

A TARTALOMBÓL:

- A gépi tanulás és a mesterséges intelligencia úttörői
- A mikro-RNS-ek világa
- BorsodChem: a Zöld Nagyvállalat
- Kompozitok a repülőgépgyártásban



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXXX. ÉVFOLYAM • 2025. FEBRUÁR • ÁRA: 1450 FT

Fehérjeszerkezetek a számítógépből



A kiadvány
a Magyar Tudományos
Akadémia
támogatásával készült

Labortechnika Kiállítás és Analitikai Ankét 2025 Labortech EXPO and Analytical Meeting

2025. február 11–12. / February 11–12, 2025

A **Labortechnika Kiállítás** célja, hogy lehetőséget adjon a legkorszerűbb analitikai termékek, szolgáltatások megismertetésére, kapcsolatok építésére, előadások és poszterek bemutatására.

A Kiállításához tudományos **Analitikai Ankéttal** csatlakozunk, melynek keretében az analitika korszerű fejlesztési irányjai és fontos alkalmazási területei kerülnek bemutatásra.



Az EXPO szervezője az MKE Titkárság. Az ankétot szervezi: az MKE Analitikai Szakosztálya, az MTA Analitikai és Környezeti Kémiai Tudományos Bizottsága, valamint az MKE Spektrokémiai Társasága.



Kérjük látogatóinkat, részvételi szándékukat szíveskedjenek jelezni a rendezvény honlapján történő regisztrációval.
www.analitikaexpo.mke.org.hu

**Különleges
kiegészítő program!**

**IUPAC GWB2025
– GLOBAL WOMENS'
BREAKFAST**

**ENSZ Nők és lányok
a tudományban nemzetközi nap
– 2025. február 11. 10 óra**

Előadások:

Prof. Szabados Ágnes: Száz év kvantumkémia, magyar vonatkozásokkal

Prof. Bodor Andrea: Rendezetlen fehérjék az NMR-spektroszkópiában: az atomi jellemzéstől a biológiai funkció megértéséig



Helyszín: ELTE, Gömb Aula
1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A
Nyitvatartási idő: 9.00–17.00

A látogatóknak ingyenes a belépés, de előzetes vagy helyszíni regisztrációhoz kötött.

**A csoportok érkezését, kérjük,
szíveskedjenek e-mailen bejelenteni:
beatrice.schenker@mke.org.hu**

Szeretettel várjuk látogatóinkat!



A Magyar Kémikusok Egyesületének tudományos ismeretterjesztő folyóirata és hivatalos lapja

SZERKESZTŐSÉG:

Felelős szerkesztő: LENTE GÁBOR
KISS TAMÁS örökös tb. főszerkesztő
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE

Szerkesztőbizottság:

KEGLEVICH GYÖRGY,
a szerkesztőbizottság elnöke,
BÁLINT MÁRIA, BUZÁS ILONA,
DOMBRÁDY ZSOLT, FÁBIÁN ISTVÁN,
GREINER ISTVÁN, HANCSÓK JENŐ,
KALÁSZ HUBA, KISS TAMÁS,
MERNYÁK ERZSÉBET, SKODÁNÉ
FÖLDES RITA, ifj. SZÁNTAY CSABA,
SZÉPVÖLGYI JÁNOS, TÖMPE PÉTER,
ZÉKÁNY ANDRÁS

Szerkesztők:

DOBÓ DORINA, KEGLEVICH KRISTÓF,
KERTI GÁBOR, KOVÁCS LAJOS,
NAGY GÁBOR, PAP JÓZSEF SÁNDOR

Szerkesztőségi titkár: KOCOR ERIKA

Kapják az Egyesület tagjai és a megrendelők
A szerkesztésért felel: LENTE GÁBOR

Szerkesztőség: 1106 Budapest,
Fehér út 10. (White Office)
Tel.: 36-20-214-0808
E-mail: mkl@mke.org.hu

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete
Felelős kiadó: SZABÓ JÁNOS ZOLTÁN
Nyomdai előkészítés: HORVÁTH IMRE
Nyomás: Europrinting Kft.
Felelős vezető: ENDZSEL ERNŐ
Ügyvezető igazgató

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete
Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank
10700024-24764207-51100005 sz.
számlájára „MKL” megjelöléssel
Előfizetési díj egy évre 15 950 Ft
(MKE-tagoknak: 9000 Ft)
Egy lapszám ára: 1450 Ft. Külföldön terjeszti
a Batthyany Kultur-Press Kft.,
H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.
1251 Budapest, Postafiók 30.
Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
KOCOR ERIKA

Magyar Kémikusok Egyesülete,
1106 Budapest, Fehér út 10. (White Office)
Tel.: 36-20-214-0808,
e-mail: mkl@mke.org.hu

Aktuális és archivált számaink honlapunkon
(mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541
HU ISSN 0025-0163 (nyomatott)
HU ISSN 1588-1199 (online)
DOI: 10.24364/MKL.2025.02

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



Egy tudományos havi magazin szerkesztése több szempontból is szokatlan feladat – legalább is nekem az. Ugyan nem vagyok képzett újságíró, de annyi mégis rám ragadt ebből a szakmából, hogy a hírtértéknek központi szerepe van, ezen folyamatosan rágódní kell a tartalom kialakításakor.

Az a meglepő megfigyelésem, hogy a hírtérték még a tudományos szakirodalomban is elsőrangú fontosságú. Noha a neves tudományos folyóiratok azt szokták terjeszteni magukról, hogy a tudományos érték az egyetlen szempont, amit mérlegelnek a beérkezett kéziratokról hozott döntések során, valójában ez egyáltalán nem igaz. Bizonyára kapott már minden tudós kollégám folyóiratszerkesztőtől olyan levelet, amelyben szakértői bírálat nélkül elutasítja egy kézirat közlését. Ennek az oka a legritkább esetben az, hogy a benne foglaltak tudományosan nem megalapozottak, hiszen ezt a kérdést meg sem vizsgálták. Az ilyen levelekben valamiféle eufemisztikus – és általában egyetlen, valóban az egyedi kéziratra vonatkozó betűt sem tartalmazó – módon azt fogalmazták meg, hogy a kézirat hírtértéke a döntést hozó szerint elégtelen.

Egy magazinban a hírtértéket ettől eltérően, idődimenzióban kell értelmezni. Sajnos a havi megjelenés ritmusa lehetetlenné teszi, hogy a napi, főként elektronikus sajtóval versenyre keljünk ilyen téren. Ezért ez nem is lehet cél. A Nobel-díjakat például minden évben október első felében jelentik be. Leghamarabb a novemberi számban tudunk reagálni az eseményekre, de a szerkesztési időkorlátok miatt ez semmiképpen nem lehet alapos. A díjazottak és az elismert tudományterület megnevezésén túl esetleg a tudósok fényképét szerepeltethetjük a címlapon, ahogy azt 2023-ban meg is tettük Karikó Katalin tiszteletére.

Februárban foglalkozni az előző évi Nobel-díjakkal már tegnapelőtti híreknek is régi. Mégis meg tesszük, mert azt reméljük, a tudományos hátteret olyan szakmai megvilágításba helyezhetjük olvasóink számára, amelyben az írások eredetisége ellensúlyozza a súlyosan megkopott hírtértéket. Az idén is három remek kollégám vállalta fel ezt a kihívást a kéresemre.

Az orvosi Nobel-díjról az a Boldogkői Zsolt írt, aki 2023-ban az Év Ismeretterjesztő Tudósa díjat kapta. Tavaly februári számunkban, érdekes módon, az akkori orvosi Nobel-díjról a 2022-es Év Ismeretterjesztő Tudósa, Kemenesi Gábor írt hasonló ismertetőt. Hogy ez a hagyomány jövőre is folytatódik, azt nem garantálhatom. 2024-ben ugyanis egy vulkanológus, Harangi Szabolcs kapta az elismerést. Nem látszik túl valószínűnek, hogy 2025-ben valamiféle tűzhányóterápia aratna kirobbanó sikert.

A kémiai Nobel-díjról Gáspári Zoltán, a fizikairól Kégl Tamás írta meg gondolatait. A két téma látható kapcsolatban van egymással a mesterséges intelligencia tudományos alkalmazásain keresztül. Miután nemrég jelent meg könyvem a Dűne univerzumának tudományos hátteréről, talán elnézi nekem az olvasó, ha erről (is) Frank Herbert fantáziavilága jut eszembe. Az ugyanis a kimondottan pesszimista víziók közé tartozik: a mesterséges intelligencia használatát szigorú vallási parancsolatok tiltják, mert a gondolkodó gépek uralmát csak óriási véráldozat árán sikerült leráznia az emberiségnek. Attól tartok, hogy ha ilyesmi valóban előfordul valamikor, akkor a vallási tiltás magára a tudományra is kiterjed majd.

Végezetül szintén rég nincs már hírtértéke annak, hogy a Magyar Tudományos Akadémia mit döntött december 11-i rendkívüli közgyűlésén. Ezzel nem is foglalkozik írás ebben a számban. Viszont van egy olyan hírem, amelyet egyetlen forrás sem írt meg: az elegáns öltözködést megkövetelő alkalmakra fenn tartott sötétkék zakómról december 11-én délután levettem az MTA kítűzőjét.

