltak. Az Eötvös által kifejlesztett reflexiós módszer is jól bevált, de főleg az, hogy zárt rendszerben mért, ahol a folyadék csak saját gőzével érintkezett. Ez nem volt kockázatmentes eljárás, mert időnként az üveggömb felrobbant a hőmérséklet-emeléssel bekövetkező nyomásnövekedés miatt. Volt, hogy Eötvös meg is sérült [10]. Eötvös fontos eredményt ért el, a törvényét leíró egyenlet az egyesített gáztörvény eleganciáját hordozza.

Eötvös Loránd legújabb szobrát (Rieger Tibor munkája) 2021-ben avatták fel a budapesti Gesztenyés-kertben

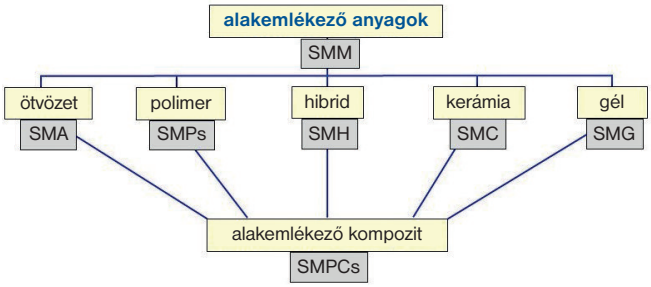
IRODALOM
[1] Johannes Diderik van der Waals – Facts. NobelPrize.org. Nobel Media AB 2021. https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1910/waals/facts/
[2] Johannes D. van der Waals’s notes in Nobel Lecture, The equation of state for gases and liquids (1910. december 12.).
[3] R. Clausius, „Über die Art der Bewegung, welche wir Wärme nennen”. Annalen der Physik (1857) 176 (3), 353–380.
[4] Th. Andrews, „The Bakerian Lecture: On the Continuity of the Gaseous and Liquid States of Matter”. Philosophical Transactions of the Royal Society of London (1869) 159, 575–590.
[5] J. C. Maxwell, „Van der Waals on the Continuity of Gaseous and Liquid States”. Nature (1874) 10 (259), 477–480.
[6] Eötvös Loránd tudományos és művelődéspolitikai-politikai írásaiból. Válogatta Bodó Barna, Kriterion Könykiadó, Bukarest, 1980., 72–88.
[7] Eötvös L., Mathematikai és Természettudományi Értesítő (1885) 54–61.
[8] Eötvös L., Mathematische und naturwissenschaftliche Berichte aus Ungarn (1886) 33–44.
[9] Eötvös L., Elnöki székfoglaló beszéd. A Magyar Tudományos Akadémia Értesítője (1889) 23(4), 145–149.
[10] Lengyel B., Egy robbanás története, Természettudományi Közlöny (1888) 20, 3. pótfüzet, 133.

Kutasi Csaba

Formamemóriás anyagok, alakemlékező intelligens textíliák

A formamemóriás anyagok speciális összetételű ötvözetek, polimerek és egyéb változatok lehetnek. A hőmérséklet változásával vagy külső mechanikai behatásra az ilyen anyag deformálódik, illetve visszaáll az eredeti alakjára. Az alakmemóriás ötvözeteket számos területen használják, többek között az orvosbiológiai, robotikai, autóipari és repülőgépipari alkalmazások jellemzőek. Az alakmemóriás polimerek képesek érzékelni és reagálni több külső ingerre. A formamemóriás ruházati és lakástextil-felhasználások is széleskörűek.

Az alakemlékező, formamemóriás intelligens anyagok **(1. ábra)** a deformáció aktiváláskor és külső inger hatására képesek megjegyezni és helyreállítani a programozott formát. Az ilyen alkalmazások többek között megfelelő ötvözetből, illetve polimerből állnak, ugyanakkor hibrid, kerámia- és gélváltozatuk is ismert. Először 1932-ben Arne Olander fedezte fel az alakmemória-hatást egy arany- és kadmiumtartalmú ötvözetben. Vernon

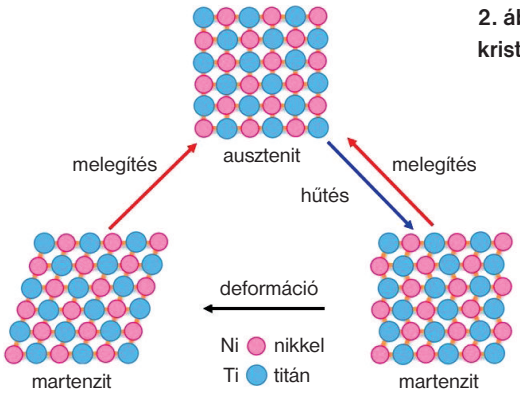


1. ábra. Az alakemlékező anyagok csoportosítása

volt az első, aki 1941-ben bevezette az alakmemória kifejezést. A memóriaeffektus alapjelenségéről később Kurdjumov és Khandros (1949), majd Chang és Read (1951) széles körben beszámolt. 1960 körül a nikkel- és titán-összetételű ötvözetet találta alkalmasnak William J. Buehler és Frederick E. Wang az Egyesült Államok haditengerészeti laboratóriumában. Az előzmény az volt, Buehler egy olyan rakétaorr kifejlesztésén munkálkodott, amely hővel és ütéssel szemben időálló, és az 55% nikkel-, 45% titán-összetételű (NiTi) ötvözet felelt meg a feltételeknek. A Frederick E. Wang közreműködésével továbbfejlesztett anyagot nitinolnak (a mozaikszó eredete: *Ni*ckel *Ti*tan–*Na*val *O*rdnance *L*aboratory) nevezték.

Alakmemóriás ötvözetek és felhasználásuk

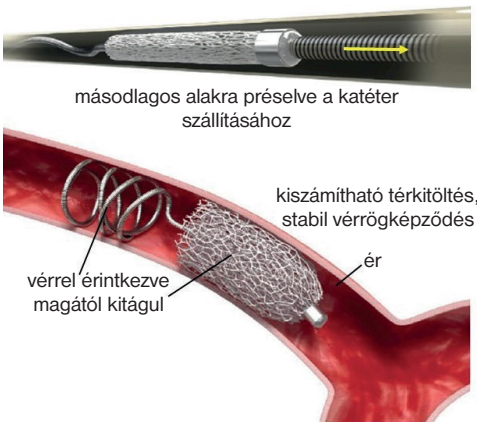
Az alakmemóriás ötvözetek olyan fémekből épülnek fel, amelyek két egyedi tulajdonságot mutatnak. A hőmérséklet változásával vagy külső mechanikai behatásra az anyag deformálódik vagy visszaáll az eredeti alakjára. A szuperplaszticitás állapotában az



2. ábra. A nitinol kristályszerkezetei

anyag nagy visszanyerhetőséggel jellemezhető. Több ilyen ötvözetfajta ismert, azonban továbbra is a NiTi jelenleg a leggyakrabban használt változat. Az aktiválási hőmérséklet alatt az ötvözet könnyen deformálódik, az aktiválási hőmérsékleten az ötvözet sokkal merevebbé válik, erőkifejtéssel visszatér egy korábbi formájához. A NiTi alacsony hőmérsékletű fázisát martenzitnek, a magas hőmérsékletűt ausztenitnek nevezik (az ausztenit az alakemlékező anyag erősebb fázisa). Az alakítás kritikus hőmérséklete fölé hevített ausztenit vissza fog térni az eredeti martenzit formára. Megjegyzendő, hogy egyutas és kétutas alakmemória is ismert. Az egyutas változatnál az anyag maradó alakítását követően, ha hő éri, ismét visszanyeri az alakítás előtti formáját. A kétutas alakmemória esetében viszont az anyag különböző hőmérsékleten más-más alakzatot vesz fel **(2. ábra)**.

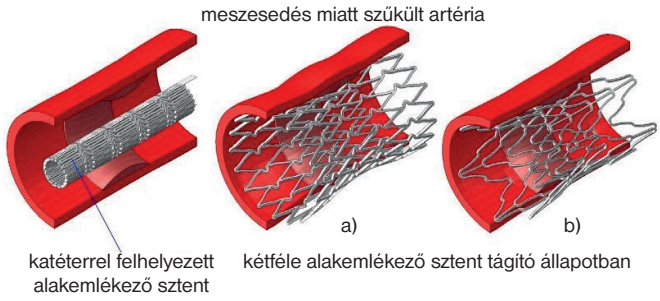
Az alakmemóriás ötvözeteket számos területen használják, többek között a *robotikai, autó-* és *repülőgépipari* és *orvosbiológiai* (pl. ortopédia, neurológia, kardiológia és intervenciós radiológia; protézisek, sztentek, az ín csonthoz való rögzítéséhez implantátumok stb.) alkalmazások jellemzők. Például az érembolizációban előnyösen beépíthető orvosbiológiai eszköz progresszív gyógyulást biztosít. Az alakemlékező implantátumot másodlagos



3. ábra. Példa az alakemlékező orvosi eszközre

alakra préselve lehet katéterrel bejuttatni az érbe. A vérrel érintkezve a tágult, nagyobb térfogatú eszköz hatékonyan képes kitölteni az ér üreges részét, miközben kis, sugárirányú erővel fejt ki nyomást az érfalra, és megakadályozza a vérrög vándorlását **(3. ábra)**.

A *sztent* hálós szerkezetű, általában fémből készült csőszerű eszköz, amely az érben elhelyezve a szűkületnél, illetve az elzáródásnál biztosítja a megfelelő mértékű vérszállítást. A katéteres vizsgálat során akár azonnal beültethető az elváltozás helyén. Az érfalba stabilan rögzített sztent nem képes elmozdulni, ugyanakkor ki sem vehető. Ma már léteznek olyan polimeranyagú sztentek is, amelyek néhány hónap után felszívódnak, amikor ez a gyógymód elegendő **(4. ábra)**.

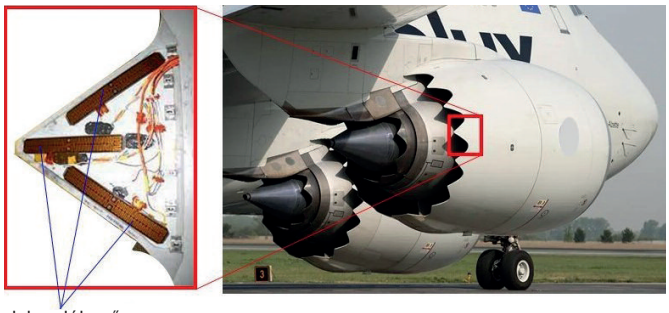


4. ábra. Pszeudoelasztikus nitinolsztent lerakódás miatt szűkült artéria modelljében

A speciális, biológiailag lebomló, alakmemóriájú polimerből készült *sebészeti varratok* melegítésre (testhő) az ideiglenes formából 20 másodperc alatt felveszik eredeti alakjukat.

A *robotikával* kapcsolatos fejlesztések például biológiai ihletésű és humanoid megoldásokra irányulnak, amelyeket olyan problémák esetében használnak, amelyek kihívást jelentenek az ember számára. Ezek akár víz alatt, levegőben és szárazföldön képesek releváns információkat szolgáltatni a nehezen hozzáférhető környezetekből (így pl. a szitakötő tizenhárom szabadságfokát biztosítva manőverezhet minden irányban az alakmemóriás anyagú elemekkel).

Az *autóiparban* számos helyen alkalmazzák az alakemlékező eszközöket, például modern járművek tükörrendszerében, illetve minden olyan helyen, ahol az üzemi hőmérséklet-tartomány és az átalakulási hőmérséklet igényének megfelelően erre mód nyílik.



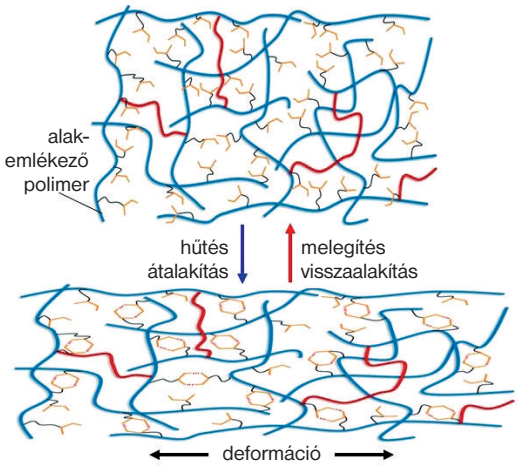
5. ábra. Változó geometriájú borítóidom – részben belülről – a sugárhajtómű hátsó részén

A *repülésben,* például a változó geometriájú borítóidomot a sugárhajtómű hátsó részén (ez képes minimalizálni a zajt a felszállás során), valamint a hidraulikus vezetékcsatlakozásban használják **(5. ábra)**.

Alakmemóriás polimerek és felhasználásuk

Az alakemlékező képességű polimereket az ötvözetek után fedezték fel, először Franciaországban, és a Nippon Zeon Co. 1984-ben forgalmazta Japánban.

Az *alakmemóriás polimerek* képesek érzékelni és reagálni több külső ingerre, nemcsak a hőmérsékletre, hanem egyes vegyszerekre, pH-változásra és fényre. Ezek a polimerek különböző rugalmassággal rendelkeznek, amely akár a kemény üvegtől a puha gumiig terjedhet. Ilyen például a polinorbornén, transz-poliizoprén, sztirol-butadién kopolimer, kristályos polietilén, néhány blokkkopolimer, etilén–vinil-acetát kopolimer, szegmentált poliuretán stb. Az alakmemóriás polimerek két polimer komponensből állnak, az egyiknek magasabb az olvadáspontja a másikénál **(6. ábra)**.



6. ábra. Alakemlékező polimer és átalakulása

Alakemlékező szál

A polietilén térhálósítása régebbi eljárás, *gamma-sugárzással* is kiváltják. Ennek során a gamma-fotonok felszakítják a láncmolekulák közötti hidrogénkötéseket, az így kialakult szabad gyökök pedig egymással kapcsolódnak. A térhálós polietilén a kristályolvadási hőmérsékleten alakemlékezést mutat. A kristályos részek megolvadásakor a felszabaduló belső feszültségek biztosítják a programozott alakról az eredeti alakra való visszaalakulást, ugyanakkor a térháló-kötéspontok meggátolják a polimer ömledékké válását.

A kutatási vizsgálatok szerint a mechanikai tulajdonságok a besugárzás hatására változóan alakulnak. Előfordulhat a húzószilárdság növekedése és a szakadási nyúlás csökkenése, vagy akár mind a húzószilárdság, mind a szakadási nyúlás csökkenése. Az optimális térhálós polimer szálak alkalmazása megkönnyítheti az *önerősített kompozitok* előállítását, amelyek alakemlékező textíliák, *orvostechnikai eszközök* alapanyagát képezhetik.

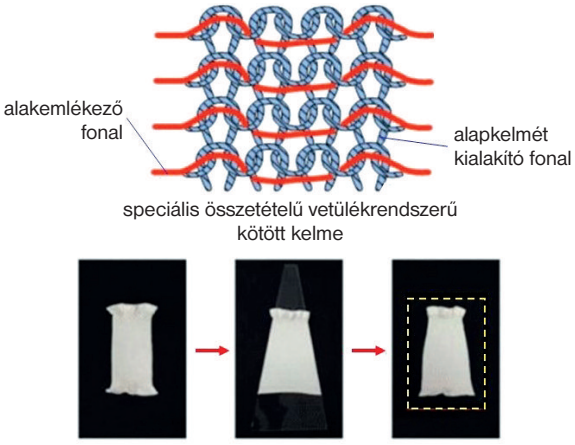
A hazai kutatás-fejlesztés során a szálak alapanyaga az extrúziós bevonatoláshoz kifejlesztett polietilén volt. A 250 °C-os szálképzést követően a gamma-sugárzást ^{60}Co-as izotóppal végezték, az alakemlékezési és relaxációs képességet dinamikus mechanikai analizátoron vizsgálták. A szálakat a modellkísérlet során 100 °C-ra melegítették, rövid ideig hőn tartották, ezután 5%-os nyújtást alkalmaztak rajtuk. Ezt nyújtott állapotban 30 °C-ra való visszahűtés követte. Az alakemlékezési jelenséget kedvezőtlenül befolyásoló belső feszültségek visszaalakulását relaxációs vizsgálatokkal figyelték. A kutatási tapasztalatok szerint az előállított térhálós polietilén szálak alakemlékező tulajdonsága bizonyítást

nyert. A kristályolvadási hőmérsékleten megőrzik az alakjukat és részben a merevségüket is.

