

# Kémiai Panoráma

2024. évfolyam 28. szám

2023 ÉVI KÉMIAI ÉS FIZIKAI NOBEL-DÍJAK

AZ IDŐ MÉRÉSE

ÓCEÁNI ÁRAMLATOK

MŰSZERES KÉMIAI VIZSGÁLATOK

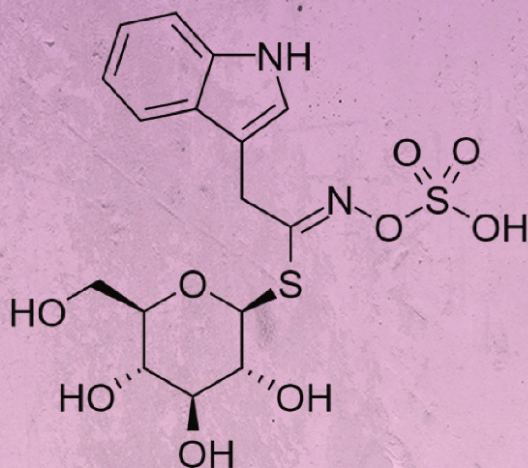
GYÓGYÍTÓ MOLEKULÁK NÖVÉNYEKBEN – A KERESZTESVIRÁGÚ ZÖLDSÉGEK

GOLDENE, A GRAFÉN ARANYBÓL KÉSZÍTETT ROKONA

KÉTSZÁZ ÉVE SZÜLETETT GUSTAV KIRCHHOFF

JELENTÉS A GLOBÁLIS KLÍMAVÁLTOZÁSRÓL

TOMASZ JENŐRE EMLÉKEZÜNK



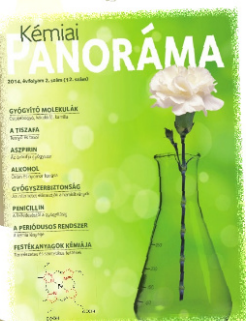
# TARTALOMJEGYZÉK

## 2-3

Tartalomjegyzék

## 4

**Kedves Olvasónk!**  
Szerkesztőség



## 5

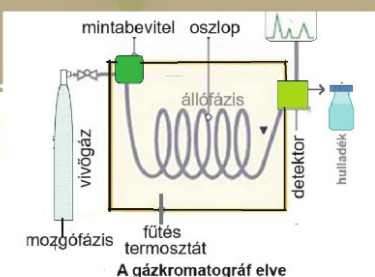
**2023. évi kémiai Nobel-díjak**  
Kvantumpontok felfedezői



## 8-13

**Műszeres kémiai vizsgálatok**

Az analitikai kémia műszeres módszerei **Pálinkás Gábor**



A gázkromatográf elve

## 17

**2023. évi fizikai Nobel-díjak**  
Atomi mozgások kutatói



## 6-7

**Tovább melegsünk**  
Jelentés a globális klímaváltozásról

## 18-21

**Gyógyító molekulák növényekben**

A keresztesvirágú zöldségek  
**Kőszegi Lídia**

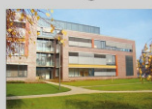


## 14-16

**Kétszáz éve született Gustav Kirchhoff**  
**Ménés András**



A szerkesztőség köszönetet mond az HUN-REN Természettudományi Kutatóközpontnak, az HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont Folyóirat-pályázatának, továbbá az MTA Kémiai Osztályának a támogatásáért. A Kémiai Panoráma magazin az ÚMFT TÁMOP 4.2.3 KMR/1/2008-0006 pályázat keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával (3-6. számok), továbbá az HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont Kémiai Osztálya (4-6. számok) és a Servier Gyógyszerkutató Intézet (5-6. szám) támogatásával valósult meg.

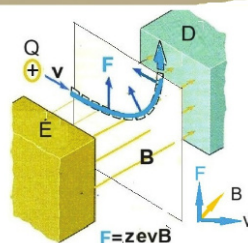




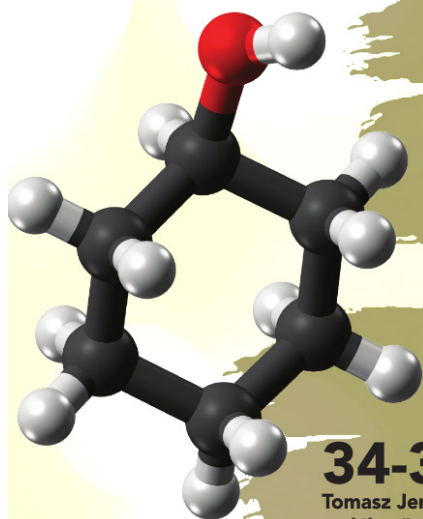
**29**  
Az idő mérése  
Optikai órák  
Simonyi Miklós

**22-28**

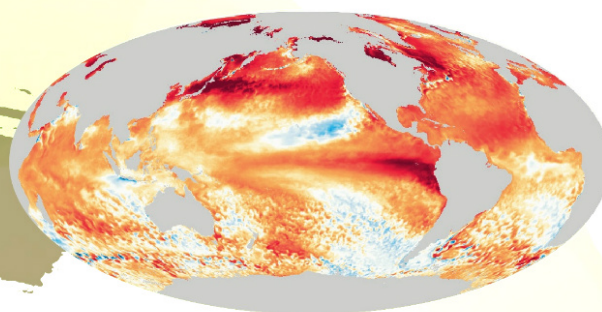
Műszeres kémiai  
vizsgálatok – 2.  
Tömegspektrometria



Pozitív ionok mágneses térben



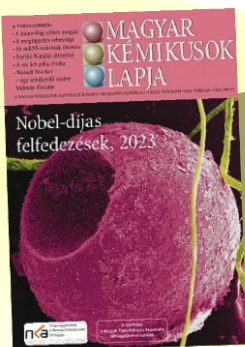
**30-33**  
Örvénylő áramkörök  
Óceáni áramlatok  
Bella József



**34-38**  
Tomasz Jenőre  
emlékezünk (1935-2024)  
A PENTACÉNSZINTÉZIS  
† Tomasz Jenő



**39**  
Az arany rokon  
Goldene  
Simonyi Miklós



**40**  
Ajánló  
Magyar Kémikusok  
lapja



**41**  
A Természet Világában  
olvashatjuk  
Vajon egyedül vagyunk?  
(Nemes László írásáról)



## KEDVES OLVASÓNK!

Ebben az évben 15. évébe lép a Kémiai Panoráma magazin. Az első kilenc szám nyomdai kiadásban is megjelent, újságosoknál is kapható volt. A 10. számtól kezdődően a magazin csak digitálisan, a honlapján érhető el és archívumában az összes száma szabadon megtalálható, írásai letölthetőek. Az internetes megjelenése korszerű lapozható, nagyítható és letölthető lapokkal készül és okostelefonokon is olvasható. Írásait kutatók, tanárok, PhD hallgatók írták és írják és megjelenésüket szakmai lektorálás előzi meg.

Ha Olvasóink belelapoznak a magazin számainak tartalomjegyzékébe ([cikkgjegyzek\(kemiaipanorama.hu\)](http://cikkgjegyzek.kemiaipanorama.hu)), láthatják, hogy a számok írásai a magazin

célkitűzésének megfelelően, a kémiai népszerűsítő, sokszor az oktatásban ritkán említett témákból készültek. Ilyen cikkek például a kémiai elemek keletkezéséről, környezetkémiai kérdésekről, a klímaváltozás hatására megjelenő hőhullámokról, a koronavírus genetikai kódjáról, üzemanyagcellák kémiajáról, a bennünket körülvevő világ kémiai összetevőiről szóló írások. A több éves hagyományoknak megfelelően a számokban megemlékezünk neves tudósokról is. Hagományos sorozatot alkotnak a gyógyszerek hatóanyagairól és a növények gyógyító molekuláiról szóló írásaink. Az utóbbi sorozatban a gyógynövények gyógyhatásáról megalapozatlanul szóló írások kritikus

olvasásához szeretnénk segítséget nyújtani az igazolt tények ismertetésével.

Jelen számunkban is új sorozatot indítunk „Műszeres kémiai vizsgálatok” címmel, hogy a korszerű kémiai vizsgálatok eszközeinek működéséről is áttekintést nyújtsunk érdeklődő Olvasóinknak. Mostani számunk az analitikai kémia két fontos módszerébe: a kromatográfiába és tömegspektrometriába veti be az Olvasót.

Szívesen fogadjuk Kedves Olvasóinknak a kémia, biokémia érdekes kérdéseit ismertető, az oktatást segítő ismeretterjesztő írásait is. [panorama@kemiaipanorama.hu](mailto:panorama@kemiaipanorama.hu)

**A Szerkesztőség**





# Kvantumpontok felfedezői

A 2023-as kémiai Nobel-díjat Mounji G. Bawendi (Massachusetts Institute of Technology (MIT), Cambridge), Louis E. Brus, (Columbia University, New York, NY, USA) és Alexei Ekimov, (Nanocrystals Technology Inc., New York, NY) kapta a fizikai méretükkel hangolható félvezető nanokristályok, az úgynevezett kvantumpontok felfedezéséért és szintézisének kidolgozásáért.

Elméletileg hosszabb ideje ismeretes, hogy nano-részecskék mérettől függő kvantum hatásokat mutathatnak, de kevesen hitték, hogy ez a tudás a gyakorlatban felhasználható. Az idei Nobel-díjasoknak sikerült olyan apró részecskéket előállítani, amelyek tulajdonságait kvantum jelenségek határozzák meg. A részecskék neve kvantum pontok (quantum dots) és nagy jelentőségük van a nanotechnológiában.

A kvantum pontok az anyag új családját alkotják, ami különbözik mind a



**Louis E. Brus**      **Alexei Ekimov**      **Mounji G. Bawendi**

molekuláktól, mind a makroszkópikus anyagoktól. Bár kémiailag nem különböznek makroszkópikus anyagoktól, mégis tulajdonságaikat nem az összetételük, hanem a részecskék mérete határozza meg. Így például a CdSe kvantum pont optikai abszorpciója és emissziója méretétől függően az optikai spektrum teljes szélességére ráhangolható.

Alexei Ekimov az 1980-as években mérettől függő kvantum-hatásokat demonstrált színes üvegekben, ahol színeket CuCl nano-részecskék hozták létre [1]. Az üveg készítésének időtartamával és hőmérsékletével a CuCl részecskék méretét is szabályozni tudta [2].

Louis Brus igazolta, hogy folyadékokban lebegő részecskék mérettől függő kvantum-

hatásokat produkálnak. CdS kristályok kolloid oldatát hozta létre, amelyek színe időben változott a részecskék átkristályosodása és méretének növekedése következtében [3].

Mounji Bawendi oldotta meg a kvantum pontok előállítását reprodukálhatóan a kívánt méretben [4].

## ALKALMAZÁSOK

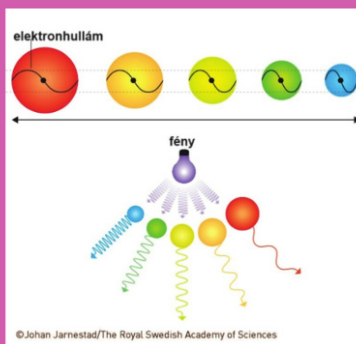
A kvantum pontok világítják meg a számítógépek monitorait és a televíziók képernyőit a QLED (quantum-dot light-emitting diodes) technológia alkalmazásával.

Az LCD képernyőkben a különböző méretű kvantumpontok jellemzően két méretűek, az egyik zöldre, a másik pirosra van optimalizálva és véletlenszerűen vagy méretre rendezve vannak elhelyezve.

Ezen felül alkalmazást nyernek orvosi képalkotó vizsgálatokban is. A jövőben hozzájárulhatnak elektronikai felhasználásokhoz: hajlékony elektronikai eszközök, apró érzékelők, vékony napelemek és titkosított kvantum-kommunikáció fejlesztéséhez.

## FÉNYLŐ RÉSZECSKÉK

A kvantumpontok 2-10 nm tipikus átmérőjű félvezető részecskék. Nevüket onnan kapták, hogy nanoméretű méretükből adódóan a kvantumhatások jelentős szerepet játszanak fénykibocsátó tulajdonságaikban. UV fényrel megvilágítva a kvantumpontban lévő elektron magasabb energiájú állapotba gerjeszthető. A félvezető kvantumpontokban ez egy elektron átmenetének felel meg a vegyértéksávból a vezetőképességi sávba. A gerjesztett elektron ezután visszaeshet a vegyértéksávba, és fény formájában energiát szabadíthat fel – ezt a jelenséget fotolumineszcenciának nevezik. A kibocsátott fény színe függ a vezetőképességi sáv és a vegyértéksáv közötti energiakülönbségtől, valamint a kvantumponton belüli diszkrét energiaállapotok közötti átmenettől és a részecskék méretétől is. Ha a részecskék csak néhány nanométer átmérőjűek, az elektronok



számára rendelkezésre álló tér összezsugorodik. Ez befolyásolja a részecske optikai tulajdonságait. A részecske méret csökkenésével kisebb tere van az elektronhullámoknak és kvantum effektus lép fel. A nagyobb (körülbelül 5-6 nm átmérőjű) kvantumpontok hosszabb hullámhosszokat bocsátanak ki, így olyan színeket eredményeznek, mint a narancs vagy a piros.



## OLVASNIVALÓK:

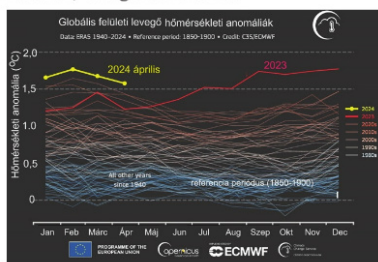
1. A. Ekimov, A. A. Onushchenko, V. Tsekhomskii: Exciton light absorption by CuCl microcrystals in glass matrix, *Sov. Glass Phys. Chem.* 1980, 6, 511-512.
2. V. V. Golubkov, A. Ekimov, A. A. Onushchenko, V. Tsekhomskii, Growth kinetics of CuCl microcrystals in a glassy matrix, *Fizika i Khimiya Stekla* 1980, 7, 397-40.
3. R. Rossetti, J. L. Ellison, J. M. Gibson, L. E. Brus, Size effects in the excited electronic states of small colloidal CdS crystallites, *J. Chem. Phys.* 1984, 80, 4464-4469. <https://doi.org/10.1063/1.447228>
4. C. B. Murray, D. J. Norris, M. G. Bawendi, Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E = sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites, *J. Am. Chem. Soc.* 2002, 115, 8706-8715. <https://doi.org/10.1021/ja00072a025>
5. Press release: The Nobel Prize in Chemistry 2023

# Jelentés a globális klímaváltozásról

## 2024 ÁPRILIS

Az Európai Unió és az Egyesült Államok klímaváltozással foglalkozó hivatalai a Copernicus Climate Change Service (C3S), National Aeronautics and Space Administration (NASA) és a National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA) ez év május elején közzétették a globális klímaváltozás jellemzőinek alakulását az év első négy hónapját követően. Az ügynökségek adatbázisaira alapozott megállapításait az alábbiakban foglaljuk össze.

2024 áprilisa globálisan melegebb volt, mint bármelyik előző április: a felszíni levegő átlagos hőmérséklete 15 °C volt, ami 0,67°C-kal haladta meg az 1991–2020 közötti időszak áprilisi átlagát, és 0,14°C-kal a korábbi, 2016 áprilisában beállított csúcscértéket. A hónap 1,6°C-kal volt melegebb, mint az iparosodás előtti referencia-időszak (1850–1900 közötti időszak) átlagának értéke.



Európa a leggyorsabban melegedő kontinens, és hőmérséklete a globális átlag kétszerese felé tart. Az Európai Unió klímaügynöksége, a Copernicus jelentésében a legutóbbi öt éves átlagok



azt mutatják, hogy az hőmérséklet Európában jelenleg 2,3 Celsius-fokkal haladja meg az iparosodás előtti szintet, míg jelenleg globálisan csak 1,3 Celsius-fokkal magasabb.



A globális átlaghőmérséklet az elmúlt 12 hónapban (2023. május – 2024. április) a legmagasabb rekord, 0,73°C-kal meghaladja az 1991-2020 közötti időszak átlagát és 1,61°C-kal az 1850-1900 közötti iparosodás előtti átlagot. A 2024. áprilisi európai átlaghőmérséklet 1,49°C-kal haladta meg az 1991-2020 közötti időszak áprilisi átlagát, így ez a hónap a második legmelegebb április a kontinensen. A hőmérséklet leginkább a kelet-európai régiókban volt átlag feletti. Átlag alatti

hőmérséklet csak Fennoskandiában (Dánia, Norvégia, Svédország) és Izlandon volt. Európán kívül Észak-Amerika északi és északkeleti részén, Grönlandon, Ázsia keleti részén, a Közel-Kelet északnyugati részén, Dél-Amerika egyes részén és Afrika részén volt magasabb a hőmérséklet az átlagnál. Várhatóan 2024 az egyik legmelegebb év lesz az ügynökségek több mint százéves adatbázisaiban.

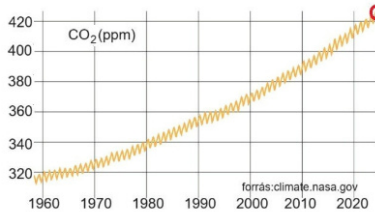
A globális tengerfelszín hőmérséklet 2024 áprilisában átlagosan 21,04 °C volt a déli 60 és északi 60 szélességi fokok között, ami kis mértékben volt alatta a 2024 márciusában regisztrált 21,07 °C rekordértéknek.

Az El Niño jelenség a Csendes-óceán keleti egyenlítői részén tovább, gyengült, de a tengeri levegő hőmérséklete szokatlanul magas szinten maradt.

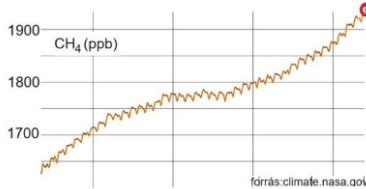
A légkör széndioxid tartalma áprilisban meghaladta a 425 ppm-et. Az ipari idők 18. századi kezdete óta az emberi tevékenység 50%-kal növelte a légkör CO<sub>2</sub>-kibocsátását – ami azt jelenti, hogy a CO<sub>2</sub> mennyisége jelenleg az 1750-es érték



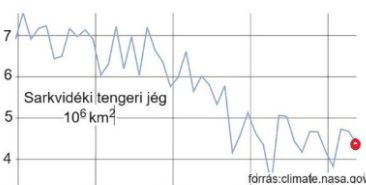
150%-a. Ez az emberiség által előidézett növekedés nagyobb, mint az utolsó jégkorszak végén 20 000 évvel ezelőtti lejátszódott természetes növekedés.



A metán koncentrációja áprilisban megközelítette az 1950 ppm-et. A metántartalom a légkörben több mint kétszeresére nőtt az elmúlt 200 évben. A kutatók becslése szerint az ipari forradalom óta ez a növekedés felelős az éghajlat felmelegedésének 20-30%-áért.

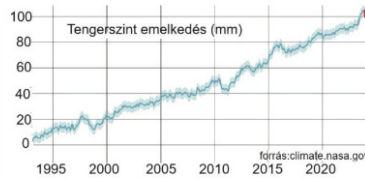


A sarkvidéki tengeri jég minden szeptemberben éri el minimális kiterjedését. A sarkvidéki tengeri jég most 12,2%-os ütemben zsugorodik évtizedenként, az 1981 és 2010 közötti időszak átlagos kiterjedéséhez képest. A grafikon az északi-sarkvidéki tengeri jég méretét mutatja minden szeptemberben a műholdas megfigyelések 1979-es megkezdése óta. A megjelenített érték a műholdas napi megfigyelések átlaga minden év szeptember hónapjában.



Az alábbi grafikon a tengerszint változását követi nyomon 1993 óta, ahogy azt a műholdak is megfigyelték. A tengerszint emelkedését elsősorban két, a

globális felmelegedéssel összefüggő tényező okozza: a jégtakarók és gleccserek olvadásából származó hozzáadott víz, valamint a tengervíz felmelegedés közbeni tágulása.



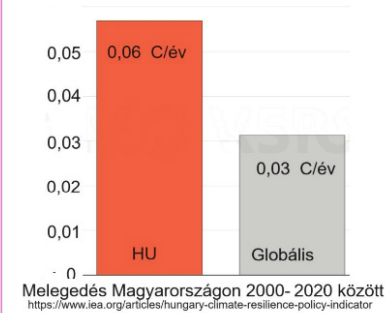
Az április hónapban a csapadéeloszlás változatos volt a bolygónkon (NOAA). Átlag alatti áprilisi csapadék esett Dél- és Közép-Európán keresztül Portugáliától és Spanyolországtól Törökorszáig és Ukrajnáig. Mexikó és az Egyesült Államok nyugati része, valamint Alaszka keleti része is az átlagnál szárazabb volt. Az átlagnál szárazabb körülmények jellemezték Nyugat-Íránt, Nepált, Délkelet-Ázsiát és Ausztrália nagy részét is. Ezzel szemben április az átlagnál csapadékosabb volt Észak-Európában, Argentína nagy részén, Dél- és Kelet-Brazíliaiban, Uruguayban és Paraguayban, az Egyesült Államok középső és északkeleti részein, Nyugat-Alaszkában, Pakisztán, Kína és Oroszország nagy részén is.

Hazánkban is az átlagnál hűvösebb márciust rekord meleg április követte. Áprilisban mintegy 15 melegrekord dőlt meg. Április 29-én megdőlt az országos melegrekord is. A 2012-ben Győrben és Nyíregyházán mért rekordot, 30,6 fokot, a napi maximum hőmérséklet tizennyolc mérőállomáson is meghaladta.

A hosszútávú trendek azt mutatják, hogy Magyarország éves átlaghőmérséklete 1,15°C-kal nőtt 1907 és 2017 között, meghaladva a globális átlaghőmérséklet-emelkedését (+0,9°C) ugyanebben az időszakban, jelentős szezonális különbségekkel (a tavasz és a nyár gyorsabban melegszik fel).

A felmelegedés üteme az elmúlt négy évtizedben jelentősen megnőtt, különösen a nyári időszakban, ami leginkább a Mecsek, a Közép-Duna-vidék és a

keleti országrészt érintette. 2000 óta a felmelegedés átlagos mértéke magasabb (évi 0,0570°C) a globális átlagnál (évi 0,0318°C). A magyarországi hőmérsékletváltozás a fagyos napok számának csökkenésével és a meleg napok növekedésével függ össze. Legnagyobb mértékben Közép- és Dél-Magyarországon nőtt a forró napok gyakorisága.



**A klímaváltozás trendje változatlan. A bolygónk légkörében és az óceánjaiban tovább növekszik az üvegházhatást okozó gázok koncentrációja. Tovább növekszik a hőmérsékletük is. Emelkedik az óceánok szintje és csökken a sarki jégtakaró mennyisége. Szaporodnak az extrém időjárási jelenségek.**

## FORRÁSOK

Climate.copernicus.eu C3S  
Climate.nasa.gov NASA  
Climate.gov Home NOAA  
Climate Resilience Policy Indicator

# Az analitikai kémia műszeres módszerei

Az analitikai kémia egy adott anyag ismeretlen komponenseinek a meghatározásával (kvalitatív analízis) és azok mennyiségének a megállapításával (kvantitatív analízis) foglalkozik. Az elemzésekhez mind kémiai, mind fizikai laboratóriumi technikai eljárásokat használ. Ezek lehetnek térfogat (titrimetria), súly szerinti (gravimetria) és műszeres analitikai módszerek is. Ha az anyag vegyületek keveréke, akkor a meghatározást megelőzi a komponenseinek elválasztása. A klasszikus analitikai módszerek többsége az elemzés elvégzéséhez kémiai reakciókra támaszkodik.

**Analitnak nevezik az analízis során elválasztandó anyagot.**

A minta analízisét egy vagy több kémiai reagens hozzáadásával hajtják végre. A kémiai reakciók és termékek megfigyelésével következtetni lehet a minta összetételére. A hozzáadott reagenseket úgy választják meg, hogy szelektíven reagáljanak egy kémiai vegyületcsoporttal, és így jellegzetes reakcióterméket képezzenek. Ezzel szemben a műszeres módszerek jellemzően az analit fizikai

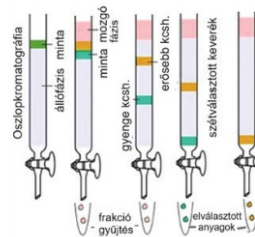
tulajdonságainak mérésétől függenek. A kémiai analízis műszeres módszereit a mérendő analit tulajdonságai szerint kategóriákra osztják. A módszerek közül sok felhasználható kvalitatív és kvantitatív elemzésre is. A műszeres módszerek fő kategóriái a spektrális, az elektroanalitikai és az elválasztási módszerek. A spektrális módszerek alkotják a műszeres módszerek legszélesebb kategóriáját. Ezek a módszerek az analit által abszorbeált, szórt vagy kibocsátott elektromágneses sugárzást mérik. Mivel számos sugárzás létezik, mérési módszerek jelentősen eltérhetnek egymástól.