2025. február

Lente Gábor

TARTALOM

NOBEL-DÍJ, 2024	
Gáspári Zoltán: Fehérjeszerkezetek a számítógépből: a 2024-es kémiai Nobel-díj	34
Kégl Tamás: Fizikai Nobel-díj: főhajtás a gépi tanulás és a mesterséges intelligencia úttörői előtt	38
Boldogkői Zsolt: A mikro-RNS-ek világa	41
VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY	
Fejes Zoltán, Szentpéteri Sándor: Rekultivációs és fejlesztési folyamatok fenntarthatósági szempontú összehangolása a BorsodChemben	44
Benke Máté, Hegedűs Marica: Új irányok és megoldások a vegyiparban. Beszámoló a 40. Borsodi Vegyipari Napról	46
KITEKINTÉS	
Inzelt György: Kiről nevezték el? A Polányi-szabály. Első rész	48
Kutasi Csaba: Kompozitanyagok a repülőgépgyártásban	53
MEGLEMLÉKEZÉS	
Keglevich György: In memoriam Tőke László	58
Kiss Tamás: Pavláth Attila (1930–2024)	59
VEGYÉSZLELETEK	
Lente Gábor rovata	62
A HÓNAP HÍREI	64



Címlapunkon:
A mérőoldkoknek számító, tervezett „top7” fehérje 3D-nyomatással előállított modellje (https://3d.nih.gov/entries/3606)



Gáspári Zoltán

■ PPKE ITK

Fehérjeszerkezetek a számítógépből: a 2024-es kémiai Nobel-díj

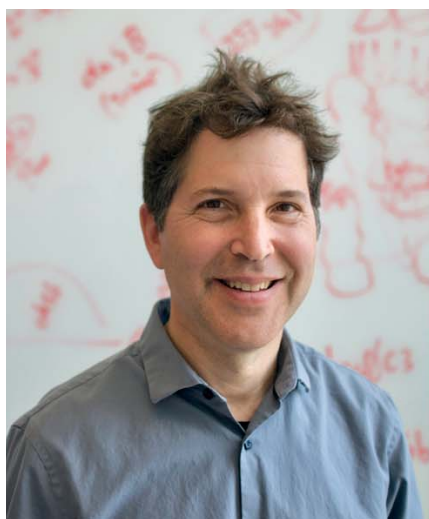
A 2024-es fizikai és kémiai Nobel-díjak között igen szoros kapcsolat látszik: a fizikai díjakat a ma használt mély neurális hálózatokon alapuló gépi tanulási rendszerek elvi alapjainak lefektetéséért ítélték oda, a kémiaiakat pedig részben egy ebbe a kategóriába tartozó rendszer adott problémára történő sikeres alkalmazásáért adták. Az indoklás szerint *David Baker* a fehérjetervezésben elért, *Demis Hassabis* és *John M. Jumper* pedig a szerkezetpredikció területén felmutatott eredményeivel érdemelték ki a díjat – utóbbi két kutató a mesterséges intelligencián (MI) alapuló AlphaFold két vezető fejlesztője. Fontos ugyanakkor már most leszögezni, hogy egyrészt *David Baker* tevékenysége a fehérjeszerkezet-predikció területén is korszakalkotónak számít, valamint hogy az AlphaFold és a hozzá hasonló MI-alapú rendszerek jelenleg a fehérjetervezési eljárások szerves részét képezik.

De ne szaladjunk ennyire előre, lássuk először az alapproblémát – már csak azért is, mert 2020-ban az AlphaFold (második, AlphaFold2 verzióját) úgy harangozták be, hogy „megoldotta a biológia egyik 50 éves kihívását”. A fehérjék háromdimenziós szerkezetének pusztán az aminosavsorrendből való becslése valóban a biokémia egyik legrégebbi feladványa. Anfinzen kísérletei óta általánosan elfogadott, hogy a fehérjék aminosav-szekvenciája meghatározza a térszerkezetet, sőt, a fehérjemolekulák térszerkezetét stabilizáló kölcsönhatások természetét is ismerjük, mégsem sikerült igen hosszú ideig olyan elméleti – a gyakorlat-

ban számítógépes – eljárást találni, amely képes ezt az összefüggést nagy megbízhatósággal reprodukálni. A probléma fizikokémiai megfogalmazása látszólag egyszerű optimálási kérdés: a szekvencia által meghatározott kémiai csoportok között kialakulni képes kölcsönhatási mintázatok közül keressük a legalacsonyabb energiájút, illetve az azt megvalósító konformációt. A kudarc oka többretegű: a fehérjemolekulák óriási konformációs változatossága miatt a megvizsgálandó, fizikailag lehetséges téralkatok száma csillagászati lehet, ráadásul az egyes állapotokban megvalósuló kölcsönhatások száma is igen nagy, ami miatt a gyakorlatban csak közelítő energiaszámítások alkalmazhatóak – így pedig nagyon nehéz a feltételezett globális minimum megtalálása.

Szerencsére a technikai fejlődésnek köszönhetően egyre több fehérjeszerkezetet sikerült kísérleti úton meghatározni, így lehetőség nyílt empirikus összefüggések megfigyelésére. Ma már minden biokémikus tudja, hogy a hasonló aminosav-sorrendű fehérjék háromdimenziós szerkezete is hasonlít, sőt, a szerkezet akkor is lehet szinte ugyanolyan, ha a két fehérje evolúciósan rokon, de az aminosavsorrendjeik az évmilliók során nagyon eltérők lettek a mutációk felhalmozódása révén. Az evolúciós rokonság felismerése tehát segíthet a szerkezetbecslésben. Rokonságtól függetlenül is igaz, hogy adott aminosavak, illetve adott aminosav-összetételű rövidebb szakaszok sok esetben rendelkeznek

2024 kémiai Nobel-díjasai (balról jobbra): *David Baker*, *Demis Hassabis* és *John M. Jumper*





valamilyen szerkezeti preferenciával, például egyesek az alfa-helikális, mások a nyújtott béta-redőzött konformációt részesítik előnyben.

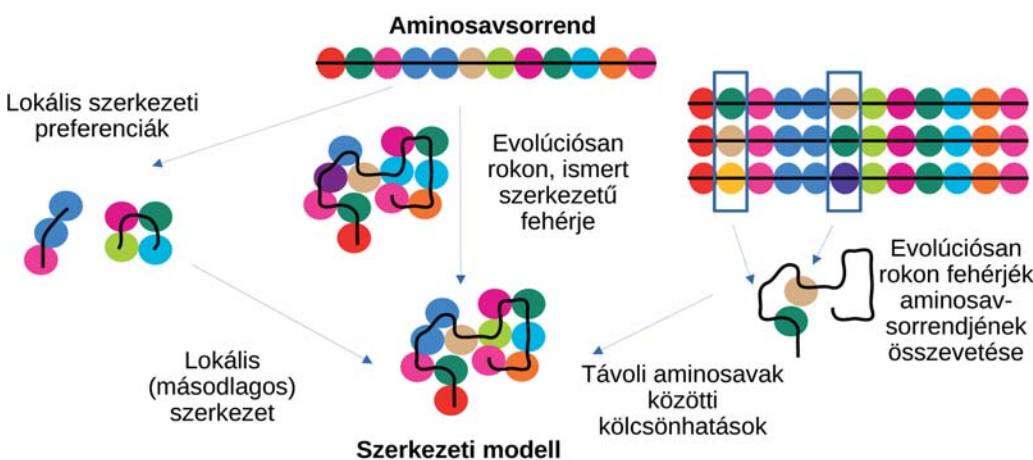
Ezek a megfigyelések már alapot adtak kezdeti predikciós eljárások kidolgozására, melyek értékelésére 1994 óta két évente versenyt is rendeznek az ezzel foglalkozó kutatócsoportok számára CASP (Critical Assessment of protein Structure Prediction) néven. Idén májusban volt szerencsém meghallgatni Andrei Lupas egyik előadását, amelyben elmesélte, hogy az első ilyen megmérettetésen az eredmény annyira csalódást keltő volt, hogy a részt vevő csoportok nagyjából fele egy életre hátat fordított a területnek. Szerencsére újabb csoportok jöttek, a fejlődés lassan, de biztosan elindult, és Lupas professzor szintén ott volt a CASP eseményen 2020 végén, amikor az AlphaFold2 ámulatba ejtette a világot. AlphaFold néven nem ekkor jelent meg módszer először a versenyen, hanem két évvel korábban, 2018-ban. Az első AlphaFold egyébként igen jól teljesített a CASP mezőnyében, különösen annak fényében, hogy a versenyeket akkor már szinte hagyományosan a régóta a területen dolgozó kutatók, köztük David Baker és Yang Zhang kutatócsoportjai dominálták. 2020-ban az alapoktól teljesen átdolgozott, hivatalosan AlphaFold2 nevet viselő módszer szinte letarolta a CASP-ot, alig néhány, a versenyen „szereplő” fehérje esetében maradt alul.

Mire az AlphaFold2 (a továbbiakban AF2) ideig eljutott, a szerkezetbecslésre használt MI-alapú eljárások már évek óta léteztek, és fontos megemlíteni, hogy ezek egy része egy e helyütt korábban nem említett megfontolást is használt: a koevolúciós mintázatot. Egy fehérjeszerkezetben két aminosav által kialakított kölcsönhatás sok esetben meggyengül vagy akár meg is szűnik, ha a kettő közül az egyik aminosavat megváltoztatjuk. De abban az esetben nem feltétlenül, ha a párja is mutálódik! Evolúciós skálán ezért létezik a korrelált mutációk – vagy egymással együtt változó, koevolváló aminosavak – mintázata, ahol a szekvencia két adott pozíciójában történő aminosavcsere között statisztikailag kimutatható kapcsoltság áll fent. Amennyiben megfelelő módon azonosítani tudjuk ezeket a pozíciókat, akkor olyan aminosavakról kapunk listát, amelyek jó eséllyel fizikai közelségben vannak a natív szerkezetben, az ilyen aminosavpárok listája pedig nagyon is jól felhasználható a szerkezetbecslésben.