Formamemóriás ruházati és lakástextil-alkalmazások

Az alakmemóriás polimerek szintén képesek rögzíteni az ideiglenesen programozott alakot, és külső ingerek hatására helyreállítani az eredeti formát. Ezt a képességet az *intelligens textíliák* fejlesztésére úgy is alkalmazzák, hogy ilyen részeket építenek be a kelmébe. A hőre, fényre, pH-változásra, mágneses energiára, elektromos tér hatására és nedvességre reagáló anyagokkal ellátott textíliákban intelligens tulajdonságok fokozására, elérésére van mód (egyedi esztétikai megjelenés, a környezeti feltételek szélsőséges változásai elleni védelem stb.). Az alakemlékező anyagok a textilipari alkalmazásával a hő- és nedvességszint változásaira való reagálás is elérhető.

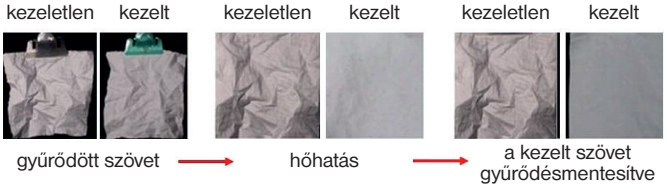
Olyan kompressziós ruhadarabok létrehozására is alkalmasak, amelyek kezdetben bő szabásúak és könnyen felvehetők, de később összezsugorodhatnak, és szorosan illeszkednek viselőjét **(7. ábra)**.



7. ábra. Az alakemlékező kelméből készült termék önmagát testre szabja

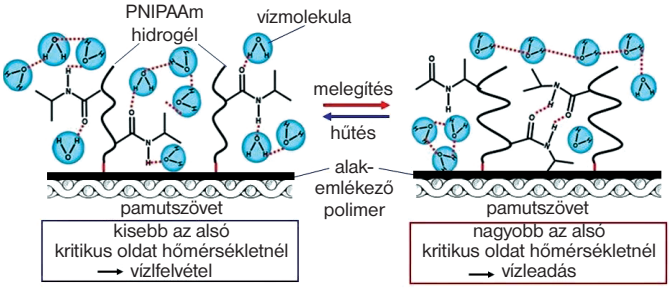
Az alakemlékező anyag által hő- és nedvességszabályozó *intelligens légáteresztő* ruha keresett komfortos termék, a vízgőzáteresztő képességet az emberi test hőmérsékletével szabályozza. A formamemóriás anyagok molekuláris szabad térfogata jelentősen megnövekszik, ha a testhőmérséklet meghaladja az üvegesedési hőmérsékletet. Így a vízgőz és a hő átadása az izzadságon keresztül megvalósulva kényelmes öltözéket biztosít. A molekuláris szabad térfogat csökken, ha a testhőmérséklet az alakemlékező anyag üvegesedési hőmérséklete alá kerül, korlátozva a hőveszteséget és a nedvesség távozását. Rétegfelvitelt és laminálást is használnak a formamemóriás anyag textilbe juttatásához, a kelmeképzés során alkalmazott egyedi képességű fonal bevitele mellett. A hőre reagáló *hidrogélek* beépítése is előfordul az intelligens hő- és nedvességkezelés érdekében. Pamutszövetek esetében többfalú szén nanocsöveket tartalmazó alakemlékező anyagot is felhasználnak kis mennyiségben, így UV-védelem is megvalósul. A formamemóriás membrán víz- és szélálló, igény szerint légáteresztő. Működése a termikus rezgésekre vezethető vissza, amelyeket a polimer láncok Brown-mozgása hoz létre. Alakemlékező poliuretán fóliát is kifejlesztettek, ami a ruharétegek közé laminálható. Amennyiben a ruházat külső rétegének hőmérséklete számottevően csökken, akkor a ruharétegek közötti légrés szélesebbé válik (növelve a hőszigetelő képességet).

A formamóriás anyaggal kezelt – egyébként gyűrődésre hajlamos – pamutszövetek *gyűrődésfeloldódó* képességgel rendelkeznek, miután a szálat felépítő láncmolekulák közötti hidrogénkötések nem szakadnak fel az alakváltoztató erők hatására. Így reaktív műgyanták alkalmazása nélkül elérhető a kedvező használati tulajdonság. A pamutkelmék mellett a gyapjúszövetek *méretállandósíthatók*, mert a bevonat a pikkelyes szálfelületet lezárja, így elkerülhető a káros nemezelődés **(8. ábra)**.



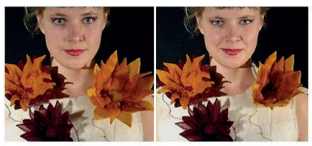
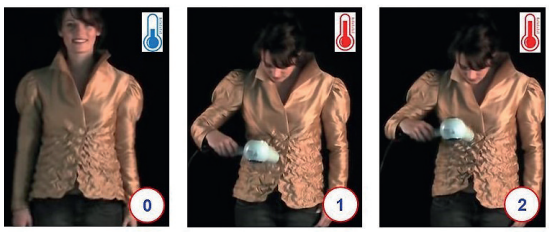
8. ábra. Pamutszövet gyűrődésmentesítése funkcionalizált hidrogéllel

Az *intelligens nedvesíthetőség* is lényeges kritérium a ruházati termékeknél. A poli-N-izopropil-akrilamid (pl. PNIPAAm) – mint hidrogél – hőmérsékletre érzékeny térhálós polimer, amely vízben oldódik. Ugyanakkor, ha az oldatot a zavarosodási pontja fölé melegítik, az oldható hidratált állapotból oldhatatlan dehidratált állapotba kerül. Tekintve, hogy az emberi test hőmérsékletéhez közeli hőmérsékleten (32–34 °C-on) dehidratálódik, lehetővé teszi a hőmérséklet-érzékeny higroszkópos textíliák előállítását. A PNIPAAm hidrogél-bevonatú szövetek reverzibilis (megfordítható) duzzadást/zsugorodást (hidratáció/kiszáradás) és jó vízgőzáteresztő képességet mutatnak. Magasabb hőmérsékleten bekövetkezik a gél zsugorodása a hidrofób kölcsönhatások következtében. Ha a pamutszövet hidrofil felületét ilyen polimer réteggel fedik be, akkor képes a nedves környezetből az alsó kritikus oldat hőmérséklet alatti vizet elnyelni, illetve hőmérséklet-változás hatására felszabadítani. A bevonatos pamutszövet hőmérséklettől függő reverzibilis és ismételhető változást mutat a nedvesíthetőségben **(9. ábra)**.



9. ábra. Pamutszövet intelligens nedvesedőképességének elérése alakemlékező kikészítő segédanyaggal

További számos textilipari alkalmazás ismert. Az *intelligens ablakfüggönyök* előállításához is alkalmazható az alakemlékező fonalak beszövése. A szerkezet nagyobb fény esetén zártabbá válik. Az alakmemóriás anyagok a *divattervezésnél* is hasznosíthatók. A textilanyagba beépített vékony formamemóriás huzal a hőmérséklet növekedésével deformálódik, így például az ebből készített a szoknya felemelkedik és a textilalapú művirág bezáródik. A *melltartók* kosárrészének alsó felében elhelyezett formázó fémíveinél a szuperelasztikus nitinolötvözet alkalmazása jobb kényelmet nyújt, mint a hagyományos acélanyagúak. Az alakemlékező ingujjak megrövidülnek, ha a hőmérséklet emelkedik **(10. ábra)**.

10. ábra. Alakemlékező képességű textíliák a divattervezésben

Kifejlesztettek olyan párnát, amely a nyak és a váll testhőmérsékletének megfelelően alakítja a formát, miután a formamemóriás habok biztosítják a test kényelmét. A *védőruházatoknál* az alakemlékező funkcionális felület hőmérsékletének növekedésével kitágulva növeli a belső légréteget: az ilyen öltözék fokozottabban védi a tűzoltót az égési sérülésektől.

Új generációs *űrruházatot* is kifejlesztettek alakemlékező anyagok alkalmazásával. Ennek lényege az aktív kompressziós öltözék, amely a hő hatására összehúzódik, közvetlenül követve az alakformát, jól illeszkedve a viselő testéhez. A klasszikus szkafanderekkel az űrhajós lényegében egy gázgömbben van, amely minimális létfontosságú nyomást fejti ki a légüres térben. Az új fejlesztésű ruházat kényelmesebb és könnyebb, nagyobb mozgásszabadságot biztosít. Az új technológiát *katonai* és *sportruházatokra* is igyekeznek kiterjeszteni.

IRODALOM
[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Shape-memory_alloy
[2] https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=134
[3] http://www.pt.bme.hu/publikaciok/1374_open_04%20Tat%C3%A1r%20Bal%C3%A1zs.pdf
[4] https://www.intechopen.com/chapters/56078
[5] https://www.google.com/search?client=firefox-b-d&q=Shape-Memory+Applications+in+Textile+Design
[6] https://www.technocrazed.com/biosuit-a-revolutionary-skin-tight-space-suit-for-astronauts-to-move-easily

Braun Tibor
dr.braun.tibor@gmail.com

Az ételek érzékelésének tudományos alapjai

Neurogasztronómia

Előszó

Nem titkolom, hogy a gasztronómia egyik kedvenc területe tudományos ismeretterjesztési tevékenységemnek. Számos bemutatót írtam erről a Magyar Kémikusok Lapjában (*Gasztronómiai íz-, illat és zamatpárosítások molekuláris háttere és lehetőségei*, *A gasztronómia gyémántja*, *Gasztromazochizmus*, *mikrobiális gasztronómia*, *Molekuláris és szupramolekuláris gasztronómia*, *Szemelvények a sajtkészítés gasztronómiájából*, *Umami az ízfokozó ötödik alapíz*, *Gioacchino Rossini gasztronómiája)*. [1–7] Jelen dolgozatban a neurogasztronómiát szeretném bemutatni többek közt azért, mert az interdiszciplinaritást bizonyítja.

Bevezetés

A világ észleléséhez minden érzékünk, az íz-, illat-, tapintásérzékünk, a látás és a hallás, sőt azok integrálása is szükséges. Az említett az érzékek nem egyénileg hatnak, és így hozzásegítenek bennünket az étkezés értelmezéséhez.

Az étkezés a sokérzékes tapasztalatszerzés egyik lefontosabbika. Étkezéskor különböző érzéki hatások jönnek létre, és azok befolyásolják az ételek érzékelését és ízét. [8] Egy borfajta fogyasztásának észlelésekor a bor a színével, viszkozitásával, az igénybe vett edénnyel, sőt, a kitöltött bor kitöltési hangjával érzékelendő. A kiválasztás után, illetve ivás közben az érzékek továbbra is információt nyújtanak a bor ízéről és aromájáról. Minden étel új tapasztalatot jelent. Annak ellenére, hogy a gasztronómia jelenléte sokérzési észlelésként mindig fontos volt, az, amiről itt beszámolunk, aránylag újkeletű ismeretnek számít.

Ez részben annak a következménye, hogy jobban megismerték, hogyan integrálja az agy a különböző érzékektől kapott információt. [9] A kezdeti vizsgálatok bonyolult agyi folyamatokat tanulmányoztak, beleértve az étkezés és ivás közbeni tapasztalatszerzést is. Az idegkutatók remélik, hogy megtalálják a közös jellemzőket azokról a folyamatokról, amelyek egyénről egyénre érzékelhetők az agyban.

Az étel és az ital felismerését számos tényező befolyásolja. Meglehetősen nehéz megérteni, hogy az egyéni jellemzők másmás egyéneknél nagyon eltérőek. Érzékszervi észlelés mellett számos más szubjektív tényező, például az érzelmek és az emlékek is fontos szerepet kaphatnak az étkezési tapasztalatszerzésben.

Neurogasztronómia

A neurogasztronómia elnevezés a gasztronómia, azaz a konyhaművészet és a pszichológia határterületén jött létre, különös tekintettel az étkezési tapasztalatszerzés tudományos megvilágítására. Nem meglepetés, hogy az ételt felszolgáló tál vagy tányér jelentős részét képezi az étkezési tapasztalatszerzésnek. Egyetértés van abban, hogy az étel más ízű lehet más fogyasztási környezetben, azaz függhet a helytől, ahol az ételt eszik, de még attól is, hogy kivel esznek együtt. Ezen ismeretek számtalan változatban jelentkezhetnek, és például a szóban forgó ételt vagy étkezést jobbá, illetve egészségesebbé tehetik.

Étkezési élmény

Az étkezési élmény többet jelent egyszerű ételfogyasztásnál. Amennyiben az étkezés élménye nem volt eléggé sokészleléses, az általa okozott élmény nem működött megfelelően. A neurogasztronómiai tanulmányok az étkezési élmény tényezőit is meg kívánják ismerni. Az egyének különbözően értékelik ugyanazt az ételt és italt annak színétől, sőt, a fogyasztása közbeni zenétől függően is. A neurogasztronómia egyik nyitott kérdése, hogy a környezet változása mennyire befolyásolja az étel- és italészlelést.

Valószínűleg lehetséges lesz úgy kiválasztani az érzékelést, hogy az az élmény optimális változását hozza létre. Minden étel tapasztalat, még a legegyszerűbb étkezési jelenség is, mint például a harapás egy barackba, bonyolult, sok észlelés kölcsönhatását jelenti. Az agynak integrálnia kell minden érzéki hatást, összekötve az illatot, az ízt, textúrát, megjelenést, színt és formát. Mindezek az érzékelési hatások komoly befolyással vannak arra, hogy az említett harapás hogyan jelenik meg az egyén agyában, illetve az egyén mire emlékszik az élményből.

Ízek az ételben

Köznapi tévedés, hogy az íz benne van az ételben. A valóságban az íz észlelés, illetve tapasztalat, ami az agyban képződik. Az étel összetételét képező molekulák nem tartalmaznak magukban semmilyen érzéki minőséget. Az ételtapasztalatot a valóban érzékletes íz, illat, textúra, színek és hangok jelentik, amelyek ezeket az érzékeket létrehozzák. Külön-külön nem rendelkeznek ezekkel a jellemzőkkel. [10] Például az édesség érzékelési minősége üzenet a nyelv receptorából az agyba, amikor cukormolekulák vannak jelen a fogyasztott élelmiszerben. Ezt az üzenetet az agy édességérzetté változtatja. Kémiailag az ételben van cukor, de az érzékelési tapasztalat az agy által képzett eredmény. Ebből arra következtethetünk, hogy amikor ugyanazt az ételt valamilyen molekulakombinációból észleljük, az egyéni élmény egészen más is lehet. Az ételben lévő bizonyos molekulák gerjesztik a kémiai érzékeket, amilyen az íz és az illat, ezzel ellentétben a tapintás, látás és hallás fizikai jellegűek, és az étel megjelenésétől, külsejétől függnek.

Bár jellemző különbségek vannak a kémiai érzékek között, mechanizmusuk hasonló, az ételekben a molekulák aktiválják a test receptorsejtjeit, és azok impulzusokként továbbítják az információt például a szaglóidegekkel az agyba, lehetővé téve azonosításukat. Az íz érzékelése akkor történik, amikor ízkémiai molekulák kölcsönhatásba kerülnek a receptorokkal a nyelven, lehetővé téve az 5 alapíz, az édes, savanyú, sós, keserű és umami által okozott élmény érzékelését. Az illat keletkezéskor a különböző illékony szerves molekulák (aromák) kölcsönhatásba kerülhetnek az orrüregben lévő illatreceptorokkal.