A műszeres elemzés második fő kategóriája az elektroanalízis. Az elektroanalitikai módszerek elektródákkal hoznak létre kapcsolatot az analit oldatával. Az elektródák elektronikus eszközökkel mérik az analit elektromos paramétereit. A mért paraméterek az analit azonosítását és/vagy az oldatban lévő mennyiségét jellemzik. A főbb elektroanalitikai módszerek közé tartozik a potenciometria, amperometria, konduktometria, elektrogravimetria, voltametria.

A műszeres módszerek harmadik kategóriáját képzik az elválasztási módszerek. Az elválasztási módszerek összetett minták analízisét teszik lehetővé azáltal, hogy elemzésüket megelőzően elválasztják az analit különböző típusú vegyületeit. Az elválasztáshoz különbség kell legyen a komponensek kémiai vagy fizikai tulajdonságai között. Több elválasztási módszer létezik aszerint, hogy a minta komponenseinek milyen tulajdonságára alapozott a módszer. Ezek közül a korszerű műszeres kémiai elemzésnek két különösen fontos módszere a kromatográfia és a tömegspektrometria.

## A KROMATOGRÁFIA

A kromatográfia elnevezés Mikhail Tswett orosz botanikustól származik. A kutató a huszadik század elején kalcium-karbonát állófázisú és petroléter (tisztított benzín) mozgófázisú oszlopával választott el színes pigmenteket növényi kivonatokból. A minta áthaladásakor az oszlopon, a növény pigmentjei egyedi színes sávokra váltak szét. Az elválasztást követően a kalcium-karbonáton képződött színes sávokból kinyerte a pigmenteket. Tswett a technikát kromatográfiának nevezte el, a görög „szín” és az „írni” szavakból. A kromatográfia elméletét A.J.P. Martin és R.L.M. Syngé dolgozta ki 1941-ben. Munkájukért 1952-ben kémiai Nobel-díjat kaptak.



A folyadékkromatográfias módszereket megkülönböztetik az állófázis hordozójának alakja szerint is. Oszlopkromatográfia, ha az állófázis egy csőben vagy kapillárisban helyezkedik el. Síkkromatográfia az elválasztási technika, ha az állófázist egy sík lemezre viszik fel. Papírkromatográfia, ha az állófázis sík papír, vagy anyaggal impregnált papír. Vékonyréteg kromatográfia, ha az állófázis valamilyen inert anyagra felvitt szemcsés szilícium-dioxid, alumínium-oxid, vagy cellulóz film.

A kromatográfias detektor fő funkciója az analit molekulái fizikai vagy kémiai tulajdonságainak mérhető jellé, jellemzően elektromos jellé alakítása, az





## HOGYAN MŰKÖDIK?

A kromatográfiai analitikai módszer lényege, hogy egy anyag-keveréket bejuttatunk egy kromatográfiai rendszerbe, amely mindig egy állófázisból és egy mozgófázisból áll. A mozgófázis próbálja szállítani a vegyületkeveréket, de az egyes komponensek különböző erősségű kölcsönhatásba lépnek az állófázissal, amely mozgásukat lelassítja. Minél erősebb az egyes anyagok kölcsönhatása az állófázissal annál lassabban haladnak. Ezért a mozgófázishoz viszonyított sebességet retenciósi faktornak nevezzük. A mintában lévő komponensek szétválását a kromatográfiai rendszerben történő sebességük különbsége okozza. Az oszlopon történő áthaladásuk ideje, az úgynevezett retenciósi idő, különböző lesz, megkönnyítve ezáltal a komponensek azonosítását, az oszlop végén elhelyezkedő detektor számára. A retenciósi idő természetesen függ az oszlop hosszától, átmérőjétől és a mozgófázis sebességétől is. A mozgófázis halmazállapota alapján, megkülönböztetünk folyadékkromatográfiát, és gázkromatográfiát. Az álló és mozgófázis alakja alapján, vékonyréteg-kromatográfiáról beszélünk, amikor az állófázist egy finom rétegre visszük fel, amelyet folyadékba mártva a kapilláris erők hatására a folyadék mozgó fázissá alakul. Amennyiben az állófázist egy oszlopba vagy kapillárisba töltjük, a mozgófázist (folyadék vagy gáz) állandó sebességgel kell átáramoltatni az állófázison, pumpával vagy nyomással.

idő függvényében. Az alkalmazott detektorok olyan eszközök, amelyek az oszlopról leváló komponensekre azok anyagmennyiségével vagy koncentrációjával arányos jelet szolgáltatnak.

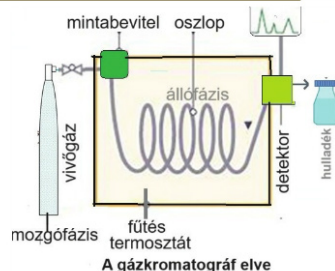
A különböző detektorok a molekulák optikai, elektrokémiai, hővezetőképesége, vagy fluoreszcencia, tulajdonságainak mérésére alapozottak. Minden detektortípus egyedi képességekkel rendelkezik, és az analitikus természetétől, valamint az analízishez szükséges érzékenység és szelektivitás

által meghatározott vizsgálatokra alkalmas.

## NAGYNYOMÁSÚ FOLYADÉK-KROMATOGRÁFIA (HPLC)

A leggyakrabban alkalmazott kromatográfiai módszer a nagynyomású folyadékkromatográfia (HPLC, az angol High Performance Liquid Chromatography rövidítése). Mivel a kromatográfiai oszlopban 1 – 5 mikrométeres szemcsék vannak, a gyorsabb elválasztás érdekében a mozgófázist nagynyomású pumpa segítségével nyomjuk át az oszlopon. A nagynyomású folyadékkromatográfiai készülék fontos részei a mozgófázis tartályok, gázmentesítő vákuum pumpa, az egyenletes mozgófázis áramlási sebességét biztosító pisztoly pumpa rendszer, injektor és automata mintaadagoló, a termosztátba helyezett kromatográfiai állófázist tartalmazó oszlop, és a detektor, ami folyamatosan méri a mozgófázis UV elnyelését. A készüléket egy komputer irányítja. A software segítségével meghatározzuk, hogy mennyi mintát és melyik üvegcsőből injektáljon a készülék, milyen összetételű és áramlási sebességű mozgófázist szeretnénk alkalmazni. A software gyűjti a detektor jelet és beállíthatjuk, hogy milyen hullámhosszon akarjuk mérni az anyagok koncentrációval arányos elnyelését. Miután az egyes komponensek leoldódtak, eluálódtak az oszlopról, a rendszer újabb minta analízisére válik alkalmassá.

A kromatográfiai analízis eredménye a kromatogram, amely a detektor jel ábrázolása az idő függvényében. Amikor nem halad át anyag, csak a mozgófázis, az az alapvonal. Amikor az egyes komponensek elhagyják a kromatográfiai rendszert és megjelennek a detektorban a jel egy csúcs alakot formál. A csúcsok száma elárulja, hogy hányféle molekulából állt a minta. A csúcsok nagysága (a görbe alatti terület) a molekulák mennyiségével arányos. Az egyes komponensek állófázissal való kölcsönhatása, azaz az



elválasztás mechanizmusa szerint adszorpciós és megoszlásos kromatográfiát különböztethetünk meg. Az adszorpciós kromatográfiát fedették fel először, amikor az álló fázis polárosabb, mint a mozgófázis, többnyire nagy felületű aprószemcsés, akár 1 mikrométeres, de többnyire 3 vagy 5 mikrométeres szemcsék alkotják. Ilyenkor a mozgófázis többnyire szerves oldószer.

## ADSZORPCIÓS (NORMÁL FÁZISÚ) KROMATOGRÁFIA

A polárosabb vegyületek erősebben tapadnak (vagy kötődnek) az állófázishoz, mint a kevésbé polárosok. Minél polárosabb a mozgófázis, annál nagyobb a képessége, hogy magával vigye a minta komponenseit, mozgás közben leoldja, eluálja azokat a szilárd fázistól.

Ez a fajta kromatográfiai mechanizmus kiválóan alkalmas nem poláris anyagok szerkezeti izomerjeinek az elválasztására.

Hátránya azonban, hogy nehezen reprodukálható, sokáig áll be az egyensúly az álló és mozgófázis között, nem lehet

**Gyengén poláros**  
keves időt tölt állófázison

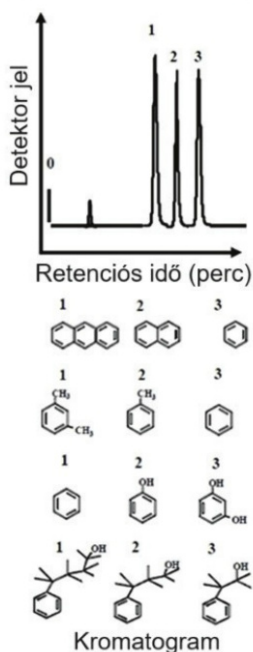
polaritás ↑

Klorid (-Cl)
Alkán (-H)
Éter (-OCH <sub>3</sub> )
Nitró (-NO <sub>2</sub> )
3' Amin (-N(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> )
Keton (-COCH <sub>3</sub> )
Észter (-COOCH <sub>3</sub> )
1' Amin (-NH <sub>2</sub> )
2' Amid (-NHCOCH <sub>3</sub> )
Alkohol (-OH)
1' Amid (-CONH <sub>2</sub> )
Karbonsav (-COOH)

↓

**Erősen poláros**  
sok időt tölt állófázison

A leválás sorrendje poláris állófázisról (pld. SiO<sub>2</sub>, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) (nagyon közelítő!)  
stenutz.eu



előre megjósolni az elúció sorrendjét. További hátrány, hogy a minta poláris komponensei irreverzibilisen kötődhetnek az álló fázishoz. A nagy tisztaságú szerves oldószerek drágák és mérgezőek a környezet számára is. Ezért ezt a fajta kromatográfias mechanizmust ma már egyre ritkábban alkalmazzák.

## FORDÍTOTT FÁZISÚ FOLYADÉK KROMATOGRÁFIA

Nagy forradalmat jelentett, amikor megfordították az állófázis és mozgó fázis polaritását. Bevonták a poláris szilikagél felszínét hosszú alkil láncokkal, amely lehetővé tette, hogy a mozgófázis poláris, magas víztartalmú folyadék legyen. Így a fordított fázisú nagynyomású kromatográfia létrejöttével, poláris, vízdékony anyagokat, aminosavakat, peptideket, oligonukleotidokat, cukrokat is el lehetett választani. Ez az eljárás nagy segítséget nyújtott a biokémia tudomány robbanásszerű fejlődéséhez is. A fordított fázisú kromatográfias eljárás további előnye, hogy a retenció idő az anyagok hidofil-lipofil jellegétől függ, ami a képletből könnyen számítható.

Amennyiben vízzel keveredő szerves oldószert is alkalmazunk, amelynek koncentrációját az analízis alatt folyamatosan növeljük, komplex elegyek szétválaszthatók, és koncentrációjuk mérhetővé válik egy analízis során. Ezt nevezzük gradiens elúciós kromatográfának. Ennek segítségével narancs kivonatot, gyógyszerkeverékeket, vizelet és vérplazma mintákat lehet vizsgálni, kis mintaelőkészítés után pár perc alatt. Nagy előnye a kromatográfias analízisnek, hogy nagyon kevés mintára van szükség 10 mikroliter 1 mM os koncentrációban, ultraibolya detektorral aromás gyűrűt tartalmazó molekulákat tudunk mérni. Amennyiben tömegspektrométert is helyezünk az UV detektor után, az egyes csúcsokat mutató molekulák molsúlya is meghatározható, így a molekulák könnyen beazonosíthatóvá válnak. A tömegspektroszkópiás detektorok még érzékenyebbek, mint az UV detektorok, így például egy billiomodnyi (ppb) szennyező anyagot is ki tudunk mutatni gyógyszeralapanyagokban.

Amennyiben az állófázis ioncserélő, (pld. pozitív vagy negatív töltésű) gyanta, ioncserélő kromatográfias mechanizmus lesz az elválasztás alapja. Ennek az előnye, hogy vízdékony töltéssel rendelkező

molekulákat, mint peptideket és fehérjéket is el tudunk választani az ionos kölcsönhatások alapján. Ezt a fajta kromatográfát preparatív célra is alkalmazzák, az oszlopok méretének növelésével, mivel az elválasztott fehérje molekulák megőrzik természetes aktív tulajdonságaikat az elválasztás után.

## MÉRETKIZÁRÁSOS KROMATOGRÁFIA

A biokémiai kutatásokban nagy szerepet játszik a méretkizárásos (size-exclusion) kromatográfia amely hidrodinamikai átmérőjük vagy hidrodinamikai térfogatuk alapján választja el a molekulákat (a nagyobb molekulák gyorsabban eluálódnak). Az állófázis ez esetben porózus gél. Itt az elúció sorrendjét kizárólag a molekula mérete határozza meg, az anyagok nem lépnek erős kölcsönhatásba az állófázissal, amely mintegy szűrő viselkedik. A kisebb molekulák nagyobb utat tesznek meg a kromatográfias rendszerben, mert beférnek az állófázis kis pórusaiba, míg a nagyobb molekulák gyorsabban áthaladnak a gél állófázis csatornáin. Ez a fajta kromatográfia kiválóan alkalmas nagyméretű biokémiai molekulák elválasztására, pl. ellenanyagok, antitestek, vagy akár kisebb vírusok analízisére is.

Az affinitás kromatográfia a biokémiai elegyek specifikus biológiai kölcsönhatásán alapuló elválasztás. Ilyen biológiai kölcsönhatás például az antigén és antitest vagy enzim és szubsztrát, illetve receptor és ligandum közötti kapcsolat.

A kromatográfias elválasztás hatékonyságára a legjobb példa a királis kromatográfia, amely az állófázissal eltérő módon reagáló sztereoizomerek elválasztására is alkalmas. Az enantiomerek csak optikailag aktív rendszerben mutatnak különbséget, minden más fizikai és kémiai tulajdonságuk megegyezik és mégis el tudjuk választani őket, sőt meg tudjuk határozni az egyes izomerek koncentrációját is. Természetesen ez csak



úgy lehetséges, ha vagy az állófázisunk, vagy a mozgófázisunk optikailag aktív, azaz királis molekulák egyik izomerjét tartalmazza csak. Így a racém mintában lévő enantiomerek eltérő kölcsönhatásba léphetnek a királis állófázissal vagy mozgófázissal, sebességük a kromatográfias rendszerben eltérő lesz és elválnak. Ez a királis gyógyszer-molekulák analízisében nagy jelentőségű lehet, mert az egyes enantiomereknek eltérő farmakológiai hatásuk, vagy toxicitásuk lehet, gondoljunk csak a Talidomid (Contergan) esetére, amikor az egyik enantiomer jótékony gyógyszer, míg a másik enantiomer borzalmas teratogen hatással rendelkezett. A királis kromatográfias analízis lehetővé teszi kis mennyiségű káros enantiomerek kimutatását és mérését is.

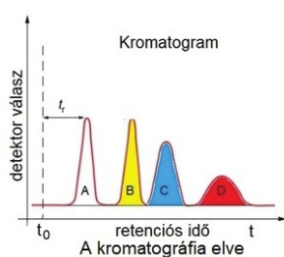
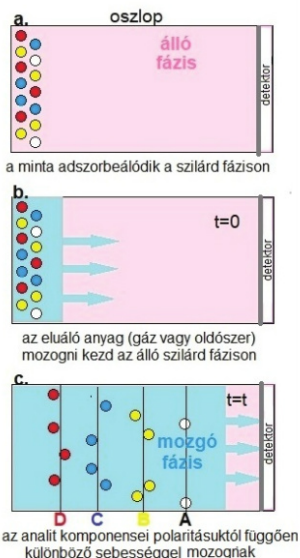
## GÁZKROMATOGRÁFIA

Ha a mozgófázis gáz, akkor gázkromatográfának (GC) nevezzük az eljárást. A gázkromatográfia olyan kromatográfias módszer, amely gázfázisban, választja el és elemzi az illékony vegyületeket.

A gázkromatográfiát általában illékony vegyületek elkülönítésére és tisztaságuk vizsgálatára, vagy a keverékben lévő különböző komponensek mennyiségi meghatározására használják. Nagy jelentőségű volt a benzinmotorok kifejlesztése során az üzemanyagok analízisében, az oktán számok meghatározásában.

Ezek a szénhidrogének, különböző hosszúságúak, elágazásúak, csak a forráspontjuk alapján lehetett frakcionált desztillációval meghatározni az összetételüket. A gázkromatográfia kifejlesztésével az analízis sokkal egyszerűbbé vált. A gázkromatográfias analízis fontos szerepet játszik az illóolajok minőség ellenőrzésében. Sokszor nem is tudunk beazonosítani minden csúcsot nagyon összetett mintáknál, de az egyes kromatogramok alakfelismerő programmal meg tudnak különböztetni illóolaj mintákat.

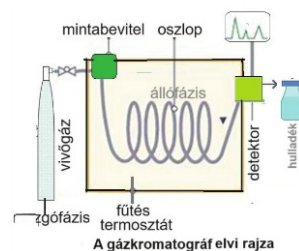
A gázkromatográf egy fűtött bemeneti



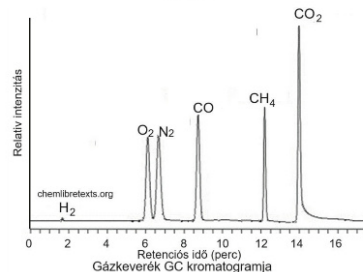
nyílásból, egy termosztátból, egy analitikai oszlopból és egy detektorból áll. A mintákat általában oldószerben oldják vagy hígítják, majd a bemeneti nyílásba fecskendezik. A folyékony minta a fűtött termosztátban elpárolog, és gázzá válik. A mozgófázis egy inert gáz viszi át a mintát az oszlopon. A mintában lévő különböző anyagok kémiai tulajdonságaiktól függően eltérően lépnek kölcsönhatásba az oszlop állófázisával. Emiatt különböző sebességgel haladnak át az oszlopon, szétválnak és különböző időben (retenciós idő) érkeznek a detektorhoz.

A GC kromatogram csúcsainak száma különböző vegyületeket jelez a mintában, méretük a detektorba ért mennyiségeiket. Az egyes csúcsok helyzete az egyes vegyületek retenciós idejét mutatja.

Az állófázis vagy szemcsés szilárd anyag (azaz gáz-szilárd kromatográfia), vagy vékony, nem illékony folyadékfilmmel – például folyékony polimerrel – bevont



GC



szilárd szemcsés anyag (azaz gáz-folyadék kromatográfia). A gázkromatográfok mozgófázisa általában inert, vagy nem reakcióképes gáz, például hélium, argon, nitrogén vagy hidrogén. Az állófázis polárosabb, mint a mozgófázis. Az analitikai gázkromatográfok többsége kapillaris oszlopokat használ, ahol az állófázis egy kis átmérőjű cső belső falát vonja be. A keverék komponenseinek szétválása az oszlop hosszától és hőmérsékletétől, valamint a mozgófázis áramlási sebességétől függ.

A minta illékonyága előfeltétele a GC-elemzésnek, azonban a molekulák funkciós csoportjának módosítása – derivatizálása – lehetővé teszi kevésbé illékony vegyületek elemzését is, amelyeket egyébként GC-vel nem lehet nyomon követni. A derivatizálás célja az analitokat illékonyra, kevésbé reaktívvá tenni, és így javítani kromatográfias viselkedésüket. A módosított

molekuláknak kisebb lesz a polaritása és alacsonyabb a forráspontja (magasabb a gőznyomása), tehát könnyebben fog párologni.

## KROMATOGRÁFIÁS DETEKTOROK

A gázkromatográfiában használt fő detektortípusok a lángionizációs detektor (FID), a hővezetőképesség detektor (TCD) és a tömegspektrométer. Illékony vegyületek elemzésében hatékonyak. Lángionizációs detektor (FID):

Általánosan használt GC-ben.

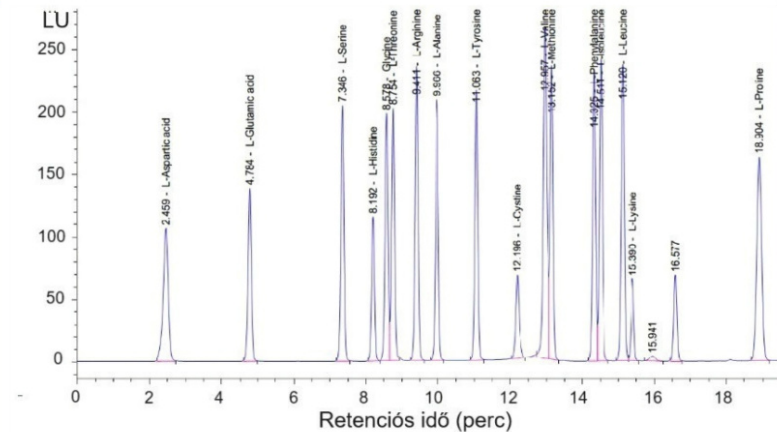
Hidrogénlángban lévő szénatomok ionizációjának mérésével érzékeli a szénhidrogéneket és más szerves vegyületeket.

Tömegspektrométer: A GC-t tömegspektrometriával kombinálja (GC-MS) a vegyületek tömegük alapján történő azonosításához és mennyiségi meghatározásához.

Mind GC-ben, mind LC-ben a mintában lévő egyes komponensek kimutatása többféle módszerrel is elvégezhető. Nincs olyan univerzális detektor, amely minden elválasztáshoz működne. Néhány általánosan használt detektor az oszlopból kilépő gázáram változásait mérő hővezetőképesség-detektor és a kilépő gázáramban lévő anyagok elégetésével keletkező ionokat mérő lángionizációs detektor, a luminiscenciás detektor, az UV detektor vagy a minta molekulaionjainak tömeg/töltés hányadosát mérő tömegspektrométer. Újabban megjelent a HPLC elválasztás és az NMR kombinációja. A legelterjedtebb és legérzékenyebb kimutatási módszer a tömegspektrometria, amely a molekulák tömege és töltési állapota alapján azonosítja a vegyületeket.

## SZÁRMAZÉKKÉPZÉS

A detektálás érzékenységének növelésére a nagy teljesítményű folyadékkromatográfiában (HPLC) a fluoreszcens derivatizálást alkalmazzák. A származékképzés funkciós csoportokat épít be a minta molekuláiba, így jobban alkalmassá válnak az UV-elnyelésre és a



Analitikai minőségű aminosav standardok >99% HPLC kromatogramja

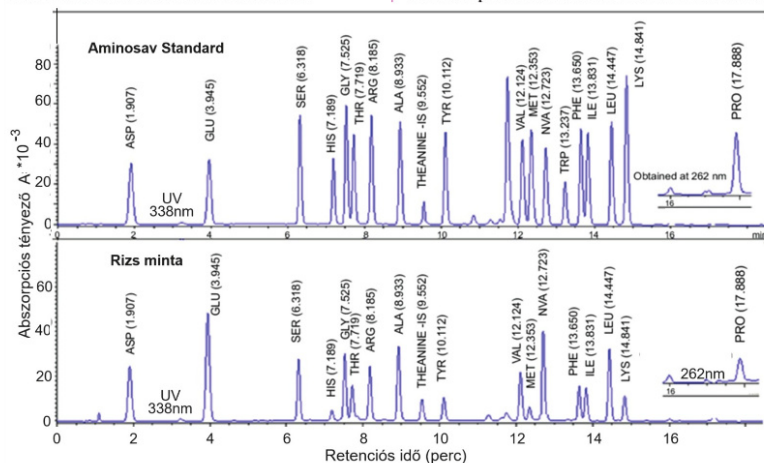
L. Slobodianiuk et al., Bio.Res.Appl.Chem., 11, Issue 2, 8969 (2021)

fluoreszcencia kimutatására. A fluoreszcencia detektorral sokkal érzékenyebb detektálás valósítható meg 340 nm-es gerjesztésnél és 455 nm-es emisszióval. A 230 nm-en történő UV-detektálás kevésbé érzékeny a fluoreszcens detektáláshoz képest.

A származékképzés történhet a kromatográfiás elválasztás előtt vagy után is. A jelölt analitot ezután meghatározott UV hullámhosszú fénynek teszik ki és a fluoreszkáló vegyületek gyenge fényjeleit egy fluoreszcenciadetektor méri. A derivatizálás klasszikus alkalmazása az aminosav-analízis. Az aminosavak

fluoreszcens csoportokkal történő jelölésével kimutatási érzékenységük jelentősen javul.