2020-ra tehát már fejlett, mélytanulással tréningezett rendszerek álltak rendelkezésre, melyek egy adott fehérjeszekvenciát, annak egyszerű fizikokémiai tulajdonságait, valamint a vizsgálttal evolúciósan rokon szekvenciák jellemzőinek megfelelő reprezentációját bemenetként megkapva képesek voltak vagy lokális szerkezeti jellemzők, vagy távoli aminosav-aminosav kontaktusok becslésére (1. ábra). Az első AlphaFold 2018-ban egyébként ezek

hez igen hasonló alrendszerekkel dolgozott, tehát külön-külön előállított, lokális és globális szerkezeti jellemzőket tartalmazó adatokat generált. Ezeket aztán egy molekuladinamikai számítási lépés „fordította le” valódi 3D atomi koordinátákkal leírt szerkezeti reprezentációra. Megjelentek ugyanakkor az úgynevezett end-to-end predikcióra képes rendszerek is, amelyek a szekvenciát mint bemenetet minimális előfeldolgozási lépések után már neurális hálózattal vizsgálták, és a hálózat közvetlenül állította elő a kimeneti 3D koordinátákat is.

Az AF2 mindezeket a megfontolásokat tartalmazza, de teljesen újszerű megközelítésben: end-to-end predikciós rendszer, tehát a szerkezet előállítását is a neurális hálózat végzi. Két fő modulból áll, ezek neve EvoFormer és Structure. Az EvoFormer rész felelős a kezdeti reprezentáció kialakításáért, ezt azonban a lokális szerkezet és a kontaktusok tekintetében nem egymástól függetlenül, hanem egymásra épülő iteratív lépések során optimalizálja – és ez kulcsfontosságú! Amikor ugyanis két vagy több szekvenciát összevetünk, illesztünk, akkor nagyon fontos, hogy az egyes egyedi szerkezetekben egymással ekvivalens pozíciókban lévő aminosavak egymás alá kerüljenek. Közele rokon szekvenciák esetében, ahol csak néhány eltérés van, ez könnyen teljesíthető, de minél több helyen különböznek egymástól, annál nehezebb a feladat – tekintve, hogy magukat a szerkezeteket nem ismerjük, hiszen éppen most akarjuk azokat megbecsülni! Ráadásul a betoldások és deléciók miatt a szekvenciák hossza sem ugyanolyan, néha „ugranunk” kell az egyikben (szakszóval rést [gap] illesztünk az egyik szekvenciába). Sok, egymás alá illesztett rokon szekvencia esetében az egyes szegmensekben található aminosavak kémiai jellege a lokális, másodlagos szerkezetre jellemző információt hordoz, az egyes pozíciók változásainak összefüggéseiben pedig 3D kontaktusok lehetnek kódolva. Az EvoFormer modul ennek a reprezentációnak az optimalizálását végzi el olyan módon, hogy a kétféle szempont, a lokális és a globális szerkezetre vonatkozó információ tartalom egyetlen konzisztens mintázatot mutasson. Ennek a lépésnek a jelentőségét a módszer szerzői a 2020-as CASP egyik legnehezebb esetén, a SARS-CoV-2 vírus orf8 nevű fehérjéjén mutatták be. Míg átlagos esetben 48 iteráció (blokk) elegendő volt megfelelő minőségű reprezentáció eléréséhez, az orf8 esetében ennek a négyszeresére, 192 iterációra volt szükség. Ez a gyakorlatban ennyi hálózati blokk összekötését jelenti. Az első AlphaFold esetében egyrészt a lokális és globális információk nem voltak egymással ilyen pontossággal szinkronba hozva, másrészt az a módszer ezeket egy külső programok által előállított reprezentációból, ún. szekvenciaprofilból állította elő. Az AF2 ezeket a lépéseket koncepcionálisan egyben kezeli, sok energiát fordít a jó megoldás megtalálására, és alapve-



1. ábra. A szerkezetpredikció során használt alapelvek egyszerűsített vázlatja. A különböző színű gyöngyök különböző aminosavakat jelölnek. A gyakorlatban a lokális szerkezeti preferenciák elemzésekor is támaszkodunk evolúciósan rokon fehérjék szekvenciáira is



tően ennek köszönhető a sikere. Ez természetesen nagyon komoly számítási teljesítményt is igényel, a módszer részleteinek ismeretése előtt a szakértők értetlenül álltak az előtt, amikor Demis Hassabis elmondta, hogy akár 40(!) GPU is dolgozhatott egy adott fehérjén – ez csak molekuladinamikai számítások esetében tartották volna reálisnak, azt pedig már ekkor lehetett tudni, hogy az AF2 esetében ez nem lehet a magyarázat.

A Structure modul az EvoFormer kimeneteként kapott reprezentációból elkészíti a teljes atomi modellt. Kiindulásként ún. „aminosavgázt” (residue gas) használva, ahol kezdetben minden aminosav egy pontban található. Ha ez még magában nem lenne elég bizarr, a modul a szerkezetépítés során egészen az utolsó lépésekig nem erőlteti az amidkötések sík téralkatának kialakítását. Ez a döntés igencsak elgondolkoztató, különösen annak a történetnek a fényében, amelyet az alfa-hélixek szerkezetére vonatkozó korai elképzelések kapcsán Hargittai István is tárgyalt: itt a fizikus Bragg-páros egyes visszaemlékezések szerint azért nem találta a megoldást, mert – a kémikus Linus Paulinggal ellentétben – úgy hitték, hogy a C–N kötés körül is van rotáció. Az AF2 azonban működik úgy is, hogy ezt a feltételt nem követeli meg a szerkezeti modell építésének minden fázisában, és ennek oka, hogy a modell minden más aspektusa így könnyebben felépíthető nagy pontossággal – amely pontosság amúgy is lehetővé teszi, hogy a folyamat végén ezt az optimalizálási lépést biztonsággal meg tudják tenni.

Az AF2 további új tulajdonsága, hogy megtanították neki saját modelljei jószágának becslését is. A tanítási folyamat során, amikor ismert a várt kimenet, kiszámítható a ténylegesen kapott kimenetnek attól való eltérése is – és ezt sikerült megtanítani a hálózatnak. Így az AF2 kimenetének része a szerkezeti modell mellett egy lokális jósági becslés minden aminosavra.

Az AF2 egyes esetekben olyan pontosságot ért el, ami még magukat a fejlesztőket is megdöbbenette. Előfordult, hogy egy Zn²⁺-kötő régió esetében az iont koordináló hisztidin aminosavak térállását szinte tökéletesen becsülte meg, miközben maga a cink-ion nem volt része a szerkezetnek, hiszen az AF2 nem képes nem fehérjetermészetű atomokat kezelni, és nem tanították külön ilyen régiók modellezésére sem. A módszernek ez a magas szintű tel-

jesítőképesége vezetett azokhoz a kijelentésekhez, hogy megoldották a fehérjefeltékeredés 50 éves problémáját – ami azért nyilvánvalóan túlzás. Az AF2 kiváló eredményeket ad egyedi globuláris domének szerkezetbecslése során, tudnunk kell azonban, hogy nem csodaszer, nem képes minden speciális eset kezelésére – sokszor egyszerűen azért, mert ez nem is volt cél a megalkotása során. Bár sok esetben a lokális szerkezetre jó becslést ad, természeténél fogva nem képes a multimer fibrilláris szerkezetek, például a coiled coil struktúrák felismerésére és modellezésére, emiatt számos, ilyen szerkezetet tartalmazó fehérje esetében hosszú, „semmibe lógó” alfa-helikális régiók találhatóak a modellekben (2. ábra). Ugyanígy nehézségei vannak a transzmembrán fehérjék modellezésekor: egyes részek, amelyek esetében ez nem reális, „belóghatnak” a membrán síkjába. Tudnunk kell azt is, hogy az AF2 a modellépítéshez felhasznál ismert szerkezetekből származó fragmenseket, és ezek pontos összetétele befolyásolja a végső modellt. A szerkezetmodellezők kezében az AlphaFold tehát ugyanúgy eszköz, mint minden más szerkezetbecslő módszer, aminek ismerni kell a korlátait.

Mindezzel együtt a tudományos közösség lelkesedése olyan nagy volt, hogy rengeteg fehérje teljes (!) szerkezetét megbecsültették az AlphaFold2-vel, és ezeket különböző adatbázisokban elérhetővé tették. Az AlphaFoldDB több mint 200 millió (!) modellt tartalmaz, köztük az összes ismert emberi fehérjét. Természetesen ezekre is igazak a fent leírt korlátok: a teljes hosszúságú fehérjék esetében a modellek megbízhatósága akár jelentősen más lehet egyes régiókra vonatkozóan.

Az AlphaFold2 logikus továbbfejlesztése volt a több fehérjéből felépülő komplexek modellezése, melyhez először létrehozták az AlphaFold-Multimer módszert – ez az eredeti AF2 viszonylag kisebb mértékű módosítása –, majd 2024 májusában megjelent az AlphaFold3 leírása: az új verzió kifejezetten fehérje-ligandum komplexek, nukleinsavak, valamint kémiaileg módosított aminosavakat és nukleotidokat tartalmazó szerkezetek modellezésére alkalmas – de ez már másik történet.