Az ételek külseje

A látás érzékelésére a szem kétfajta receptorral rendelkezik, ezeket a fény intenzitása és az elektromágneses sugárzás aktiválja. Ennek nyomán azonosítható az étel színe, mérete, formája és mennyisége. A hallás lehetővé teszi az ételek hangjának, illetve a környezeti légkörnek az észlelését. Az érzékeléshez a hanghullámok és a rágás közbeni csontvezetés is hozzájárulnak. [8] Az étel érzékelése az összes érzék kombinációjából ered. Az illat valószínűleg a leginkább multiérzékelési tapasztalat, viszont a szaglás játssza a főszerepet, és az ízek orális jeleivel kombinálva adja a tradicionális íz definícióját. Bár ezek a definíciók nem foglalják magukba a hallási és vizuális érzékelőjeleket, a jelenlegi kutatások megkísérlik ezek kimutatását az íz észlelésében. [11]

Agy és íz

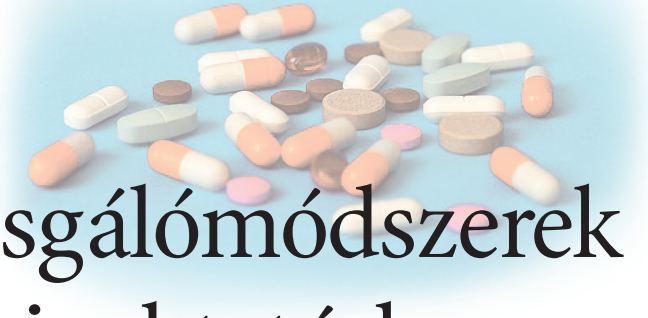
Az emberi agy ízrendszere két részből áll. Az első az érzékelőrendszer, amely az egyéni érzékelés megnyilvánulásait konvertálja az íz együttes értelmezéséhez. Amikor egyidejűleg érkeznek különböző ingerek, az agysejtek ezeket társítják egy közös válaszban, ami erősebb, mint az egyedi válaszok. [11] A másik rész a hatásrendszer, amely az emberi agy számtalan képességét felhasználja, hogy válaszoljon az íz érzékelésére. Az érzelemnek, az emlékezésnek és a nyelvnek nagy a hatása az egyének választásaira.

Régebben a kutatók úgy gondolták, hogy a vizuális stimulusokat a „vizuális agy” dolgozza fel, a hangokat a „hallási agyban”, és nem tudták, illetve nem ismerték az összeköttetést, a kapcsolatokat az érzékek között. [12] Ezzel a gondolkodásmóddal ellentétben az étel érzékelése nem tekinthető különböző egyéni, egyidőben megjelenő tapasztalatnak, hanem inkább egy egyesített észlelésnek, ami egynél többféle érzékelés koordinált működése. Ez a többérzékelési tapasztalat többféleségként definiálható, és jellemzői túlmennek a tipikus többalaki tapasztalaton. Ezek az eredmények abból erednek, hogy egy érzék működése befolyásolhatja és megváltoztathatja a többi érzék működését. A különböző érzékelődimenziók közötti befolyásolás jobb megismerésére számos különböző empirikus kutatást végeztek, és kimutatták a közöttük lévő jelentős összefüggést. [14]

Utószó

Az utóbbi évtizedekben a neurogasztronómia sok ismeretet fejlesztett ki arról, hogy az érzékek stimulusainak változása hogyan hathat az étel érzékelésére. Sőt, alapszabályokat javasoltak arról, hogy az agy hogyan kombinálja az étkezési információt. [15]

IRODALOM
[1] Braun Tibor, MKL (2014) 11, 347.
[2] Braun Tibor, MKL (2015) 7–8, 347.
[3] Braun Tibor, MKL (2015) 3, 84.
[4] Braun Tibor, MKL (2011) 4, 114.
[5] Braun Tibor, Szemelvények a sajtkészítés gasztrokémiájából. In: A szerelem molekulái. Typotex Kiadó, Budapest, 2021. 85–93.
[6] Braun Tibor, MKL (2017) 1, 17.
[7] Braun Tibor, MKL (2019) 7–8, 245.
[8] C. Spence, Chemosensory perception (2010) 3, 68.
[9] C. Spence, The new science of eating. Penguin, UK, 2017.
[10] H. McGee, Lucky Beach (2016) 18, 19.
[11] G. M. Shephert, Neurogastronomy: How the Brain Creats Flavour and Why it Matters. Columbia University Press, 2007.
[12] C. Spencer, M. U. Shankar, H. Blumenthal, Art and Disenses (2011) 238.
[13] C. Spence, S. Velasco, K. Knoeferle, Flavour (2014) 3, 8.
[14] A. Hopia, S. Ihanus, 5D Cook Book. University of Turku, 2014.
[15] C. Spence, Gastrophysics: The New Science of Eating. Penguin. UK, 2017



Szólláthné Sebestyén Zita
Nyíregyházi Egyetem, Környezettudományi Intézet | sebestyen.zita@nye.hu

Gyógyszerészeti vizsgálómódszerek felhasználása a kémiaoktatásban: a Rossett–Rice-teszt

A természettudományos tárgyak oktatása egyre több kihívás elé néz ezekben az években. Nemcsak a csökkenő óraszámokkal kell számolni, a diákok érdeklődését is egyre nehezebb felkelteni például a kémia iránt anélkül, hogy elriasztanánk őket. Másrészt egyre inkább előtérbe kerül az a követelmény, hogy a tananyag kapcsolható legyen más tárgyakhoz is, ami interdiszciplináris megközelítést kíván.

A gyógyszerésztudományban is ez a megközelítés jelenti az alapot, miközben számos kémiai alapműveletet kell alkalmazni az egyes feladatok megoldására. Mind a gyógyszerkutatásban, mind az ellenőrzési folyamatok során szükség lehet egyes szervek vagy szervrendszerek modellezésére, ahol elengedhetetlen a fizikai, kémiai és biológiai ismeretek ötvözése. A gyógyszerészetben felhalmozott ismeretek és gyakorlati tapasztalatok adott esetben a tantermi oktatásban is hasznosíthatóak. Amellett, hogy látványos kísérleteket állíthatunk be, számos tévképzet is eloszlatható a segítségükkel az emberi szervezet működésével kapcsolatban.

A gyomor működésének szimulálása

Ahogyan a gyógyszerformák egyre sokszínűbbé válnak, úgy kell követnie a növekvő igényeket az egyes vizsgálómódszereknek is. Elég csak arra gondolnunk, mennyire más kísérleti elrendezésre van szükség egy nyelv alatti tabletta, egy bukkális készítmény [1] vagy egy gyógyszeres rágógumi kioldódásvizsgálatához [2], mint egy hagyományos, szájon át alkalmazandó készítményéhez.

A gyomor működésének szimulálásánál ugyanazokat a tényezőket kell figyelembe venni, mint a gasztrointesztinális traktus más szakaszainál: a gyomornedv térfogata és kémhatása mellett be lehet állítani az ionerősséget/ozmózisnyomást is. A kioldóközeg ebben az esetben viszonylag egyszerű: a megfelelő pH-t az oldat sósavtartalma, a megfelelő ionösszetételt a hozzáadott nátrium-klorid vagy kálium-klorid biztosíthatja. Az enzimek jelenléte itt nem annyira meghatározó, mindemellett a „mesterséges gyomornedv” előirata pepszint is tartalmaz. Összetettebb vizsgálatoknál a táplálék egyes összetevőit is hozzáadhatjuk a kioldóközeghez, például étel-interakciók esetén. A különböző kioldófolyadékok összetételét a VIII. Magyar Gyógyszerkönyv pontosan szabályozza [3].

A megfelelő hőmérséklet beállítása mellett kevertetés is szükséges, hogy a gyomor perisztaltikájának hatását is szimulálhassuk. Az ilyen típusú vizsgálatok kivitelezésére kioldódásvizsgáló készülékek állnak rendelkezésünkre, melyeket hagyományosan az Amerikai Gyógyszerkönyvi Konvenció (USP) számozása alapján neveztek el 1–4. berendezésnek (forgókosaras, forgólapátos, függőleges mozgású és átfolyó cellás készülék), melyek különböző technikai megoldásokkal segítik a kevertetést és a gyógyszerforma megfelelő elhelyezkedését [4]. Ezekkel a berendezésekkel az automatikus mintavétel is megvalósítható, melyeknek időpontjait szintén szabályozza a VIII. Magyar Gyógyszerkönyv.

A fiziológiás körülményeket legjobban közelítő berendezésekben a fent említett paraméterek beállítása mellett a gyomortartalom pH-változása is regisztrálható, illetve a gyomornedv újratermelődése és a részleges gyomorürülés is szimulálható perisztaltikus pumpák segítségével [5].

A gyomorsavcsökkentők szerepe

A hiperaciditás csökkentésére ma már számos hatékony kezelés áll rendelkezésre. Ezek közül az egyik legegyszerűbb az antacidok használata, amelyek a gyomorban reagálnak a felesleges savval. Bár mára szerepük némiképp csökkent, enyhébb esetekben elegendő lehet a használatuk, vagy kiegészítő terápiaként jöhetnek szóba a szekréciógátlók használata mellett [6].

Mivel a cél a gyomorsósav közömbösítése, a gyengén bázikus (főként szervetlen) sók alkalmasak erre a feladatra. Az alkalmazott vegyületek egyéb előnyös hatásokkal is rendelkezhetnek, például a pH emelkedésével párhuzamosan csökkentik a pepszinaktivitást. Egyes gyógyszeranyagok bevonhatják a nyálkahártyát, vagy adszorpció révén megköthetik a refluxanyagokat, például az epesavakat, és erősíthetik a gyomor nyálkahártyájának védekező mechanizmusait.

Csoportosíthatjuk őket aszerint, hogy rendelkeznek-e szisztémás hatással. Míg a legtöbb vegyületre ez nem jellemző, a jól felszívódó vegyületek (nátrium-hidrogén-karbonát, nátrium-citrát) kationjai nem kívánt hatásokat idézhetnek elő például fokozott nátriumbevitel révén. Túlzott használatuk pedig kedvezőtlen irányba befolyásolhatja a vér pH-ját is (alkalózis).

Az antacidok használata során nem szabad elfeledkezni a gázfejlődés lehetőségéről, amely puffadás okozhat, illetve mindig gondolni kell a gyógyszer-interakció lehetőségére, amelyet a gyomor megváltozott pH-ja vagy a kationokkal való kölcsönhatás okozhat.

Ezeknek a gyógyszerkészítményeknek több kritériumnak is meg kell felelniük. A gyomor pH-ját minél hamarabb 3 fölé kell emelniük, hogy a panaszok megszűnjenek. Az ideális pH-tartomány 3 és 5 között van, tehát minél hosszabb ideig ezt kell bizto-

sítania az antacidnak. Teljes semlegesítés nem szükséges, sőt, a kiugróan magas pH elkerülendő, mert reaktív savtermelődést válthat ki. Lehetőleg a tartós adagolás se járjon mellékhatásokkal, illetve előnyt jelent, ha a gyomorsav semlegesítése mellett adszorbens vagy nyálkahártyavédő tulajdonságokkal is rendelkezik a készítmény [7].

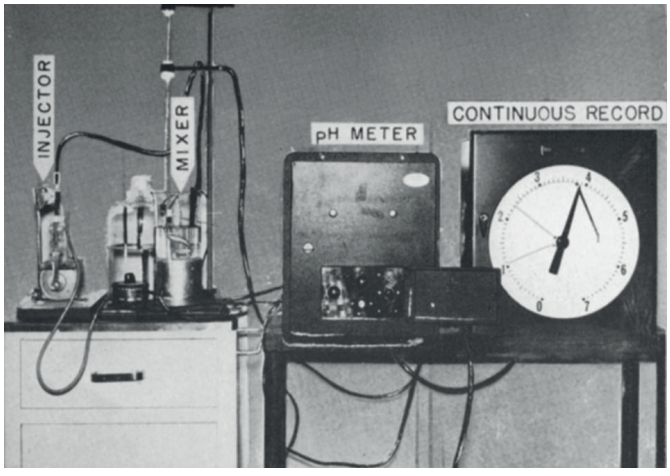
A Formulae Normales VIII. kiadásában az antacid porokra javasolt orvosi vényelőiratok alapanyagait az **1. táblázat** foglalja össze.

Vényelőirat	*Pulv. ad pyros.* [8]	*Pulv. alumin. et magnes.* [9]	*Pulv. antacid.* [10]
Gyógyszer-alapanyag	Dinatrii phosphas dodecahydricus	Aluminii oxidum hydricum	Natrii hydogenocarbonas
	Calcii carbonas	Magnesii oxidum leve	Magnesii subcarbonas levis
	Natrii hydrogenocarbonas		
	Magnesii subcarbonas levis		

1. táblázat. Antacid hatású összetett porok alapanyagai a FoNo VIII.-ban [8]

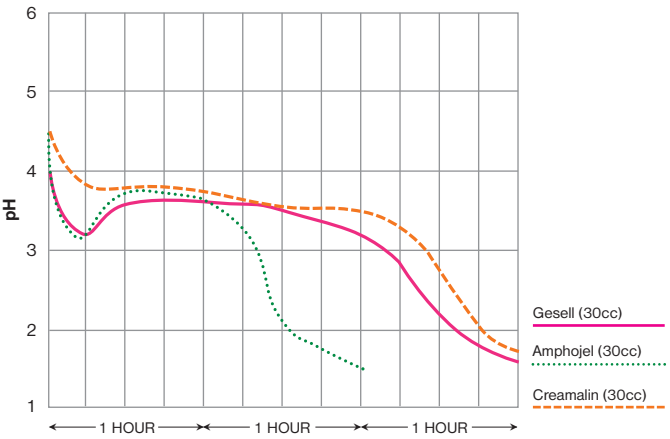
A Rossett–Rice-teszt

Az egyik vizsgálómódszer, amellyel az antacidok hatékonysága ellenőrizhető, *N. E. Rossett* és *Marion L. Rice* nevéhez fűződik [11]. A kiindulási oldat 30,0 cm^3 0,1 mol/dm^3 koncentrációjú sósav és 70,0 cm^3 desztillált víz elegye, amely a hiperaciditást hivatott reprezentálni (pH~1,4). A megfelelő mennyiségű antacid hozzáadása után egy injektor segítségével **(1. ábra)** óránként 240 cm^3 0,1 mol/dm^3 koncentrációjú sósavat adagoltak a rendszerhez folyamatos kevertetés mellett. Közben az elegy pH-ját folyamatosan regisztrálták egy üvegelektród segítségével.



1. ábra. A *Rossett* és *Rice* által alkalmazott eredeti berendezés [11]

A módszer alkalmasnak bizonyult különböző gyári készítmények – vagy akár különböző gyógyszerformák – gyomorsavcsökkentő hatásának összehasonlítására **(2. ábra)**. Azt az időtartamot, amíg a rendszer pH-ja 3 felett van, a szerzők után ma is *Rossett–Rice-idő*nek nevezzük. A késleltetési idő (t_{lag}) az az



2. ábra. Három ekvivalens mennyiségű gyári készítmény hatékonyságának összehasonlítása [11]

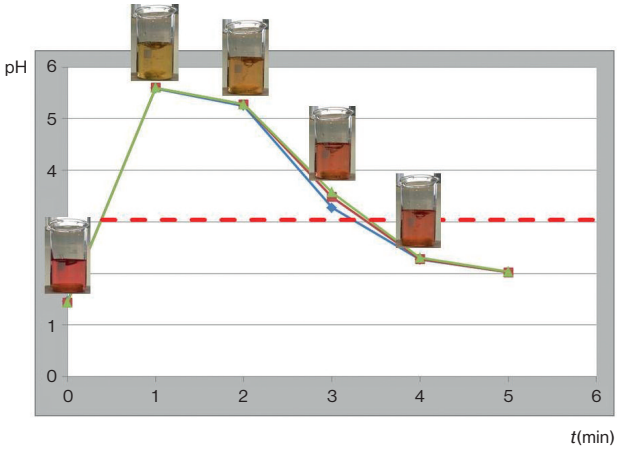
időtartam, amíg a pH eléri a kívánt 3-as értéket. A regisztrált görbékről meghatározhatóak a pH-maximumok is. Ezzel a három értékkel jellemezhetőek a vizsgált minták, melyek nemcsak az összehasonlítást segítik, hanem számszerű adatokat is szolgáltatnak az antacidokkal szemben támasztott főbb kritériumok teljesüléséről.