Az aminosavak leggyakrabban tanulmányozott fluoreszcens származékképző reagense az orto-ftáldaldehyd (OPA), de nem tud reagálni szekunder aminosavakkal, például prolinnal. A szekunder aminosavak elemzéséhez 9-fluorenilmetil-kloroformátot (FMOC) használnak. Az FMOC a primer és a szekunder aminosavak is fluoreszkáló terméket eredményez. Az OPA/FMOC származékképzés lehetővé teszi a primer és szekunder aminosavak



Étkezési rizs aminosav kromatogramja fordított fázisú HPLC-vel

V.V. Liyanaarachchi, et al., Int.J.Analyt. Bioanalyt.Methods 2:008 (2020)



egyidejű mennyiségi meghatározását. A származékképzéshez különféle reagensek kaphatók a kereskedelemben. Az aminosavak oszlop előtti származékképzése tiovegyülettel kombinált orto-ftáaldehiddel és kloroformáttal napjaink egyik legnépszerűbb technikája.

Az előző oldal első ábrája OPA és FMOc vegyületekkel módosított standard aminosavak fluoreszcencia detektorral ellátott HPLC-vel mért kromatogramját tünteti fel. A gerjesztési és az emissziós hullámhossz 340 nm és 450 nm volt.

Az előző oldal második ábrája az étkezési rizs aminosav-tartalmának fordított fázisú HPLC-vel végzett analízise eredményét illusztrálja VV. Liyanaarachchi, és munkatársai által Int. J. Analyt. Bioanalyt. Methods folyóiratban 2020-ban közölt munkájuk alapján. A rizs aminosav-összetételének meghatározása fontos a rizs fehérjeminőségével kapcsolatos jellemzők meghatározásához. A fehérje a második legnagyobb mennyiségben előforduló tápanyag a rizsben, a szénhidrátok mellett. A rizs átlagos fehérjetartalma 4,5-15,9%.

Az aminosav-analízis során a fehérjét 24 órán át 6 mol/l-es HCl-oldattal hidrolizálták 110°C hőmérsékleten. A hidrolizált aminosavakat ultraibolya/látható, diódasoros detektorral ellátott nagy teljesítményű fordított fázisú folyadékkromatográfiával elemezték. Az aminosavak standard referenciaanyagait

„  
A klasszikus analitikai módszerek többsége az elemzés elvégzéséhez kémiai reakciókra támaszkodik.

0,1 M HCl-oldatban állították elő. A primer aminosavak oszlop előtti származékképzését o-ftáaldehid 3-merkaptopropionsavval (OPA-MPA), a szekunder aminosav: Prolin származékképzését 9-fluorenilmetoxikarbonil-klorid (FMOc) felhasználásával végezték. A rizsmintákat finomra őrlés után átszitálták és az analízis előtt hidrolizálták. (6 mol/l HCl, 1% (v/v) tioglikolol és 1 g fenol literenként). A derivatizált primer aminosavak adszorbanációját (A) 338 nm-en, míg a Pro szekunder aminosavat: 262 nm-en diódasoros detektor segítségével mérték meg.

Az adszorbancia (A) – a beeső (I<sub>0</sub>) és az áthaladó fény (I) intenzitás arányának negatív logaritmus – és a koncentráció (c) között egyenes arányosság áll fenn:

$$A = -\log(I_0/I) = \kappa \cdot c$$

A diódasoros detektor (vagy UV-Vis detektor) a HPLC (nagynyomású folyadékkromatográfia) egyik leggyakrabban használt detektor típusa. A

diódasoros detektorral teljes UV spektrumot tudunk felvenni az átáramló mozgófázisról, minden tized vagy század másodpercben is. Így az egyes csúcsok beazonosítása a jellegzetes UV spektrum alapján lehetővé válhat. A legtöbb UV-Vis detektor a mintában lévő anyagok abszorbanációját méri az ultraibolya vagy a látható fény tartományában. A detektor a minta eluálása során folyamatosan méri az abszorbanációt, és így lehetővé teszi az elválasztott anyagok azonosítását és mennyiségének meghatározását az idő függvényében.

Pálincás Gábor



#### OLVASNIVALÓK:

Kremmer Tibor, Torkos Kornél:  
Elválasztástechnikai módszerek elmélete és gyakorlata  
<https://mersz.hu/kremmer-torkos-elvasztastechnikai-modszerek-elmelete-es-gyakorlata>

Illisz István, Elválasztási módszerek  
<https://www2.sci.u-szeged.hu/inorg/MOMA/ch05.html>

Chromatography - Chemistry LibreTexts

Elválasztástechnika (pte.hu)  
<https://tamop412a.ttk.pte.hu/files/kemia7/www/ch07.html>

Kromatográfia  
[https://biologynotesonline.com/hu/kromatogr%C3%A1fia/?utm\\_content=cmp-true](https://biologynotesonline.com/hu/kromatogr%C3%A1fia/?utm_content=cmp-true)

**Fluoreszcens detektor:** fluoreszcens vegyületeket észlel. Nagy érzékenységet és szelektivitást biztosít.



**Törésmutató detektor:** Méri a törésmutató változását az oldott anyag elúciója miatt. Hasznos UV-t nem elnyelő vegyületekhez.



**Tömegspektrométer (LC-MS):** Az LC-t tömegspektrometriával kombinálja a pontos tömegmeghatározás és a szerkezeti feltárás érdekében.

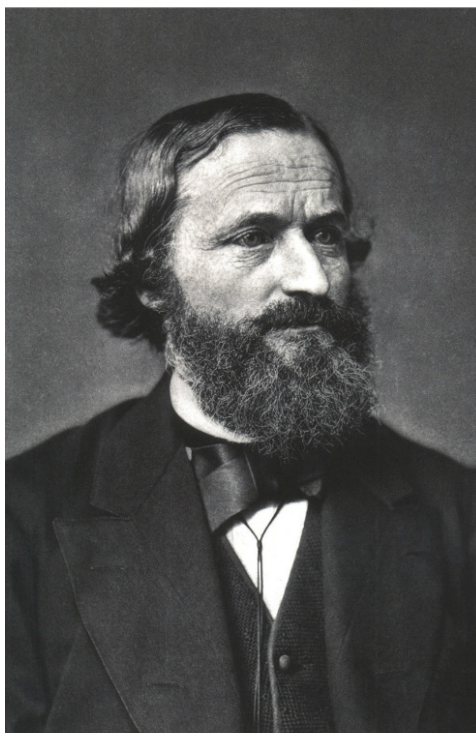


## GUSTAV KIRCHHOFF

Noha Gustav Kirchhoffot a történelemlékönyvek gyakran mellőzik, az ő teljesítményeiben gyökerezik a fizika hőskora.

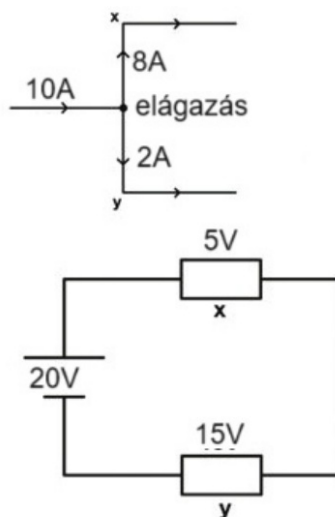
Ő fektette le 1859-ben azt az alapelvet, hogy a kémiai elemek jellegzetes színeképet bocsátanak ki.

Robert Bunsennel közösen dolgozták ki a színképelemzés módszerét, amellyel a természet minden elemét jellemezni lehet. Kirchhoff azonnal felismerte a szélesebb körű alkalmazást, az égi kémia jelenségeinek lehetséges megfigyelését. Hamarosan a fizika bosszantó, de alapvető problémájával, a „feketetest-sugárzással” kezdett foglalkozni, amely végül, negyven évvel később, a kvantumelmélet kifejlesztéséhez vezetett. Nagy hatású pedagógusként „világosságra és szigorúságra törekedett a kísérletek mennyiségi elemzésekor – írja Léon



Rosenfield –, egyenes és közvetlen megközelítéshez, egyszerű gondolatokhoz folyamodott”.

Gustav Robert Kirchhoff 1824. március 12-én született Königsbergben, amely akkor Poroszországhoz tartozott, ma Kalinyingrád néven Oroszország része. Az ügyvéd és állami tisztviselő fia korán kimutatta a matematika iránti érdeklődését. A Königsbergi Egyetemen Franz Neumann volt a tanára, az ásványkutató, akit érdekelt az új matematikai fizika és az elektromágnesesség elmélete. 1847-ben Kirchhoff lediplomázott, és párizsi ösztöndíjat kapott, de 1848-ban közbeszólt a forradalom. Ezért először Berlinbe ment, ahol tanítani kezdett, majd 1850-ben a Breslauer Egyetem professzora lett. Ebben az időben találkozott és barátkozott össze Robert



Bunsennel, a szerves kémikussal és fizikussal, akit a Bunsen-lámpa tett közismertté. A tizenhárom évvel idősebb tudós segítette Kirchhoffnak, hogy 1854-ben állást kapjon a Heidelbergi Egyetemen. Ekkor kezdődött el kettejük hosszú, termékeny együttműködése.

Kirchhoff korai munkássága az elektromosság területére esik. Ennek az elméletileg és gyakorlatilag is fontos munkásságnak van egy nagy mulasztása. Még diákként, 1845-ben felfedezett két törvényt, amelyek a nevét viselik, és amelyet máig használnak az elektromosságban.

Kirchhoff törvényei, rámutatva Ohm törvényének hiányosságára, amely szerint kapcsolat van az ellenállás és az áram folyása között, megadják a kellő képletet, amelyekkel az elektromos hálózat bármely pontján mérni lehet az áram folyását és teljesítményét. 1857-ben újabb fontos teljesítménnyel járult hozzá az elektromágnesességhez: általános elméletet alkotott meg az elektromos vezetésről. Számításait kísérleti eredményekre alapozta, amelyek megadták az áram terjedési sebességének állandóját. Észrevette, hogy ez az állandó nagyjából megfelel a fény sebességének, de nem foglalkozott ennek a ténynek a további következményeivel. Véletlen egybeesésnek tekintette. James Clerk Maxwellre maradt annak a bejelentése, hogy a fény az elektromágneses színeképe része.

Kirchhoff 1858-ban a termokémia területére kirándulva kimutatta, hogy a termokémiában a kémiai reakció hő változását állandó nyomáson, a termékek és a reagensek hőkapacitásának különbsége adja meg. Az összefüggés a termokémia Kirchhoff törvénye nevet kapta.

Kirchhoff munkásságának legfontosabb része 1859 és 1862 közé esik, amikor létrejött a spektroszkópia, mint az elemzés eszköze. A történet szerint



Kirchhoff meglátogatta Bunsent a laboratóriumában, ahol ő éppen különböző sókat elemzett, amelyek különféle színekre festették a lángot égés közben. Bunsen színezett üveget használt a láng megfigyelésére. Kirchhoff javasolta, hogy a jobb megfigyelés érdekében a fényt vezessék át egy prizmán. Így is tettek. A színekélemzés értéke azonnal világos volt. A színekélemzés, amely Isaac Newtonnak a fény összetett voltát bizonyító kísérleteiből ered, hirtelen széles alkalmazási területre lelt. Minden elem külön színekkel rendelkezett, amely látható, rögzíthető és mérhető volt.

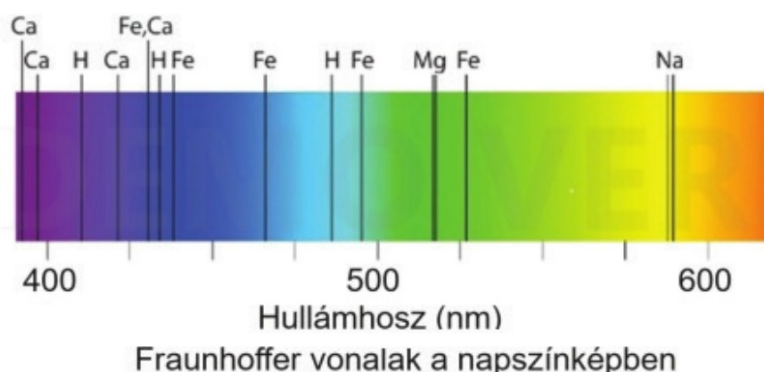
„Eredményeik – jegyzi meg Abraham

Pais – roppant fontosak voltak.” Minden elemnek és vegyületnek megvan a maga színeképe, amely olyan jellegzetes, mint egy ujjlenyomat. A színekélemzés, ahogy Kirchhoff és Bunsen nem sokkal később írta, „a kémiai felfedezések olyan területének megnyílását ígéri, amely mostanáig zárva volt”. Nemcsak az ismert elemeket analizálták, újakat is felfedeztek. Az elpárologtatott ásványvíz sóit vizsgálva Kirchhoff és Bunsen egy kék színeképvonalat találtak, ami egy olyan elemhez tartozott, amit céziumnak kereszteltek el. A litiumcsillámot tanulmányozva 1862-ben Bunsen egy alkálifémre bukkant, amelynek a

rubidium nevet adta, napjainkban az atomórákban használják. Még a század vége előtt tíz további elemet fedeztek fel.

Színekélemzésüknek különösen egy eredménye volt igen fontos. Kirchhoff észrevette, hogy a napfény színeképében bizonyos sötét vonalak – az úgynevezett Fraunhofer-vonalak – egybeesnek az égő kálium színeképében látható sárga vonalakkal. Ha a Nap színeképét égő kálium lángján keresztül néznénk, akkor a sötét vonalak még sötétebbek lennének. Kirchhoff rájött, hogy alapvető felfedezés küszöbén áll, és a helyes következtetést vonta le: a színekép sötét vonalait abszorpciót jelentenek, mivel a Nap

# KÉTSZÁZ ÉVE SZÜLETETT

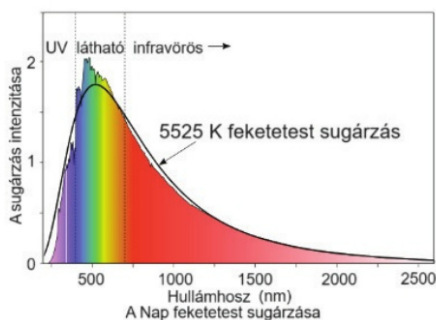


léggöre káliumot tartalmaz. Más kémiai elemek színképei hasonló sötét vonalakkal jelennek meg a Nap spektrumában.

A színképek összehasonlítása alapján Kirchhoff és Bunsen azonnal tisztában voltak vele, hogy technikájuk milyen fontos a Nap összetételének és az égi kémiának a tanulmányozásában.

„Elképzeltető – írta Kirchhoff –, hogy a színképelemzés arra is használható, hogy megvizsgálják a naplégkört és a ragyogóbb állócsillagokat.” Így is van, az ötletet később kiterjesztették a világegyetem egészére. 1861-ben Kirchhoff és Bunsen tovább vizsgálták az elemek színképvonalait a Nap színképvonaláival, ami a hélium felfedezéséhez vezetett. A huszadik században a színképelemzés alapvető technika lett az atomelmélet és az asztrofizika kifejlesztésében.

A Fraunhofer-vonalakkal kapcsolatos munkássága közben Kirchhoff általános elméletet dolgozott ki a termodinamikában az emisszióval és a sugárzással kapcsolatban, amelyet ma Kirchhoff-törvénynek nevezünk. Ennek



van egy kvantitatív formája. Egyszerűbb szavakkal kifejezve az a lényege, hogy egy anyag fénykibocsátási képessége egyenlő ugyanannak a fénynek az elnyelési képességével azonos hőmérsékleten.

Kirchhoff sugárzási törvényének egyik eredménye a „feketetest-sugárzás”, amely negyven éven át nem hagyta nyugodni a fizikát. Ez a különös, de alapvető dilemma azért keletkezik, mert ha egy fekete testet – például egy vasrudat – hevítünk, hőt és fényt fog kibocsátani. Ez a sugárzás lehet először láthatatlan vagy infravörös, majd láthatóvá, vörösen izzóvá lesz, majd végül fehéren izzóvá, vagyis a színkép minden tartományában sugároz. A színkép sugárzását, amely nem függ a test anyagától, csupán attól, mennyire hevítik fel, a klasszikus fizika nem tudta előre megjósolni. Kirchhoff felismerte, hogy „rendkívül fontos feladat ennek általános szerepét feltárni”. A fekete test problémáját, amelynek általános jelentősége volt az energiaértelmezésben, végül is megoldották. 1900-ban Max Planck felfedezte a kvantumot, amelyet széles körben felhasznált a huszadik századi tudomány.

Robert von Helmholtz 1890-ben kiadott magasztaló emlékirata „az igazi német feltaláló tökéletes példjaként” rajong Kirchhoffért. „Életének célja és hitvallása a legtisztább igazság keresése és kifejezésre juttatása már-már átszellemült lemondással.” Igaz, noha legnagyobb teljesítményeit nem hanyagolják el az angol nyelvű tudománytörténetekben, de ritkán

méltatják. Ez azért is lehet, mert nem volt elszánt atomista, és közvetlen hatása a klasszikus fizikával véget ért. De, mint Lloyd Motz és Jefferson Weaver rámutatott, a spektroszkóp „egyszerűsége ellenére valószínűleg a legfontosabb tudományos eszköz, amelyet valaha kitaláltak. Minden más eszköznél vagy eszközcsoportnál több tudományos felfedezést tett lehetővé, a nukleáris kutatástól a kozmológiáig, a fizika birodalmában, a csillagászatban, és ehhez számítható még a földtan, a vegyészet és az orvostudomány minden ága”. Az is tény, hogy Kirchhoff Bunsennel együtt az első között általánosította a spektroszkópia elméletét.

A roppantul tisztelt Kirchhoff professzor egy baleset következtében megnyomorodva mankót vagy toloszékot volt kénytelen használni, ami azonban

**Kirchhoff és Bunsen tisztában voltak vele, hogy technikájuk milyen fontos a Nap összetételének és az égi kémiának a tanulmányozásában.**

nem ártott jó kedélyének. 1875-ig folytatta a kísérleteit, attól kezdve a Berlini Egyetem elméletifizika-professzoraként dolgozott 1886-ig, csak nem sokkal 1887. október 17-én bekövetkezett halála előtt vonult vissza.

Gustav Kirchhoff öröksége kiterjed a fizikára és a kémiára is, kitoröhlhetlen nyomot hagyva a tudományos megismerésben. Robert Bunsennel folytatott együttműködése és a spektrumelemzés terén végzett úttörő munkája továbbra is gyarapítja az anyagi világgal kapcsolatos ismereteinket.

**Ménes András**





# Atomí mozgások kutatói

A díjat három fizikusnak ítélték oda olyan kísérleti módszerek kidolgozásáért, amelyek attosekundumos villanások révén képesek az elektrondinamika tanulmányozására anyagokban (attosekundum =  $10^{-18}$  sec) [1].

Az atomok mozgása molekulákban femtosecond ( $10^{-15}$  s) tartományba esik. Az elektronok mozgása atomokban, vagy molekulákban sokkal gyorsabb és 1-től néhány-száz attosecond időt igényel. Lézerekkel a femtosecond tartománynál gyorsabb mozgások nem tanulmányozhatók. A díjazottak olyan kísérleteket végeztek, amelyek lehetővé tették az attosekundumos fényimpulzusok előállítását és ezzel az elektronok igen gyors atomi mozgásának tanulmányozását.

Az attosecond tudomány akkor kezdődött, amikor az 1980-as évek végén Anne L'Huillier argon ionizálását vizsgálta, infravörös lézérfényvel és azt tapasztalta,

hogy nagyobb energiájú fotonok sorozata lép ki a nemes gázból. Más szóval az argonból nagyobb frekvenciájú fény lép ki, mint amelyek az ionizációt kiváltották. A kilépő fényimpulzusok a gerjesztő fény „felhangjai” (felharmonikusai) voltak, az infravörös lézér sugar elnyelése ultraibolya fény távozását váltotta ki [3]. A jelenség oka az, hogy az elnyelt fény energiája nagyobb, mint ami az ionizációhoz szükséges és az energiafelesleg okozza az emittált fotonok nagyobb energiáját.

Krausz Ferenc a 90-es években ultra rövid lézér villanások megvalósításán és alkalmazásán dolgozott. Amikor ezeket molekuláris szerkezetre irányította sikerült 650 attosecond hosszúságú emittált sugarat kiváltani a besugárzott anyagból és ezzel elsőként tudta átlépni a nanosecond határt [4].

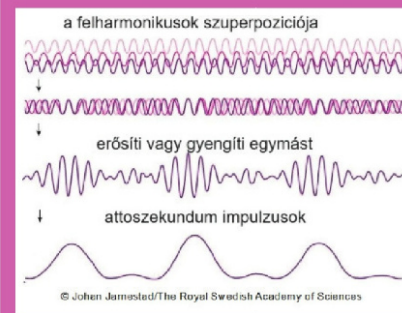
Különböző frekvenciájú lézér sugarak egyidejű alkalmazásával a foto-ionizációs módszer egymást követő fény-villanásokat hoz létre. Ezzel a technikával Pierre Agostini már 250 attosecond hosszúságú fény pulzusokat váltott ki [5].

Az attosecond vizsgálatokat nem csak molekulákra, hanem szilárd és folyékony anyagokra is kiterjesztik. Az attosecond pulzusok felderíthetik mi történik abban a pillanatban, amikor egy molekulából elektron távozik, ion marad vissza és a többi elektron átrendeződik olyan gyorsan, hogy ezalatt a nehéz atommagok nem is képesek elmozdulásra. „Ezeknek a vizsgálatoknak a hajtóereje kizárólagosan alapkutatói érdeklődés: nagyon rövid fénylöketeiket tudunk előidézni, de mire tudjuk felhasználni?” mondta L'Huillier egy sajtókonferencián. „Időbe telik, amíg elérünk oda, hogy alkalmazzuk őket az orvostudományban, a félvezetőiparban, vagy a kémiában” [1].



**Anne L'Huillier**, Lund University, Sweden,  
**Krausz Ferenc**, Max Planck Institute of Quantum Optics in Garching, Germany,  
**Pierre Agostini**, Ohio State University, Columbus, USA.

Amikor lézérfényt gázon keresztül továbbítanak, a gáz atomjaiból ultraibolya felharmonikusok keletkeznek. Megfelelő körülmények között ezek a felharmonikusok fázisban lehetnek. Amikor ciklusai egybeesnek, koncentrált attosekundumos impulzusok képződnek. Ma már 100 attosekundumos felvillanásokat is tudnak produkálni.



## IRODALOM:

1. Nature 622, 225-227 (2023)
2. The Nobel Prize in Physics 2023 - Popular science background, nobelprize.org
3. M. Ferray, A. L'Huillier, X. F. Li, L. A. Lompre, G. Mainfray, C. Manus, Multiple-harmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases, J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys. 1988, 21, L31-L35.
4. M. Hentschel, R. Kienberger, Ch. Spielmann, G. A. Reider, N. Milosevic, T. Brabec, P. Corkum, U. Heinzmann, M. Drescher, F. Krausz, Attosecond metrology, Nature 2001, 414, 509-513. <https://doi.org/10.1038/35107000>
5. P. M. Paul, E. S. Toma, P. Breger, G. Mullot, F. Augé, Ph. Balcou, H. G. Muller, P. Agostini, Observation of a Train of Attosecond Pulses from High Harmonic Generation, Science 2001, 292, 1689-1692. <https://doi.org/10.1126/science.1059413>



alaphang  
felhang 1  
felhang 2  
felhang 3

A meglévő technológia fejlesztése nem volt elég ahhoz, hogy az elektronok elképesztően rövid időskálán lezajló folyamatai tanulmányozhatóvá váljanak [2] Ahhoz, hogy rövidebb idejű fényvillanásokat

állítsanak elő, nem csupán egy lézerre van szükség; a rövidebb ideig tartó felvillanások elérésének kulcsa egy olyan jelenség, amely akkor lép fel, amikor a lézérfény áthalad egy gázon, a fény kölcsönhatásba lép az atomokkal, és olyan hullámokat is létrehoz, amelyek frekvenciái az alaphang egészszámu többszöröse, felharmonikusai. Hasonló jelenség, mint a zenei hang esetében az alaphanggal együtt szóló, azt színező a felhangok.



## A keresztesvirágú zöldségek



A keresztes virágú zöldségek a Brassica nemzetségbe tartozó növények csoportja. Virágaik négy szirmúak, így keresztre hasonlítanak. Ilyen zöldség a brokkoli, a kelbimbó, a karfiol, a káposzta, a kelkáposzta, a retek, karalábé, a torma, vaszabi és még több más is. Némelyik salátaként nyersen is fogyasztható, több közülük kén-tartalmú vegyületei miatt kissé keserű, vagy csípős ízű. Főzve pirítva, grillezve remek főételek készíthetők belőlük, kiegészítik a húst, halat és tésztákat.