Beszéljünk most inkább a Nobel-díj másik feléről! David Baker hosszú utat járt be, és ennek fontos állomása a Rosetta nevű eljárás, mely az évek során igen nagy változásokon ment át. Alap-

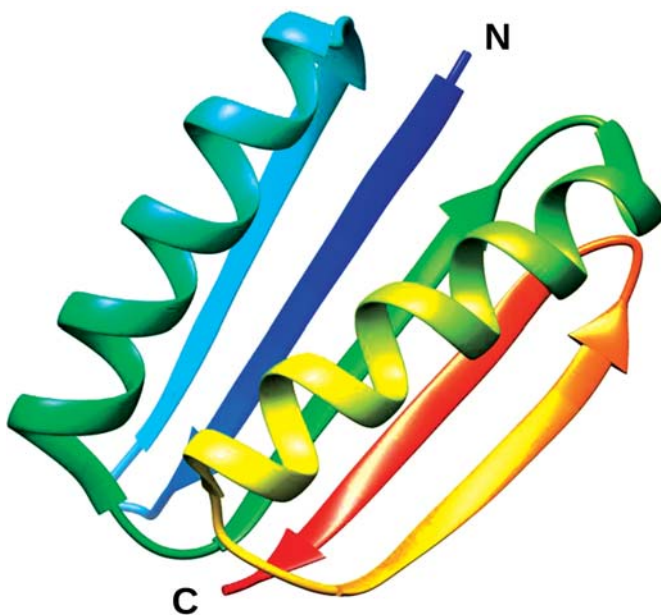
2. ábra. Példa egy jó modellre, ami félvezető lehet. A Homer1 fehérje AlphaFoldDB-ben elérhető modellje (AF-Q86YM7-F1-v4, fent) és az irodalom, valamint az elérhető kísérletes szerkezetek segítségével a kutatócsoportunk által épített előzetes modell (lent). Az AlphaFold2 önmagában nem képes felismerni, hogy a szerkezet multimer, erre nem is tanították, tehát az egymás köré csavarodó alfa-helikális coiled coil szerkezetet nem tudja visszaadni, ahogyan a tetramer szerkezetet sem. Ugyanakkor a helikális szerkezeti preferenciát megfelelően felismeri és modellezi. Az ábra a UCSF Chimera programmal készült





vetően fehérjeszerkezetek predikciójára alkalmas fragmensalapú módszer, de már viszonylag korán felismerték, hogy használható a fehérjetervezésben is. Egy picit itt álljunk meg, mert ez az összefüggés némi magyarázatra szorul. Valójában a szerkezetbecslés és a szerkezettervezés egymás fordított (inverz) problémái: előbbinél egy adott szekvencia által felvehető 3D szerkezetet keresünk, míg utóbbi esetében egy kívánt 3D szerkezethez szeretnénk megtalálni az azt megvalósítani képes szekvenciát. Mindkét feladat megoldásában segít, ha képesek vagyunk olyan kisebb szakaszokat, fragmenseket azonosítani, amelyek adott térszerkezetet preferálnak. Ezekből a fragmensekből a teljes szerkezet felépíthető, összerakható, természetesen a teljes szerkezetben megvalósuló, szekvenciában távoli aminosavak közötti kölcsönhatások figyelembevételével. A gyakorlatban a kapcsolat még ennél is szorosabb: számos esetben a kívánt szerkezethez első körben tervezett szekvenciákat szerkezetbecslő eljárásokon átfuttatva, azok eredményei alapján választják ki azokat, amelyeket a következő körökben újaterveznek – és ezt a folyamatot iteratív módon ismétlik.

A fehérjetervezés egyik mérföldkövének a 2003-ban tervezett, 95 aminosavas „top7” nevű fehérjét tekintik, természetesen ez is a Baker-labor eredménye (3. ábra). Ennek tervezése során egy olyan térszerkezeti sémát kerestek, mely az ismert természetes fehérjékben nem fordul elő. Ezután – a Rosetta programot és egyéb eljárásokat is felhasználva – elvégezték a molekulagerinc és az oldallánc-konformációk geometriai optimalizását egymással összefüggésben, a szekvenciát is változtatva. Ez a gyakorlatban nagyon sok Monte Carlo optimalizációs lépést jelentett, és az első lépésekhez használt kiindulási szekvencia aminosavainak csupán 31%-a maradt változatlan. A puding próbája természetesen az evés: előállították a végső szekvenciát és meghatározták a térszerkezetét, ami kiváló egyezést mutatott a tervezettel.



3. ábra. A tervezett top7 fehérje kísérletileg meghatározott szerkezete (PDB kód: 1QYS). A színskála az N-terminálisról a C-terminális felé változik, a terminálisokat N és C betűk jelölik. Az ábra a UCSF Chimera programmal készült

Az azóta eltelt évek alatt David Baker csoportja számos jelentős előrelépést tett, a kétféle, megfelelően tervezett alegységből felépülő, víruskapszidszerű nanoklaszterektől az allosztérikus át-

menetekre képes fehérjekomplexek létrehozásáig. A terület kétségkívül a felfedező szerkezeti biológiai kutatásokból az alkalmazott bionanotechnológia egyik leginkább látványosan fejlődő ágává nőtte ki magát, de természetesen itt sem beszélhetünk arról, hogy minden egyes aspektus megoldottnak tekinthető. Lásuk, mit gondol minderről maga David Baker, aki egy 2019-es közleményben összefoglalta a legfontosabb addigi tanulságokat!

A fehérjeszerkezet-tervezésben szerzett tapasztalatok szerint a termodinamikai stabilitás elérése a kulcs: kellő stabilitású végállapot mellett nem jellemző, hogy a feltekeredés kinetikailag akadályokba ütközne. Ráadásul a tervezett szerkezetek tipikusan lényegesen stabilabbak, mint a természetes fehérjék. A tervezés máig egyik legnehezebb aspektusa a megfelelő, feszültségektől mentes gerinckonformáció létrehozása, ami rendszerint a megfelelő helyekre beillesztett flexibilis szakaszok segítségével oldható meg. Érdekes módon a „nagy ugrások” tervezési szempontból egyszerűbbek, mint a kis lépések: teljesen új szerkezetet könnyebb létrehozni, mint célzottan módosítani egy meglévőt. Végül, de nem utolsósorban, a partnerekötés tervezésekor a sikeres megoldások változatossága jóval kisebb jelenleg, mint ami a természetes fehérjékben megfigyelhető – a monomer állapotban stabil, specifikus kötésre képes szerkezeti modulok tervezése egyelőre nem kellően megoldott.

Mind ezek a megfigyelések elgondolkodtatóak mind a természetes, funkcionális fehérjék szerveződéséről való tudásunk teljessége, mind a fehérjéket stabilizáló kölcsönhatások természetének és azok rendszerének pontos megértése kapcsán. Itt kanyarodhatunk vissza arra az aspektusra, hogy úgy a fehérjeszerkezet-predikció, mint a fehérjetervezés jelentős mértékben támaszkodik az ismert szerkezetekben megfigyelt mintázatokra, azokkal való adott jellegű hasonlóságokra, és messze nincs szó arról, hogy pusztán fizikai és kémiai alapelvek mentén képesek lennénk ezeket a kérdéseket megoldani. A hasonlóságok innovatív felhasználása és fizikai elvekkel való ügyes kombinálása azonban ma már lehetővé teszi ezen problémák jelentős részének gyakorlati megoldását.

Több mint tíz éve, 2013-ban Martin Karplus, Arieh Warshel és Michael Levitt kapták a kémiai Nobel-díjat a fehérjeszerkezetek modellezése terén kifejtett munkásságukért. Ez már egyértelműen jelezte, hogy a fehérjeszerkezet-kutatásba „megérkezett” a számítógépes kémia. A 2024-es kémiai Nobel-díjjal ez a terület mintegy felnőttkorba ért, és mind a természetes, mind a tervezett fehérjeszerkezetek világa minden eddiginél jobban kinyílt a kutatók előtt, új irányokat mutatva az orvosi és egyéb biotechnológiai fejlesztések és alkalmazások számára.

IRODALOM

- Abramson, J. et al. Accurate structure prediction of biomolecular interactions with AlphaFold 3. *Nature* (2024) 630, 493–500.
- Baker, D. What has de novo protein design taught us about protein folding and biophysics? *Prot Sci* (2019) 28, 678–683.
- Dobson L et al. TmAlphaFold database: membrane localization and evaluation of AlphaFold2 predicted alpha-helical transmembrane protein structures. *Nucleic Acids Res* (2023) 51, D517–D522.
- Hargittai, I. Linus Pauling’s quest for the structure of proteins. *Struct Chem* (2010) 21, 1–7.
- Hegedűs T et al. Ins and outs of AlphaFold2 transmembrane protein structure predictions. *Cell Mol Life Sci* (2022) 79, 73.
- Jumper, M. et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature* (2021) 596, 583–589.
- Kuhlman, B. et al. Design of a novel globular fold with atomic-level accuracy. *Science* (2003) 302, 1364–1368.
- <https://deepmind.google/discover/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology/>
- <https://docs.rosettacommons.org/docs/latest/meta/Rosetta-Timeline>
- <https://moalquarishi.wordpress.com/2020/12/08/alphafold2-casp14-it-feels-like-ones-child-has-left-home/>



Kégl Tamás

■ PTE TTK Kémiai Intézet

Fizikai Nobel-díj: főhajtás a gépi tanulás és a mesterséges intelligencia úttörői előtt

Nyugodtan mondhatjuk, hogy az elmúlt két évben mind a tudományos, mind a hétköznapi közbeszédben kitüntetett szerepet kapott a mesterséges intelligencia (MI). Sokak számára talán nem meglepő, hogy a 2024-es fizikai Nobel-díjat *John J. Hopfield* és *Geoffrey E. Hinton* kapták a mesterséges neurális hálózatokkal történő gépi tanulás terén végzett úttörő munkájukért (1. ábra). Ezek a felfedezések alapvetően formálták át a mesterséges intelligencia és a gépi tanulás világát, jelentős hatást gyakorolva a tudományos kutatásokra és a mindennapi életre egyaránt.