A Rossett–Rice-teszt az első publikáció óta számtalan tanulmány része, bár gyakran éltek bizonyos módosításokkal. Napjainkban a gyógyszerészhallgatók is egy módosított Rossett–Rice-teszttel ismerkedhetnek meg a Kémiai gyógyszertechnológia gyakorlati kurzusain [12]. Az Egyesült Államok Élelmiszer- és Gyógyszerügyi Hatósága (FDA) által meghatározott kiindulási savmennyiség 5 mmol [13], melyet 5,0 cm^3 0,1 mol/dm^3 sósavoldat biztosít, 65,0 cm^3 desztillált vízzel elegyítve, 37 °C-ra termosztálva, 300 min^{-1} fordulatszámú kevertetés mellett (mágneses keverő segítségével). A hőmérséklet beállítására hagyományosan kettős falú üveg mérőcellát használunk, amely termosztált vízfürdővel van összeköttetésben. A pH-t kombinált üvegelektróddal mérjük előzetes kalibrálás után. Az adatok rögzítése manuális. A vizsgált minták tömege 0,5 g, melyet a titrálás előtt dörzsmozsárban 5,0 cm^3 vízzel szuszpendálunk. A szuszpenzió mérőcellába öntése után indul az idő mérése, majd a dörzsmozsarat haladéktalanul kétszer 2,5 cm^3 vízzel átöblítjük és a rendszerhez adjuk. Az injektort bürettával helyettesítjük, és percenként 0,50 cm^3 1 mol/dm^3 koncentrációjú sósavat adagolunk. Minden újabb savrészlet előtt regisztráljuk az aktuális pH-t, mely aztán az idő függvényében ábrázolható, és a megfelelő paraméterek leolvashatóak.

A fenti leírásból látható, hogy a módszer viszonylag kis műszer-, eszköz- és anyagigénye miatt jól adaptálható tantermi körülmények közé, nemcsak a gyógyszerészoktatásban, hanem akár középiskolai szinten is. Mivel a termosztálható mérőcella igen speciális, nem lehet elvárás a használata egy ilyen demonstrációnál. Bár a számszerű adatok nyilván változnak alacsonyabb hőmérsékleten, de ha a hőmérséklet közel állandó, a különböző mérések összehasonlíthatósága megmarad. A büretta használata elegáns, de az idő rövidsége miatt épp a pontosság sérül. Egy automata pipettával sokkal praktikusabban megoldható az egyenlő kis folyadékrészletek gyors és pontos hozzáadása. A kombinált üvegelektród fontos szerepet játszik a pH pontos és folyamatos követésében, de ha nem áll rendelkezésre, a megfelelő indikátor kiválasztásával a reakcióelegy pH-változása nyomon követhető, bár ugyanaz a pontosság nem várható el. Az indikátorállandó alapján a dimetil-

sárga áll a legközelebb a pH = 3-as átcsapáshoz (pK_i = 3,25), de a színváltozás a brómfenolkék vagy a metilnarancs esetében is megkezdődik pH = 3 után [14]. Ebben az esetben a Rossett–Rice-idő stopper segítségével határozható meg: mennyi ideig látható az indikátor „lúgos" színe?

A **3. ábrán** az univerzál indikátor alkalmasságát szeretném bemutatni, amely részletesebb, bár pontatlanabb képet ad a pH-változásról, de demonstráció céljára ugyanúgy megfelelhet. A **3. ábráról** az is leolvasható, hogy ilyen kísérleti feltételekkel is biz-

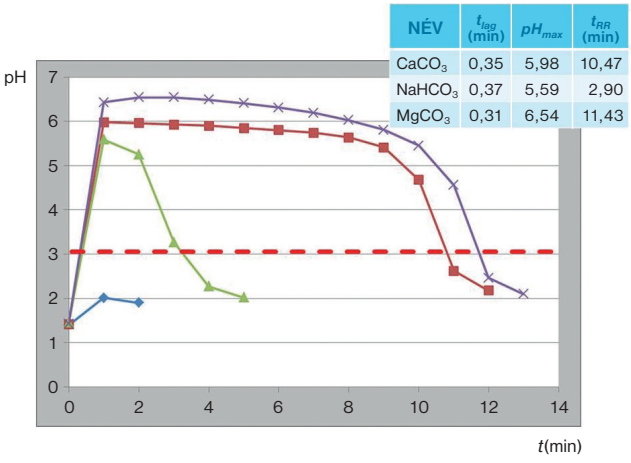


3. ábra. Rossett–Rice-teszt 0,5-0,5 g-os nátrium-hidrogén-karbonát-mintákat alkalmazva antacidként, potenciometriásan vagy univerzál indikátorral követve (a színek az adott mérési pontokhoz tartoznak)

tosítható a megfelelő reprodukálhatóság annak ellenére, hogy nem volt termosztálás, és a kiindulási elegy összeméréséhez mérőhengert, a sósavrészletek adagolásához pedig automata pipettát használtunk.

A módszer kivitelezése nagy gyakorlottságot igényel, de tantermi körülmények között csapatmunkában is végezhető. Az idő vagy a pH mérésének és a sósav adagolásának feladatai szétoszthatóak. A gyakorlati munkában szerzett tapasztalat mellett a diákok a kísérlet során megismerkedhetnek a bázikus sók tulajdonságaival (értékűség, oldhatóság, gázfejlődés). A titrálási görbe platószerű szakasza jól szemlélteti a pufferrendszerek működését. A mért pH számításokkal is előre jelezhető abban az esetben, ha nincs gázfejlődés és jól oldódik a vegyület.

4. ábra. *Pulvis ad pyrosim* összetevőinek (0,5-0,5 g) vizsgálata Rossett–Rice-módszerrel
(kék: $Na_2HPO_4 \cdot 12H_2O$; zöld: $NaHCO_3$; piros: $CaCO_3$; lila: $MgCO_3$)



NÉV	t_{lag} (min)	pH_{max}	t_{RR} (min)
$CaCO_3$	0,35	5,98	10,47
$NaHCO_3$	0,37	5,59	2,90
$MgCO_3$	0,31	6,54	11,43

Példaként a *Pulvis ad pyrosim* (Fono VIII. [8]) antacid összetevőinek hatékonyságát hasonlíthatjuk össze a **4. ábra** segítségével. Az egységnyi tömegű bemérés miatt a nagyobb moláris tömegű sók (pl. $Na_2HPO_4 \cdot 12H_2O$) kevésbé emelik meg a pH-t. (Ha a demonstráció szempontjából praktikusabb, azonos anyagmennyiségek is összehasonlíthatóak az adott vegyületekből.) A gyógyszerészetben azért van a tömegre vonatkoztatott savkötő kapacitásnak is jelentősége, mert az egyszerre bevehető, kapszulázható vagy tablettázható por mennyisége korlátozott.

A többértékű savak teljesen deprotonált anionjainak (például karbonátok) savkötő képessége is többszörös. Másrészt a hosszabb Rossett–Rice-idő a vizsgált vegyületeknél magasabb pH-maximummal is párosul. Ezért alkalmaznak a gyógyászatban keverékeket annak érdekében, hogy az előnyök és hátrányok elfogadható kombinációja álljon fenn. Ebben az esetben a mellékhatás-profil is csökkenthető anélkül, hogy egyes hatóanyagokat kizárnánk a terápiából (például a magnéziumsók hashajtó vagy az alumíniumsók székrekedést okozó hatása miatt) [6].

Tévképzetek a lúgosítás körül

A Rossett–Rice-teszt nemcsak az alapvető kémiai ismertek elsajátításában vagy a szervezetünk működésének megismerésében nyújthat segítséget, hanem az évtizedek óta fel-felbukkanó mítoszokkal való leszámolásban is, amelyek a gyomornedv és a szervezet más folyadéktereinek kémhatását, illetve az étkezés ennek befolyásolásában betöltött szerepét illeti. Az oktatásnak meghatározó szerepet kell játszania abban, hogy a diák egész felnőtt életében képes legyen azonosítani az áltudományos, jelenlegi ismereteinkkel homlokegyenest szembemenő állításokat.

Az élettani értelemben vett lúgosítás elmélete a 20. század első felében látott napvilágot. Bár több kortársa is foglalkozott a kérdéssel, az alapelvek lefektetése *Edgar Cayce* (1877–1945) nevéhez fűződik. A prófétaként is emlegetett Cayce nyolc osztályt végzett, és sohasem hagyta el az Egyesült Államok területét. 1923 és 1944 között számos kinyilatkoztatását rögzítették, amelyeket önindukált hipnózisban elért transzállapotban közölt, és amelyekben számos megbetegedés gyógymódjára tett javaslatot [15]. Az étrendre vonatkozó irányelveit úgy lehetne összegezni, hogy az elfogyasztott ételeknek legalább 80%-a lúgosító növényekből kell állnia [16]. A növényi étrend preferálásának ajánlása miatt nem lehet károkozással vádolni, de érdemes tisztázni, hogy mely növényeket titulálunk lúgosítónak, illetve hol és milyen mechanizmussal fejtik ki ezt a hatást. Másrészt pedig: milyen eredményben reménykedhetünk a diéta kapcsán?

Ez a módszer még napjainkban is divatos, köszönhetően *Robert O. Young* munkásságának és nagy példányszámban eladott könyveinek. Young számos megbetegedés kialakulását a vér elsavasodására vezette vissza, illetve arra, hogy a szervezet kimerül a normál pH visszaállításában. Szerinte mindezt megelőzhetjük azzal, ha kizárjuk a savasító ételeket az étrendünkből, melyek közül a legfontosabbak: a disznózsír, a mogyoróvaj, az áfonya, a tészta és a kenyér (fehér lisztből), a marhahús, a napraforgóolaj, a sertéshús, a burgonya, a sör, a tömény szesz és a vaj [17]. Sajnos ha mindezeket mellőzzük, a kiegyensúlyozott tápanyagbevitel igencsak nehézzé válik. Ezek a felsorolások nem mindig konzekvensek, egyes élelmiszereket hol savasítónak, hol lúgosítónak kiáltanak ki, függetlenül a valódi kémhatásuktól. A citromos víz például nemhogy tiltott lenne, de egyenesen ajánlott a lúgosítás érdekében.

Ahogyan azt az előzőekben is láttuk, a szervezet a homeosztázis fenntartására törekszik a pH tekintetében is, az emberi test

egyes folyadékterei jól definiált pH-n funkcionálnak, és kis pH-ingadozás is súlyos következményekkel jár: például a vér esetében 7,37 és 7,43 között normális [16], és alapvetően nem az elfogyasztott tápláléktól függ. A kivételt a vizelet jelenti, mert egyes ételek valóban befolyásolhatják a kémhatását, de ez független a vér pH-jától. Mégis, a vizelet ellenőrzése a megfelelő tesztcsíkokkal igen gyakori a lúgosító diéta gyakorlói között.

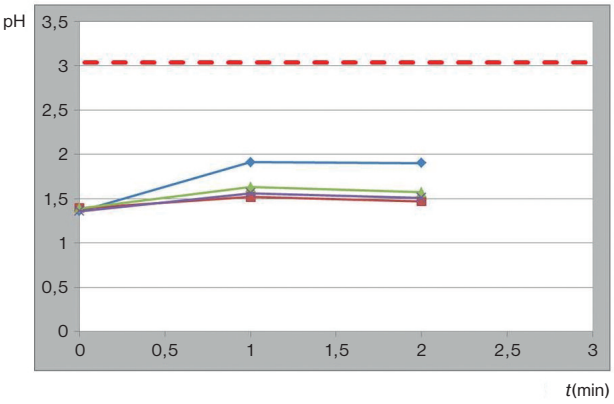
Magát a teóriát nem támasztják alá megfelelő tudományos bizonyítékok, de a módszer hatásosságát folyamatosan vizsgálják különböző betegségcsoportokban. Sajnos ezeknek lezárulta előtt, illetve meggyőző eredmények hiányában is alkalmaztak lúgosító terápiát akár daganatos betegeken is (ami tulajdonképpen nátrium-hidrogén-karbonát-oldat intravénás adagolását jelentette). Ennek igazi veszélye abban rejlik, hogy a páciens nem jut valódi kezeléshez, miközben reménykedik a sokszor igen költséges alternatív megoldásban. Youngot is többször perbe fogták balul sikerült kezelések és képesítés nélkül gyakorolt gyógyászati tevékenység miatt.

A lúgosítás érdekében gyógynövények is bevethetőek porított formában vagy teát készítve belőlük. Ezen keverékek jótékony hatásait nem zárhatjuk ki (pl. antioxidáns hatás), de valószínűleg semmi közük a vér vagy más testnedv vagy a sejtek közötti tér pH-jához. Közös jellemzőjük a magas klorofilltartalom. A készítmények egyes esetekben tartalmaznak valóban bázikus hatóanyagokat is.

A Rossett–Rice-teszt alkalmas az ilyen típusú táplálékkiegészítők hatékonyságának vizsgálatára, összehasonlításukra hagyományos készítményekkel. Azt se megcáfolni, se megerősíteni nem tudjuk a titrálás alapján, hogy a hatóanyag milyen hatásokat fejt ki a szervezetben, de azt igen, hogy milyen irányba befolyásolja a gyomor pH-ját, és milyen hamar képes ezt kompenzálni a rendszer. A demonstráció egyik üzenete az, hogy a gyomor idővel még a valóban hatékony antacidok hatását is „ledolgozza", igazán hosszú távú hatásra ezzel a mechanizmussal nem számíthatunk.

Egy kereskedelmi forgalomban lévő lúgosító kapszula tartalmát vizsgálva a *Rossett–Rice-módszerrel* jól látszik (**5. ábra**), hogy az egyetlen antacid összetevő 0,5 grammja sem képes a pH-t 3 fölé emelni ($CaHPO_4 \cdot 2H_2O$), ahogyan a kapszula töltőanyagának 0,5 grammja sem. A teljes napi dózis poranyaga (2 kapszula tartalma, kb. 0,6 g) sem vált ki jelentős változást.

A módosított *Rossett–Rice-teszt* tehát kis műszer- és anyagigénye miatt alkalmas lehet középiskolai szinten tantermi demonstráció bemutatására vagy csoportosan végzett kísérlet beállítására. A vizsgálat csapatmunkában hatékonyan végezhető, és amellett, hogy alapvető kémiai tulajdonságokkal és jelenségekkel ismerteti meg a diákokat – mint az oldódás, semlegesítés, gázfejlődés és pufferhatás –, segíti az interdiszciplináris szemlélet kialakulását, és felvértezi a diákokat azokkal az ismeretekkel és képességekkel, amelyekkel sikeresen kiszűrhetik a félrevezető információkat a témában.