A keresztes virágúak családjába tartozó zöldségek a Földközi-tenger és Kis-Ázsia északi és nyugati partjain és Nyugat-Ázsiában őshonos vadkáposzta különböző fajtái. A vadkáposzta különböző egyedeinek házasítása hozta létre a család (Brassicaceae) többi tagját is, a mai brokkolit, a karfiolt, a káposztát, a kelkáposztát, a karalábét és a kelbimbót is. A káposzta eleinte vadon termő növény volt (ahogy a legtöbb zöldség, amit fogyasztunk), majd a vadkáposzta különböző egyedeinek házasítása hozta létre a család (Brassicaceae/káposztafélék) többi tagját is, a mai brokkolit, karfiolt, a fejes káposztát, a kelkáposztát, a karalábét, a kelbimbót vaszabit is. Például a brokkoli élelmékként történő termesztését valahol Olaszország északi és középső részén az etruszkok kezdték meg idősámításunk előtt 1000 körül. A római szakácskönyvek is utalnak egy kerti zöldségfélére, amely jól illeszkedik

a brokkoli leírásához. Először 1560-ban említik Franciaországban, de a zöldség csak az 1700-as években terjedt el széles körben Nagy-Britanniában, Európában és Amerikában. A brokkolit a vegetáriánus étrend elemeként a 18. század óta népszerűsítik. A kelbimbót XIX. században Belgiumban nemesítették ki, emiatt angolul például „brüsszeli bimbónak” (brussel sprouts) is nevezik. A retket már az ókorban is ismerték és termesztették. A csipős ízű tormát (gyógy- és fűszernövény) eredetileg gyógynövényként termesztették, csak később vált a sülték, ízesítőjévé. Az eredetileg Japán hegyi folyók partján nőtt vaszabi (egyéb nevei: japán vízitorma vagy japán zöld torma) is a káposztafélék családjába tartozik. Gyökerét fűszerként használják. Íze rendkívül csipős.

## A ZÖLDSÉGEK KÉMIAI ÖSSZETÉTELE

Közismert, hogy a zöldségek fogyasztása, a kis szénhidrát- és kalóriatartalmuk, továbbá a magas rost-, ásványi anyag- és vitamintartalmuk miatt, az emésztést is elősegítő egészséges életmóddhoz tartozik.

A legtöbb káposztafélében megtalálható bioaktív fitokémiai vegyületek közé tartoznak az antioxidáns tulajdonságú polifenolok, fenolsavak, flavonoidok, karotinoidok (zeaxantin, lutein,  $\beta$ -karotin),

Vitaminok	Folát (B9)
	C Vitamin
	K Vitamin
Ásványi vegyületek	Kálium
	Szelén
	Kalcium
Fitokémikáliák	Karotinoidok
	Klorofil
	Rostok
	Flavonoidok
	Glükózinolátok
	Izotiocianátok
	Lignánok
A keresztesvirágú zöldségek gyógyhatású vegyületei	

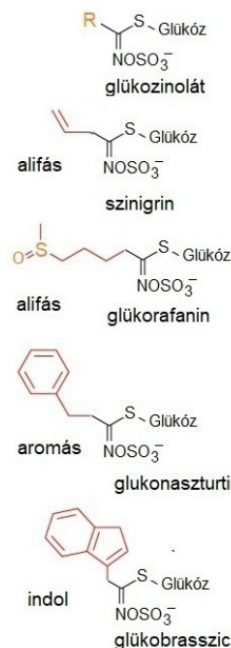
az alkaloidok, tanninok, szaponinok, antocianinok, fitoszterolok, terpenoidok, glikozidok, klorofill, glükózinolátok, fitoszteroidok, C-vitamin, E-vitamin, B9 és K vitamin, amelyek védik a sejteket a szabad gyökök károsító hatásától, valamint alifás és aromás aminok, aminosavak. A K-vitamin segíti a véralvadást és a csontok

## Gyógynövény-e a brokkoli?

egészségét, segíthet csökkenteni a vérnyomást, valamint szabályozni az izomösszehúzódnásokat is. Az azonban kevésbé ismert, hogy ezek a zöldségek, illetve bioaktív hatóanyagai a fentieknél sokkal többet is nyújtanak.

Az utóbbi évtizedekben végzett számos in vitro és in vivo vizsgálat a keresztes virágú zöldségek fogyasztását összefüggésbe hozta több krónikus betegség, -szív-és érrendszeri betegség, degeneratív betegség és bizonyos rákos megbetegedések- kockázatának csökkenésével, illetve néhány esetben ezek gyógyításával is. A keresztesvirágúban található fő bioaktív vegyületek a glükózinolátok (GSL), amelyek kénben gazdag, anionos és vízben oldódó másodlagos metabolitok, mint például a glükobraszicin és származékai. A zöldségek íze és fűszeres aromájuk is ezektől a molekuláktól származik.

A nyers keresztesvirágú zöldségek aprítása vagy rágása bioaktív glükózinolát hidrolízis termékek, például izotiocianátok és indol-3-karbinol képződését eredményezi. A glükózinolátok ként és nitrogént tartalmazó glikozidok, glükózból és egy aminosavból származnak. (glikozidok: lásd ginzzenozidokat a ginzeng gyökérben, KP 18.szám (2017)). A glükózinolátok három kategóriába sorolhatók aminosav-prekursoraik kémiai szerkezete alapján: alifás glükózinolátok (például szinigrin, glükorafanin) metioninból, alaninból, leucinból,



Különböző típusú glükózinolátok

	mg/100g	előfordul
Kerti zsáza	392	
Mustárzöld	282	
Kelbimbó	236	80- 445
Torma	160	
Kelkáposzta	100	7-317
Vízitorma	94	
Fehér retek	92	
Káposzta	78	
Káposzta (vörös)	64	
Brokkoli	61	19-128
Karalábé	46	20-109
Karfiol	44	

Linus Pauling Institute, Oregon State University  
A zöldségek glükózinolát tartalma

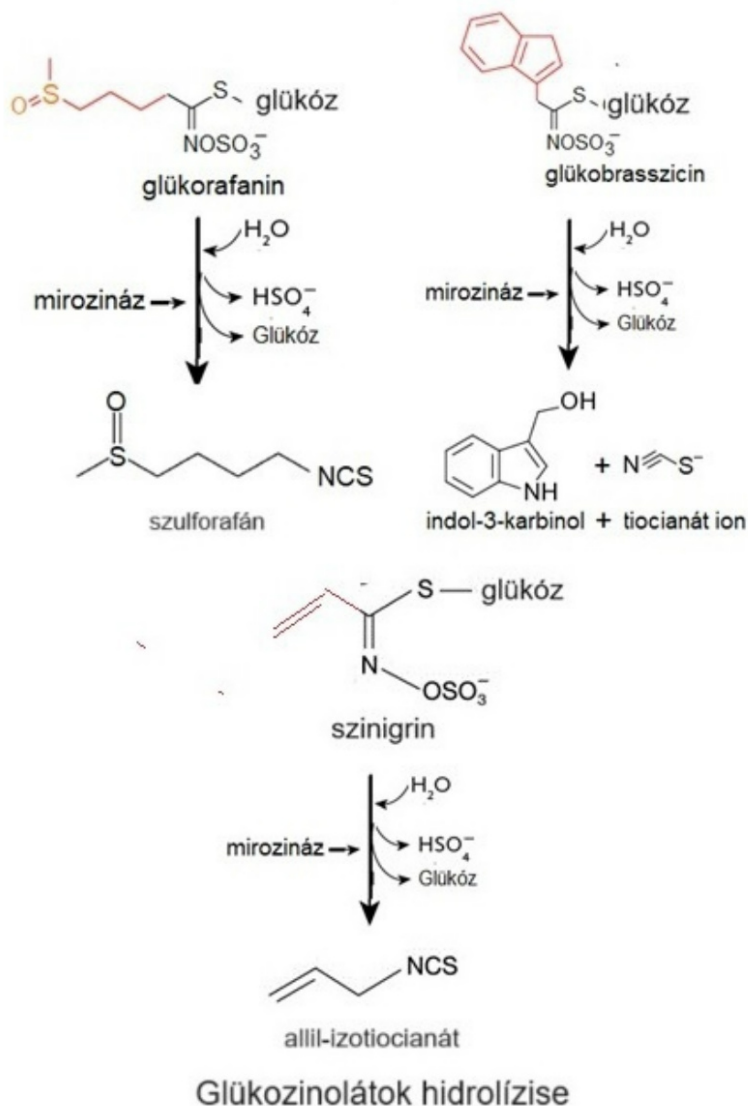
izoleucinból vagy valinból származnak, indol-glükózinolátok (például glükobraszicin) triptofánból származnak és aromás glükózinolátok (pl. glükonaszturtin) fenilalaninból vagy tirozinból épülnek fel.

Megjegyzendő, hogy mint más növények esetében is, a keresztes virágú zöldségek glükózinolát tartalma is függ a nemzetségtől és a fajtól, továbbá nagymértékben változhat a növénytermesztési és a betakarítás utáni tárolási körülményektől, valamint a konyhai feldolgozástól függően is. Vizsgálatok utalnak arra is, hogy a keresztesvirágú zöldségek forralása nagyobb mértékben csökkenti glükózinolát tartalmukat,

mint a gőzben történő főzés és a mikrohullámú sütés. Mindazonáltal, amikor főzött keresztes virágú zöldségeket fogyasztunk, a vastagbélben a bakteriális aktivitás felelős a metabolitok széles skáláját képezve a glükozinolát lebomlásáért. Kimutatták, azt is, hogy a hűtés során jobban csökken a zöldségek glükozinolát tartalma, mint a fagyasztás során.

A glükozinolátok hidrolízise, amelyet a mirozínázok (β-tioglukozidázok) nevezett enzimek csoportja katalizál,

különböző antioxidáns bioaktív vegyületek, pl. tiocianátok, izotiocianátok, indolok, oxazolidin-2-tionok (pl. tionitril, epithionitril) képződéséhez vezet. Az enzimek két különböző típusa létezik: a növényi mirozínáz, amely a növényekben együtt létezik a glükozinolátokkal, bár fizikailag elkülönül, és így közvetlenül nem érintkezik velük, és a bakteriális mirozínáz, amely főleg a vastagbélben fejti ki hatását.



A növényekben a mirozínáz, a tiocianátok, az izotiocianátok, az epithionitril és a nitril, a kórokozók, rovarok és növényevők ellen védekező vegyületek. Amikor a növényi sejtek károsodnak, a mirozínáz felszabadul, és érintkezésbe kerül a glükozinolátokkal, katalizálva azok erősen reaktív metabolitokká történő átalakulását. A nyers keresztesvirágú zöldségek aprításakor, a glükozinolátokat a mirozínáz gyorsan hidrolizálja, és metabolitokat hoz létre, amelyek azután fogyasztáskor felszívódnak a proximális bélben.

## A ZÖLDSÉGEK ÉS HATÓANYAGAIK GYÓGYHATÁSA

Az elmúlt két évtizedben intenzív in vitro kutatások folytak és különösen nagyszámú humán klinikai kísérletet végeztek a keresztesvirágú zöldségek és hatóanyagai, a glükozinolátok és izotiocianátok gyógyhatásának kimutatására, és a gyógyhatásuk mechanizmusának felderítésére. A vizsgálatokban bemutatott bizonyítékok igazolták, hogy a glükozinolátok erős gyulladásgátló, antioxidáns, antimikrobiális, antivirális tulajdonságokkal rendelkeznek és arra utalnak, hogy a glükozinolátok és izotiocianát metabolitjaik fontos összetevői lehetnek számos krónikus betegség megelőzésének és kezelésének.

Míg a keresztesvirágú zöldségek fogyasztása és a rák kockázatának csökkenése közötti kapcsolat nem mindig teljesen egyértelmű, a tanulmányok valószínűsítik, hogy a zöldségek hatóanyagai segíthetnek csökkenteni a rák kialakulásának kockázatát is. A közelmúltban a klinikai kísérletek eredményeiről, több összefoglaló közlemény is megjelent az irodalomban (1,2,3). Az alábbiakban idézünk a klinikai kísérletek jellemzőiből és eredményeiből.

## KLINIKAI VIZSGÁLATOK

A tanulmányok az eredményeket a ClinicalTrials.gov és az International Standard Randomized Controlled Trial Number (ISRCTN) nyilvántartás segítségével gyűjtötték össze. 2000-2021

között 126 regisztrált klinikai vizsgálatból különböző kritériumok alapján a szerzők 87-et vontak be a kvalitatív elemzésbe, hogy áttekintsék a klinikai vizsgálatok eredményeit.

A vizsgálat tárgyát tekintve az elvégzett kísérletek három csoportra voltak oszthatóak. (a) Glükoszínolátokban (GSL) gazdag zöldségek, (b) glükoszínolátokban gazdag kivonataik és (c) egyedi tisztá vegyületek, a zöldségek glükoszínolát, illetve izotiocionát hatóanyagai. A 87 vizsgálat többségét kivonatokkal vagy tisztá vegyületekkel végezték (n = 60). A kísérletekben a szulforafán (SFN) volt a legtöbbet vizsgált vegyület, 29 szulforafánon (SFN), 3 fenetil-izotiocionáton és 1 történt a glükorafáninon (GR)), míg a brokkoli volt a leggyakrabban vizsgált zöldség. A GSL-ben gazdag zöldségekkel 27 kísérletet végeztek.

**Az eset-kontroll vizsgálat az érdeklődésre számot tartó betegségben vagy állapotban szenvedő emberek egy csoportját (esetek) hasonlítja össze egy olyan kontrollcsoporttal (kontrollok), akik nem szenvednek a betegségben vagy állapotban. A vizsgálat célja, hogy kimutassa a két csoport közötti kockázati tényezők eltéréseit, amelyek kapcsolatban állhatnak a betegség kialakulásával. Előnye, hogy nem kell nagyszámú egyedet hosszú időn keresztül megfigyelni, hogy megállapítsák, ki fogja elkapni a betegséget, mivel a vizsgálatot azután végzik, hogy a betegség már bekövetkezett.**

**A kutatók áttekintve a vizsgálatok eredményeit megállapították azt is, hogy a vizsgálatokból származó bizonyítékok még mindig ellentmondásosak, a vizsgálati terv, az időtartam, a résztvevők száma, a beadott táplálék vagy élelmiszer-összetevők és az elemzett eredmények heterogenitása miatt. Felhívták a figyelmet a GSL-ek és/ vagy élelmiszerekből, kivonatokból és egyedi vegyületekből származó származékok biohasznosulásának (biológiai hozzáférhetőség) vizsgálatára is, tekintettel a gyógyhatást módosító különböző genetikai polimorfizmusok hozzájárulására.**

A legtöbb tanulmány a GSL-ek egészségre gyakorolt hatásait a rákkal és a kognitív funkciókkal kapcsolatos eredményekre összpontosítva értékelte, még akkor is, ha az eredmények nem mindig voltak egyértelműek. A vizsgálatokat egészséges alanyokon és kockázati tényezőkkal rendelkező személyeken, illetve betegségben szenvedőkön is tesztelték. A beavatkozás időtartama néhány naptól 10 hétig változott, zöldség adagja napi 30-200 g között volt. A kivonatok és a tisztá hatóanyagok glükoszínolát tartalma 51-450 mmol között ingadozott.

A figyelembe vett fő markerek a gyulladással, méregtelenítéssel (főleg génextpresszió vagy enzimaktivitás) és a rákkockázattal kapcsolatosak voltak, amelyeket főként a vérben, a célsejtekben (perifériás vér mononukleáris sejtek) vagy a szövetben (például prosztatata) elemezték. Ami a résztvevők jellemzőit illeti, a GSL-ekkel kapcsolatos kísérleteket egészséges alanyokon (n = 41) és olyan betegségben szenvedő alanyokon is végezték, mint a rák, az Alzheimer-kór, a diabetes mellitus, a depressziós rendellenesség és az autizmus spektrum zavar (n = 41 vizsgálat). t klinikai vizsgálatba vontak be olyan személyeket, akiknél kardiovaszkuláris rizikófaktorok jelentkeztek, mint például túlsúly, prehipertónia, hiperkoleszterinémia és dohányosok. Csak néhány vizsgálatot végeztek prosztatatakos alanyokon.

## EREDMÉNYEK

A vizsgálatok eredményeit összefoglaló kutatók megállapítják, hogy a GSL-eknek és a GSL-ben gazdag élelmiszereknek az emberi egészségre gyakorolt hatását illető bizonyítékok alátámasztják pozitív szerepüket a nem fertőző betegségek, különösen a rákkal kapcsolatban.

A kohorsz (speciális populációkból vett minták) eset-kontroll vizsgálatok következetes fordított összefüggést mutattak ki a GSL-ben gazdag élelmiszerek (azaz brokkoli, kel, káposzta és karfiol) és a glükoszínolátok magas fogyasztása és a tüdő-, mell-, gyomor-, vastagbél-, végbél- és a prosztatatakos kockázata között.

Összefoglalva elmondható, hogy bár



jelentős erőfeszítések történtek a GSL-ek és a GSL-ben gazdag élelmiszerek tanulmányozására, további vizsgálatokra, nagyobb számú résztvevőt tartalmazó klinikai kísérletekre van szükség a kapott eredmények megerősítéséhez.

**A biohasznosulás a beadott hatóanyagoknak a szisztémás keringésbe jutó hányada (%) Az apoptózis során a szervezet megszabadul beteg sejtjeitől.**

A kutatások és vizsgálatok tovább folynak. A klinikai kísérleteket összefoglaló közlemények megjelenése után az elmúlt két évben is több közlemény jelent meg a folyóiratokban a keresztesvirágú zöldségek és hatóanyagaik gyógyhatásáról. Például a kutatók beszámoltak a kis toxicitású indol-3-karbinol számos biológiai folyamatban végzett pozitív hatásáról. A molekula hozzájárul a karcinogén anyagcseréhez, a DNS-javításhoz és az apoptózis indukciójához a beteg sejtekben, ami miatt ez a vegyület a jövő ígéretes terápiás szerepe közé tartozik.

**Köszegi Lídia**

## **✳ IRODALOM:**

- M. Marino et al., *Front Nutr.* 2021; 8: 730906  
E.N. Connolly et al., *Front Pharmacol.* 12: 767975. (2021)  
B. Mangla et al., *Phytotherapy Research.* 35:5440 (2021)  
F. Centofani *Pharmaceuticals (Basel).* 16(2): 240 (2023).  
M.A. Pietro et al., *Adv. Food Nutr. Res.* 90:305 (2019)  
C. Bosetti et al., *Ann Oncol* 23(8): 2198, (2012)  
Costa-Pérez et al., *Nutrients* 15, 1424. (2023)  
A. Kamboj et al., *The Pharma Innovation Journal* 12(6): 633 (2023)

# TÖMEGSPEKTROMETRIA

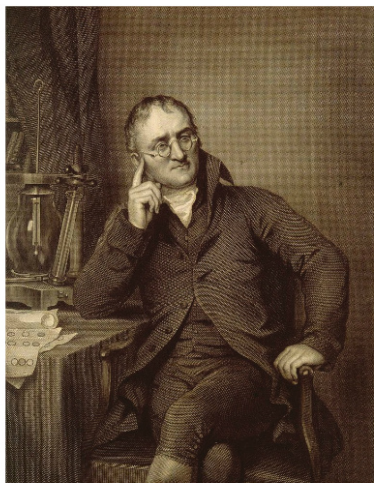
A tömegspektrometria (MS) az ismeretlen vegyületek mennyiségi és minőségi meghatározására szolgáló műszeres kémiai analitikai módszer. A tömegspektrométerben a szilárd, folyékony vagy gáznemű mintát ionizálják, majd az ionokat tömeg/töltés ( $m/z$ ) arányuk alapján elektromos vagy mágneses mezők segítségével szétválasztva detektálják.

Számos analitikai vizsgálatot végeznek tömegspektrometria segítségével. Például szennyező anyagok kimutatása, kémiai elemek izotópjainak azonosítása, pontos tömegük és relatív mennyiségeik meghatározása, geológiai minták kormeghatározása, szerves és szervetlen vegyi anyagok elemzése különösen kis mennyiségű szennyeződés esetén, gyógyszerjelöltek és metabolitjaik azonosítása, összetett szerves anyagok szerkezeti képletének meghatározása, vagy például a Holdról, és a Marsról származó minták kémiai és izotóp-összetevőinek elemzése.

A tömegspektrométerekben az elemzés

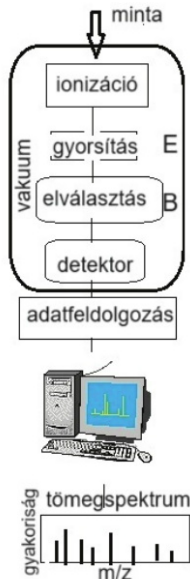
## MIT JELENT AZ $m/z$ ?

Az  $m$  az ion tömegének,  $z$  pedig az ion töltésének számértéke. Ezekhez az értékekhez az atomi tömegegységet (dalton) és az elemi töltésegységeket használják. Az atomi tömegegység (dalton) a  $^{12}\text{C}$  atom (a szén legstabilabb izotópjá) tömegének egy tizenketted része. Az eredmény a minta tömegspektruma, amely a minta kémiai összetevőit a tömeg/töltés arányuk függvényében ábrázolja. A tömegspektrum elemzésével meghatározható a vegyületek tömege és a kémiai szerkezetük is.



John Dalton

általában öt alapvető lépésből áll: mintabevitel, ionizálás, gyorsítás, tömegelemzés és iondetektálás. A mintákat a mintabemeneten keresztül vezetik be a műszerbe. A műszerbe kerülve a minta molekulái az ionizációs



egységben ionokká alakulnak, majd elektrosztatikusan felgyorsítva a tömegelemzőbe kerülnek, amely  $m/z$  arányuk szerint elválasztja azokat. A lépések megvalósítására az egyes alkalmazásoknak megfelelően különböző módszerek léteznek. A detektor az ionok energiáit elektromos jelekké alakítja, amelyeket azután adatfeldolgozásra számítógépnek továbbít.

Valamennyi tömegspektrométer vákuumrendszerrel is rendelkezik, a működéshez szükséges vákuum fenntartásához. A nagyvákuum minimalizálja az ion-molekula reakciókat, az ionok szóródását és semlegesítését. Egyes kísérletekben a tömegspektrométer egy részében szándékosan növelik a nyomást, hogy tanulmányozzák az ion-molekula reakciókat. Normál működés mellett azonban minden ütközés zavarja az elemzést.

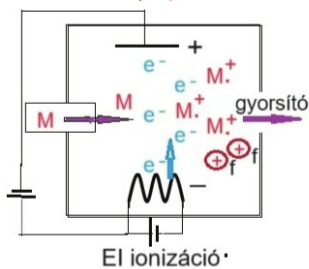
## MINTABEVITEL

Ahhoz, hogy egy kezdetben atmoszférikus nyomású (760 torr) mintán tömeganalízist végezhessünk, azt úgy kell bevezetni, hogy a műszerben a vákuum viszonylag változatlan maradjon ( $\sim 10^{-6}$  torr). A mintabevitel régebben főleg a minta ionizációs egységbe való közvetlen bevitelével történt. Ma már a mintát, mint később látni fogjuk, leggyakrabban folyadék- vagy gázkromatográfyon keresztül juttatják az ionforrásba.

## IONIZÁCIÓ

A különböző ionizációs módszerek úgy működnek, hogy a semleges molekulákat elektronkilökéssel, elektronbefogással, protonálással, vagy deprotonálással ionizálják, vagy közvetlenül ionokat visznek át a kondenzált fázisból gázfázisba. A leggyakrabban használt ionizációs technikák az elektronütköztetési, a kémiai, az elektro spray, a foto- és mátrix-asszisztált lézeres ionizáció.

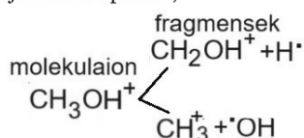
## ELEKTRONÜTKÖZTETÉSES IONIZÁCIÓ (EI)



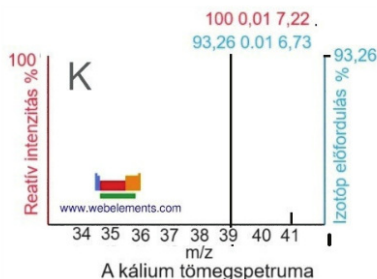
Az elektronokat egy fémszál (pl. volfrámszál) hevítésével ún. izzó katódból nyerik. Az elektronok száma az izzószál hőmérsékletével (az izzószálon áthaladó áram nagyságával), energiájuk az alkalmazott gyorsító feszültség változtatásával befolyásolható.

Az EI ionizáció általában egyszerűen töltött pozitív ionokat hoz létre. A molekula elektronokkal ütközve ionizálódik, miközben páratlan elektronszámú gyökkation ( $M^+$ ) képződik belőle. A töltött molekulát molekulaionnak nevezzük.