1. ábra. John J. Hopfield és Geoffrey E. Hinton
(Niklas Elmehed grafikája, © Nobel Prize Outreach)

John Joseph Hopfield (1933. július 15-én született Chicagóban) az amerikai tudományos élet egyik meghatározó, interdiszciplináris alakja, akinek munkássága különösen nagy hatást gyakorolt az idegtudományra, a fizikusok és a számítástudósok által művelt neurális hálózatok elméleti alapjaira, valamint a biológiai rendszerek információfeldolgozási mechanizmusainak megértésére. Fizikusként kezdte pályáját, később azonban a komplex rendszerek és a kognitív folyamatok modellezése felé fordult, ezzel hidat képezve a klasszikus fizika, a kémia, a biológia és a mesterséges intelligencia között. Leginkább a róla elnevezett Hopfield-háló miatt vált ismertté, amely az idegrendszer mintázatfelismerő és memória-funkcióit leíró neurális hálózatok egyik alapvető modellje.

John Hopfield egy olyan korszakban született, amikor a tudomány számos területe – beleértve a kvantummechanikát, a szilárdtestfizikát és a korai számítógép-tudományt – óriási fejlődésen ment keresztül. Magas szintű képzést kapott; alapfokú diplomáját 1954-ben szerezte a Swarthmore College-ban, doktori fokozatát pedig 1958-ban védte meg a Cornell Egyetemen. Fizikai képzettsége révén a későbbiekben szilárdtestfizikai és kvantumkémiai kutatá-

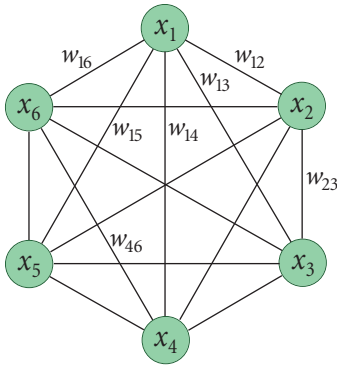
sokba kezdett, amelyek jó alapot teremtettek számára ahhoz, hogy megértse a komplex rendszerek mikroszkopikus kölcsönhatásainak makroszkopikus viselkedésben megjelenő mintázatait.

Pályájának kezdeti szakaszában Hopfield szilárdtestfizikával és molekuláris rendszerekkel foglalkozott. Az 1960-as és 1970-es években kutatásai olyan területekre irányultak, mint a polimerek elektronikus tulajdonságai, a szilárdtestfizika különböző jelenségeinek elméleti megértése, valamint a folyadékok és szilárd anyagok molekuláris mozgásának dinamikája. Ezek a munkák megalapozták azt a szemléletmódot, amely a komplex, sok részecskéből álló rendszerek leírására szolgáló statisztikus fizikai módszereket helyezte előtérbe.

A statisztikus fizika eszköztára, mely a sokrészecske-rendszerek viselkedésének makroszkopikus leírására szolgál, később kulcsfontosságúvá vált Hopfield neurális hálókkal kapcsolatos kutatásaiban is. A neurális hálózatok megértéséhez ugyanis hasonlóan elvont, probabilisztikus eszközök szükségesek: a neuronok nagy száma és a szinaptikus kapcsolatok hálózatos felépítése indokoltá teheti az ilyen módszertani megközelítéseket.

Hopfield 1982-ben publikált, mára már klasszikusnak számító tanulmánya [1] forradalmasította a mesterséges neurális hálózatokról alkotott elképzeléseket. Ebben a munkában a szerző bemutatott egy egyszerű, mégis mélyreható modellt, amelyet ma Hopfield-hálónak ismerünk. A Hopfield-háló visszacsatolt, teljesen összekapcsolt neurális hálózat: minden neuron hatással van a többi neuronra. A háló állapota a neuronok aktivációjának mintázatából áll össze. A háló dinamikája úgy van megalkotva, hogy időben az energiafüggvény által leírható potenciálfelületen egyre alacsonyabb energiaállapotok felé mozduljon el. Így a háló stabil állapotai (lokális minimumai) a memorizált mintázatoknak felelnek meg. Ennek eredményeképpen a Hopfield-háló képes zajos vagy hiányos bemenetek esetén is felismerni és kiegészíteni a tárolt mintákat, így egyfajta asszociatív memória modelljévé vált.

A Hopfield-hálózat elsősorban abban különbözik a ma ismertebb mély neurális hálózatoktól, hogy gyakran bináris neuron-csomópontokkal dolgozik, amelyek vagy „aktívak” (1) vagy „inaktívak” (0). Az ilyen hálózatok többnyire teljesen összekapcsolt struktúrával rendelkeznek, vagyis minden neuron kapcsolatban áll az összes többi neuronnal (2. ábra). A kapcsolatokat szinaptikus súlyok jellemzik, melyek meghatározzák, hogy az egyik neuron aktivitása hogyan befolyásolja egy másik neuron állapotát. Ezeket a súlyokat a hálózat a betanítási fázis során „tanulja meg”, rendszerint egy meghatározott tanulási szabállyal. A tanulás után a hálózat úgy működik, hogy ha valamelyik neuron módosítja az álla-



2. ábra. A Hopfield-hálózat felépítése

$$\text{Energia: } E = - \sum_{i < j} x_i x_j w_{ij}$$

$$\text{Valószínűség: } \frac{e^{-E}}{\sum e^{-E}}$$

potát, ez befolyásolja a többi neuron állapotát is, egészen addig, amíg a rendszer el nem éri valamelyik stabil állapotát.

A rendszer stabil állapotai „vonzerőpontoknak” vagy fixpontoknak is nevezhetők, amelyek általában a betanított mintákat képviselik. Ez azt jelenti, hogy ha a hálózat bármelyik neuronját egy bizonyos irányban elmozdítjuk (például zajos bemenetet adunk neki), idővel a hálózat visszaáll a legközelebbi stabil állapotba, azaz felidézni a számára „leginkább hasonló” mintát. Ennek az az eredménye, hogy képes egy-egy részleges vagy zajjal terhelt bemenetből rekonstruálni a teljes, eredetileg betanított mintát. Emiatt a Hopfield-hálózatokat gyakran alkalmazzák auto-asszociatív memóriarendszerekként, ahol a cél az, hogy megbízhatóan tárolják és előhívják az információt még torzított vagy hiányos adatok esetén is.

Az energia fizikai és kémiai analógiák alapján történő bevezetése új és igen hasznos koncepciót jelentett: a háló olyan dinamikus rendszer, amely mindig az alacsonyabb energiaállapotok felé halad. Ez hasonlít a természetes rendszerek viselkedéséhez, ahol a stabil állapotok jellemzően az alacsony energiaállapotoknak felelnek meg. A Hopfield-hálóban minden konfigurációnak (tehát minden lehetséges neuronállapot-kombinációnak) van egy hozzá rendelhető energiája, és a rendszer beépített szabályai alapján a neuronok állapotát leíró hiperparaméterek a minél alacsonyabb energiájú állapot elérésére törekednek.

A Born–Oppenheimer-közelítésből levezethető potenciális-energia-felületekkel analóg „energiatájak” elképzelése segít megérteni, miért tér vissza a háló egy-egy betanított mintához: egyszerűen a megjegyzett mintázatok olyan „energiagödörként” viselkednek, amelyekbe, ha a háló állapota belekerül (még ha nem is pontosan a közepébe, csak a közelébe), akkor szépen „lecsorog” az energia-lejtőn az ismerős mintázat stabil pontjába.

A Hopfield-háló sikerét követően John Hopfield kutatásai továbbra is a biológiai információfeldolgozás kérdéseire koncentráltak, de fokozatosan bővült a paletta – többek között a biológiai rendszerek időbeli mintázatainak feldolgozásával, a neurotranszmitterek szerepével, valamint a genetikai szabályozás mögött rejlő információelmélettel. Hopfield munkáiban gyakran jelent meg az az alapgondolat, hogy a biológiai rendszerek – az agy, a genetikai hálózatok, a sejtjelátviteli mechanizmusok – információs problémákat oldanak meg, és ezek a megoldások hatékony, energia-optimalizált stratégiákon alapulnak [2]. Hopfield kutatásai már az 1960-as évektől kezdve kiterjedtek a számítógépes és elméleti neurális hálózatok mellett a valódi idegrendszeri folyamatokra is, gyakran együttműködésben biológusokkal, psi-

chológusokkal és más tudományterületek képviselőivel. Emellett jelentős hatást gyakoroltak a mesterséges intelligencia és a gépi tanulás közösségére is, hiszen a Hopfield-halók a mély tanulási hálózatok előfutárjainak tekinthetők.