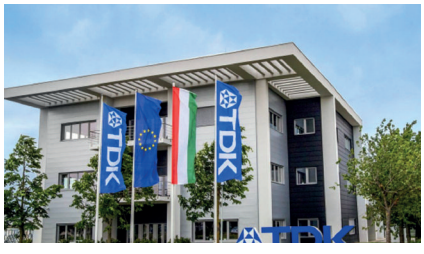
5. ábra. Gyári lúgosító kapszula hatékonyságának vizsgálata (kék: 0,5 g $CaHPO_4 \cdot 2H_2O$; zöld: ~0,6 g kapszula-töltőanyag; lila: 0,5 g kapszula-töltőanyag; piros: ~ 0,3 g kapszula-töltőanyag)

"If you hear someone say that your body is too acidic and you should use their product to make it more alkaline, you would be wise not to believe anything else the person tells you." (Dr. Gabe Mirkin) [17]

IRODALOM
[1] B. Szabó, G. Hetényi, K. Majoros, V. Miszori, N. Kállai, R. Zelkó, Acta Pharm. Hung. (2011) 81, 1.
[2] S. Azarmi, W. Roa, R. Löbenberg, Int. J. Pharm. (2006) 328, 12.
[3] Szilárd gyógyszerformák hatóanyagának kioldódási vizsgálata (Ph. Hg. VIII.): https://ogyei.gov.hu/dynamic/GYK2010/2_9_3_6_6.pdf (2002.12.20.)
[4] Dissolution (USP, 2011): https://www.usp.org/sites/default/files/usp/document/harmonization/gen-method/stage_6_monograph_25_feb_2011.pdf (2002.12.20.)
[5] M. Kakuk, D. Farkas, I. Antal, N. Kállai-Szabó, Acta Pharm. Hung. (2020) 90, 155.
[6] Antacidok (FoNo VIII.): https://ogyei.gov.hu/dynamic/2021_eFoNoVIII/5_1_2_Antacidok.pdf (2022.12.20.)
[7] I. Antal, I. Klebovich, K. Ludányi, Kémiai ellenőrző vizsgálatok a gyógyszertechnológiában, Semmelweis Kiadó, Budapest, 2012, 102.
[8] Pulvis ad pyrosim (FoNo VIII.): https://ogyei.gov.hu/dynamic/2021_eFoNoVIII/Pulvis_ad_pyrosim_FoNoVIII_01_Orvosi_cikkely.pdf (2022.12.21.)
[9] Pulvis aluminii et magnesii (FoNo VIII.): https://ogyei.gov.hu/dynamic/2021_eFoNoVIII/Pulvis_aluminii_et_magnesii_FoNoVIII_01_Orvosi_cikkely.pdf (2022.12.21.)
[10] Pulvis antacidus (FoNo VIII.): https://ogyei.gov.hu/dynamic/2021_eFoNoVIII/Pulvis_antacidus_FoNoVIII_01_Orvosi_cikkely.pdf (2022.12.21.)
[11] N. E. Rossett, M. L. Rice, Gastroenterology (1954) 26(3), 490.
[12] I. Antal, I. Klebovich, K. Ludányi, Kémiai ellenőrző vizsgálatok a gyógyszertechnológiában, Semmelweis Kiadó, Budapest, 2012, 148.
[13] Antacid products for over-the-counter (OTC) human use: https://www.accessdata.fda.gov/scripts/cdrh/cfdocs/cfcfr/CFRSearch.cfm?CFRPart=331&showFR=1 (2022.12.21.)
[14] K. Burger, Az analitikai kémia alapjai, Semmelweis Kiadó, Budapest, 1999, 73.
[15] B. S. Kendler, M. J. Glade, Townsend Letter (2013) 755–756, 114.
[16] „El vagyunk-e savasodva?": https://kodpiszkalo.blog.hu/2012/02/16/el_vagyunk-e_savasodva (2022.12.23.)
[17] H. Hall, Skeptic (2017) 22, 4.

Új típusú kondenzátorok

Új típusú, energiahatékonyságot növelő kondenzátorokat és „kondenzátor-bank" modulokat fejlesztettek ki egy nemrég lezárult átfogó kutatás-fejlesztési program részeként a TDK Hungary Components Kft.-nél Szombathelyen. Az elmúlt két év során megvalósított projekt a teljesítmény-induktivitások és a kibővített feszültségtartományú hibrid polimer kondenzátor fejlesztését célozta. Az új típusú kondenzátorok többek között az autók motorvezérlő egységeiben, elektromos kormányszervo, elektromos fékműködtető és fékrásegítő rendszerekben alkalmazhatóak, de felhasználhatók ipari elektronika, a megújuló energia, az 5G telekommunikációs hálózatok, valamint a háztartási elektronika területén is. *(https://www.tisztajovo.hu)*

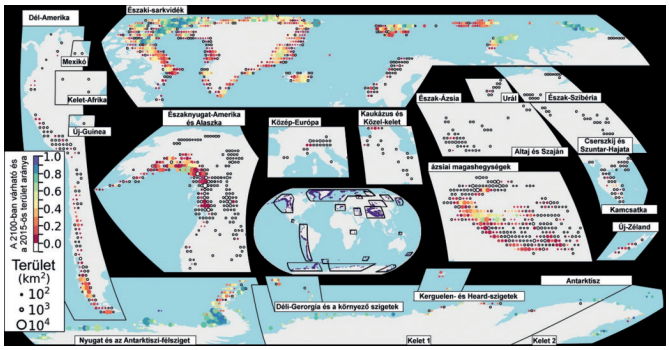


DD

TÚL A KÉMIÁN

Forrósodó gleccserszámadás

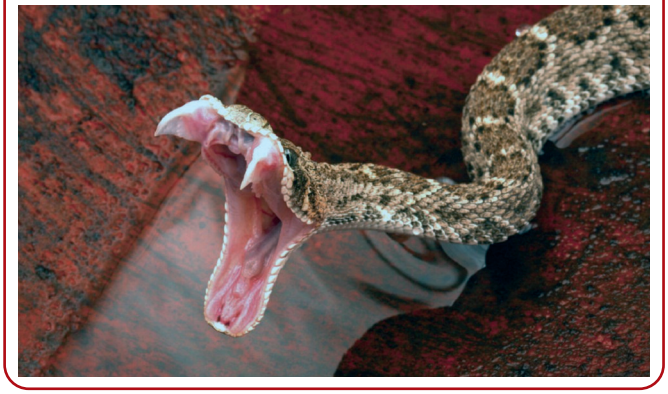
Az idei tél minden korábbinál nyilvánvalóbbá tette, hogy a globális éghajlatváltozás a tudósok távoli, bizonytalan jóslatából égető fontosságú, mindennapi kérdéssé vált. Habár a Föld gleccserei az antarktiszi vagy grönlandi jégmezőkhöz képest összességében kevés jeget tartalmaznak, a tengerszint emelkedése szempontjából mégis jelentősek. Egy igen széles körű tanulmány a Földön ismert összes (szám szerint 215 547) gleccser kilátásait próbálta felmérni a következő nyolc évtizedre. A becslések szerint az ipari forradalom előtti értékhez képest 1,5 °C-os globális felmelegedés a jelenlegi gleccserek 60%-ának eltűnését okozza majd 2100-ra. Ha az emelkedés 2,0 °C, ami a Párizsi Megállapodás minimumcélja, akkor a kicsi gleccserek 70%-a, a közepesnek pedig bő egyötöde olvad el teljesen addigra. Sajnos a jelenlegi folyamatok alapján a további beavatkozás nélkül várható felmelegedés 2,7 °C: ennek a sarkvidékek közelében fekvő, hatalmas gleccserekre is nagyon jelentős hatása lenne. *Science 379*, 78. (2023)



Kígyóméreg-autorezisztencia

Kevesen gondolnak bele abba, hogy a mérges kígyók hogyan lehetnek rezisztensek a saját szervezetük által termelt toxinnal szemben. A texasi csörgőkígyók (*Crotalus atrox*) esetében a közelmúltban sikerült válaszolni erre a fontos és érdekes kérdésre. Ezt a kígyófajt azért kezdték el vizsgálni, mert genomja 30 metalloproteáz enzimet kódol, minden más csörgőkígyófajénál többet. Ezek közül az egyik (a FETUA-3 jelű) meglepő tulajdonsága, hogy a molekulák összetett keverékét tartalmazó kígyóméreg minden toxikus komponensének hatását gátolja. Ennek a felfedezésnek a kígyómarások orvosi kezelésében nagy jelentősége lehet.

Proc. Natl. Acad. Sci. USA 119, e2214880119. (2022)



CENTENÁRIUM

Géza Schay: Eine neue Methode zur elektrolytischen Trennung und Bestimmung der Halogene *Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie, Vol. 29*, pp. 123–126. (1923. március 1.)

Schay Géza (1900–1991) magyar kémikus, akadémikus volt. Legmaradandóbb tudományos eredményeit a folyadék- és gázadszorpció termodinamikai, reakciókinetikai és kromatográfiai vizsgálatai jelentették. Teljes pályafutása Budapesthez kötötte: több egyetemen tanított, de volt a Magyar Ruggyantaárugyár kutató-, ellenőrző és textillaboratóriumának vezetője is. Nyugdíjazása előtt a Magyar Tudományos Akadémia Központi Kémiai Kutatóintézetének első igazgatója volt.

Katalitikus aranytojás

Aranytojást tojó tyúkhoz is hasonlíthat az a katalizátor, amely tojáshéjba beépített arany nanorészecskéket tartalmaz. A tojáshéj porozitási tulajdonságai fémorganikus hálózatra emlékeztetnek, ezért a héj katalizátorhordozónak is megfelel. Az elkészített kompozit hasznosságát textilipari szennyvizek kezelése során bizonyították, ahol az anyag 14 cikluson át is megőrizte aktivitását. Az arany tojáshéj egy ennél sokkal szelektívebb reakcióban, a paracetamol előállításában szerepet játszó hidrogénezési folyamatban is bevált a grammos nagyságrendű mennyiségek szintézisében.

ACS Appl. Mater. Interfaces 14, 51855. (2022)

APRÓSÁG

10^{27} ronna (R)

10^{30} quetta (Q)

10^{-27} ronto (r)

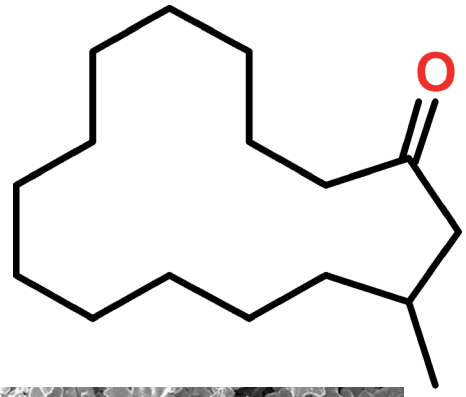
10^{-30} quecto (q)

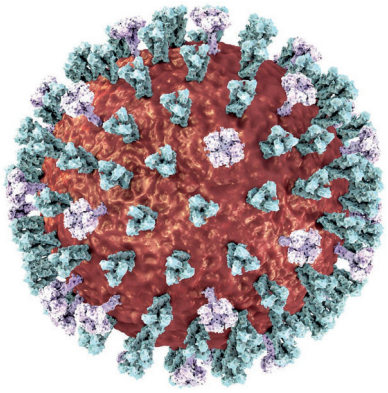
A 27th General Conference on Weights and Measures négy új prefixumot vezetett be az SI-be: a ronna (R) 10^{27}-t, a ronto (r) 10^{-27}-t, a quetta (kvetta, Q) 10^{30}-t, a quecto (kvekto, q) pedig 10^{-30}-t jelent ezentúl (a magyar írásmód a szokásos módon eltérhet majd).

Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg1206@gmail.com. A rovatszerkesztő korábbi írásait is tartalmazó blog elérhető a következő internet-oldalon: http://lenteg.ttk.pte.hu/ScienceBits/index_magyar.html

A HÓNAP MOLEKULÁJA

A muszkon ($C_{16}H_{30}O$) az illatszeripar számára az egyik legnagyobb hasznot hozó, jellegzetes pézsmaszag kialakulásában fontos. Az ilyen illathoz négy különböző kémiai szerkezetű családba tartozó molekulák is hozzájárulhatnak. Nemrégiben azt sikerült kimutatni, hogy a szaglóérzékelésben mind a négy típus ugyanarra a receptorra hat, amelynek jele OR5A2. *Curr. Biol. 32*, 5172. (2022)

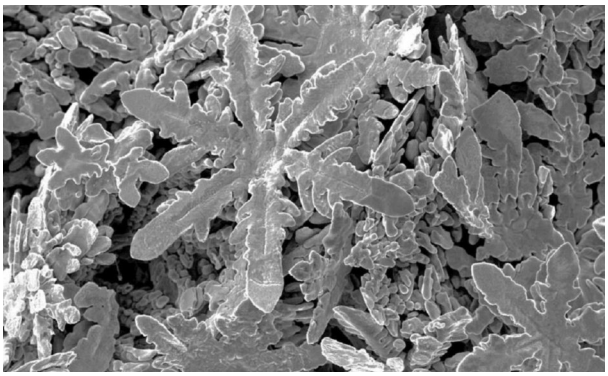




Univerzális RNS-vakcina influenza ellen

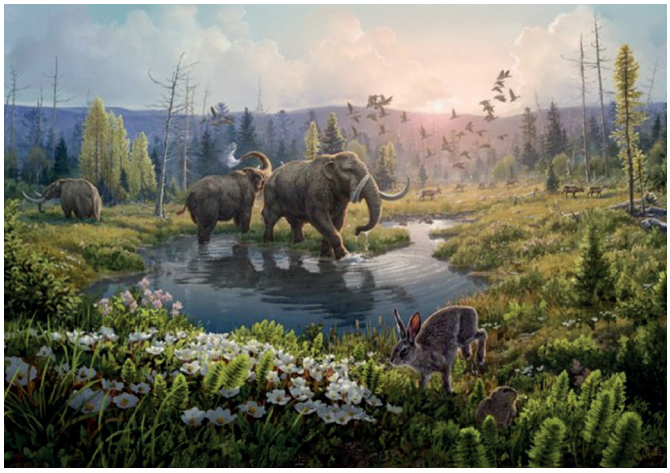
Gyógyszertudósok már régóta próbálnak olyan védőoltást kifejleszteni az influenza ellen, amely a vírus ritka vagy újonnan kifejlődő törzsei ellen is hatásos lehet. Egy új tanulmány áttörést jelenthet ezen a területen a Covid–19 ellen kifejlesztett mRNS-vakcinák működési elvét használva. A módszer lényege, hogy a vírusban fontos szerepet játszó hemagglutinin fehérjéket kódoló mRNS-t tartalmazó lipid nanorészecskéket adnak be egereknek és hörcsögöknek. Ezek szervezete olyan antitesteket termelt, amelyek minden influenzavírus ellen védettséget adtak. Sajnos még nem világos, hogy a hatás mennyire tartós: ezt későbbi munka során kell tisztázni.

Science 378, 899. (2022)



Cink hópelyhek

Egy új fémkristályosítási technika révén elemi cinkből nagyon látványos, hópehely alakú kristályok állíthatók elő. Az eljárás lényege, hogy galliumhoz mintegy 10 tömegszázalék cinket adtak olvadékállapotban, majd az így keletkező folyékony ötvözetet hűteni kezdték. Bámulatosan formagazdag cinkkristályok keletkeztek. Hasonló elveken rézből, platinából és ónból is hópehelyszerű kristályokat tudtak előállítani. *Science 378*, 1118. (2022)



Ökológiai DNS-analízis

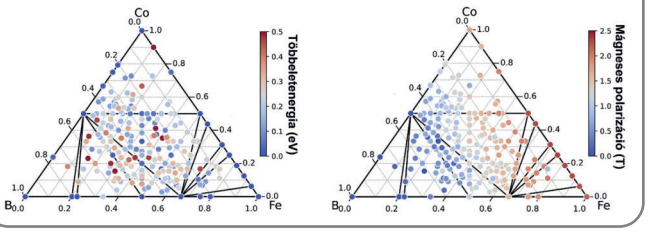
Egy kutatócsoportnak kétmillió éves, Grönlandról származó DNS-mintákat sikerült szekvenálnia. A jelenleg fagyos és jeges sziget neve ma igen ironikusnak hat, hiszen zöld földet jelent, de való igaz, hogy földtörténeti mércével mérve nem is olyan régen még kellemesen meleg, fűvel borított terület lehetett. A nagyon régi minták analízisét az tette lehetővé, hogy a nukleinsav természetes bomlása jelentősen lelassul, ha az üledékekben nagy mennyiségben megtalálható agyagásványokhoz kötődik. A munkában emlős állatok mitokondriumaira, illetve növények kloroplasztiszaira koncentráltak, így elég jó képet tudtak alkotni arról, hogy a minták keletkezésének korában milyen lehetett az élőhely.

Nature 612, 283. (2022)

Állandó mágnes ritkaföldfém nélkül

Az erős állandó mágneseket egyre nagyobb mértékben használja a tudomány, például NMR-készüléket is lehet már venni szupravezető elektromágnes nélkül. Amerikai kutatók a gépi tanulás módszereinek segítségével, kvantummechanikai módszerekkel olyan, vasat, kobaltot és bórt tartalmazó háromkomponensű rendszert találtak, amelynek előre jelzett mágneses sajátságai igen ígéretesek voltak. Az anyagot szerencsére nem volt nehéz előállítani, s az így szintetizált Fe_3CoB_2 tulajdonságai nagyon jó egyezést mutattak az elméleti jóslatokkal. Nagy előnye a vegyületnek, hogy ritkaföldfémet nem tartalmaz, így ára és stratégiai hozzáférhetősége is sokkal kedvezőbb, mint az erős mágnesesekben használható, eddig ismert ötvözeteké.