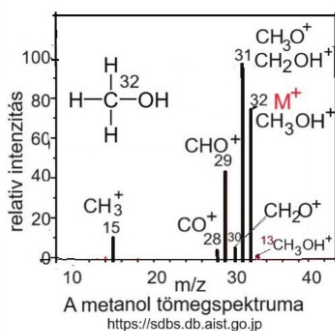
A rugalmatlan ütközés során az elektronok átadják energiájuk egy részét a molekuláknak, amely nem csak a molekulák ionizációjára, hanem gerjesztésére is fordítható. A gerjesztett állapotban lévő ionok további reakciókon (pl. kötéshasadás fragmentálódás vagy átrendeződés) mehetnek keresztül belső energiájuktól függően. A molekulaion ezt követően kisebb töredékekre bomlik. Például a metanol ion különböző módon töredezhet, az egyik fragsmens töltést hordoz, egy másik, töltés nélkül marad gerjesztett állapotban,



amelyek maguk is tovább bomlanak még kisebb darabokra. Minél nagyobb a bombázó elektronok energiája és összetettebb a molekula, annál nagyobb a töredezés, és annál bonyolultabb a



A kálium tömegspektruma



A metanol tömegspektruma

tömegspektrum. Míg atomok esetében csupán az izotóposztétel jelenik meg a tömegspektrumban a nagyobb molekulákból bonyolultabb tömegspektrum jön létre a fragmentáció miatt.

## KÉMIAI IONIZÁCIÓ (CI)

A CI ionforrás felépítése lényegében azonos az EI forrásáéval, csak az ionizáció mechanizmusa eltérő. A mintát ennél a módszernél is el kell párologtatni, így ezzel is csak hőstabil, illékony vegyületek vizsgálhatók. A mérendő mintát az elektron bombázás előtt hígítják valamilyen reagensgázzal (pl. metán, izobután, ammónia). Az elektronok nem a minta molekuláit, hanem az eszközben jóval nagyobb mennyiségben jelenlévő reagensgáz molekuláit ionizálják. A kémiai ionizáció folyamatában a vizsgált molekula a reagensgázból képződő ionnal ütközik és ion-molekula reakciók (pl. protontranszfer) során ionizálódik. A minta molekuláiból protonált molekulaion,  $[M+H]^+$  képződik. Ez a módszer lágy ionizációs módszerek közé tartozik: kíméletesebb eljárás, jóval kisebb mértékű a fragmentáció, mint az EI

technikánál, viszont emiatt kevesebb szerkezeti információ nyerhető a spektrumokból.

## AZ ELEKTROSPRAY IONIZÁCIÓ (ESI)

Olyan módszer, amely közvetlenül oldatból állítja elő a gáznemű ionizált molekulákat. Úgy működik, hogy erősen töltött cseppekből finom permetet hoz létre elektromos tér jelenlétében. Az oldószer mennyiségének csökkentésére a képződött aeroszolt egy fűtött kapillárison vezetik át. A párolgás során a cseppek mérete folyamatosan csökken, viszont töltésük nem változik, így jelentősen megnövekszik a felületi töltéssűrűségük, instabillá válnak, végül kisebb cseppekre, majd gázfázisú ionokra bomlanak. Az ionspray technikát aerodinamikus porlasztással kombinálják, inert porlasztógázt (pld  $N_2$ ) alkalmaznak a töltött aeroszol létrehozására. Ez az ionizációs technika könnyen protonálódó, bázikus csoportokat tartalmazó vegyületek (aminok, peptidek, fehérjék stb.) vizsgálatára alkalmas, és valamennyi analízator típussal kombinálható. Az apoláris vegyületek ESI-vel nem, vagy csak alig vizsgálhatóak. Ilyen esetekben gyakran jól használható a légköri nyomáson történő kémiai ionizáció (APCI) vagy a fotoionizáció (APPI).

## ATMOSZFÉRIKUS NYOMÁSÚ FOTOIONIZÁCIÓ (APPI)

Az APPI ionizáció során a mintához olyan adalékanyagot, segédanyagot (pl. toluol) kevernek, mely az UV-tartományban jelentős elnyeléssel rendelkezik. Az oldatot a porlasztás közben UV-fénnyel sugározzák be, a mintamolekulákat ennél a módszernél is végül a gerjesztett adalék molekulák ionizálják. Ezzel a módszerrel kis, apoláris molekulák vizsgálhatóak.

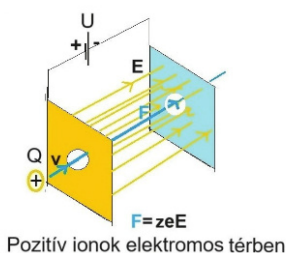
## MÁTRIX-ASSZISZTÁLT LÉZER DESZORPCIÓ ÉS IONIZÁCIÓ (MALDI)

A fehérjék nem illékonyak, ezért melegítéssel nem lehet gáznemű ionokat

létrehozni. A MALDI egy gázfázisú peptid- és fehérjeionokat előállító technika. A módszer alapja az, hogy a vizsgált minta molekuláinak ionizációja egy segédanyag, a mátrix, például 2,5-dihidroxi-benzoészav,  $\alpha$ -ciano-4-hidroxi-fahéjsav segítségével történik meg. A mátrix-mintaoldatot rászárítva a mintatartóra, a szilárd mikrokristályokat lézerfényvel sugározzák be. A minta molekulái az alkalmazott lézer hullámhosszánál fényelnyelést mutató mátrix kis molekuláiba ágyazódnak, amelyek a lézer energiáját átadva az analit makromolekuláinak ionizálja azokat, miközben végbemegy a lézer deszorpció is. Ezzel az igen érzékeny módszerrel az ESI/hez hasonlóan, akár nagy molekulatömegű (>300 kDa), poláros vagy könnyen polarizálható mintákat is vizsgálhatnak.

## GYORSÍTÁS

Az ionok kilépve a pozitív ionizációs kamrából két fémlemez között ( $U = 1-10\text{kV}$ ) feszültség hatására kialakuló homogén elektromos térbe (E) kerülnek, amely erőt fejt ki a pozitív töltésű ionokra, és ezáltal azok elmozdulnak a negatív töltésű lemez felé. Homogén elektromos térben a töltött részecskékre olyan erő hat, amely a tér irányába egyenes vonalban gyorsítja őket. A mozgás sebessége az elektromos tér erősségétől és az ionok tömegétől és töltésüktől függ. Az elektronra ható erő arányos az elektromos tér intenzitásával és felgyorsítja az elektront. Homogén elektromos térben a pozitív ionok egyenesen gyorsulnak a negatív lemez felé.



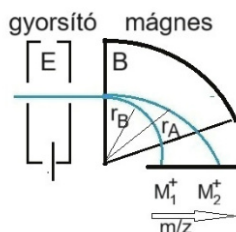
## TÖMEGANALÍZIS ELVÁLASZTÁSSAL

A minta vegyületei ionizálásukat követően

a tömegelemzőbe kerülnek, amely az  $m/z$  arányuk szerint elválasztja, analizálja az ionokat. Különböző eltérő működésű analizátor konstrukciók léteznek, melyek alkalmazása a szükséges felbontástól, tömegtartománytól, pásztázási sebességtől és kimutatási határoktól függ. Az általánosan használt tömegelemzők a mágneses, a repülési idő, és a kvadrupól tömeganalizátorok.

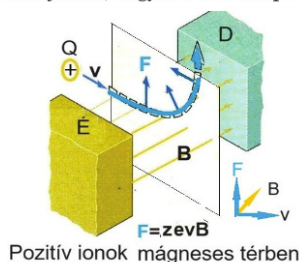
## MÁGNESES TÖMEGANALIZÁTOR

A mágneses analizátor a gyorsítóból kilépő ionokat impulzusuk és töltésük alapján választja el. A sebességükre merőleges mágneses mező ívben elhajlítja az ionnyalábot, melynek sugara arányos az egyes ionok tömeg/töltés arányával. A könnyebb ionok jobban eltérnek mágneses térben, mint a nehezebbek.



A mágneses térben a töltött részecskére un Lorenz erő  $F_B$  hat, amely a sebességre merőleges tér esetén, a töltés  $ze$  (e az elektron töltése, z az ionizáció mértéke), a sebesség  $v$  és a mágneses indukció  $B$  szorzata. A Lorentz-erő mindig merőleges a térre és részecske sebességére is.

Ez azt jelenti, hogy az erő centripetális



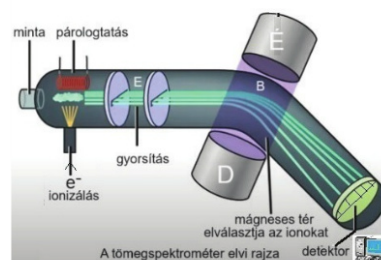
erőként  $F_c$  működik, körpályára kényszeríti a töltött részecskét. Figyelembevéve, hogy az  $U$  feszültséggel

történt gyorsítás követően az ion potenciális energiája ( $E_{pot} = \text{töltés} \times \text{gyorsító feszültség}$ ) alakult át kinetikus energiájává ( $E_{kin}$ ), adódik a körpálya sugara.

$$F_B = F_c = ze v B = \frac{m v^2}{r}$$

$$E_{pot} = E_{kin} = ze U = \frac{m v^2}{2}$$

$$r = \frac{1}{B} \sqrt{\frac{m \cdot 2U}{e}}$$



Léteznek sokcsatornás diódasoros detektorok, amelyek alkalmasak az ionok egyidejű detektálására is, de sok esetben, az analizátor detektor felé eső részén rögzített rész van, amely adott  $m/z$  arányú ionokat továbbít a detektornak. A tömegspektrumot – a különböző  $m/z$  arányú ionok továbbítását – a mágneses mező vagy a gyorsító feszültség megváltoztatásával érik el. A tér erősségének változtatásával a különböző tömegű ionok fokozatosan fókuszálhatók, egy íves cső végére rögzített rész mögötti detektorra.

## REPÜLÉSI IDŐ TÖMEGANALIZÁTOR (TOF)

A repülési idő (TOF) tömeganalizátor nagyon egyszerű, nem használ mágneses teret, az ionok áthaladási idejét méri egy repülési csőben. Az elválasztás elve hasonló a kromatográfiához, azzal a különbséggel, hogy nincs álló/mozgó fázis, ehelyett az elválasztás az ionok kinetikus energiáján és sebességén alapul. Az analizátorban az ionok elválasztását az eredményezi, hogy az azonos kinetikus energiával induló, de eltérő  $m/z$  arányú ionok különböző sebességgel mozognak,



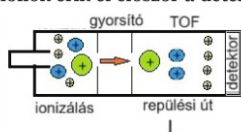
$$v = \sqrt{\frac{2eU}{m/z}}$$

amely miatt különböző idő alatt haladnak át egy adott L hosszúságú repülési csövön. A repülési idő  $T_r$ , a fentieknek megfelelően az alábbi lesz,

$$T_r = \frac{L}{v}$$

$$T_r = L \sqrt{\frac{m}{z} \frac{1}{2eU}}$$

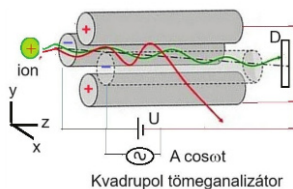
Az egyenlet azt mutatja, hogy a kis  $m/z$  arányú ionok érik el először a detektort.



Az ionok elektromos hatást váltanak ki a detektorban, amelyet a számítógép elemel. A tömegspektrum úgy keletkezik, hogy számítógép az idő függvényében rögzíti az ionizálóban keletkezett ionok minden egyes impulzusának detektorjelét.

## KVADRUPOL TÖMEGANALIZÁTOR

A kvadrupol tömeganalizátor négy párhuzamos hengeres fémrúd elektródot tartalmaz egy vákuumkamrában, a középtengelytől egyenlő távolságra elhelyezve. A rudakra egyen- és nagy frekvenciás váltófeszültséget is kapcsolnak úgy, hogy az egymással szemben elhelyezkedő elektródok potenciálja megegyezzen, a szomszédos rudak potenciálja pedig ellentétes előjelű legyen. Az ionforrásból kilépő ionok a gyorsító feszültség hatására a rudak közti térrészben, a folyamatosan változó kvadrupólus elektromágneses tér hatására fajlagos tömegüktől függő pályán fognak mozogni.



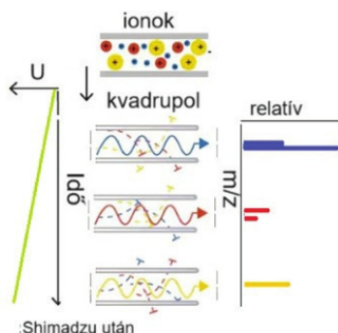
A pozitív töltésű ionokat az éppen pozitív töltésű rudak taszítani, míg a negatív töltésűek vonzani fogják. Mivel a váltófeszültség hatására az elektródok között gyorsan változó fázisú elektromos tér jön létre, – a rudak relatív töltése folyamatosan változik – az ionok oszcillációs mozgást végezve haladnak a rudak között úgy, hogy az analizátoron csak az adott U egyenfeszültség és a váltófeszültség frekvenciája  $\omega$  által meghatározott tömeg/töltés arányú ionok tudnak áthaladni:

$$m/z = K \frac{U}{r^2 \omega^2}$$

Mathieu egyenlet

ahol  $K$  = állandó és  $r$  a rudak közti távolság,  $\omega$  az oszcilláció frekvenciája.

Az összes többi ion – a kisebbek és a nagyobbak is – a rudakba ütközve semlegesítődnek és nem jutnak el a detektorig. Emiatt a kvadrupol tömeganalizátort tömegszűrőnek is nevezik. Az  $U$  egyenfeszültség folytonos pásztázásával rögzíthető a teljes tömegspektrum.



Rögzített  $U$  és  $\omega$  értékkel meghatározott  $m/z$  értékkel rendelkező ionok detektálhatók. Az ilyen berendezések relatíve egyszerűek, könnyen vezérelhetők, gyorsak, bármilyen ionforrással vagy más elválasztástechnikai eszközzel kombinálhatóak (lásd GC-MS, LC-MS).

## AZ MS DETEKTOROK

A tömegspektrométerek kulcsfontosságú eleme a detektor, amely az elválasztott

ionok tömegáramát mérhető jellé alakítja. A detektor a beérkező ionokat elektromos impulzusokká alakítja át, amelyeket aztán egy integrált mérőáramkör segítségével megszámlál. Az elektromos impulzusok száma megfelel a detektorra beérkező ionok számának. A detektorok úgy működnek, hogy rögzítik egy felületükbe ütköző vagy mellette elhaladó ion által okozott indukált töltést vagy áramot. Mivel a jel nagyon kicsi,  $10^{-5}$ - $10^{-10}$  A, elektronsokszorozóval, Faraday kollektorral vagy elektron-foton detektorral erősítik fel a jelet, hogy előálljon a tömegspektrum. Különböző típusú detektorokat a tömeganalizátorhoz való alkalmazásuk szerint használják a tömegspektrométerekben.

## AZ ELEKTRONSOKSZOROZÓ EM

A tömeganalizátorból kilépő pozitív ionokat az elektronsokszorozó első elektródjához (dinódájához) irányítják. A dinódára negatív feszültséget kapcsolnak, hogy vonzza a pozitív ionokat. A dinóda aktív felületére ütköző ion, egy vagy több elektront vált ki a felületből. Ezeket a primer elektronokat, megfelelő feszültséget alkalmazva, egy újabb aktív felületre, a következő dinódára irányítják, ahol szekunder elektronokat váltanak ki. Ha az egymást követő ütközések során az elektronok megfelelően nagy energiára tesznek szert, akkor ütközésenként átlagosan egy elektronnál többet váltanak ki, így az ütközési folyamat kellő számú ismétlésével igen nagyszámú elektron állítható elő. A tipikus végső sokszorozási faktor nagyságrendje  $10^4$  és  $10^8$  között van.

## FARADAY-KOLLEKTOR FC

Az FC egy hengeres fémelektrod, amely megfelelő terelő- és védőelektródokkal van ellátva. Az ionok a cella nyitott végén lépnek be, és a cella oldalfalába vagy hátfalába ütköznek. Az ionütközések által keltett áramot először feszültséggé alakítják, majd erősítik és mérik.

## ELEKTRON-FOTON KONVERZIÓS DETEKTOR

Az ionok kezdetben egy dinódába ütköznek a detektorban, ami elektronemissziót eredményez. A keletkezett elektronok ezután egy foszforral bevont ernyőbe ütközve, fotonokat szabadítanak fel. A fotonok ezután a multiplikátorba kerülnek, ahol az erősítés lépcsőzetesen megy végbe – hasonlóan az elektronsokszorozóhoz.

## SORDETEKTOR

A sordetektorban sok egyéni detektor tömb formátumban van elrendezve. A detektort, amely térben érzékeli a különböző m/z arányú ionokat, jellemzően mágneses tömeganalizátorokhoz használják. A térben elkülönülő ionok egyidejűleg detektálhatók egy sordetektorral. Ennek a megközelítésnek az elsődleges előnye, hogy kis tömegtartományban nincs szükség szkennelésre, így az érzékenység javul.

## A TÖMEGSPEKTRUM

A biológiai molekulák, a kis peptidek és fehérjék kulcsfontosságú építőkövei, az aminosavak és szénhidrátok tömegspektrumai, a molekulatömegüknek és fragmentációs mintázatuknak megfelelő jellegzetes csúcsokat eredményeznek. A molekulafragmensek az ionizáció során elvesztett funkciócsoportok eredményei. Jelük a tömegspektrumban segítenek azonosítani az egyes aminosavakat és szénhidrátokat a mintában. A két vegyülettípus komponenseinek tömegspektrumaiban karakterisztikus ún. marker fragmensek is megfigyelhetők. A markerjelek intenzitása a teljes szerves tömegspektrumhoz viszonyítva lehetővé teszi a molekulatartalom becslését is a vizsgált mintában.

A két vegyületcsoport számos molekulájának tömegspektrumát J. Schneider és munkatársai vizsgálták elektropray-ionizációs repülési-idő

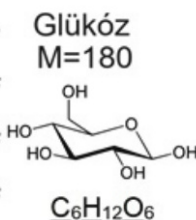
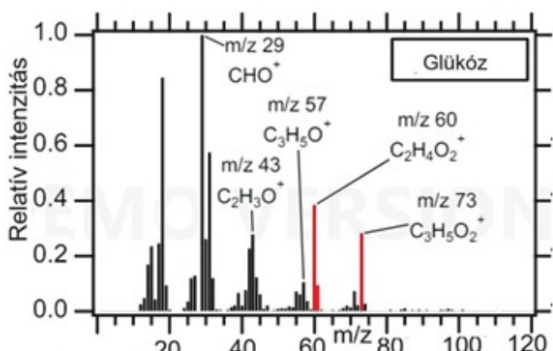
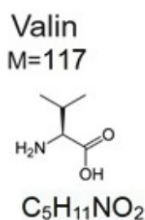
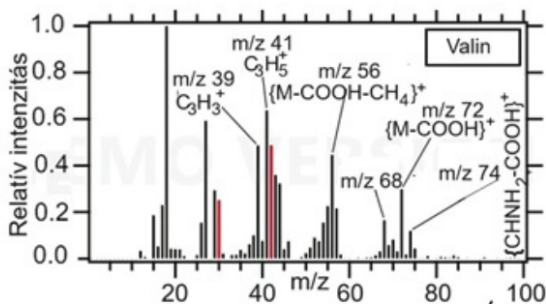
tömegspektrométerrel. Az alábbi ábrán a munkájukból kiragadott két példa a valin és a glükóz tömegspektruma illusztrálja a két vegyületcsoport tömegspektrumainak információtartalmát.

## VALIN

A valin tömegspektrumában az m/z 72 és 56-nál megjelenő csúcsok, a COOH- és az COOH-CH<sub>2</sub>- csoportok elvesztéséből származnak, ahol M az eredeti molekula moláris tömege (117).

A tömegspektrum az m/z 74 értéknél a CHNH<sub>2</sub>COOH<sup>+</sup> fragmens jelenlétét mutatja, ami az alifás oldallánc elvesztéséből adódik.

A 39, 41 és 43 m/z csúcsok szénhidrogén fragmensek (C<sub>3</sub>H<sub>7</sub><sup>+</sup>, C<sub>3</sub>H<sub>5</sub><sup>+</sup> és C<sub>3</sub>H<sub>3</sub><sup>+</sup>), amelyek több különböző reakcióúton is képződhetnek. Az m/z 30 és 42-nél megjelenő [CH<sub>2</sub>NH<sub>2</sub>]<sup>+</sup> és [C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>N]<sup>+</sup> csúcsok az aminosavak tömegspektrumaiban jellemzően megjelenő marker csúcsok. (Az ábrán pirossal megjelölve).



A valin és a glükóz elektropray ionizációval keletkezett fragmenseinek tömegspektruma  
J. Schneider, at al., Atmos. Chem. Phys., 11, 11415 (2011)





## Az elválasztási módszerek kombinációja.

A két különböző elválasztási módszer, a gáz- vagy folyadékkromatográfia kombinációja a tömegspektrometriával (GC/MS vagy LC-MS és HPLC-MS) hatékony analitikai módszer, amely jelentősen megnöveli összetett szerves keverékek elemzésének hatékonyságát. A kombináció nagyfelbontású elválasztást és részletes szerkezeti információkat biztosít molekuláris szinten. Az így kapott tömegspektrum betekintést nyújt a molekulák elemi összetételébe és fragmentációs mintázataiba, segítve azonosításukat. A tömegspektrométer a kromatográf szempontjából detektor, a kromatográf a tömegspektroszkópia szempontjából, mintaelőkészítés. A kombináció előnye, hogy egy keverék több különböző komponense az elválasztásukat követően egyenként is elemezhető.

## GC-MS

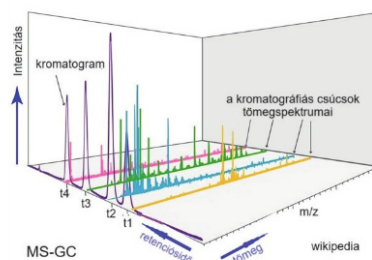
A gázkromatográfia-tömegspektrometria (GC-MS) egy hatékony analitikai technika, amely a gázkromatográfiát (GC) a tömegspektrometriával (MS) kombinálja a mintán belüli különböző anyagok azonosítására és mennyiségi meghatározására. A GC-MS sokoldalú technikát, különféle területeken használnak, beleértve a kutatást, az élelmiszerbiztonságot, a környezeti tesztelést és a gyógyszeranalízist. Értékes információkat nyújt az összetett keverékek összetételéről, és segít a kutatóknak azonosítani és számszerűsíteni a vegyületeket.

Az elemzés a gázkromatográffal (GC) kezdődik. A mintát a gázfázisban elpárologtatják, majd egy inert vivőgáz (például hélium, hidrogén vagy nitrogén) hajtja át a vegyületeket a folyékony vagy szilárd állófázissal bevont kapillárisoszlopon, amely során a minta vegyületei eltérő forráspontjuk és polaritásuk miatt eltérő időben válnak le az oszlopról, és a detektor előállítja a gázkromatogramot.

Az elválasztás után a komponensek elhagyják a GC oszlopot és belépnek a

tömegspektrométerbe (MS). Az MS-ben a molekulákat ionizálják (általában elektron- vagy kémiai ionizációs forrásokkal) és fragmentálják. Az ionizált molekulákat és fragmentumokat ezután gyorsítva, a tömegelőző (kvadrupólusos, vagy mágneses) tömeg/töltés arányuk (m/z) alapján elválasztja.

A GC-MS adatgyűjtése két módon hajtható végre: Az adatgyűjtés történhet letapogatási módban, amely átfogó tömegspektrumot biztosít, az m/z arányok széles tartományát fedi le. Vagy ionfigyelő (SIM) módban, amely bizonyos érdeklődésre számot tartó tömegekről gyűjt adatokat.



A tömegspektrumban a fragmentált ionok m/z arányuk függvényében jelennek meg. A gázkromatogram csúcsterületei arányosak a megfelelő vegyület mennyiségével. Ha egy komplex mintát GC-MS-sel választanak el, az több spektrumot eredményez a gázkromatogramon. Minden kromatográfiai csúcset egyedi tömegspektrumot generál, amely az adott vegyület azonosítására használható.

A kereskedelemben kapható tömegspektrum könyvtárak lehetővé teszik az ismert és ismeretlen vegyületek azonosítását és mennyiségi meghatározását.