Geoffrey Everest Hinton, aki 1947. december 6-án született Wimbledonban, a mesterséges intelligencia (MI) és a gépi tanulás egyik legnagyobb hatású alakja. Sokan „a deep learning (mélytanulás) keresztapjának” nevezik, mivel kulcsszerepet játszott olyan elméleti és gyakorlati módszerek kidolgozásában, amelyek a neurális hálózatok modern reneszánszát idézték elő. Életútja során olyan módszerek kifejlesztéséhez is hozzájárult, amelyek mind a mai napig megalapozzák az önvezető autók, a képfelismerés, a beszéd felismerés, a természetes nyelvfeldolgozás és számos más, mesterséges intelligenciával kapcsolatos technológia hatékony működését.

Hinton intellektuális érdeklődése nem előzmények nélküli. Értelmiségi családban nőtt fel, felmenői között az akadémiai világ jeles képviselői is akadnak, például Sir Geoffrey Taylor fizikus, aki Hinton anyai dédapja volt. Az efféle háttér nagyban hozzájárult ahhoz, hogy már fiatalon érdeklődést mutasson a tudományos kérdések iránt. Eleinte még nem a mesterséges intelligencia kötötte le a figyelmét, hanem inkább a kognitív folyamatok megértése és a tudat természete vonzotta, ám ezek a kérdések hamar a mesterséges intelligencia felé tereltek.

Hinton a Cambridge-i Egyetemen szerezte első diplomáját (BA) 1970-ben, kísérleti pszichológia szakon. Már ekkor felvetődött benne az idegrendszer számítógépes modellezésének gondolata. A mesterséges intelligencia iránti érdeklődése aztán az Edinburgh-i Egyetemen bontakozott ki, ahol 1978-ban doktorált mesterséges intelligencia témakörben, Christopher Longuet-Higgins vezetésével. Doktori munkája során a kognitív tudomány, a pszichológia és a számítástudomány találkozásánál mozgott, és mélyen foglalkoztatta, hogy miként lehetne számítógépes rendszerekbe beépíteni az emberi agyhoz hasonló tanulási képességeket.

Az 1970-es évek végén és az 1980-as évek elején a mesterséges intelligencia világa még nem a mai értelemben vett neurális hálózatokról szólt, noha a legegyszerűbb neurálháló (egy réteg neuron, aktiváló függvény nélkül) több mint 200 éves múltra vezethető vissza, mivel gyakorlatilag megegyezik a Legendre és Gauss által alkalmazott lineáris regressziós módszerrel. A legtöbb kutató a szimbolikus MI-t (symbolic AI) részesítette előnyben, ahol a tudást logikai szabályok és ismeretbázisú rendszerek alapján kódolták. Hinton azonban úgy érezte, hogy az agy működése nem redukálható egyszerű szabályrendszerekre; ehelyett elosztott reprezentációkra és súlyozott kapcsolatokra épített. Ez a meggyőződés vezette el a mesterséges neurális hálózatok területére.

Doktori címének megvédését követően Hinton dolgozott a Sussexi Egyetemen, a San Diegó-i Kaliforniai Egyetemen, majd a Carnegie Mellon Egyetemen (CMU) is. A CMU-n töltött évei során találkozott David E. Rumelharttal és Ronald J. Williamsszel, akikkel közösen kidolgozta a visszatérjesztéses hibaminimalizálás (backpropagation) módszerét, amely lehetővé teszi a több rétegből álló neurális hálózatok hatékony tanítását [3].

A backpropagation algoritmus fontosságát ma már nehéz túlbecsülni: ez az eljárás kulcsfontosságú volt annak megértésében, hogy miként taníthatunk többretegű, úgynevezett „deep” (mély) hálózatokat. A módszer megalkotása és ismertté válása ugyan még nem indította be a mélytanulás forradalmát – az akkori számítási kapacitások és adatmennyiségek ehhez nem voltak elegendők –, de elvi alapokat szolgáltatott ahhoz, hogy később, a 2000-es években, amikor már rendelkezésre állt elegendő feldol-



gozási teljesítmény és digitális adat, a mélytanulás (deep learning) robbanásszerűen fejlődhesen.

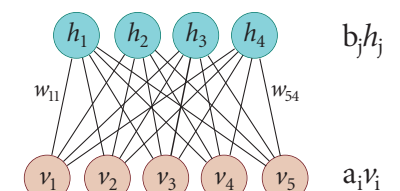
Az 1980-as évek végén Hinton Kanadába költözött, ahol a Torontói Egyetemen kapott professzori állást. Ez a váltás jelentős hatással volt munkásságára, ugyanis a Torontói Egyetemen rendkívül élénk kutatói közösség alakult ki, amely támogatta a neurális hálózatokat előnyben részesítő szemléletet. Kanadában Hinton olyan közegegre talált, ahol a tudományos intézmények nyitottak voltak az interdiszciplináris megközelítésekre és az alternatív MI-irányzatok kevésbé vonták el a neurális hálózatok iránt fogékony kutatók érdeklődését.

Hinton kutatásai során felmerült az a kérdés is, hogy miként képesek a neurális hálózatok belső, rejtett reprezentációkat kialakítani. E téren fontos előrelépést jelentett a Boltzmann-gépek és a korlátozott Boltzmann-gépek (Restricted Boltzmann Machines, RBM) bevezetése. Az RBM-ek segítségével Hinton és munkatársai olyan tanulási módszereket dolgoztak ki, amelyek képesek voltak a bemeneti adatok statisztikai szerkezetének felfedezésére és belső, rejtett egységek által kódolt mintázatok kialakítására.

A Boltzmann-gépek (Boltzmann Machines, BM) a mesterséges neurális hálózatok egy különleges fajtáját jelentik, amelyeket eredetileg Geoffrey Hinton és Terrence Sejnowski az 1980-as években dolgoztak ki [4]. Ezek a hálózatok elsősorban statisztikai fizikai elvekre épülnek, és képesek bonyolult mintázatok megtanulására és reprezentálására. Fő különlegességük az, hogy a hagyományos irányított hálózatoktól eltérően a Boltzmann-gépekben nincsenek kijelölt bemeneti vagy kimeneti rétegek, valamint a kapcsolatok kölcsönösek. Ez azt jelenti, hogy a háló minden neuronja képes hatni a többire, és az információ nem egy irányban (pl. csak előre) terjed, hanem körkörösén. Ez lehetővé teszi, hogy a háló komplex mintázatokot sajátítson el és ezeket a belső állapotaiban tárolja.

A Boltzmann-gépek tanítása nem egyszerű feladat, mert a teljes kapcsolati hálózat miatt sokféle állapotot kell figyelembe venni. A tanulás lényege az, hogy a súlyokat úgy módosítjuk, hogy a megfigyelt (tehát a betanító adatokból származó) minták valószínűsége nőjön a háló által generált mintákhoz képest.

A gyakorlatban a teljesen általános Boltzmann-gépet gyakran túl nehéz hatékonyan tanítani. Ezért vezették be a „korlátozott Boltzmann-gépet” (RBM), amelynek nincsenek rejtett rétegen belüli kapcsolatai és nincs látható rétegen belüli kapcsolat sem. Csak a látható és a rejtett rétegek közt vannak súlyok (3. ábra).



3. ábra.
A korlátozott Boltzmann-gépek (RBM) általános működési elve

$$E(v, h) = -\sum_i a_i v_i - \sum_j b_j h_j - \sum_{ij} w_{ij} v_i h_j$$

$$= -\mathbf{a}^T \mathbf{v} - \mathbf{b}^T \mathbf{h} - \mathbf{v}^T \mathbf{W} \mathbf{h}$$

Ez a korlátozás jelentősen egyszerűsíti a betanítást. Az RBM-ek jellegzetessége az is, hogy felügyelet nélküli tanulást (unsupervised learning) tesznek lehetővé, így még osztályozási feladatok esetén sem kell előre kijelölni az egyes kategóriákat.

Ezen elvek révén született meg a Deep Belief Networks (DBN) koncepciója is, melyben az RBM-ek rétegeit egymásra halmozva mély és összetett reprezentációk hozhatók létre. A DBN-ek és a hozzájuk kapcsolódó módszertan lehetővé tették, hogy az addig nehezen tanítható, mély hálózatokat is hatékonyan be lehessen ta-

nítani rétegről rétegre történő, kezdetben felügyelet nélküli, majd finomhangolásként felügyelt tanulási lépésekkel. Ez a megközelítés mutatta meg igazán, hogyan tudnak a mély neurális hálózatok, összehangolt rétegek láncolataként, egyre absztraktabb és összetettebb jellemzőket megtanulni a nyers adatokból – legyen szó képekről, hangokról vagy szövegekről.

A Boltzmann-gépek (így a korlátozottak is) olyan neurális hálólok, amelyek a statisztikus fizika inspirációjára a neurális állapotok valószínűségi eloszlásán alapulnak. Nem fix bemenet-kimenet párjaik vannak, hanem a Hopfield-hálókhöz hasonlóan inkább egy belső szabály szerint „ringatóznak” különböző állapotok között, a kapcsolatok által meghatározott energiafelületen. Idővel képesek megtanulni az adatokat jellemző mintázatokot, és ezeknek megfelelően alakítani a súlyokat, így az alacsony energiaállapotokhoz azok a minták tartoznak, amelyek a háló megtanult. Az RBM-ek ugyan jelenleg a ritkábban alkalmazott modellek közé tartoznak, ám mégis fontos szerepet játszottak a mélytanulás előretörésében és nagyban hozzájárultak ahhoz, hogy a gépi tanulás mára ennyire fejlett és hatékony legyen.