Proc. Natl. Acad. Sci. USA 119, e2204485119. (2022)



Válogatás

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya által kiválasztott aktuális kiemelt publikációk a nanolapokat tartalmazó diszperziók egylépéses előállításával, a nanoenzimként funkcionáló aerogélek előállításával és a használt PET-palackokból készült őrlemény organokatalizátoros lebontásával foglalkoznak.

Perczel András

osztályelnök, az MTA rendes tagja

Réteges kettős hidroxidok mérsékelt körülmények között történő delaminációja ionos folyadékokban

The Journal of Physical Chemistry Letters, 2022

https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpclett.2c03275

Dóra Takács[1,2], Gábor Varga[2], Edit Csapó[2,3], Andrej Jamnik[4], Matija Tomšič[4], István Szilágyi[1,2]

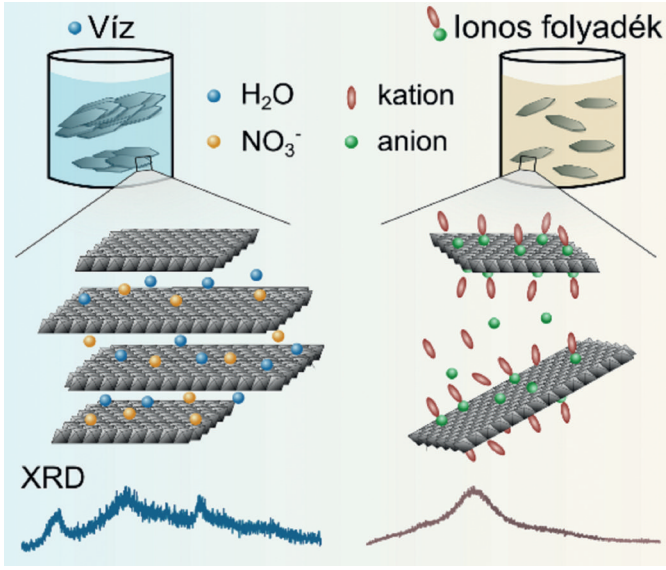
[1] MTA-SZTE Lendület "Momentum" Biocolloids Research Group, University of Szeged

[2] Interdisciplinary Excellence Center, Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged

[3] MTA-SZTE Lendület "Momentum" Noble Metal Nanostructures Research Group, University of Szeged

[4] Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Večna pot 113, Ljubljana, Slovenia

A kétdimenziós nanoanyagok iránti megnövekedett érdeklődés olyan hatékony, gazdaságos és környezetbarát delaminálási folyamatokat igényel, amelyekkel ipari alkalmazásuk fenntartható. A hagyományos módszerek fő problémája, hogy többlépéses folyamatokban játszódnak le, környezetkárosító toxikus oldószerek



és adalékanyagok bevonásával. A jelen közlemény réteges kettős hidroxidok szerkezetének megbontásával foglalkozik ionos folyadékok jelenlétében. Az ionos folyadékok szobahőmérsékleten folyékony, sószerű vegyületek, melyekben a lamellás szerkezet szétesése a rétegközi vonzás a leárnyékolódása miatt következik be. Az eredmények alapján az ionos folyadékokban történő delaminálás kiváló módja a nanolapokat tartalmazó diszperziók egy lépésben történő előállítására nem illékony, zöld oldószerek felhasználásával.

Tetraazamakrocikus réz(II)komplexekkel funkiconalizált aerogélek: Szuperoxid-dizmutáz aktivitású nanoenzimek

Applied Surface Science, 2023

https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433222031506

Norbert Lihi[1], Zoltán Balogh[1,2,3], Róbert Diószegi [1,2], Attila Forgács[1], Krisztián Moldován [1,2], Nóra V. May[4], Petra Herman[1], István Fábián[1], József Kalmár[1]

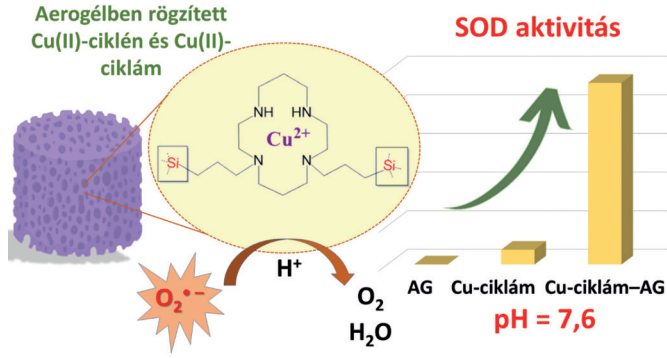
[1] ELKH-DE Mechanisms of Complex Homogeneous and Heterogeneous Chemical Reactions Research Group, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, University of Debrecen

[2] Doctoral School of Chemistry, University of Debrecen

[3] Neutron Spectroscopy Department, Centre for Energy Research

[4] Centre for Structural Science, Research Centre for Natural Sciences

A szerzők ciklén- és ciklámligandumok réz(II)komplexeit rögzítették mezopórusos szilika aerogél hordozón. Az így előállított aerogélek nanoenzimként funkcionálnak, mivel jelentős szuperoxid-dizmutáz aktivitásuk van, amely jobb, mint az oldatfázisú réz(II)komplexeké. Az immobilizáció eredményeképp kialakult új kémiai környezet, a réz(II)-centrumok közötti kellő távolság és a póruson belüli zárt tér hatása járul hozzá a megnövekedett enzimaktivitáshoz.



A PET glikolízisének optimalizálása visszaforgatható heterogén organokatalizátorok alkalmazásával

Green Chemistry, 2022

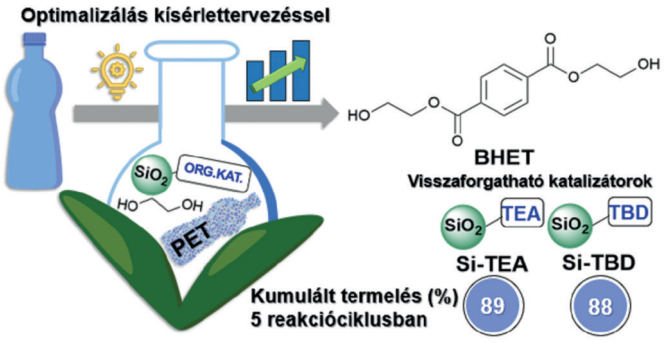
https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2022/gc/d2gc02860c

Zsuzsanna Fehér[1], Johanna Kiss1, Péter Kisszékelyi[1], János Molnár[2], Péter Huszthy1, Levente Kárpáti[2], József Kupai [1]

[1] Department of Organic Chemistry and Technology, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics

[2] Laboratory of Plastics and Rubber Technology, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics

A szerzők használt PET-palackokból készült őrleményt bontottak le kiváló termeléssel szilikagélhez rögzített organokatalizátorok segítségével, amelyek szűrés után újra felhasználhatók, így gaz-



daságos lehet az iparban való alkalmazásuk. A kémiai újrahasznosítás előnye, hogy a reakció terméke, amely a műanyag alapegysége, felhasználható a műanyag újbóli előállítására a körforgásos gazdaság érdekében.

Februári számunkban a következő összefoglalót helytelen címmel közöltük, amiért elnézést kérünk a szerzőktől és az olvasóktól. Helyesen:

Hosszú szénláncú olefinek katalitikus bontása propilénné izomerizáló metatézissel látens biciklikus (alkil)(amino)karbén-ruténium olefinmetatézis-katalizátorok alkalmazásával

Angewante Chemie International Edition, 2022
https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/anie.202204413

Márton Nagyházi[1], Ádám Lukács[1], Gábor Turczel[1], Jenő Hancsók[2], József Valyon[1], Attila Bényei[3], Sándor Kéki[4], Róbert Tuba[1]

[1] Institute of Materials and Environmental Chemistry, Eötvös Loránd Research Network, Research Centre for Natural Sciences
[2] Environmental and Chemical Engineering, Department of MOL Hydrocarbon and Coal Processing, University of Pannonia
[3] Department of Pharmaceutical Chemistry, Faculty of Science and Technology, University of Debrecen
[4] Department of Applied Chemistry, Faculty of Science and Technology, University of Debrecen

Olyan zöld kémiai eljárás kidolgozása valósult meg, amely megteremti annak a lehetőségét, hogy napjaink rendkívüli környezeti terhelést okozó, a természetben nem lebomló műanyagait olyan vegyületekké alakítsa át hatékonyan, környezetbarát módszerekkel, amelyek a körkörös gazdaság magas hozzáadott értékű alapanyagává válhatnak.

A 80 éves Penke Botond köszöntése

Az SZTE SZAOK Orvosi Vegytani Intézete kötetlen, személyes emlékekkel gazdagított tudományos ülésen, utána pedig állófogadáson munkatársak, együttműködő partnerek, barátok, tisztelők jelenlétében köszöntötte a 80 éves Penke Botond akadémikust, egyetemi tanárt, az intézet korábbi vezetőjét az MTA SZAB Székházában.

Penke Botond 1942. október 13-án született Beregszászon (ami akkor rövid ideig ismét Magyarország része volt). Szülei pedagógusként dolgoztak. Édesapja a háborúban tartalékos tisztként hősi halott lett. Gyermekkorát Szatmárcsekén töltötte, általános iskolai tanulmányait is itt végezte. Középiskolai tanulmányait a debreceni Fazekas Mihály Gimnáziumban fejezte be. Érettségi után 1960-ban az Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Karára nyert felvételt biológia-kémia szakra, ezt 1965-ben kitűnő eredménnyel végezte el. Az egyetem után Szegedre, a József Attila Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékére nyert felvételt, Kovács Kálmán professzor peptidkémiai kutatócsoportjába. Itt védte meg 1968-ban egyetemi doktori disszertációját a bázikus jellegű glutaminsav-származékok szintézise témaköréből. 1970–71-ben Theodor Wieland professzor kutatócsoportjában 14 hónapot dolgozott a heidelbergi Max Planck Orvostudományi Kutatóintézetben. Kandidátusi disszertációját 1976-ban védte meg. Még ebben az évben a peptidkémiai kutatócsoport átköltözött egy emelettel feljebb, a Szegedi Orvostudományi Egyetem Orvosi Vegytani Intézetébe. Akkor Penke Botond elsősorban a neuroendokrin és a gasztrointesztinális rendszer hormonjaival foglalkozott. Emellett azonban még számos más kutatási irányt is művelt, a szintetikus peptidkémián keresztül az elméleti kémiáig, illetőleg a peptidek különböző betegségek patomechanizmusában betöltött szerepéig, a neurodegenerációig, különös tekintettel az Alzheimer-kórra. Munkássága során foglalkozott radioimmuno-assay módszerek kidolgozásával, a fehérjék aminosav-összetételének újszerű meghatározásával, valamint peptid-szulfátészterek előállításának új eljárásaival is. Ezeknek a munkáknak egy részéből született az akadémiai doktori disszertációja, amelyet 1989-ben védett meg. 1989 júliusától 2005-ig vezette a SZTE ÁOK Orvosi Vegytani Intézetét, 1990-ben professzorrá nevezték ki. 1996 és 1999 között 3 évig a József Attila Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékének is vezetője volt. 2012-től professor emeritus. Megalakulásától tagja az MTA Peptidkémiai Munkabizottságának, amelynek 2003 és 2008 között elnöke is volt. 2001-ben az Akadémia levelező tagjává, majd 2007-ben rendes tagjává választották. Számos tanulmányúton vett részt, így a francia Atomenergia Ügynökség Gif-sur-Yvette-i Biokémiai Intézetében, a kaliforniai Salk-Intézetben, a göttingeni Max Planck Kísérleti Orvostudományi Intézetben. Több mint négyszáz tudományos közleménye jelent meg, melyekre eddig több mint 9500 hivatkozást kapott. Hirsch-indexe 54. Megkapta a Szent-Györgyi Albert-díjat, a Széchenyi-díjat, a Klebelsberg-díjat, a Szegedért Alapítvány díját, a Magyar Érdemrend középkeresztjét is.

Az Orvosi Vegytani Intézete ünnepi ülését Lázár György egyetemi tanár, az orvostudományi dékánja nyitotta meg. Az ünnepelt emberi és szakmai kvalitásait méltató szavai után átadta neki az SZAOK Kari Tanácsa által adományozott Pro Facultate

Medicinae díjat kiemelkedő oktató, oktatásszervező és tudományos munkássága elismeréseként. Hangsúlyozta, hogy szinte nincsen olyan díj, amelyet az ünnepelt ne kapott volna meg, illetve kevés olyan pozíció volt az egyetemen töltött több mint 50 év során, amit Penke Botond ne töltött volna be.

Ezután Vígh László, akadémikus (SZBK, Biokémiai Intézet) tartott személyes hangvételű előadást a közös kutatásokról „Munka és barátság egy nagyszerű emberrel" címmel. Ő is, mint a következő előadó, egyetemista korában találkozott Botonddal és azóta is tart a rendkívül eredményes együttműködésük.

Deli Mária akadémikus, (SZBK, Biofizikai Intézet) „Béta-amiloid peptid, halolaj és szigma-1 receptor – egy húszéves együttműködés dióhéjban" című előadásában bemutatta a szerteágazó közös kutatásokat, és Botondot a kutatás szenvedélyes szeretetében és széles körű kutatásaiban példát mutató mentoraként aposztrofálta.

Juhász Gábor egyetemi tanár (ELTE) több, Botonddal közös közlemény társszerzője „A molekuláris neuron fenotípus új, dinamikus modellje az unbiased kutatások eredményei alapján" címen tartotta meg előadását.

Fülöp Lívia (SZTE, SZAOK, Orvosi Vegytani Intézet), aki Botond nyugdíjba vonulásakor átvette a kutatócsoport vezetését, az Alzheimer-kór molekuláris mechanizmusainak megfejtését célzó kutatásaikról beszélt, és vázolta a területen sokáig dogmaként uralkodó amiloid-hipotézis felemelkedését, tündöklését és bukását 30 év kutatómunka tükrében. Botond, örök optimizmusát jól mutatva, köszönő beszédében a legújabb közlemények alapján bizakodásának adott hangot, hogy ez a hipotézis nincs teljesen bukásra ítélve, és esetleges más célpontokat is figyelembe véve előállítható a közeljövőben gyógyszer a sokak életét megkeserítő Alzheimer-kór ellen.

Perczel András akadémikus, az MTA Kémiai Tudományok Osztályának elnöke (ELTE, Kémiai Intézet) ugyancsak méltatta az ünnepeltet, kiemelve a Peptidkémiai Munkabizottságban betöltött sok évtizedes meghatározó szerepét, majd saját új kutatási eredményeikről beszélt „Amiloid-kontroll" címen.

Az ünnepeltről közismert rendkívül széles érdeklődési köre, imponáló szakmai tudása, a legígéretesebb kutatási irányok gyors és alkotó felismerése, a tudományos kutatás szenvedélyes szeretete, az oktatás, tudomány-népszerűsítés lelkes művelése.

Együttműködései behálózták Magyarország és a világ jelentős részét. Különböző tudományterületeken dolgozó csoportok szerteágazó kutatásait koordinálta karmester módjára, akár mint csoportvezető, tanszékvezető, vagy a Dél-alföldi Neurobiológiai Tudásközpont korábbi vezetője, különféle nagy volumenű pályázatok értelmi szerzője és koordinátora. Lendületét és aktivitását a mai napig megőrizte, emeritus professzorként is fáradhatatlanul követi a szakirodalmat, szervezi az együttműködéseket. Még nyugdíjasként is több magasan citált review-t írt az Alzheimer-kór különböző aspektusairól.

Penke Botondra nemcsak a szakma, hanem az élet szeretete is jellemző. Sajnos ez év elején szeretett feleségét, mindenben társát, Olgit elveszítette. Botond végig mellette állt, szerető támogatást nyújtott és próbált gyógymódot találni. Bár nagyon aggódtunk érte, életszeretete, optimizmusa, a tudományos kutatás iránti rajongása és gyerekei, unokái szeretete átsegítették a nehézségeken. Napjainkban újra tele van tervekkel, cikket ír, szervez. Szívesen ismer meg új tájakat, kultúrákat, kirándul a hegyekben, régebben számos kajaktúrát szervezett. Híres a főzés iránti rajongása is, feleségével közösen szakácskönyvet is kiadtak 2008 karácsonyán *Jól főzni jó – mindenkinek; kétszáz étel-ábránd* címen.