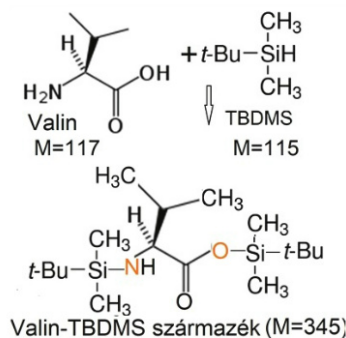
Gázkromatográfiával kevésbé poláros illékony vegyületek analizálhatóak. A kevésbé illékony analitok közé tartoznak például a savak, bázisok és magas forráspontú semleges analitok, amelyek nagyszámú poláris szubsztituenszt tartalmaznak (pl. szterolok és kis cukrok). Ilyen esetekben a HPLC alkalmasabb az

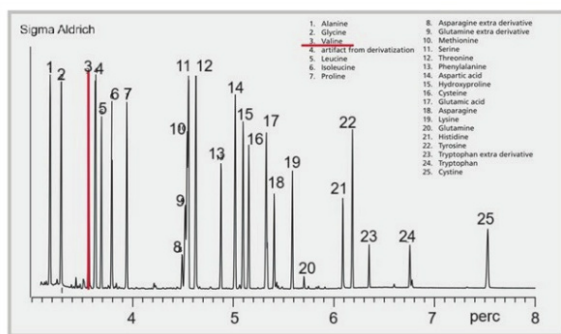
analitok szétválasztására. Vizsgálhatóak azonban ezek a vegyületek gázkromatográfiával is származékképzés után (lásd a magazin jelen számában megjelent kromatográfiáról szóló írást). A módosított molekuláknak kisebb lesz a polaritása és alacsonyabb a forráspontja (magasabb gőznyomása), könnyebben fog párologni. Az analit (Y) származékképzése az analit valamely aktív hidrogénének Y-H helyettesítését jelenti poláros funkciók csoportokban (mint pl. az OH, COOH, SH, NH és CONH), az analit forráspontját csökkentő más funkcionális csoporttal (R).



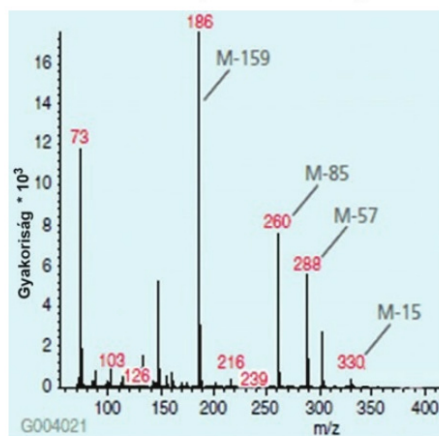
Gyakori eljárás a származékképzésre az analit szililezése. Ilyen szililező reagens a trimetil-szilil-trifluor-acetamid (MTBSTFA). Az MTBSTFA származékképző reagens terc-butil-dimetil-szilil (TBDMS) származékokat képez, ha aktív hidrogént tartalmazó poláris funkciók csoportokkal reagál. Különösen gyakori ez az eljárás az aminosavak gázkromatográfiai analízisékor. Erre láthatunk példát az alábbi ábrán, amely az aminosav TBDMS-el történő módosítását követő GC-MS analízisének eredményét illusztrálja a valin aminosav tömegspektrumának példájával.

A valin (M=117) esetében a származékképzés mind a savas OH, mind





Aminosavak derivatizálása és analízise GC-MS-el  
Katherine K. Stenerson Reporter US Volume 25.3 Sigma Aldrich



Aminosavak derivatizálása és analízise GC-MS-el  
Katherine K. Stenerson Reporter US Volume 25.3 Sigma Aldrich

az NH<sub>2</sub> csoportjának hidrogénjét lecseréli a TBDMS csoport.

A gázkromatográf elektron-ütközéssel ionizált és szétválasztott módosított aminosavak tömegspektrumai tipikus fragmentumokat tartalmaznak, amelyek tömegei a valin esetében megfelelnek a származék molekula tömegének (M=345) és az ionizáció során leszakadt csoportok a CH<sub>3</sub> (M15), C<sub>4</sub>H<sub>9</sub> (M57), C<sub>4</sub>H<sub>9</sub> + CO (M85) és CO-O-TBDMS (M159) tömegei különbségeinek.

## HPLC-MS

A nagy teljesítményű folyadékromatográfia (HPLC) szintén hatékony analitikai technika, amelyet a mintában lévő komponensek elkülönítésére, azonosítására és mennyiségi meghatározására használnak. Ezt az elválasztási technikát is széles

körben használják a kutatásban, a gyógyszeriparban, a környezetelemzésben és az élelmiszerbiztonságban.

A HPLC-MS és a GC-MS nagyon hasonló elválasztástechnikai módszerek. A legfontosabb különbség a GC/MS és HPLC-MS rendszerek között az, hogy a GC/MS gáz mozgó fázisnak inert gázokat használ a párologtatott vegyületek szállítására és hőt a keverék elválasztásához. Emiatt illékony és gázminták esetében jobban alkalmazható. Azonban egy sokkal összetettebb elemzés, mivel a mintát először el kell párologtatni, ami viszont nem mindig tehető meg. Az HPLC-MS nyomással folyékony mozgó fázissal szállítja a mintát és ionizációt használ az elválasztáshoz. Ez kíméletesebb és különösen vizes oldatok esetében alkalmasabb elválasztási módszer. A GC/MS gyorsabb folyamat,

míg az HPLC/MS a vegyületek szélesebb körét képes elemezni.

A kémiai elemzés hatékonyságának növelése érhető el két azonos elválasztástechnikai módszer, két (vagy több) tömegspektrométer kombinációjával is. A tandem tömegspektrometria, más néven MS-MS, egy vagy több tömeganalizátort használó elemzés.

## TANDEM TÖMEGSPEKTROMETRIA MS-MS

Két tömegspektrométer kombinációja, a tandem tömegspektrometria, MS/MS, a műszeres elemzés olyan technikája, ahol két vagy több tömeganalizátort kapcsolnak össze, hogy fokozzák kémiai minták elemzésének minőségét. Különösen összetett nagymolekulák, biomolekulák, például fehérjék és peptidok analízisére alkalmas technika.

Az első tömegspektrométer MS<sub>1</sub> ionizálja majd elválasztja, tömeg/töltés arányuk alapján a minta molekulaionjait, majd ezekből kiválasztva a vizsgálni kívánt m/z arányúakat, ezt követően a második MS<sub>2</sub> ütközéssel, ion-molekula reakciókkal vagy fotodisszociációval tovább fragmentálja a kiválasztott molekulaionokat, majd a tömeganalizátora a fragmenseket m/z arányuk szerint elválasztja egymástól, és detektálja azokat. A fragmentációs lépés lehetővé teszi a nagyon hasonló m/z arányú ionok azonosítását, szétválasztását és kémiai szerkezetük meghatározását is.

Pálinkás Gábor

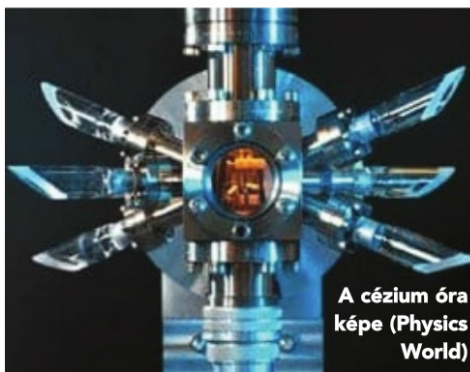
## IRODALOM

Mass spectrometry – Chemistry LibreTexts  
Mass Spectrometry: Basics (scripps.edu)  
Kvalitatív tömegspektrometria  
(<https://www2.sci.u-szeged.hu/inorg/MOMA/ch07s01.html>)  
Csonka Gábor A tömegspektrometria alapjai  
(<http://web.inc.bme.hu/csonka/csg/oktat/tomegsp.doc>)  
Mátyási Judit, Dr. Balla József,  
Tömegspektrometria (MS)  
J. Schneider et al. Atmos.Chem. Phys., 11, 11415–11429, (2011)



# Optikai órák

1955-ben Louis Essen megalkotta az első cézium atomórát az Egyesült Királyság Nemzeti Fizikai Intézetében (National Physical Laboratory, NPL) és ezzel elindította az idő mérését atomórák alapján [1]. Mindaddig a másodpercet (szekundum) a Föld forgásából származtatták, de ennek értéke ingadozott, ahogy az időmérés technikája fejlődött. Essen megmutatta, hogy a diszkrét energiaszintekkel rendelkező atomok segítségével sokkal stabilabb időintervallum áll rendelkezésre.



A cézium óra képe (Physics World)

A cézium-133 atomok spektrumát  $\sim 9,2 \times 10^9$  Hz frekvenciájú mikrohullámú sugárzás környezetében vizsgálták. Megállapították, hogy a  $9\,192\,631\,770$  Hz frekvenciájú foton energiája megegyezik a cézium atomok két szomszédos energiaszintje közötti átmenet energiájával. Az abszorpció által generált jelet a mikrohullám forrására vezették vissza és megállították a mikrohullámú sugárzás frekvenciájának változását. A mikrohullám forrásának az atomok által okozott stabilitása engedi meg, hogy a szekundumot úgy határozzuk meg, mint a cézium atom két energiaszintje közötti

átmenet ideje megszorozva  $9\,192\,631\,770$  -nel. Ezen az alapon működik a Világóra (Coordinated Universal Time, UTC).

1967-ben a Súlyok és Mértékek Nemzetközi Bizottsága (CGPM) 13. ülésén a szekundumot a fentieknek megfelelően definiálta, mint a cézium-133 atom alapállapotában két diszkrét energiaszint közötti átmenet időtartamának  $9\,192\,631\,770$  - szerese [2].

Az optikai órák – a fentivel ellentétben – mikrohullám helyett fényt használnak. Az atomórák stabilitása egyenesen arányos az órát működtető frekvenciával és fordítva arányos az elektronátmenet energiájának szélességével. Mivel a fény frekvenciája  $\sim 10^{15}$  Hz – mintegy 100 ezerszerese a mikrohullámú sugárzásnak – az optikai órák pontossága a mikrohullámmal működő órákéval sokkal nagyobb. A fény frekvenciatartományába eső atomi-energiaátmenetek mérése azonban sokkal nehezebb, mint egy spektrum felvétele, ezért az első atomórák működtetése bonyolult műszerezettséget – rögzített frekvenciájú lézerek sorozatát – és nagyszámú személyzetet igényelt [3]. A problémát az optikai frekvencia fésű (optical frequency comb, OFC) kifejlesztése oldotta meg [4]. Az OFC képes az atomi energiátmenet frekvenciájának megjelenítésére  $1/10^{18}$  pontossággal.

Az optikai óráknak számos potenciális alkalmazása lehetséges, pl. pontosabb meghatározások GPS méréseknél, mélytengeri vizsgálatoknál, az általános relativitás alapvető tesztjeiben és a fizikai állandók méréseiben. Az optikai órák miatt lehetséges a szekundum ismételt újradefiniálása.

Valóban, a CGPM 27. ülésén 2022-ben napirendre vette a kérdést. Felismerve, hogy számos intézmény optikai frekvenciák alkalmazásával akár 100-szoros pontosságú módszereket alkalmaz, tervbe vette a szekundum újradefiniálását a 2026-ban esedékes következő, 28. konferenciáján [5].

Természetesen a cézium nem



használható optikai gerjesztés esetében.

Optikai órákhoz hidrogén, vagy jód atomokat használnak. Újabban a jód optikai frekvencia sztenderdeket űrhajózás céljára is vizsgálják (a szatellitákról jövő GPS jelek ma még a cézium óra szerint működnek). Legújabban tengeri hajózás céljára olyan jód optikai órát konstruáltak, amely a viharos tengeren 20 napon keresztül hibátlanul működött [6].

Simonyi Miklós



## OLVASNIVALÓK:

- Essen, L. & Parry, J. V. L. An atomic standard of frequency and time interval: a caesium resonator. *Nature* 176, 280 (1955).
- Szervusz kilogramm? *Kémiai Panoráma* 20, 17-18, (2018).
- (Hollberg, L., Diddams, S., Bartels, A., Fortier, T. & Kim, K. The measurement of optical frequencies. *Metrologia* 42, S105-S124, 2005).
- Tara Fortier, Esther Baumann: *Communication Physics* 2, 153. 2019: <https://doi.org/10.1038/s42005-019-0249-y>
- <https://www.bipm.org/documents/20126/64811223/Resolutions-2022.pdf/281f3160-fc56-3e63-dbf7-77b76500990f>
- Jonathan D Roslund, Arman Cingöz, Martin M. Boyd et al. Optical clocks at sea, *Nature* 628, 736-740, 2024. <https://doi.org/10.1038/s41586-024-07225-7>
- A kőbezárt idő, *Kémiai Panoráma* 18. szám (2017)

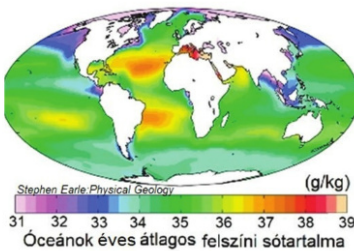
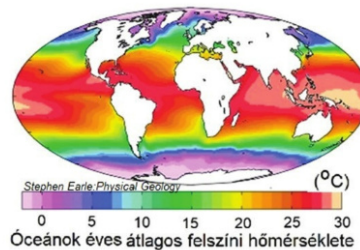
## Óceáni áramlatok

Az óceánok és a hozzájuk tartozó peremtengerek a Föld felszínének közel 71 százalékát borítják be. A szárazföld a bolygó felszínének fennmaradó 29 százalékát foglalja el. Az óceánok döntő szerepet játszanak a Föld éghajlatának szabályozásában azáltal, hogy csökkentik a légkör által elnyelt hőt. Az óceánok egyrészt termelik a szükséges oxigén 50 százalékát, másrészt elnyelik a humán eredetű szén-dioxid-kibocsátás 25 százalékát is.

A Föld éghajlata napenergiával működő rendszer. Globálisan az év során a szárazföldi felszínnek – az óceánok és a légkör – másodperenként átlagosan 240 joule napenergiát nyelnek el. Az elnyelt napfény kiváltja a fotoszintézist, elősegíti a párolgást, olvasztja a havat és a jeget, és felmelegíti a szárazföldet és óceánokat. A Nap azonban nem egyenletesen melegíti fel a Földet. Az egyenlítői régiókat jobban felmelegíti, mint a sarki régiókat. A légkör és az óceán folyamatosan kiegyenlíti a napenergia egyensúlyának hiányát a felszíni víz elpárolgása, a csapadék, a konvekció, a légköri és az óceáni áramlatok révén. A légköri és óceáni áramlatok kölcsönhatása képezik a klíma hőmotorját. A Föld hőmérséklete nem növekszik határ nélkül, mert az energia eloszlása mellett a felszín és a légkör is egyúttal hőt sugároz az űrbe.

Az óceánok vize oldott ionok, köztük nátrium, klorid, magnézium és kalcium összetett keveréke. Az ionok

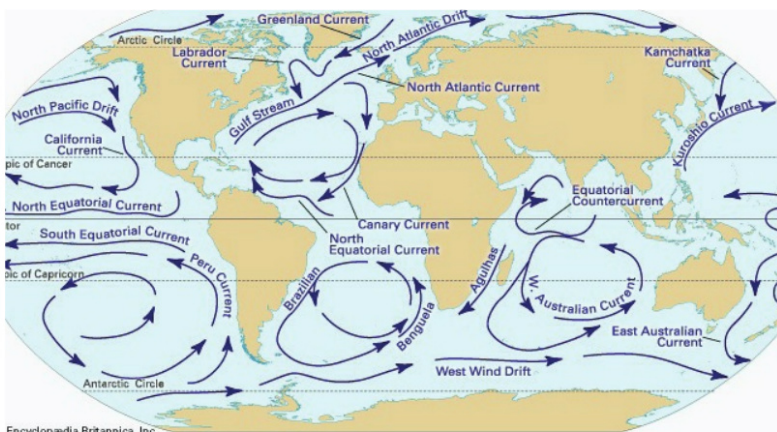
koncentrációja változik, függ elhelyezkedésétől és a víz mélységétől is. A vízben végbemenő egyik legfontosabb kémiai folyamat a hidrogénionok és karbonátionok cseréje. Ez a folyamat



szabályozza a víz pH-értékét és az oldott széndioxid koncentrációját. A tengervíz pH-ja jellemzően 8,1 körül van, ami enyhén bázikus. Ez az érték azonban számos tényezőtől függően változhat, beleértve a hőmérsékletet, a sótartalmat és az oldott gázok, például a szén-dioxid koncentrációját. Az óceán savasodása jelentős hatással lehet a tengeri élőlényekre, különösen azokra, amelyek karbonátionokra van szükségük héjuk vagy csontvázuk felépítéséhez.

Az óceán vize mozgásban van, mozog a víz a felszínén és a mélyén is. Áramlatai hatással vannak a globális éghajlatra, a helyi ökoszisztémára és az élővilágra. A szelek, a vízhőmérséklet, a sótartalom és az árapály, mind mozgatják az óceáni felszíni áramlatokat. Ezeket az áramlatokat a légkör tartós szélrendszerei (például a passzátok, a nyugati szelek öve) tartják fenn. A part menti és a tengerfenék jellemzői befolyásolják elhelyezkedésüket, irányukat és sebességüket.

Az Atlanti-óceán és a Csendes-óceán északi és déli medencéiben, valamint az Indiai-óceán déli medencéjében, hatalmas örvénylő áramkörök alakulnak ki. Az északi féltekén ezek az áramutató járásával megegyező jobbforgásúak, a délin pedig azzal ellentétes, balforgásúak. (A Föld forgásából eredő Coriolis-erő horizontális komponense, az északi



Encyclopædia Britannica, Inc.

féltekén minden mozgást jobbra térít el, a déli féltekén pedig balra). A felszíni áramlatok a különböző földrajzi helyeken nevet is kaptak. Ezek közül talán a legismertebb a Golf-áramlat (*Atlantic Meridional Overturning Circulation, AMOC*), amely Észak-Amerika és Európa éghajlatát is befolyásolja.

A mélyvízi áramlatokat a vízhőmérséklet és a sótartalom változékonyságából adódó sűrűség-különbségek okozzák. A mélyvízi áramlatok tömegesebbek, de lassabban mozognak, mint a felszíni áramlatok. A víz alatti áramlatok globális szinten keverik az óceáni vizeit. Ezeket az óceáni áramlatokat termohalin keringésnek nevezik.

A hideg régiókban, például az Atlanti-óceán északi részén, Izland szomszédságában a délről északfelé mozgó Golf-áramlat hőt ad le a légkörbe, lehűl és sűrű lesz. Az Atlanti-óceán felszínéről évente sokkal több víz párolog el, mint amennyi csapadék behullik. Sűrű-hideg-sós víz lesüllyed az óceán fenekére s ott megkezdje lassú útját dél felé. A süllyedő víz helyére, újabb hideg és sós felszíni víz folyik be.

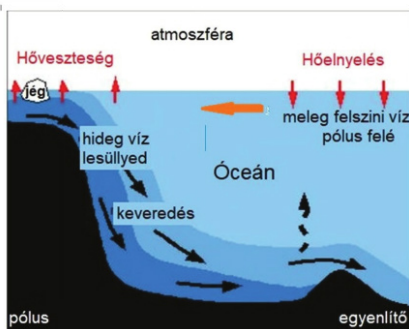
A 30. déli-szélesség táján, a dél felé

## MI LESZ VELED, GOLF-ÁRAMLAT?

A globális klímaváltozás hatással van a Golf-áramlatra is, sebessége lassan csökken. A lassulás abból adódik, hogy a felmelegedés következtében egyre intenzívebben olvadó jégtakaró hígítja a víz sótartalmát, ezért a víz alábukása egyre gyengül. Több tanulmány szerint, amennyiben az Atlanti-óceán melegvíz utánpótlása megakadna, az Észak-atlanti medence környezetében az éves középhőmérséklet 5-10 °C-kal süllyedne. A változást nemcsak Kanada keleti fele és Grönland érezné meg, hanem Nyugat-Európa nagy része is. A tanulmányok következtetéseivel kapcsolatban jelenleg vita folyik az irodalomban.

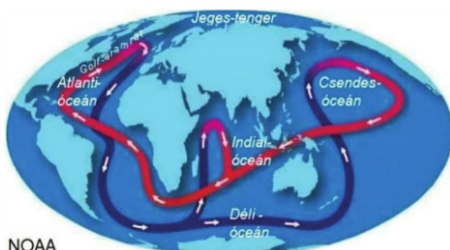
diffundáló mélyvíz belejut a Déli-sarkvidék körüli viszonylag gyors nyugati áramlásba. Ezt nevezik Délsarki cirkumpoláris áramlásnak. A szalag itt kétféle válik. Egyik ága észak-kelet irányba, az Indiai-óceán felé fordul. A másik elérve a Csendes-óceánt, Ausztráliát megkerülve tart észak felé. Az első ág vize az Indiai-óceánban, míg a másik ága a Csendes-óceánban az egyenlítőtől északra emelkedik a felszínre. Az Atlanti-óceán és az Indiai-óceán felszíni vizei átlagosan 1g/kg-mal sósabbak a Csendes-óceánénál, a sarkok felé pedig ez a különbség eléri a 2-3 g/kg-ot is.

A felszínre emelkedett víz felmelegszik nyugatra áramlik, és az Atlanti-óceánban csatlakozik a Golf-áramlatba. Létrejön a



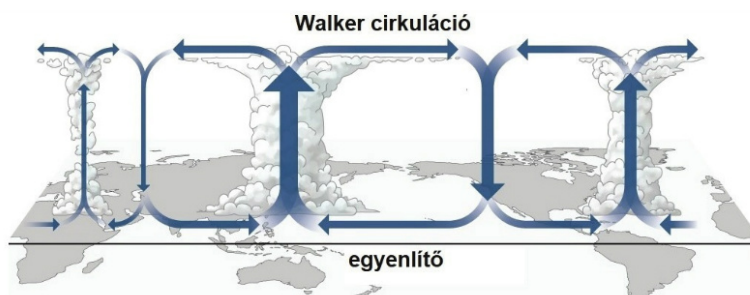
Termohalin cirkuláció

Míg a légköri cirkulációt a szél hozza létre, addig a mélyvízi keringést a sűrűségkülönbségek hajtják



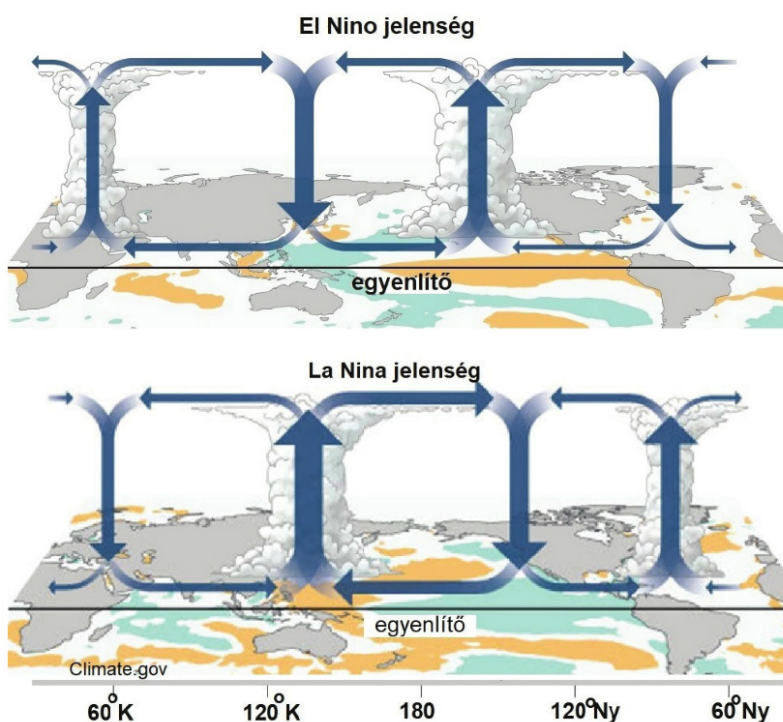
NOAA

Globális oceáni szállítószalag  
 meleg felszíni áramlat hideg, sós mélyáramlat



A Walker cirkuláció eredménye például, hogy az egymástól 8000 km távolságban fekvő Darwin (Ausztrália (-12.5: 130.8) és Tahiti (Polinézia (-17.65: -149,42) időjárása összefügg. Ha Darwinban csökken a légnyomás, akkor Tahitit éppen ellenkezőleg, emelkedni fog és ez fordítva is igaz.

# ÖRVÉNYLŐ ÁRAMKÖRÖK



globális óceáni szállítószalag. A szállítószalagot az a sötöbbség hajtja, amelyet a Golf-áramlatból elpárolgó víz hagy maga után. Az Izland környékén mélyvízbe lesüllyedő nagy sötét, sűrű hideg víz a motorja a Föld körül keringő hőt, széndioxidot és tápanyagot szállító globális szállítószalagnak. Emiatt a Golf-áramlatnak döntő szerepe van az Atlanti-óceán áramlatainak mozgatásában és Nyugat-Európa időjárásának meghatározásában is.