A 2000-es évek végére és a 2010-es évek elejére Hinton és tanítványai (köztük Yann LeCun és Yoshua Bengio) olyan módszereket és elveket dolgoztak ki, amelyek a számítási teljesítmény növekedésével (főleg a GPU-k alkalmazásának elterjedésével) és az egyre nagyobb adattömegek (Big Data) rendelkezésre állásával együtt elhozták a mélytanulás korszakát. A beszédfelismerés, a képfelismerés és számos más alkalmazási terület ezáltal ugrásszerű fejlődésen ment keresztül.

Különösen látványos eredményt ért el Hinton csoportja a 2012-es ImageNet kihíváson, ahol egy AlexNet névre keresztelt mély konvolúciós hálózat több mint 10 százalékponttal jobban teljesített a képfelismerési feladatban, mint az addigi legjobb megoldások [5]. Ez a pillanat mérföldkő volt a számítógépes látás területén, és világszerte felkeltette az ipar érdeklődését a mélytanulás iránt. A Google hamar felfigyelt Hinton munkájára, és 2013-ban alkalmazta is őt, majd megalapozta a Google Brain kezdeményezést, amely a mesterséges intelligencia kutatásának egyik vezető műhelye lett.

Hinton nemcsak kutatóként, hanem tudományszervezőként is maradandót alkotott. A Torontói Egyetemen belül és körül kialakuló kutatói ökoszisztéma révén hozzájárult a kanadai mesterséges intelligencia-kutatás virágzásához. Közreműködött a Vector Institute for Artificial Intelligence megalapításában, amely a kanadai kormány és ipari partnerek támogatásával a mesterséges intelligencia kiválósági központjaként működik.

Tudományos munkásságáért számos rangos kitüntetést kapott. Közülük kiemelkedik a 2018-ban megítélt Turing-díj, amelyet gyakran a „számítástechnika Nobel-díjaként” is emlegetnek. Ezt a díjat Hinton megosztva kapta Yann LeCun és Yoshua Bengio kutatókkal, akik szintén a mélytanulás területének meghatározó úttörői. A díj hivatalos indoklása szerint munkájuk forradalmasította a számítógépes tanulás képességét, amellyel felismerhetők a képek, hangok és szöveges adatok komplex struktúrái. ●●●

IRODALOM

- [1] J. J. Hopfield, Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities, Proc. Natl. Acad. Sci. USA (1982) 79, 2554–2558.
- [2] J. J. Hopfield, Neurons, Dynamics and Computation, Physics Today (1994) 47, 40–46.
- [3] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton, R. J. Williams, Learning representations by back-propagating errors, Nature (1986) 323, 533–536.
- [4] D. H. Ackley, G. E. Hinton, T. J. Sejnowski, A learning algorithm for Boltzmann machines, Cognitive Science (1985) 9, 147–169.
- [5] A. Krizhevsky, I. Sutskever, G. E. Hinton, ImageNet classification with deep convolutional neural networks, NIPS'12: Proceedings of the 26th International Conference on Neural Information Processing Systems – Vol. 1 (2012) 1, 1097–1105.



Boldogkői Zsolt

■ SZTE Orvosi Biológiai Intézet

A mikro-RNS-ek világa

A szabályozó RNS-ek felfedezése

A molekuláris genetika forradalma a 20. század közepén kezdődött a DNS kettősspirál-szerkezetének felfedezésével, amely lavinát indított el, s a tudományterület azóta is folyamatosan produkálja az új, gyakran szemléletünket gyökeresen átformáló eredményeket. A korai molekuláris biológia két makromolekulára összpontosította figyelmét: a DNS-re, mint az örökítő információ hordozójára, és a fehérjékre, melyek a sejtfunkciók végrehajtói. Az RNS-t abban az időben mellékszereplőnek gondolták, melynek feladata a genetikai üzenet közvetítése a DNS és a fehérjék között (mRNS), illetve az asszisztálás e folyamathoz (tRNS és rRNS). Az elmúlt évtizedek technológiai fejlődése azonban új lehetőségeket nyitott a nukleinsavak mélyebb szintű vizsgálatában. A kutatások eredményeként egy hatalmas, eddig ismeretlen világ, a nemkódoló RNS-ek világa került a tudomány látókörébe. Kiderült, hogy az RNS-ek jóval fontosabb szerepet játszanak a sejtműködés szabályozásában, mint azt korábban gondoltuk.

A mikro-RNS-ek (miRNS-ek) felfedezése törte be az RNS-ek birodalmába vezető kaput, megalapozva ezzel egy új tudományterület, a kis RNS-ek biológiájának létrejöttét. A miRNS-ek története Victor Ambros és Gary Ruvkun felfedezésével kezdődött 1993-ban, amikor azonosították a rövid lin-4 RNS-molekulát a fejlődésgenetika modellszervezetében, a mindössze ezer sejtből álló fonalféregben, a *C. elegans*-ban. A kutatók megállapították, hogy a lin-4 egy nemkódoló RNS, amely a lin-14 gén kifejeződését szabályozza azáltal, hogy komplementer bázispárosodással a lin-14 által kódolt mRNS-hez kapcsolódik, így akadályozva meg annak leolvasását fehérjévé. A két kutató csoportjának munkája ezzel egy eddig teljesen ismeretlen génszabályozási mechanizmust tárt fel, mely az RNS-RNS kölcsönhatáson alapul. Ennek a munkának

2024 orvosi-élettani Nobel-díjasai: Victor Ambros (balra) és Gary Ruvkun



a jelentőségét azzal ismerték el, hogy az idei orvosi-élettani Nobel-díjat Ambrosnak és Ruvkunak ítélték oda.

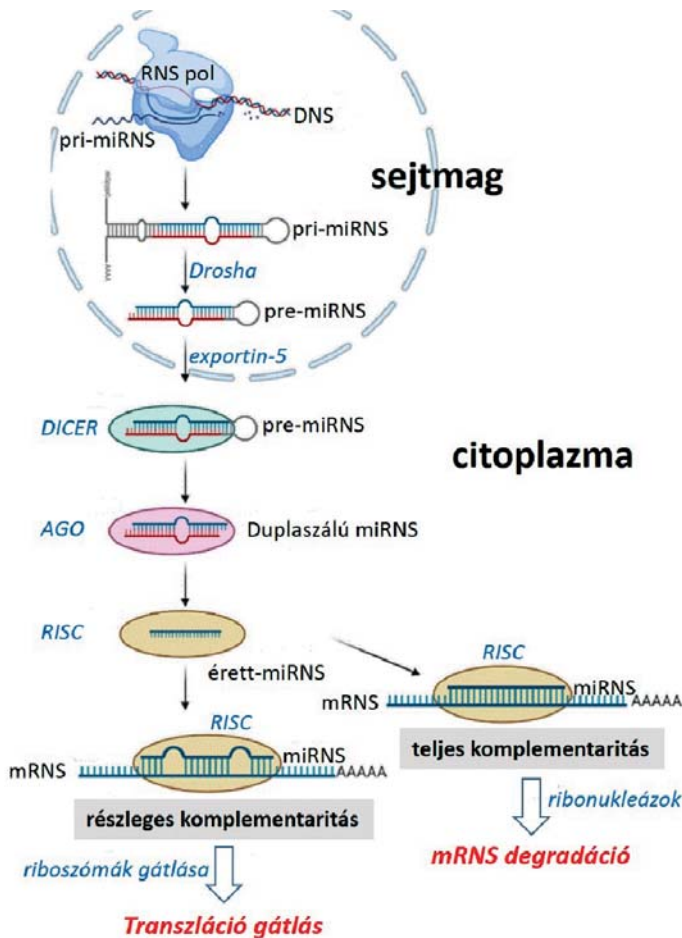
A miRNS-ek jellemzően 21–23 nukleotid-hosszúságúak, és úgy működnek, hogy egy RISC nevű fehérjekomplexszel kapcsolódva olyan mRNS-ekhez kötődnek, melyekkel részlegesen vagy teljesen komplementerek. Hamarosan felfedeztek egy másik rövid nemkódoló RNS- (sncRNS) családot is, a kis interferáló RNS-eket (siRNS-ek), melyek az ún. RNS-interferencia mechanizmusának alappilléret alkotják. Ez a molekuláris apparátus a génexpresszió szabályozása mellett a sejt és a genom védelmét is szolgálja a vírusok és transzpozabilis elemek ellen. Később felfedezték a hosszú nemkódoló RNS- (lncRNS) féleségeket, melyek – a kis sncRNS-ekhez hasonlóan – igen változatos feladatokat látnak el a sejtben, többek között a kromatin módosításában, a transzkripció szabályozásában és a transzkripciót követő (poszttranszkripció) folyamatokban vesznek részt. A kutatások eredményeként kiderült, hogy lényegében a teljes emberi genom transzkripcionálisan aktív, azaz RNS-molekulákat állít elő, ami azért meglepő, mert a DNS-ünk alig több mint 1%-a kódol fehérjemolekulákat. Ez azt jelenti, hogy a nemkódoló RNS-molekulák óriási számban és féleségben fejeződnek ki a sejtjeinkben. Ezeknek az RNS-molekuláknak a felfedezése tehát alapjaiban változtatta meg a sejten belüli folyamatokról való tudásunkat. Mára nyilvánvalóvá vált, hogy a nemkódoló RNS-ek kulcsszerepet játszanak számos biológiai mechanizmus koordinálásában és különféle betegségek kialakulásában.