Születésnapja alkalmából, valamennyi tisztelője nevében is, további jó egészséget és eredményes munkát kívánunk a 80 éves Penke Botondnak!

Tóth Gábor, Szűcs Mária
SZTE

44. Kémikus Nap Kecskeméten, az Univer Product Zrt.-nél

2022. december 7.

Egyesületünk Bács-Kiskun Megyei Területi Szervezete 44. Kémikus Nap rendezvényének az Univer Product Zrt. Kecskemét-Hetényegyházán a közelmúltban elkészült új gyárépülete adott otthont. A program első részében hagyományosan aktuális témákat tárgyaló tudományos előadások hangzottak el, melyek helyszíne a korszerű, új konferenciaterem volt. A program további részét üzemlátogatás és az új laboratóriumok megtekintése képezte. Szintén a területi szervezet értékes hagyományát követve a rendezvényen kecskeméti középiskolások is részt vettek.

A nagyszámú érdeklődőt Palotás Gábor, az Univer Product Zrt. kutatásfejlesztési és minőségügyi vezérigazgató-helyettese, az idén ötvenéves területi szervezet elnöke köszöntötte, majd ellátta a rendezvény elnöki feladatait. A programról a következőkben számolunk be.

Baranyi József tudományos tanácsadó (Debreceni Egyetem), egyetemi magántanár (Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem): *A baktériumok alkalmazkodása új környezethez analóg a mi „kultúrsokk" élményünkkel*

Baranyi professzor úr a mikrobiológiai folyamatok matematikai megközelítésére irányuló, Svédországban kezdett, majd Nagy-Britanniában végzett kutatásai során dolgozta ki a róla elnevezett Baranyi-modellt baktériumok növekedésének leírására. Kutatásaival a matematika és az élettudományok közötti hídépítést célozta és érte el. Ezt a modellt ma világszerte alkalmazzák a prediktív mikrobiológiában, főként az élelmiszertudományok területén, amint arra példákat hallhattunk.

Az előadás arra is rámutatott, hogy a baktériumok lappangási fázisban adaptálódnak, ha új környezetbe kerülnek (pl. új enzimeket kell termelniük), és ez a folyamat hasonlítható az ember kultúrsokk-hatásra adott válaszához. Példákat mutatott be, hogy amikor a baktériumok stressz-környezetbe kerülnek, a lappangás alatt kialakulhat bistabilitás, azaz véletlenen alapuló kétféle génexpresszó is, tehát előfordulhat, hogy a baktérium genetikai állománya változatlan marad, de a gén kifejeződése kétféle lesz. A biológiai folyamatokban és a humán társadalomban fellépő egymásra hatás hasonlóságára és értékeire hívta fel az előadás a figyelmet megemlítve ebben a hálózatok szerepét.

Fontos tanulságként emelte ki a professzor úr, hogy a stressz megoszt és uralkodik mind a baktérium populációban, mind az emberi társadalomban. Ennek felismerésében és megismerésében nemcsak a szellemóriásoknak, hanem a tanáregyéniségeknek is meghatározó szerepük van.

Daood Hussein egyetemi tanár (Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem): *A paprika karotinoidvegyületei és kémiai analízisük*

Daood professzor úr utalt arra, hogy hosszú évek alatt szoros együttműködést alakítottak ki az Univer Product Zrt.-vel. Előadásában áttekintette a magyar fűszerpaprika legfőbb jellemzőit és a minőséget megalapozó vegyületeket, biokémiai folyamatokat különös tekintettel a karotinoid-színanyagokra. A hungarikumok között szereplő fűszerpaprikát különleges és kitűnő aromaprofil, a színanyagok összetétele és tartalma, a tárolás alatti stabilitás, valamint tradicionális magyar feldolgozás jellemzi. Az előadás bemutatta hidrolizált és nem hidrolizált fűszerpaprika-kivonatok karotinoid-összetételének vizsgálati módszereit, melyek között kiemelkedő szerep jut a HPLC-eljárásoknak. Ismertette a kulcsfontosságú vegyületeket, azok, valamint szennyeződések (így ólom-oxid és Sudan festékek) kimutatásának lehetőségeit.

Az előadás kiemelte a fűszerpaprika azon komponenseit, amelyek antioxidáns hatásukkal védik a minőséget meghatározó karotinoid-színanyagokat az érés, feldolgozás és tárolás során (C-vitamin és polifenolok magas víztartalom esetén, E-vitamin-komponensek alacsony víztartalom mellett). Áttekintette továbbá a fűszerpaprika utóérlelése, szárítása és őrlése során felmerülő élelmiszer-biztonsági kérdéseket, a kis dózisú gamma-besugárzás kedvező hatását a színanyagok képződésére. Bemutatta különböző szárítási módszereknek a karotinoid-színanyagokra gyakorolt hatását, és felhívta a figyelmet a további kutatás szükségességére e területen.

Palotás Gábor kutatásfejlesztési és minőségügyi vezérigazgató-helyettes (Univer Product Zrt.): *Az Univer-paprikakutatás első évtizede: új fajták, fitokemikáliák, mikroorganizmusok*

Az előadás rövid ismertetést adott a 100%-ban magyar tulajdonú vállalatról, majd áttekintette azokat a gazdasági tényezőket, amelyek szükségessé tették, hogy a vállalat pályázati források bevonásával, analitikai laboratóriumának fejlesztésével, szakembergárdájának bővítésével intenzíven megújítsa K+F tevékenységét a paprikanemesítés területén. Ehhez a saját erőforrások fejlesztésén túl széles körű együttműködéseket épített ki hazai kutatópartnerekkel.

Az elmúlt tíz évben nemesítéssel új, európai, illetve magyar fajtaoltalommal védett paprikafajtákat állítottak elő, alapvetően megújítva a hazai csípős fűszer fajtakört. 2023-ban azonban már első édes fűszerpaprika-fajtájuk is köztermesztésbe kerül. Ennek a programnak a kiemelkedő eredményeit a 2015-ben elnyert Agrárinnovációs Díj is fémjelzi. Tudományos szempontból is említésre érdemesek a kapszaicinoid-analitikai, valamint mikrobiológiai kutatási eredményeik. Új, természetesen előforduló kapszaicinoid-komponenseket határoztak meg, valamint egyes termékeikből, illetve növényi mintákból új, ritka tejsavbaktérium-, illetve élesztőtörzseket azonosítottak és vizsgálták tulajdonságaikat.

Üzemlátogatás és az új laboratóriumok megtekintése

Az Univer Product Zrt. 8 milliárd forint értékű beruházásával évi 12 ezer tonnára növeli, ezzel megduplázza magyaros ételízesítőinek gyártókapacitását. Kormányzati támogatással 2021-ben indult új üzem építése a kecskemét-hetényegyházi telephelyen. A már működő üzem és a laboratórium felszerelése 2023-ra vált teljessé. Amint arról tájékoztatást kaptunk, a beruházás egyszerre jelent kapacitásbővülést, technológiai innovációt és a munkahelyek megőrzését. A termelés és a fent jelzett K+F tevékenység

Kecskemét-Hetényegyháza – az Univer új üzemi és laboratóriumi épülete

Középiskolások az új üzemcsarnokban

A hallgatóság az új épület előadótermében

szükségleteinek megfelelően építi ki a vállalat új, korszerű műszerekkel ellátott laboratóriumát. Az új üzemben gyártják a hungarikum Erős Pista és Piros Arany, valamint számos más ételízesítő (Édes Anna, Gulyáskrém, Fokhagymakrém, Vöröshagymakrém, Reszelt Torma, Haragos Pista) termékeiket.

Felhívták a figyelmünket arra, hogy a megfelelő minőségű és mennyiségű zöldség-alapanyag biztosítása érdekében az Univer 45 éve működteti saját termeltetési rendszerét, amely több száz, jellemzően Kecskemét 80 kilométeres körzetében dolgozó magyar termelőre épül.

A hetényegyházi projekt mellett az állami támogatás kiterjed az Univer Product Zrt. napenergiára alapozott energetikai fejlesztéseire is.

Részletesebb információért ajánljuk a www.univer.hu című honlapot.

Buzás Ilona

Álláspályázat

A Magyar Kémikusok Egyesülete álláspályázatot hirdet a szervezet Ügyvezető Igazgató Tisztségének betöltésére 2023. október 1-től, határozatlan időre. A kinevezett ügyvezető igazgató feladata:

– az Egyesület operatív működésének biztosítása és irányítása,
– a szervezet közhasznú tevékenységeivel kapcsolatos feladatok szervezése,
– a titkárság munkájának koordinálása,
– gazdasági folyamatok irányítása,
– rendezvényszervezési feladatok ellátása és koordinálása,
– az Egyesület rendezvényein való megjelenés és képviseleti feladatok ellátása,
– a Gazdasági Bizottságban tagként való részvétel,
– az Egyesület Intézőbizottsági munkájában tanácskozási joggal való részvétel és az azzal kapcsolatos adminisztratív feladatok ellátása.

A pályázóval szemben elvárt követelmények:

– felsőfokú végzettség,
– tárgyalóképes angol nyelvtudás,
– informatikai és számítástechnikai jártasság,
– gyakorlat néhány fős munkacsoport irányításában.

A pályázat során előnyt jelent:

– közhasznú szervezet vezetésében szerzett tapasztalat,
– természettudományos végzettség,
– lobbitevékenység-tapasztalat,
– rendezvényszervezési tapasztalat,
– jó kommunikációs képesség.

Sikeres pályázat esetén a kinevezett Ügyvezető Igazgató közös egyetértéssel kialakított versenyképes jövedelemben részesül. A pályázat benyújtható elektronikusan a mail@mke.org.hu címre. A pályázat benyújtásának határideje: 2023. május 30.

ÚJ OPEN ACCESS FOLYÓIRAT
(energiatárolás, katalízis, kémiai biológia, anyagkémia, új szintézismódszerek, szupramolekuláris kémia)

A HÓNAP HÍREI

BME a fenntarthatóságért konferencia

Hulladék, műanyagok, biodiverzitás, újrahasznosítás és fenntarthatóság a kémiában

Tudósítás

A „Fenntartható BME” projektet Czigány Tibor rektor indította be még a háború és az energiaválság előtt. A szakmai vezetést – Levendovszky János tudományos és innovációs rektorhelyettes felügyelete alatt – rektori megbízottként jelen sorok írójára bízta.

A 2022. november 25-én megrendezett „BME a fenntarthatóságért” workshop célja az volt, hogy a BME különböző karai és tanszékei megmutathassák egymás és a külsős partnereknek számára kompetenciájukat a fenntarthatóság területén. A rendezvény egyik szekciója a „Hulladék, műanyagok, biodiverzitás, újrahasznosítás és fenntarthatóság a kémiában” című előadás-sorozat volt, amely magyar és angol nyelven zajlott. Örömünkre szolgált, hogy a panelben a BME öt kara is képviseltette magát. (Hamarosan az Energetika szekcióról is lesz összefoglaló.)

Az első előadás, „Körforgásban az építészet – Alternatív közgazdaságtani megközelítéseken alapuló építészeti jógyakorlatok” (Horváth-Farkas Zsófia, Építészmérnöki Kar) fő mondanivalója az volt, hogy mivel egy évtizeden belül számottevő nyersanyaghiány várható, egyre fontosabbá válik a különféle hulladékok nyersanyagként való kezelése. A második, „A bontás, mint tudatos építészeti gesztus” (Barta Fruzsina, Építészmérnöki Kar) arra próbált rávilágítani, hogy általában igaz, hogy az átépítés nem drágább, mint az új épület létrehozása. Tehát átgondolandó az eléggé elterjedt teljes dózerolás. A következő három beszámoló a betonipar „zöldítéséhez” kapcsolódott. A „Machine learning as a tool for more efficient adaptation of green solutions in the concrete industry” (Amina Dacić, Építőmérnöki Kar) arra mutatott rá, hogy adatbázisok létrehozásával racionalizálható a betonipar. Ezt követően a „Production of sustainable concrete using BME cladding wastes” és „A detailed review on early age shrinkage cracking in recycled aggregate concrete” (Ahmed M. Seyam és Iftikhar Sahar, Építőmérnöki Kar) az összezúzott agyagtéglák, illetve aprított habarcs adalékként való hasznosítását mutatták be. A következőkben „Környezetbarát áramköri hordozók” címmel (Hajdu István, Villamosmérnöki és Informatikai Kar) a hordozók történetében bekövetkezett bakelit → epoxigyanta → cellulóz-acetát → cukoralapú epoxigyanta fejlődési ívet ismerhette meg a közönség. Az elektronikai iparban is fontos a természetbarát anyagok alkalmazása. „A bioműanyagokról közérthetően” (Tábi Tamás, Gépészmérnöki Kar) ismertetés a bioműanyagok rele-

vanciáját elemezte, köztük a lehetséges fajtákat, például a tejsavalapú polikondenzátumokat (PLA), amelyek megújuló erőforrásalapúak, és biológiai lebomlásra képesek. Nagyon sok tévhit (pl. saját maguktól idővel szétesnek) övezi ezeknek az anyagoknak a használatát akár a szakmai, akár a fogyasztói oldalról, ugyanakkor a tévhitek eloszlatásával és a bioműanyagok, valamint az azokat kiszolgáló ágazatok térhódításával „zöld" műanyagipar indulhat el hazánkban is. Hasonló volt a tárgya a „*Polimerek a fenntarthatóság jegyében*" témájú prezentációnak (Szolnoki Beáta, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar), amiből kiderült a cukoralapú makromolekulák mint alternatív műanyagok jelentősége, valamint a polimer hulladékok értékes másodlagos nyersanyagként történő értéknövelő felhasználásának fontossága. A „Stabilizátorok szerepe a polietilén újrahasznosításában; Természetes eredetű antioxidánsok alkalmazása" (Tátraaljai Dóra, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar) arról a lehetőségről szólt, hogy a műanyagiparban jelenleg elterjedten alkalmazott fenoxiszármazékok szőlőhéjból extrahált, polifenolokban gazdag kivonatokra cserélhetőek, ezzel csökkentve a műanyag termékek környezet- és egészségkárosító hatását. A „Zero Waste Kampusz" előadás (Pokol Júlia, Építészmérnöki Kar) az egyetem működésének zöldítésére tett javaslatokat foglalta össze, melyek közül a műanyag-újrahasznosítást helyezte előtérbe. Az előadó szervezőként és kutatóként is részt vesz a Műegyetemen (és lakóhelyén) összegyűjtött polipropilén kupakok újrahasznosításában. A kupakok darálás, adalékolás és granulálás után extruderbe kerülnek, majd az olvadékból készült lapok feldarabolása után az építőiparban használható, tűzgátolt homlokzatburkolati elemek, illetve egyéb design-termékek készülnek. Végezetül jelen sorok írója (Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar) foglalta össze gondolatait a „Fenntartható szerves vegyipar (gyógyszeripar) – zöld kémiai kihívások a fejlesztések során" témakörben. Fontos, hogy megújuló forrásból származó anyagokból induljunk ki, hogy atomhatékony reakciókat és a szelektivitást biztosító katalizátorokat válasszunk, az egészséget és környezetet károsító, illetve tűz- és robbanásveszélyes oldószerek helyett „zöld" médiumokat alkalmazunk, a reakciókat pedig környezetbarát módon valósítsuk meg. A feldolgozásokat is célszerű racionalizálni.

Összességében jó hangulatú, hozzászólásokban bővelkedő szekcióülésen vehettünk részt.

A workshop proceedings-e a https://www.bme.hu/sites/default/files/csatolmanyok/BME%20a%20fenntarthat%C3%B3s%C3%A1g%C3%A9rt_1201_v4.pdf linken érhető el.