A globális szállítószalag előző oldalon lévő ábrája a jelenség egyszerűsített képe. A valóság részleteiben ennél sokkal összetettebb. Például a mélyvíz egy része kismértékben már a Déli-sarkvidék szomszédságában is feltör a felszínre és az útja során felszíni melegvízű áramlatai több helyütt is kölcsönhatásba lépnek a legköri cirkulációval is. A legmarkánsabb ilyen jelenség az El Niño-Déli-Oszcilláció (ENSO), a trópusi Csendes-óceán felszíni hőmérséklet-ingadozásainak jelensége. (Az ENSO az El Niño/Southern Oscillation rövidítése). A déli oszcillációt

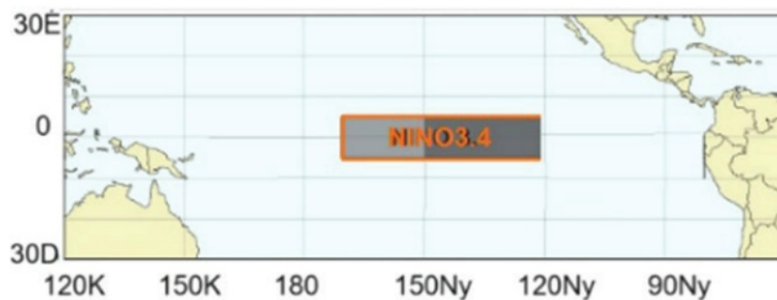
elsősorban az óceán és a légkör áramlatai közötti kölcsönhatások okozzák a trópusi csendes-óceáni térségben. Nevezetesen a Csendes-óceán egyenlítő környéki trópusi meleg vízfelszíne és a trópusi Csendes-óceánon keletről nyugatra fújó passzátszelek hatnak kölcsön egymással.

Az ENSO időszakosan ismétlődő

természeti jelenség, amely a trópusi Csendes-óceánban fordul elő, és amely körülbelül 3-7 éves ciklusokban a felszíni vizek hőmérsékletének változását jelenti. Ez a változás a normálhoz képest 1-3 Celsius fokos melegedést vagy hűlést jelent. Az ENSO az óceán hőmérsékletének és sótartalmának változtatásával hatással van az óceáni szállítószalag keringésére, befolyásolva ezzel a globális éghajlati változékonyságot. De hatással van a Walker-légáramlatra is, (más néven Walker-cella), amely egy markáns hurkolt légáramlás a trópusi alsó légkörben, a troposzférában, zonális (kelet-nyugati) és függőleges irányban egyaránt. A cirkuláció a Csendes-óceán keleti részén fennálló magas nyomású rendszer és Indonézia feletti alacsonynyomású rendszer közötti fennálló nyomásgradiens következménye.

## AZ EL NIÑO-DÉLI-OSZCILLÁCIÓ

Az ENSO (El Niño – Déli Oszcilláció) **időszakosan ismétlődő természeti jelenség**, amely a trópusi Csendes-óceánban fordul elő, s amely körülbelül 3-7 éves ciklusokban a felszíni vizek hőmérsékletének ingadozását jelenti. Az ingadozás a normálhoz (átlaghoz) képest 1-3 Celsius fokos melegedést vagy hűlést jelent. Oszcillál oda-vissza az átlagosnál melegebb El Niño



**Az El Niño 3,4 index az átlagos tengerfelszíni hőmérsékleti anomáliát méri, a Csendes-óceán északi szélesség 5°-tól a déli szélesség 5°-ig és a nyugati hosszúság 120°-tól a nyugati hosszúság 170°-ig terjedő egyenlítői régióban. Ha a Niño 3.4 index értéke +0,5°C vagy ennél nagyobb, akkor a Déli-oszcilláció El Niño fázisban van. Hasonlóképpen, ha az index -0,5°C vagy ez alatt van, akkor az oszcilláció La Niña fázisban van.**





és az átlagosnál hidegebb La Niña fázisok között. Az El Niño jellemzően 9-12 hónapig tart, míg a La Niña 1-3 évig is fennmaradhat, gyakran két telet átölelve. Mindkét fázis akkor tetőzik, mikor az északi féltekén tél van (dec-feb), majd nyáron gyengülnek.

A trópusi Csendes-óceán döntő szerepet játszik a jelenség kialakulásában. Az Egyenlítő közelében hatalmas meleg vízi terület található, amelyet meleg medencének neveznek. A passzátszelek, amelyek keletről nyugatra fújnak a trópusi Csendes-óceánon keresztül, a meleg felszíni vizeket a Csendes-óceán nyugati része felé tolják. Mivel ezek a meleg vizek Indonézia és a Csendes-óceán nyugati részének közelében felhalmozódnak, tengerszinti nyomáskülönbséget okoznak a medence keleti és nyugati része között.

Az oceán felszín: El Niño idején a passzátszelek gyengülnek, így a meleg víz visszaáramlik kelet felé a Csendes-óceánon keresztül. Ez a tengerfelszíni hőmérséklet felmelegedéséhez vezet a Csendes-óceán középső és keleti trópusi részén. Ezzel szemben La Niña idején, a passzátszelek megerősödnek, és a meleg vizet még messzebbre tolják nyugat felé. A Csendes-óceán középső és keleti részén az oceánfelszín az átlagosnál hűvösebb lesz.

A légköri válasz: Az oceánfelszín felmelegedése vagy lehűlése hatással van



a légköri keringésre. Az El Niño alatt a melegebb vizek konvekciót (felszálló levegőt) okoznak a Csendes-óceán középső és keleti részén. Ez a Walker-keringés eltolódásához vezet, ami alacsony nyomást eredményez a Csendes-óceán keleti részén (Tahiti közelében), és magas nyomást a Csendes-óceán nyugati részén (Ausztrália, Darwin közelében).

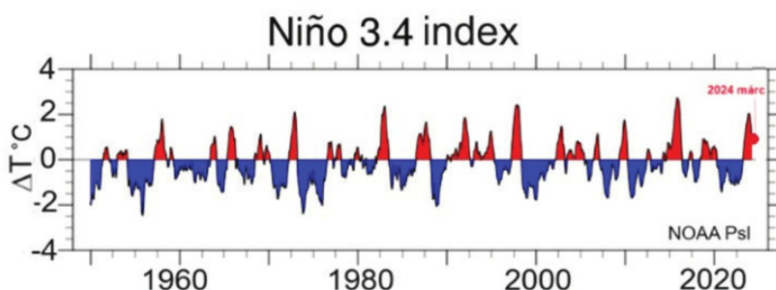
La Niña alatt a hűvösebb oceánfelszín elnyomja a konvekciót a Csendes-óceán középső és keleti részén. A Walker-keringés megfordul, magas nyomást hoz létre a Csendes-óceán keleti részén, alacsony nyomást a Csendes-óceán nyugati részén.

## A GLOBÁLIS HATÁS:

A déli oszcilláció világszerte befolyásolja az időjárási mintákat. Az El Niño csapadékosabb körülményeket hoz létre az Egyesült Államok nyugati részében, szárazságot Ausztráliában, és megváltozott monszunokat Ázsiában. A La Niña gyakran megnövekedett hurrikán tevékenységhez vezet az Atlanti-óceánon és szárazabb körülményekhez Dél-Amerika egyes részein.

Az egyenlítői Csendes-óceán felszíni hőmérséklet fluktuációjának nyomon követése céljából, az átlagos hőmérséklettől való eltérés (hőmérsékleti anomália) jellemzésére több indexet is bevezettek. Egy gyakran használt index az El Niño 3.4 index.

Bella József



Az ábra 1950- és 2024 április közötti déli-oszcillációt jellemzi a Niño 3.4 index feltüntetésével. Az El Niño jelentősen gyengült az év áprilisban. Folyik a semleges állapotok felé való átállás. ~70% az a La Niña várhatóan július-szeptemberre kifejlődik.

A déli oszcilláció az oceáni felszíni hőmérséklet és a légköri folyamatok dinamikus kölcsönhatásának eredménye, amely globális szinten befolyásolja az oceáni felszíni áramlatokat és ezzel az éghajlat változékonyságát is.



## IRODALOM:

Czelnai Rudolf, 1999 Vince Kiadó, A Világóceán  
Bella József, Kémiai Panoráma 25.szám (2022)

NOAA's National Ocean Service  
<https://oceanservice.noaa.gov/facts/conveyor.html>  
Thermohaline Circulation - NOAA's National Ocean Service  
<https://oceanservice.noaa.gov>  
The Walker Circulation  
[www.climate.gov/](http://www.climate.gov/)

# A pentacénszintézis

Vegyészi oklevélem megszerzése után 1958-tól három évet dolgoztam az ELTE Bruckner Győző professzor vezette Szerves Kémiai Tanszékén, mint gyakornok. Az itt eltöltött három esztendő feledhetetlenül szép időszaka volt életemnek. Külön hálás vagyok a Sorsnak, amiért megajándékozott azzal a két csodálatos hónappal, amikor egy laboratóriumban dolgozhattam a Proffal, asszisztálhattam munkájához a pentacén szintézis kidolgozásában. Így egészen kivételesen szerencsés embernek érzem magam, amiért, bár csak rövid időre, de ilyen közel kerülhettem Hozzá. Akik Őt közelről ismerték, megértik, mit jelenthetett számomra ez a két hónap!

## TOMASZ JENŐRE EMLEKEZÜNK (1935-2024)

1958-ban diplomázott az ELTE vegyész szakán. Pályáját a Szerves Kémiai Intézetben kezdte gyakornokként, amiről a Pentacénszintézis története című írásában számolt be (Kémiai Panoráma 17, 14-18, 2017). Kutatói pályája a Szegedi Biológiai Központban teljesedett ki, ahol a Nukleotidkémiai Csoportot vezette. Innen indult el Karikó Katalin küzdelmes pályafutása a

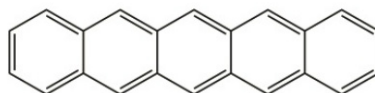


2023. évi Orvosi Nobel-díjig. Tomasz 10 évet töltött az Egyesült Államokban, amelynek során a nukleotidkémia világszerte ismert, kimagasló művelőinek a meghívására összesen tizenkét egyetemen számolt be a Szegeden végzett munkáiról. 1996-ban hazatérését követően nyugdíjba vonult. Néhány évig a Kémiai Kutatóközpontban dolgozott még a nukleotidkémiai kutatások tanácsadójaként, majd szakmai pályája kényszerűen véget ért. A Természet Világa és a Magyar Kémikusok Lapja hasábjain szeretettel méltatta pályatársait (Bruckner Győző, Kajtár Márton, Kucsman Árpád, Straub F. Brúnó). 2020-tól kezdve egészsége megromlott, 2024. április 25-én meghalt.

A pentacén szintézis kidolgozásában a Prof megkérdőjelezhetetlenül fontos szerepet játszott annak ellenére, hogy Ő akkor már hosszú évek óta tankönyvének írásával foglalkozott, a laboratóriumokba csak látogatni járt, dolgozni sosem. A pentacén szintézissel kapcsolatos történések mégis utólagos szépítés nélküli bepillantást engednek a laikus ember által gyakorta indokolatlanul csodált kutatómunkába, és felhívják a figyelmet arra, hogy a kutatásban milyen fontos szerepet kaphatnak a véletlenek.

1959-ben a Szerves Kémiai Tanszék a REANAL Finomvegyszergyártól néhány nagy értékű organikus vegyület, többek között 100 g pentacén elkészítésére kapott megbízást.

A Bruckner-tanszék szelleme abszolút demokratikus volt. A tanszékvezetőtől a legfiatalabb gyakornokig mindenki egyformán részesedett az ipari munkák bevételéből, és a laboratóriumi asszisztencia is szépen keresett. Ha emlékezem nem csal, a tanszemélyzet minden tagja fejenként kb. 24,000 Ft-ot keresett ezen az ipari munkán, ami 1959-ben igencsak szép pénz volt. A segédszemélyzet – laboránsok, takarítónők – tanszék által javasolt mértékű jutalmazását a kari KK-bizottság nem hagyta jóvá, sokallta. Ezért a nekik szánt



Pentacén



Bruckner Győző  
vegyész  
1900-1980

pénzt részben mi vettük fel, és zsebből fizettük ki őket. Ugyanakkor az is természetes volt, hogy mindenki legjobb tudása szerint, maximálisan kiveszi részét a könnyűnek egyáltalán nem ígérkező munkákból. Kivétel volt Müller Sándor professzor, ahogyan mindnyájan hívtuk, Epus, aki nem vett részt a REANAL-os munkákban, és gyanítom Kovács Kálmán docens sem, viszont a fizetésből hozzánk hasonló mértékben részesültek. Bruckner professzor úr a pentacén szintéziséért felelős csoporthoz csatlakozott, melynek későbbi felesége, Adrienn, akkor még Karczag Ivánné és Mészáros Miomír (Mió), Körmendy Károly és jómagam voltunk tagjai. Sajnos már csak egyedül én vagyok életben. Azért csatlakozott ehhez a csoporthoz, mert 100 g pentacén elkészítése

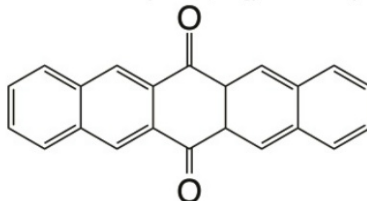


# története

volt a megoldandók közül az egyik legproblematisabb feladat. Egy esetleges kudarc pedig még a tanszék presztízsét is megnyírálhatta volna.

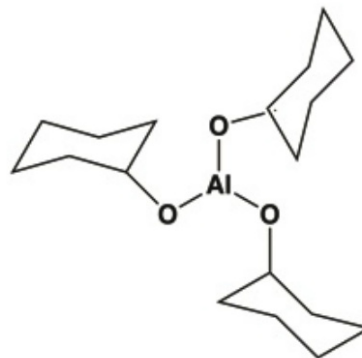
A Prof ténylegesen csak akkor csatlakozott a pentacén-teamhez, amikor – elsősorban Mióval folytatott több hónapos kísérleti munkánk eredményeképpen – egyre nyilvánvalóbbá vált, hogy 100 g anyagot az ismert eljárások egyikével sem tudunk elkészíteni. Hogy milyen eljárásokat próbáltunk ki, nem tudom már. Csupán néhány kép él emlékezetemben. Az egyik, amikor a B. épületben, a II. emeleten, a teraszról nyíló vegyifülkében Mióval és laboránsunkkal, Vinczellér Lajos bácsival több, mint egy mázsa nátriummalgámat készítettünk. Lajos bácsi makkacukor nagyságú darabokra szelte a nátriumot. A fémdarabkákat Mió felszúrta egy általa üvegrúdból erre a célra készített tűre. A tűt átadta nekem, én pedig higany alá nyomtam a nátriumot. Néha percekre elvesztettük a hallásunkat olyan vehemens csattanások kísérték a két fém egyesülését. Mire az amalgámkészítést befejeztük, Lajos bácsi balkezén a mutatóujj szabályosan átlukadt. Egyre kilátástalanabbnak látszó kísérleteink hatására Adrienn elkezdett aggályoskodni, mint később kiderült, teljes joggal, vajon határidőre el tudunk-e készülni az anyaggal? Én Miót védve alaposan összeveszttem vele. Komolyan persze nem veszekedtünk, mindössze egy jót ordítottunk egymással. Ma is magam előtt látom Kucsman Árpád döbbsé arcát, ahogy figyelte hangos szóváltásunkat. Adrienn nyilván elmondta a Profnak aggályait, és gondolom ennek volt tulajdonítható, hogy ezután már ő is bekapcsolódott a kísérleti munkába. Addigra már kiizzadtunk kevés dihidropentacént. Ennek magas hőfokon és vákuumban rézporral kiváltott dehidrogénezése vezetett volna a vágyott pentacénhez, mely az adott körülmények között kiszublimált volna a reakcióelegyből.

Elég reménytelennek látszott ezen az úton összekotorni 100 g pentacént. Ennek ellenére a Prof a kísérlet előtt azt latolgatta, hogy ha nem megy másként, mindenkit kötelezni fog egy-egy szublimációs kísérlet elvégzésére. Ballépésem, amit ennél a vákuum szublimációnál elköttem, a mai napig éles emlék maradt. Alkalmos vákuumszivattyút csak abban a laborban volt, ahol Mióval dolgoztunk, így itt raktuk össze a szublimáló berendezést. Az én dolgom lett volna a szivattyút előtt lévő csap kinyitása, a rendszer vákuum alá helyezése. Igen óvatosan elforgattam a csapot. A Prof kétszer is megkérdezte: - „Ráadtad a vákuumot?” - „Igen” - feleltem. - „No, akkor menjünk teázni” - mondta, és áttentünk a szomszédos Prof-laborba elfogyasztani a szokásos délutáni teát. Amikor tíz-húsz perc múlva visszamentem megnézni, mi történt, meglepetéssel tapasztaltam, hogy az edény, ahová vártuk a pentacén állítólagos szép, mélykék kristályait, üres volt, a rézporral összekevert dihidropentacén viszont megfeketedett, elszínesedett. Pillanatok alatt rádöbbsentem, mi történt. Elfelejtettem, hogy – a szivattyút



**Pentacén-6-13-kinon**

védendő – Mióval mi két csapat építettünk a rendszerbe, én viszont csak az egyiket nyitottam ki! Rettenően restelltem baklövésemet. Jellemző Bruckner Győzőre, ahelyett, hogy letolt volna figyelmetlenségemért, még ő vígasztalt. Később megtanultam, hogy minden rosszban van valami jó, csak meg kell találnunk. Így ma már azt gondolom, talán ügyetlenségem némi katalizátorként hatott



**Aluminium-ciklohexanolát**

a Profra, amikor eldöntötte, hogy teljesen új eljárást kell kidolgoznunk a pentacén előállítására. Az új eljárás megtalálásában fontos szerephez jutott egy keményfedeles, vastag fűzet. Ebbe a fűzetbe írtam össze a pentacénre vonatkozó adatokat, melyeket a szakirodalomban találtam. Többek között feljegyeztem a könnyen elkészíthető pentacén-6,13-kinont. Arra természetesen nem gondoltam, hogy ez a vegyület szintézisünk alkalmas kiindulási anyaga lehet. Csak, mint érdekes pentacén származékot regisztráltam. A Prof döntését követően Adriennek előrukkoltam a fűzetemmel. - „Adja csak ide, szombaton úgyszintén jön hozzám a Prof, majd megmutatom neki, és akkor nyugodtam át tudja nézni” - mondta Adrienn.

„Hát megvan, a kinonból fogjuk megcsinálni a pentacént!” - lelkesedett hétfőn reggel a Prof, amikor találkoztunk. „De hát, hogyan?” - kérdeztem. - „Egy kinont csak át tudunk alakítani szénhidrogénné” - hangzott a megnyugtató válasz.

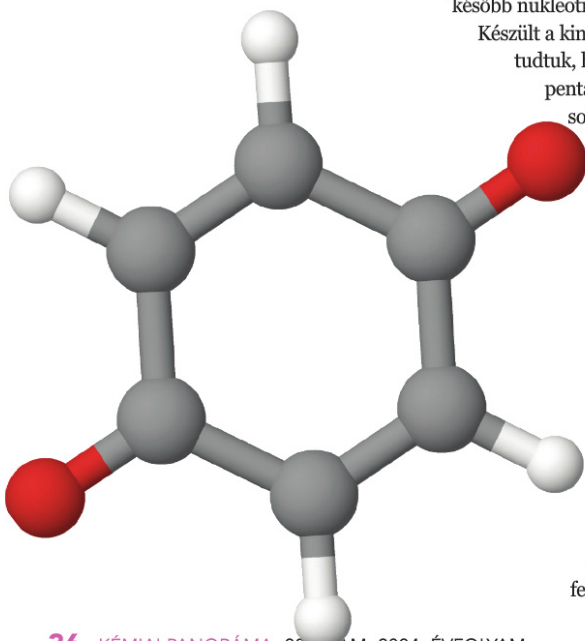
Mindenesetre nekiláttunk a kinon szintézisének. A kinon szintéziséhez szükséges vegyületek közül két anyagot úgy tűnt - nem tudunk időben beszerezni. *Bruckner* professzor úr ekkor tanszékvezetőből anyagbeszerzővé



1,4-benzokinin

„avanzsált”. Ennek eredményeképpen néhány óra múlva megjelent *Lévai Július* barátunk és a Szerves Vegyipari Kutatóintézetből meghozta a kinonszintézis egyik kiindulási anyagát, az o-xilolt. Amikor eldöntöttük, hogy a redukción alumínium-ciklohexanoláttal fogjuk végrehajtani a Prof közbenjárása után már másnap elmehettünk a Fémipari Kutatóintézetbe, ahonnét annyi négykilences tisztaságú alumíniumot bocsátottak rendelkezésünkre, amennyi – mint később kiderült – akár 1 kg pentacén előállításához is elegendő lett volna.

Időközben *Kucsman Árpád*, akinek melleleg semmi köze nem volt a pentacén szintéziséhez, megtalálta a legegyszerűbb eljárást a kinonszintézis egyik alapanyagának előállítására. Mindezt csak

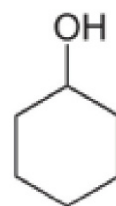


azért említem, hogy érzékeltessem, mennyire egymást segítve dolgoztunk akkoriban a Bruckner-intézetben.

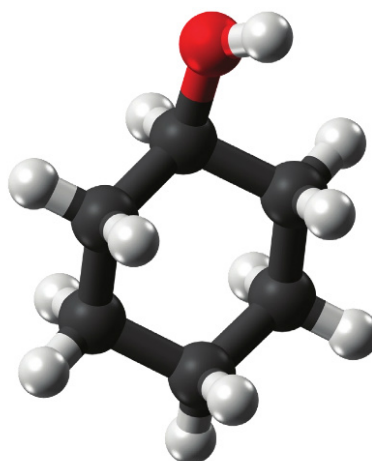
Minden feltétel adva volt tehát, hogy nekilássunk a szintézisnek. Néhány hét intenzív laboratóriumi munka után kezünkben volt a kinon.

Ezekben a laboratóriumi munkákban a Prof nem vett részt. Nem emlékszem már, négyünk közül ki, melyik lépést csinálta. Az o-xilol oldallánc bromozását én végeztem a hallgató labor ablakában. Kitűnő ultraibolya fénykatalizátorként működött az ablakba tűző nyári nap. A gázkivezető csövet nemes egyszerűséggel kihajlítottam az ablakon. A kiáramló gőzök gyönyörű vörösre színezték az épület frissen festett élénksárga falát. Erről akkor szereztem tudomást, amikor az intézetbe érkező Adrienn és a Prof felkiabáltak a Trefort-kertből figyelmeztetve lustaságom következményeire. A kinon közvetlen prekursorait csak össze kellett önteni szobahőfokon, ez egy igen egyszerű reakció volt. Az anyag 140-szeres dimetilformamidból történő átkristályosítása azonban mindig megizzasztott. Ez volt első személyes találkozásom a dimetilformamiddal, ezzel a kiváló oldószerrel, melyről akkor még nem sejtettem, milyen fontos szerephez jut később nukleotidkémiai kutatásaimban.

Készült a kinon, de még mindig nem tudtuk, hogyan fogjuk az anyagot pentacénné átalakítani. A sok-sok munkától fáradtan egyik este betámolyogtam a könyvtárba. Találomra levettem a frissen érkezett folyóiratok polcáról az *Indian Journal of Chemistry* utolsó számát. Ezt a folyóiratot korábban sosem néztem meg. Inkább csak pihenésből, unottan, érdektelenül lapozgattam. Egyszer csak megakadt a szemem egy képletsoron, mely többek között felvázolta egy elég bonyolult



ciklohexanol



szerkezetű kinon szénhidrogénné történő redukción alumínium-ciklohexanoláttal. Mindjárt elmúlt a fáradtságom. Azonnal megkerestem az eljárást, melyre a cikkben hivatkozás történt, s mely az antrakinon antracénné történő átalakítását írta le. Másnap jelenthettem a Profnak, hogy valószínűleg kezünkben van a módszer, amivel a kinont pentacénné tudjuk redukálni.