Keglevich György

Vegyipari mozaik

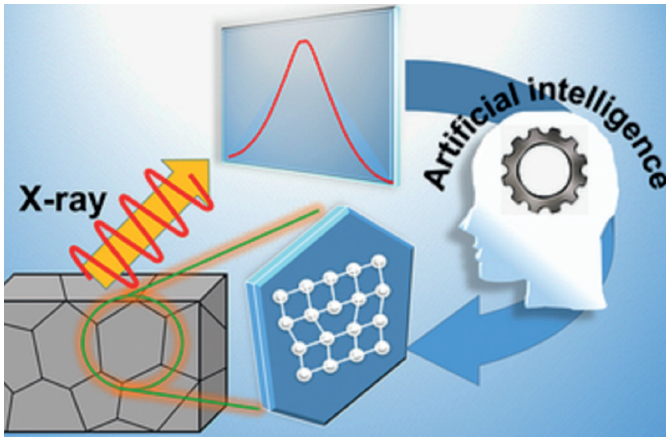
A napelemek termelését egyszerűen javíthatja egy új fejlesztés. „Egy amerikai kutatócsoport szerint a napelemes panelek sorainak távolságnövelésével fokozható az adott rendszer teljesítménye és gazdaságossága" – számol be a PV Magazine. A módszer segítségével javul a légáramlás, ami elősegíti a modulok hűtését, így akár 2,15 százalékkal is jobb lehet az LCOE értéke (ez az adott eszköz teljes élettartam alatt megtermelt energia költségét mutatja meg) bizonyos éghajlati viszonyok mellett.

A Nemzeti Megújuló Energetikai Laboratórium (NREL, mely az Egyesült Államok Energetikai Minisztériuma alá tartozik) szakértői kidolgoztak egy új hűtési technikát. Több tényezőt (sortávolság, légmozgás, a panel magassága és dőlésszöge) vettek figyelembe modellezésük során, majd a hőátadást szimulációval és szélcsatorna-kísérletekkel mérték fel. A csapat hosszskála segítségével tanulmányozta azt a teret, amelyben a levegő a napelemek körül és között mozog, így sokkal pontosabb képet kaphattak a teljesítményről.

A mezőgazdasági naperőművekben ez a teljesítménynövelő eljárás különösen előnyös lehet, ugyanis ezzel több a hely a növények és a mezőgazdasági eszközök számára. *(https://www.tiszta-jovo.hu/)*

A MOHU. MOHU MOL Hulladékgazdálkodási Zrt. lesz a neve a MOL hulladékgazdálkodási koncepcióért felelős cégének, amely azért jött létre, mert a MOL elnyerte a 35 évre szóló, évi 4-5 millió tonna hulladék kezelésére vonatkozó magyarországi hulladékkoncessziót. A cég partnereket keres, amelyekkel a koncepció megvalósításán fog dolgozni. Erre több száz pályázat már beérkezett. Közben lefolytatta a 2024. január 1-vel induló országos kötelező visszaváltási rendszerhez szükséges visszaváltó automaták beszerzési eljárását. A hulladékkezelő gazdasági létesítmények üzemeltetőivel és tulajdonosaival is megkezdte a tárgyalásokat a szükséges erőforrások lekötéséről. Bővebb információ a https://mohu.hu/ oldalon található.

Mesterséges intelligencia segíti az anyagok mikroszerkezetének vizsgálatát. Az ELTE fizikusai új, gépitanulás-alapú módszert fejlesztettek ki a Mesterséges Intelligencia Nemzeti Laboratórium támogatásával, mely rendkívüli módon felgyorsítja a különböző kémiai összetételű minták vizsgálatát, így jelentősen hozzájárul új anyagok kifejlesztéséhez is. Az új módszerről szóló publikáció a *Nanomaterials* című folyóiratban jelent meg.



A gépitanulás-alapú röntgenvonalprofil-analízis (angolul: machine learning-based X-ray line profile analysis, rövidítve: ML-XLPA) első lépéseként a kutatók készítettek egy szoftvert, amely különböző szemcseméretek és kristályhiba-mennyiségek esetére legyártotta az elméleti röntgendiffraktogramokat. Ezek alkották azt a tanulóhalmazt, amelyen a mesterséges intelligencia szoftver megtanulta a mikroszerkezeti paraméterek és a diffrakciós csúcsalakok közötti összefüggést. *(https://www.elte.hu)*

https://cobots.robotics.abb.com/en/robots/yumi/

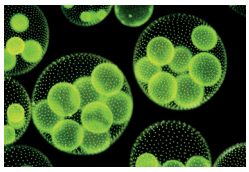
YuMi, az ABB együttműködő ipari robot. A Pécsi Tudományegyetem Műszaki és Informatikai Karán a diákok többfajta ABB-robotot, többek között egy YuMi kollaboratív robotot használnak tanulmányaik során, mely új lehetőségeket nyit az automatizálás terén. A YuMi név az angol te és én szavak összevonásával keletkezett ezzel is utalva a robot és az ember közös munkájára. A robot rendkívül gyors és pontos, kétszázad milliméteres visszaállási pontossággal rendelkezik 1,5 m/s maximális sebesség mellett.

A YuMi az egyetem Orvos-Mérnöki és Innovációs Központjának (CBEI, Centre for Biomedical Engineering and Innovation) projektjeit segíti. A CBEI az egyetem Általános Orvostudományi Kara, valamint a Műszaki és Informatikai Kar közös fejlesztéseinek és innovatív megoldásainak működtetésére létrejött központ, melynek célja multidiszciplináris kutatócsoportok kialakítása, amelyben orvosok és mérnökök is részt vesznek. A kutatóhálózat egyik kutatócsoportja orvosi robotikával foglalkozik.

A YuMi kollaboratív robotot sikeresen használták fel egy hét hónapon át tartó kutatási projektben, melynek a célja az volt, hogy a robotot a vezérlő személy kezeit felhasználva tudja irányítani. A hallgatók meglepődve tapasztalták, hogy a robot menynyire precízen, stabilan és gyorsan képes lekövetni az emberi kéz mozgását. *(http://new.abb.com/hu)*

Dobó Dorina összeállítása

Algatenyésztés



Nagy hatékonyságú steril mikroalga-biomassza létrehozására alkalmas bioreaktort fejlesztett a Zolend Kft. az, Albitech Kft. és a Debreceni Egyetem. A piacvezérelt kutatás-fejlesztés és innováció a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatásával valósult meg.

A Debreceni Egyetemen számos algaalapú fejlesztési téma, illetve fermentációs projekt fut jelenleg is, a Biotechnológiai Intézet küldetése a modern biotechnológia összes ágában innovatív és iparorientált fejlesztések magvalósítása, ipari együttműködések generálása.

Az évek során azonban bebizonyosodott, hogy nincs a piacon olyan fotobioreaktor, valamint algatenyésztési technológia, amely optimális tenyésztési körülmények mellett nagy mennyiségű steril mikroalga-előállítást tenne lehetővé.

A konzorcium tehát a kis léptékű, nagy hozzáadott értékű algatenyésztésekhez alkalmas fotobioreaktor(ok), valamint egy algák segítségével előállított piaci termék (agrár célú) fejlesztését tűzte ki célul, melyet megvalósított. Ehhez a Zolend Kft. a gépészeti és műszaki hátteret, az Albitech Kft. az algatechnológiákat, a Debreceni Egyetem a biotechnológiai és bioanalitikai hátteret biztosította.

A konzorcium így hazai viszonylatban egyedülálló tudományos-technológiai-műszaki erőt és tapasztalatot képvisel. Az algatartalmú, illetve algaalapú termékek és technológiák nagy jövő előtt állnak, azonban a legmegfelelőbb eszközök eddig nem készültek el. A nagyüzemi tenyésztés nyitott medencékben vagy zárt rendszerű fotobioreaktorokban valósulhat meg. A fotobioreaktorok használata számos előnnyel rendelkezik, ilyen például a nagyobb biomasszahozam, a szennyeződés lehetőségének csökkenése, a reprodukálhatóság, a szén-dioxid-veszteség minimalizálása, a szabályozhatóság.

A projekt keretein belül olyan egyedi, innovatív fotobioreaktor-konstrukciókat fejlesztettek ki, melyek alkalmasak az algák aszeptikus körülmények között történő tenyésztésére, ezért kiválóan alkalmazhatók nagy mennyiségű steril algabiomassza előállítására, az algák ugyanis rendkívüli változatosságuk és kedvező összetételük miatt hatalmas lehetőségeket rejtenek magukban. Számos értékes vegyület, például lipidek, pigmentek, szénhidrátok, vitaminok és fehérjék forrásai. Az algák és metabolitjaik felhasználhatók a környezeti szennyezések mérséklésére, élelmiszer- és takarmány-adalékanyagként, kozmetikai célokra, gyógyszergyártásban. Az algákban előforduló szénhidrát polimerek, főképp a cellulóz és a keményítő, a fermentációs iparban használatosak. Az emberi/állati fogyasztásra alkalmas mikroalga-készítmények elsősorban étrend-kiegészítőként vannak jelen a kereskedelemben. A mikroalgák ugyancsak alkalmasak a különböző talajtípusok jellemzőinek javítására, például a vízmegtartás növelésére, a textúra javítására vagy anyagcseretermékeik által a patogén mikroorganizmusok számának csökkentésére. A termőföldre és a termésre gyakorolt pozitív hatás a mikroalgák által termelt növényi növekedésszabályozó anyagoknak köszönhető elsősorban.

ZOLEND albitech biotechnológiai kft. DEBRECENI EGYETEM

MKE-rendezvénynaptár (2023)

Április 14–16.	55. Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny – Döntő	Debrecen
Április 21.	18. Magyar Magnézium Szimpózium	Hódmező-vásárhely
Április 24.	Szakosztályok/társaságok, területi szervezetek és munkahelyi csoportok vezetőinek találkozója	Budapest
Május 19.	Tisztújító Küldöttközgyűlés	Budapest
Június 1–3.	Young Researchers' International Conference on Chemistry and Chemical Engineering (YRICCCE IV)	Debrecen
Június 22–24.	iNEXT 2023	Budapest
Július 10–12.	MKE 4. Nemzeti Konferencia	Eger
Október	Őszi Radiokémiai Napok	
November	Környezetvédelmi Analitikai és Technológiai és Analitikai Kémia Konferencia	Balaton-szárszó
November 23.	Kozmetikai Szimpózium	Budapest

Tájékoztatjuk tisztelt tagtársainkat, hogy

személyi jövedelemadójuk 1 százalékának felajánlásából idén 675 240 forintot

utal át a NAV Egyesületünknek.

Köszönjük felajánlásaikat, köszönjük, hogy egyetértenek a kémia oktatásáért és népszerűsítéséért kifejtett munkánkkal. A felajánlott összeget ismételten a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, valamint a 2022-ben tizennegyedszer megrendezett Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használtuk fel, valamint arra a célra, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő határon túli honfitársunkhoz.

Ezúton is kérjük, hogy a 2022. évi SZJA bevallásakor – értékelve törekvéseinket – éljenek a lehetőséggel, és személyi jövedelemadójuk 1%-át ajánlják fel az erre vonatkozó Rendelkező Nyilatkozat kitöltésével.

Felhívjuk figyelmüket, hogy akinek a bevallás pillanatában adótartozása van, az elveszíti az 1% felajánlásának a lehetőségét!

Az MKE adószáma: 19815819-2-41

Felhívjuk szíves figyelmüket, hogy amennyiben a NAV készíti el az adóbevallásukat, úgy külön kell nyilatkozni az 1 százalékról.

Terveink szerint 2023-ban az így befolyt összeget ismételten a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az 55. Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, valamint 2023-ban tizenötödször szervezendő Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használjuk fel.

Továbbra is céljaink közé tartozik, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő határon túli honfitársunkhoz.

MKE egyéni tagdíj (2023)

Kérjük tisztelt tagtársainkat, hogy szíveskedjenek gondoskodni a **2023. évi tagdíj** befizetéséről A tagdíj összege az egyes tagdíjkategóriák szerint az alábbi:

- alaptagdíj: 10 000 Ft/fő/év
- nyugdíjas (50%): 5000 Ft/fő/év
- közoktatásban dolgozó kémiatanár (50%): 5000 Ft/fő/év
- ifjúsági tag (25%): 2500 Ft/fő/év
- gyesen lévő (25%): 2500 Ft/fő/év

Tagdíjbefizetési lehetőségek:

- banki átutalással (az MKE CIB banki számlájára: 10700024-24764207-51100005)
- sárga csekk az MKE Titkárságtól kérhető
- személyesen (MKE-pénztár, 1015 Budapest, Hattyú u 16. II/8.)

Banki átutalásos és csekkes tagdíjbefizetés esetén a **név, lakcím, összeg rendeltetése** adatokat kérjük jól olvashatóan feltüntetni.

Ahol a munkahely levonja a munkabérből a tagdíjat és listás átutalás formájában továbbítja az MKE-nek, ez a lista szolgálja a tagdíjbefizetés nyilvántartását.

Tájékoztatjuk, hogy a **Magyar Kémikusok Lapja** nyomtatott változatát csak azok a tagjaink kapják meg, akik 7000 Ft-tal hozzájárulnak a lap megjelenéséhez és postázásához. Kérjük, ha az online hozzáférés mellett a nyomtatott példányt is szeretné megkapni, küldje el nevét és címét az Egyesület Titkárságának (1015 Budapest Hattyú u. 16. 2/8., e-mail: mkl@mke.org.hu).

Előfizetés a Magyar Kémiai Folyóirat 2023. évi számaira

A Magyar Kémiai Folyóirat 2023. évi díja fizető egyesületi tagjaink számára 1400 Ft. Kérjük, hogy az előfizetési díjat a tagdíjjal együtt szíveskedjenek befizetni. Lehetőség van átutalással rendezni az előfizetést a Titkárság által küldött számla ellenében. Kérjük, jelezzék az erre vonatkozó igényüket!

Köszönetet mondunk mindenkinek, aki 2022-ben kettős előfizetéssel hozzájárult a határon túli magyar kémikusoknak küldött folyóirat terjesztési költségeihez. Kérjük, aki teheti, 2023-ban is csatlakozzon a kettős előfizetési akcióhoz.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXVIII. No. 3. March

CONTENTS

Catalysing reactions and students. An interview with Professor ***Zoltán Novák*** 70
PÉTER SZALAY
Discovery of large molecular structures 73
ISTVÁN HARGITTAI and MAGDOLNA HARGITTAI
Whom was it named after? *Van der Waals equation, van der Waals forces, Eötvös rule* 80
GYÖRGY INZELT
Shape-memory materials 83
CSABA KUTASI
Neurogastronomy 86
TIBOR BRAUN
Chembits 92
GÁBOR LENTE
Publication of the month 94
On the 80th anniversary of Professor Botond Penke 95
GÁBOR TÓTH and MÁRIA SZŰCS
The Society's News 96
News of the Month 98

thermo scientific

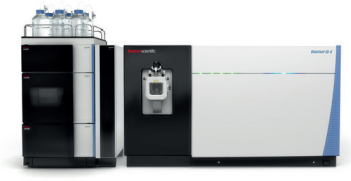
Lépje át a határokat

eddig elérhetetlen LC/MS teljesítménnyel

Teljesen új lehetőségek nyíltak meg a komplex analitikai kihívások megoldásában, a kis- és nagymolekulák világában egyaránt. A Thermo Scientific™ Orbitrap™ Tribrid™ nagyfelbontású, nagy tömegpontosságú tömegspektrométerek ötvözik a kiemelkedő szelektivitást, érzékenységet, sebességet és kombinálhatóságot, ezzel lehetővé téve a kimutatási határok, a mennyiségi meghatározás és az ismeretlen komponensek azonosításában eddig ismert korlátok jelentős túllépését. A Tribrid™ tömegspektrométerek három analizátor típus, a kvadrupol, a lineáris ioncsapda és az Orbitrap™ előnyeit kombinálva teljesen egyedi mérési üzemmódok alkalmazását teszik lehetővé.

Thermo Scientific™ Orbitrap Eclipse™ Tribrid™ MS

Thermo Scientific™ Orbitrap Fusion™ Lumos™ Tribrid™ MS



Thermo Scientific™ Orbitrap ID-X™ Tribrid™ MS

További információk: **thermofisher.com/tribrid**

Kizárólagos képviselet:

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

UNICAM