Így a kinon redukción alumínium-ciklohexanoláttal valóban sikerült megvalósítanunk. Az alumínium-ciklohexanolát képződése igen vehemens, exoterm reakció, olyannyira, hogy amikor kis léptékben először kipróbáltam, az egész reakcióelegy pillanatok alatt a Dimroth hűtőben jojózott. Szerencsére, volt helye ott bőven. Emlékszem, ezt az első kisléptékű sarzsot, 2 g kinonból kiindulva, késő este indítottam el a 6-os laborban. Már mindenki hazament, csak Szondi Tamás volt még benn. A sárga kinonnak az alumínátoldatban való feloldódását

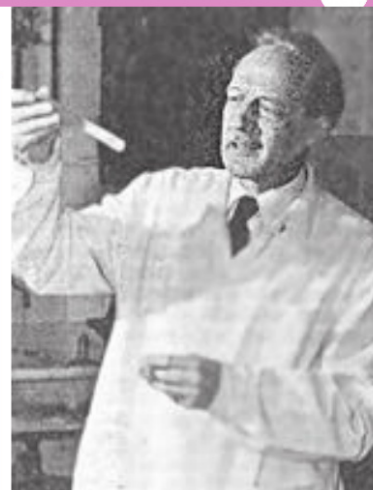


követően néhány perc múlva liláskék lett a reakcióelegy. Tamás még mondta, nini már itt is a pentacén. Miután 48 óras főzést írt elő a recept, én ezt nem akartam elhinni. Pedig Tamásnak igaza volt. Az előírt két nap elteltével valóban gyönyörködhattunk a lombik alján összegyűlt mélykék pentacén kristályokban. Úgy tűnt, semmi egyebet nem kell tennünk, mint kiszűrni az anyagot. A Proffal és Mióval neki is láttunk. A vizskózus oldatot nagyon nehéz volt szűrni, de kis térfogata miatt valahogy végül is sikerült. A Prof az esetleges anorganikus szennyezéseket eltávolítandó sósavat kért, hogy átmossa a csapadékot. Kérését teljesítve ráöntöttem a szűrőre a sósavat. „Mit csinálsz?” – kiáltott rám a Prof, amikor meglátta az üvegen a címkét: 6N HCl. Látván, hogy a pentacén rá se hederít az erős savra, megnyugodott, és ismét megjelent arcán a jól ismert kedves, barátságos és megnyugtató mosoly. Nem így az első nagyléptékű sarzsnál. Gyakorlatlanságom nem számolt azzal a ténnyel, hogy több liter folyadék nem fér el egy Dimroth-hűtőben. *Bruckner* professzor úr hiába kért, kezdjem már hűteni a forrásnak induló reakcióelegyet, én makacsul hajtogattam: „ez még semmi, professzor úr kérem, ez még semmi!” Egészen addig, míg gázbevezető, kalcium-kloridos cső szanaszét nem repült, s a hűtőn és a lombik tubusain át nem kezdett kifelé zúdulni a forró ciklohexanol.

Akkor persze már nyomtam a jeges-vizes fürdőt a lombik alá. Mindez a 6-os laborban meglehetősen nagy nézőközönség előtt történt. Nemcsak a Prof, Adrienn, Árpád és én voltunk ott, hanem rajtunk kívül még néhány, a laborban valamiféle javítást végző szerelő is, akik abbahagyván munkájukat érdeklődve figyelték, mi a csuda lehet az a fontos kísérlet, aminek a végrehajtásában maga a professzor is részt vesz? Később Adrienn, célozva arra, hogy inkább tűrtem a kezemre folyó forró ciklohexanolt, semmint elengedtem volna a jeges-vizes fürdőt, nevetve mondta: „Jenőkém, maga boldogtalan, ha hetente legalább egyszer nem folyik a kezére a 160°-os ciklohexanol!” Szegény professzor úr látván baklövésemet és következményeit, elkeseredésében

hazament ebédelni. Valahogy azután sikerült a reakciót megfékezni. Ennek eredményeképpen a reakcióelegy nagy része a lombikban maradt. *Bruckner* professzor úr otthonról telefonált és kérte, annak ellenére, hogy minden bizonnyal nedvességet kapott, ne öntsük ki az alkoholátoldatot, hanem használjuk fel a redukcióhoz. Amikor ezt a sarzsot feldolgoztuk meglepetéssel tapasztaltuk, hogy a pentacént nagy mennyiségű fehér anyag szennyezi, melyet sósavas mosással sehogy sem tudtunk eltávolítani. A Prof arra gondolt, hogy az alkoholát képződésnél a rendszer vizet kapott, és a fehér anyag valamiféle alumíniumhidroxid vagy oxid. Azt fontolgatta, hogy egy mozsárban sósavval eldörzsöli a fehér anyaggal szennyezett pentacént. Még szerencse, hogy mielőtt ehhez hozzákezdett volna, Mió egy Bunsen-égő fölé tartotta spatuláját, melynek egyik végét előzőleg beleforgatta a fehér anyagba. A csapadék először elszenesedett, majd nyomtalanul eltűnt, otthagya névjegyét, miszerint ő szerves anyag nem pedig valamiféle öreg alumíniumoxid. Ekkor felnéztem a reagens polcra. Az első üveg, ami a szemem elé került a dimetilformamidos üveg volt. Egy kémcsőpróba pillanatok alatt azt bizonyította, hogy a dimetilformamid kiválóan oldja az ismeretlen fehér anyagot. Valószínű, hogy azért nyúltam a dimetilformamidos üveghez, mert ebből az oldószerből kristályosítottam a kinont. Megtanultuk tehát, hogyan kell izolálni a pentacént!

Ennek az első, végül is sikeres nagy sarzsnak a tapasztalatai alapján *Bruckner* professzor úr megtervezte, mennyi kinont kell még feldolgoznunk, hogy megkapjuk a kívánt mennyiségű pentacént. A tervezésnél a Prof azt is figyelembe vette, hogy a centrifugálás során az egyik centrifugacsövet véletlenül fellökte a könyökövel, és így – véleménye szerint – az anyagnak mintegy nyolcadát elveszítettük. „Föncsuskám, hát hogy tudta fellökni a csövet?” – évődött nevetve Adrienn a Proffal. Ketten, *Mészáros Mió* és én, biztosan akartunk menni s az összes rendelkezésre álló kinont fel akartuk



használni. *Bruckner* professzor úr nem engedte, s igaza lett. Utóbb hálás voltam döntése miatt, hiszen a megmaradt kinon később elegendőnek bizonyult a reakció optimális körülményeinek megállapítására.

A pentacént a reakcióelegy centrifugálásával izoláltuk. *Bruckner* professzor úr ragaszkodott hozzá, hogy a centrifugacsövek tisztítását és szárítását személyesen végezze. Hiába kérlete laboránsunk, *Vincellér Lajos* bácsi, hadd mosogasson ő, nem hagyta. Ilyen gyönyörűségeken tisztára suvicskolt és gondosan kiszáritott üvegedényeket azóta sem láttam. Miért csinálta? – kérdezhetnénk. A válasz – úgy gondolom – egyszerű. Élvezte, szerette a laboratóriumi munkát, s jól tudta, hogy a mosogatás ennek a munkának igen fontos, egyáltalán nem lebecsülendő része.

Késő este volt, amikor elkészült ez az utolsó sarzs. *Mészáros Mióval* elhatároztuk, megtérítjük a Profot. Többnek mondtuk az üres edény súlyát, mint az a valóságban volt. Úgy tűnt tehát, hogy a 100 g pentacénból hiányzik néhány gramm. Csak amikor főnökünk arcán állandósulni láttuk a fegyelmezett szomorúságot, akkor vallottuk be turpisságunkat. Négyen voltunk a 6-osban – a Prof, Adrienn, Mió és én, – amikor először együtt láttuk a 100 g pentacént. Boldogan vonultunk át a C épületbe elmesélni a nagy újságot az Intézetben még dolgozó kollégáknak. „Vigyé talán a kicsi” – mondta Adrienn, és kezembe nyomták a nagy értéket tartalmazó

kristályosító tálat. A pentacénszintézist s különösen alumínium-ciklohexanolátos baklövésemet *Bruckner* professzor úr élete végéig szeretettel emlegette. 1975-ben írta egy levelében: „Veled kapcsolatban is meleggé válik az emlékezés, ha arra gondolkodom, milyen örömmel rottyogtattuk a ciklohexanolos lötytyöt és lestük a frissen ledöngölt pentacén súlyát.” Négy évvel később pedig egy nukleotidos munkámra reflektálva említette: „milyen enyhe körülmények alkalmazásával lehet ezeket az amidokat reakcióra készíteni, nem kell ciklohexanolos főzés, a reakcióelegy a hűtőn át nem mászik fel a plafonra.” Még azon a kötetlen beszélgetésen is emlegette, valamikor a hetvenes években, amikor a Kémikusok Egyesülete Szegedi Csoportjának meghívására pályájáról emlékezett.

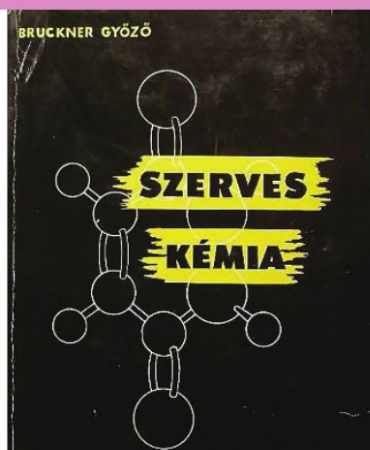
Ebben a pentacénes időszakban sokszor késő estig dolgoztunk. Délután a munkát csak az 5 óra körüli teázások szakították meg. Ha ránk esteledett, átmentünk a Múzeum kávéházba vacsorázni. Egyik kedvenc édességemet, a Gundel-palacsintát, *Bruckner* professzor úrnak köszönhetem. Ott a Múzeum kávéházban kóstoltatta meg velem először. A munka nem egyszer úgy elhúzódott, hogy mire hazaindultunk, nemcsak a C épületet, hanem a Trefort-kert kapuit is bezárták. Hogy kijuthassunk a Múzeum körútra fel kellett vernünk mély álmából *Stefán* nénit, a portást. Néha már az utolsó villamos is elment. Ilyenkor *Bruckner* professzor úr taxin vitt haza. Jól benne voltunk már a nyárban, mikorra a 100 g pentacén elkészült.



Mindnyájan megérdemelt szabadságunkra mentünk. Szeptember elején, amikor visszatértünk a tanszékre, *Bruckner* professzort a könyvtárban találtuk. Míg mi nyaraltunk, ő a rá jellemző alaposággal végigolvasta a pentacén irodalmat, és a kísérleti részt nem számítva megírt két cikket: egy előzetes közleményt a Tetrahedron Letters számára<sup>2</sup> és a szintézist részletesen leíró dolgozatot, amely azután az előzettel csaknem egy időben az Acta Chimica-ban jelent meg<sup>3</sup>.

Amikor jegyzőkönyveink alapján nekifogott a kísérleti rész megírásának, kitűnt, hogy az alkoholátkészítésben alkalmazott katalizátor, a szublimát mennyiségét nem mértük le. Megkért – emlékeink alapján – legalább hozzávetőleges állapítsuk meg, mennyi szublimátot használtunk? Természetesen megtettük de megvallom őszintén, teljesen feleslegesnek tartottuk. Mondanom sem kell, megint igaza lett. Később ugyanis kitűnt, hogy a pentacénszintézis hozama szempontjából egyáltalán nem közömbös az alkoholátképzésben használt katalizátor mennyisége.

Ősztől folytattam a pentacénes munkát. *Bruckner* professzor úr naponta megjelent a laboratóriumban, hogy tájékozódjék a kísérletek előrehaladásáról. A pentacén Diels-Alder-adduktumainak vizsgálata annyira felkeltette érdeklődését, hogy néhány napra ismét bekapcsolódott a kísérleti munkába. Nem emlékszem már, miért készítettem el a maleinanhidrides Diels-Alder-adduktumot. Az irodalomban leírt eljárást követve meglepetésemre két szabad szemmel is jól megkülönböztethető kristályos terméket kaptam. A főtermék viszonylag nagy, színtelen kristályait mechanikusan sikerült szétválasztanom a kisebb mennyiségben keletkezett halványárga apróbbaktól. Mindkét anyag elemi analízise azonos volt, és megfelelt a Diels-Alder-adduktumra számított értéknek. A Prof azonnal felismerte, hogy a 6,13 ill. az 5,14 helyzeteket áthidaló izomer adduktumokról lehet szó. Szerkezetüket kémiai úton egy újabb Diels-Alder-reakcióval akarta igazolni. Az 5,14-adduktum maleinanhidriddel bisz-



adduktumot fog képezni, a 6,13-adduktum viszont nem lép Diels-Alder-reakcióba. Nagyon sokat dolgoztam, és őszintén sajnálom, hogy ebből a munkából nem sikerült publikálható eredményeket kihoznom. Az (egyéb) eredményekből azután egy további pentacénes dolgozat született. Ez a dolgozat a pentacénszintézis optimális körülményeinek a megállapításával, és amire a dolgozat címe is utal, a termék izolálásának az egyszerűsítésével foglalkozik<sup>4</sup>.

Így korán megtanulhattam és meg is tanultam, miként lehet és kell egy ipari munkából tudományt csinálni?! A pentacénszintézis a gazdag bruckneri oeuvre-nek csupán egy kis epizódja, de még erre a munkára is ott található a hivatkozás *I. F. Fieser*: Reagents for Organic Synthesis című alapvető munkájának első kötetében.

**Tomasz Jenő**

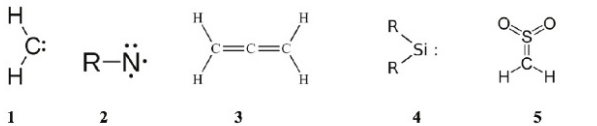


## IRODALOM

1. Egy tanítvány emlékezése *Bruckner Győző* professzor úrra, *Tomasz J. Magy. Kém. Lapja*, 2004, 59, 229.
2. Einfache Synthese des Pentacens. *Bruckner, V.; Karczag (Wilhelms), A.; Körmendy, K.; Mészáros, M.; Tomasz, J.: Tetrahedron Lett.* 1960, 5-6.
3. Einfache und ausgiebige Synthese des Pentacens. *Bruckner, V.; Karczag (Wilhelms), A.; Körmendy, K.; Mészáros, M.; Tomasz, J.: Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* 1960, 22, 443-448.
4. Weitere Vereinfachung der Pentacensynthese. *Bruckner, V.; Tomasz, J.: Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* 1961, 28, 405-408.

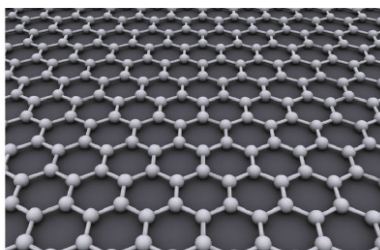


# Goldene



Ez vajon mi lehet?

Hallottunk már olyat, hogy carbene (1), nitrene (2), allene (3), silene (4), sulfene (5), amelyek mind telítetlen, nagy reakcióképességű vegyületek, ill. gyökök. Lehet az aranyak is hasonló képződménye? Vagy talán a graféntől (graphene) származik a név [1], a szén egyik allotróp modosulatától (6), amely a szénatomok atom-vastagságú hexagonális rács-szerkezete és már jelen van a grafitban? A név -ene végződése egyben arra utal, hogy a szén graphite allotrópja

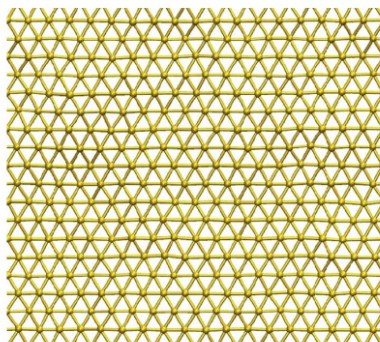


Érthető szenzációként hat tehát az atom-szélességű aranylemez előállítására [2], egy olyan nano-szerkezet, ami a természetben nem létezik.

## Goldene, a graphene aranyból készített rokona

tele van kettőskötésekkel. De ilyen képződményről még nem beszéltek fémekben, még kevésbé aranyban!

Lars Hultman és munkatársai a Linköping Egyetemen (Svédország) goldene előállításához titanium-karbid köpenyek közé szendvicsként ékelődő atom-szélességű szilíciumréteget hoztak



Atomnyi vastagságú aranylemez, az Au – Au kötések hossza ~ 3.6 Å

létre. Ezt a szilíciumréteget aranyra cserélték. A cseréről részleteket nem árulnak el, említenek diffúziót, és 650°C-on történő kezelést [3] is. Végül a képződött aranyrétegről a titanium-karbid rétegeket lemaratták 1g / 10 ml koncentrációjú kálium ferricianid (K<sub>3</sub>[Fe(CN)<sub>6</sub>]) oldattal.

A friss aranyfelület könnyen felcsavarodik, vagy összetapad, amit felületkezeléssel kell megakadályozni.

A kapott aranyréteget kétféle nézetben a következő ábrák mutatják.

A goldene alkalmazásaitól sokat várnak mind az elektronika, mind a kémiai katalízis területén.

Simonyi Miklós

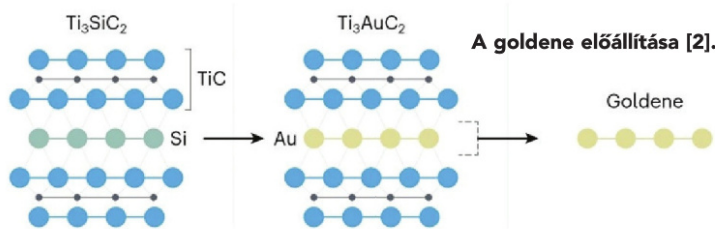


### IRODALOM:

1. 3D szerkezetek (fullerén, nanocső, grafén). *Kémiai Panoráma* 17, 25-29, 2017.

2. Shun Kashiwaya, Yuchen Shi, Lars Hultman et al. *Synthesis of goldene comprising single-atom layer gold. Nature Synthesis*, 16 April 2024, DOI <https://doi.org/10.1038/s44160-024-00518-4>

3. Fashandi, H. et al. *Synthesis of Ti<sub>3</sub>AuC<sub>2</sub>, Ti<sub>3</sub>Au<sub>2</sub>C<sub>2</sub> and Ti<sub>3</sub>IrC<sub>2</sub> by noble metal substitution reaction in Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub> for high-temperature-stable Ohmic contacts to SiC. Nat. Mater.* 16, 814–818 (2017).



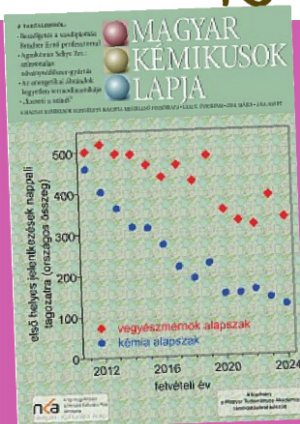
Az aranylemez vastagsága



# Magyar Kémikusok Lapja

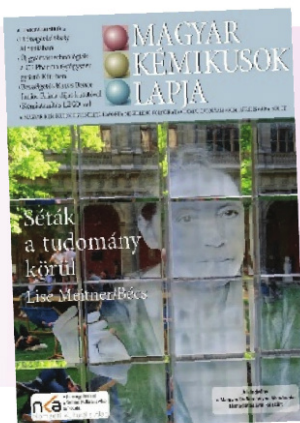
## 2024. MÁJUS

Inzelt György  
Az Arrhenius-egyenlet  
Lente Gábor rovata  
Az LHS 3844b sötét oldala  
Tiltott vegyszerek az újrahasznosított  
padlóknban  
Marszi meteoritok a mesterséges  
intelligenciában  
Az egérlányok halálos illata



## 2024. FEBRUÁR

Hargittai István  
A megfigyelés sebessége  
Kemenesi Gábor  
Karikó Katalin Nobel-díja és az mRNS-  
vakcinák üzenete  
Milen Mátyás  
A víz két pKa értéke: 14,0 és 15,7



## 2024. ÁPRILIS

Inzelt György  
Faraday törvényei. Második rész  
Szólláthné Sebestyén Zita  
A LEGO alkalmazása a kémiaoktatásban  
Új antibiotikumcsalád  
Az áfonyaszín titka  
Mesterséges enzim

## 2024. JANUÁR

Próder István  
Magyar vonatkozású kémia- és  
vegyipartörténeti évfordulók  
Lente Gábor, Szabó Rebeka  
Gyalogos tudomány az Alpok árnyékában  
Lente Gábor rovata  
Vírusölő kesztyű  
Atom-vaddisznók  
Kalcium-karbonát-határ az óceánokban

## 2024. MÁRCIUS

Inzelt György  
Faraday törvényei. Első rész  
Csupor Dezső  
Sárkány ellen sárkányfű, látás ellen  
fecskefű?  
Lente Gábor rovata  
Vesetájéki szinkérdés  
Nanoműanyag a palackos vízben  
Vesetájéki szinkérdés







# Vajon egyedül vagyunk?

Nemes László írása a Ritka Föld hipotézisről a Természet Világa áprilisi számában.

A szerző írásában azt az emberiséget régóta foglalkoztató kérdést vizsgálja, hogy vajon található-e élet a Földön kívül is? A modern időkben ezt a kérdést Enrico Fermi 1950 nyarán egy séta során tette fel barátainak Edward Tellernek, Herbert Yorknak és Emil Konopinskinak az UFO-jelenségről beszélgetve. Enrico Ferminek az volt a véleménye, hogy ha valóban vannak földönkívüli értelmes lények, azoknak a Föld hosszú geológiai története alatt már itt kellett volna járniuk, de ennek semmi nyoma nem maradt (később ez a Fermi-paradoxon nevet kapta).

A válasza az első próbálkozás Frank Drake amerikai csillagász nevéhez fűződött, aki 1960-ban egy 26 méter átmérőjű rádióteleszkóppal rádiójeleket kísérelt megfigyelni két közeli csillagrendszerből. Kéthetes megfigyeléssel sem talált földönkívüli lényeknek tulajdonítható rádiójeleket. Ez volt a SETI-projekt előfutára.

A SETI az űrből érkező jelek vételére és elemzésére összpontosít különösen a rádió és látható fény tartományában. A feladatára intézet is alakult. A SETI-ben

részt vevő kutatók feladata olyan nem véletlenszerű jelek észlelése a rádió és a látható fény tartományában, amelyeket valószínűleg technológiailag fejlett lények küldtek. szándékosan vagy véletlenül. A projekt elsődleges célja az intelligens földönkívüli élet jeleinek észlelése.

A szerző ismerteti Frank Drake csillagász valószínűségi összefüggését, az úgynevezett Drake-egyenletet, amellyel a galaxisunkban létező földönkívüli civilizációk száma becsülhető meg. Az érdeklődő számára egy applikációt is ajánl, ahol az olvasó maga is számításokat végezhet az egyenlettel.

A planetáris csillagászatban és az asztrobiológiában elterjedt Ritka Föld hipotézis szerint az élet létrejötte és az emberi intelligencia kialakulása a bolygónkon az asztrofizikai és geológiai események és körülmények igen valószínűtlen együttes megvalósulását igényelte.

A továbbiakban a szerző felsorolja azokat a Ritka Föld hipotézis gerincét alkotó körülményeket, feltételeket, amelyek szükségesek az intelligens földönkívüli élet létrejöttéhez.

1. A bolygó elhelyezkedése egy megfelelő galaxis megfelelő részében.
2. A bolygó megfelelő távolsága a megfelelő típusú csillagtól.



A SETI Intézet rádióteleszkóp-hálózata

3. A csillagot övező bolygórendszer megfelelő szerkezete.
4. A vizsgált bolygó stabilis és megfelelő alakú pályája a csillag körül.
5. A bolygó szilárd állapota és megfelelő nagysága.
6. A bolygónak legyen lemeztektonikája.
7. A bolygónak legyen nagyméretű holdja.
8. A bolygó atmoszférája legyen kedvező az élet számára.
9. A komplex életjelenségeket egyszeri vagy többszörös kiváltó okok indukálják.
10. A komplex életnek az evolúció megfelelő szakaszában kell kialakulnia.

A feltételek részletes tárgyalását követően a szerző végezetül választ ad a címben feltett kérdésre is. „A speciális és véletlenszerű körülmények sokasága indította a Ritka Föld hipotézis szerzőit arra a meggyőződésre, hogy noha a kozmoszban a bakteriális élet valószínűleg rendkívül elterjedt, azonban földönkívüli komplex és értelmes életformák megjelenése, legalább is a mi galaxisunkban rendkívül ritka. A bonyolult/értelmes élet talán csak a Földön jött létre.”

**Az érdeklődő olvasóinknak ajánljuk az érdekes kérdéssről szóló írást.  
Nemes László - TERMÉSZET VILÁGA  
160-164. oldal (2024 ÁPRILIS)**



## Kémiai Panoráma

Kiadja az HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont  
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.  
e-mail: panorama@kemiaipanorama.hu

Honlap: [www.kemiaipanorama.hu](http://www.kemiaipanorama.hu)  
Felelős kiadó és főszerkesztő: Pálinkás Gábor  
Szerkesztők: Simónyi Miklós, Gózon Ákos



Tördelés, képszerkesztés: Szarka Bernadett

The image shows a large, tilted periodic table of elements. The elements are arranged in rows and columns, with their chemical symbols and atomic numbers visible. The table is tilted at an angle, making it difficult to read the text clearly. The elements shown include H, He, Li, Be, B, C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, P, S, Cl, Ar, K, Ca, Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn, Fr, Ra, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr, and various elements in the lanthanide and actinide series.