A mikro-RNS-ek biogenezeise és hatásmechanizmusa

A mikro-RNS-ek úgynevezett primer miRNS (pri-miRNS) formában kódoltak a DNS-ben, és az RNS polimeráz II enzim segítségével íródnak le (1. ábra).

Ez a nemkódoló RNS egy vagy több hajtűszerű szerkezetet foglal magában, melyet egy Drosha nevű enzim vág ki, létrehozva a rövidebb, prekursor miRNS-t (pre-miRNS), melyt ezt követően az exportin-5 fehérje segítségével a sejtmagpórusokon keresztül a citoplazmába jut. Itt egy újabb enzim, a Dicer alakítja át kettős szálú miRNS-sé, melyek közül az egyik a RISC-hez kapcsolódik, míg a másik szál rendszerint lebomlik.

A miRNS-ek génexpresszióra gyakorolt hatása függ a miRNS és a cél-mRNS közötti komplementaritás mértékétől. Állatokban és emberben a részleges komplementaritás a gyakoribb, amit az tesz lehetővé, hogy nem a cél-gén komplementer DNS-szála kódolja, hanem attól távol helyezkedik el a genom-ban. A részleges komplementaritás módot



1. ábra. A miRNS-ekről, vázlatosan

ad arra, hogy egyetlen miRNS több, hasonló bázis-összetételű mRNS-t is megcélozzon, így komplex génhálózatokat képes szabályozni. Ha a kötődés részleges komplementaritáson alapul, akkor a miRNS-ek általában anélkül represszálják a transzlációt, hogy lebontanák az mRNS-t. A RISC ilyenkor jellemzően a riboszómák működésének gátlásával akadályozza az mRNS-ek leolvasását fehérjékké. Egy másik mechanizmus azon alapul, hogy a miRNS-RISC komplex szintén a cél-mRNS-ekhez kapcsolódva degradálja azokat azáltal, hogy a RISC egyik komponense kettévágja az mRNS-molekulát (1. ábra). Az mRNS-ek normális esetben védve vannak a sejtben jelen lévő ribonukleáz enzimektől: az egyik végükön a Cap-szerkezet, a másikon pedig a poli(A)-farok révén. A RISC általi vágás viszont sebezhetővé teszi őket, és a ribonukleázok le is bontják ezeket a molekulákat. Ez utóbbi mechanizmus rendszerint akkor lép működésbe, ha a komplementaritás a miRNS és az mRNS között teljes vagy közel teljes. Az siRNS-ek is ez utóbbi módon degradálják a cél-mRNS-eket. Ráadásul, az siRNS-ek a transzkripció szintjén is képesek szabályozni a génexpressziót azáltal, hogy az éppen leíródó pre-mRNS-hez kötődnek egy RITS fehérjekomplexszel kapcsolatban, majd ún. epigenetikai enzimeket vonzanak oda, amelyek a DNS és/vagy a hisztonfehérjék metilációja révén gátolják a transzkripciót.

A mikro-RNS-ek szerepe

A legújabb kutatások szerint a fehérjekódoló gének akár 90%-ának kifejeződése is miRNS-ek kontrollja alatt állhat, ami a genetikai szabályozásában való létfontosságú szerepükre utal. Egyrészt egyetlen miRNS többféle mRNS-t képes szabályozni, másrészt egyetlen

mRNS is általában több miRNS kontrollja alatt áll. A miRNS-ek szabályozási mechanizmusai különösen konzerváltak a fajok között, ami azt jelenti, hogy még nagy evolúciós távolságokban is nagyon hasonló a bázissorrendjük. Az evolúciós konzerváltság annak eredménye, hogy igen erős negatív szelekció védi ezeket a változással szemben, ami szintén a miRNS-ek fontosságára utal a sejtműködés szabályozásában. A miRNS-ek kulcsszerepet játszanak a sejt differenciálódásában és az egyedfejlődésben azáltal, hogy szabályozzák a génexpresszió szintjét és időzítését. A *C. elegans*-ban például a lin-4 és let-7 miRNS-ek az egyedfejlődés eseményeinek megfelelő időzítését irányítják. A let-7, amely az egyik legstabilabb bázis-összetételű miRNS, nem csupán a férgekben, hanem a gerincesekben is fontos szerepet játszik az egyedfejlődés egymást követő molekuláris mechanizmusainak összehangolásában. A miRNS-ek fontos szerepet játszanak a sejt típus meghatározásában is. Például a miR-1 elsősorban az izomszövetekben fejeződik ki, és igazolt szerepe van az izom differenciálódásban. Hasonlóképpen, a miR-124 az idegszövetekben specifikus, és létfontosságú a neurogenesis során. Ezek a miRNS-ek a sejt differenciálódási út vonalait meghatározó gének gátlásával segítenek stabilizálni és fenntartani a differenciált sejt típusazonosságát.

A mikro-RNS-ek és a betegségek

Rák. A miRNS-ek szabályozó szerepüknel fogva számos betegség kialakulásában is részt vesznek. A rákképződésben különösen fontos a részvételük, ahol a rákképződést elősegítő onkogénekként vagy – ellenkezőleg – tumorszuppresszoroként működhetnek. Az onkogén miRNS-ek (onkomiR-ek) a tumorképződést rendszerint a tumorszupresszor gének gátlásával érik el, míg a tumorszupresszor miRNS-ek (tsmiR) éppen fordítva, az onkogének gátlásával akadályozzák meg a rákos sejtek kialakulását. A miR-21 az egyik legtanulmányozottabb onkomiR, amely számos ráktípusban, köztük a máj-, mell-, tüdő- és vastagbélrákban is túltermelődik, és ezáltal gátló hatást vált ki több tumorszupresszor gén (pl. PDCD4, PTEN és TPM1) működésére is. A let-7 miRNS szintén fontos tsmiR, amely normális esetben gátolja számos onkogén gén expresszióját. A let-7 szintjének csökkenése több ráktípusban is megfigyelhető. A tumorszupresszor hatás másik példája a miR-34 család, amely különösen fontos szerepet játszik a p53 gén szabályozási hálózatában. A p53 gén központi rákképződést gátló szerepet tölt be a sejt ciklus kontrolljában, az apoptózis indukciójában, valamint a DNS-károsodásra adott válaszreakciókban. A miR-34 szerepe számos ráktípusban, például a prosztata-, a hasnyálmirigy- és a májrákban figyelhető meg, ahol elégtelen kifejeződése lehetővé teszi a tumorsejtek túlélését és szaporodását azáltal, hogy elkerülik az apoptózist. Ezenkívül a miR-34 célpontjai közé tartoznak az olyan gének, amelyek onko-génekké alakulhatnak, például a BCL2, a cyclin D1 és a MET, melyek a sejtek túlélésének és terjedési képességének (metasztázis) szabályozásában játszanak szerepet.

A szív- és érrendszeri betegségekben szintén jelentős szerepet játszanak a miRNS-ek. Például a miR-1 és miR-133 RNS-molekulák a szívizomsejtek szerkezetének és funkciójának szabályozásában vesznek részt. A miR-1 diszregulációja szívritmuszavarokhoz vezethet, mivel hatást gyakorol az ionszarnak működésére. A miR-133 szerepet játszik a szívizom tömegének meghatározásában: a szívizom-hipertrofiával és a szívélgtelenséggel hozható összefüggésbe. Ezeknek és más kardiovaszkuláris miRNS-eknek a szabályozási zavara olyan állapotokhoz vezethet, mint a szívroham, érlemezésedés és különféle szívizombetegségek.



A **neurodegeneratív betegségek** szintén kapcsolatba hozhatók a miRNS-ek diszregulációjával. Például az Alzheimer-kór esetében a miR-29 játszik fontos szerepet a béta-amiloid prekursor fehérje termelésének szabályozásában. A miR-29 szintjének csökkenése fokozhatja a béta-amiloid felhalmozódását, ami az agyban neurotoxikus amiloid plakkokat képez, és hozzájárul az idegsejtek pusztulásához. A miRNS-ek expressziójának kóros változásai, amint a miR-29 esetében láttuk, súlyosbítják a neurodegenerációs folyamatokat és az ezzel párosuló kognitív hanyatlást. A miRNS-ek szerepére jó példa a miR-132 is, amely kiemelt jelentőségű az idegsejtek fejlődésében és plaszticitásában, továbbá szerepe van az agyi gyulladásos folyamatok szabályozásában. Mind az Alzheimer-kórban, mind a Parkinson-kórban kimutatták, hogy a miR-132 szintje jelentősen csökken, ami az idegsejtek túlélésének és működésének károsodásához vezethet. Alzheimer-kór esetén a miR-132 szintjének csökkenése hozzájárulhat a tau-fehérje kóros foszforilációjához is, ami az idegsejtekben neurofibrilláris kötegek kialakulásához vezet. Ezek a kötegek a neuronok pusztulását idézik elő. Parkinson-kórban a miR-132 csökkent szintje szintén összefüggésben áll az idegsejtek pusztulásával, különösen a dopaminerg neuronokban, melyek a mozgás kontrolljában játszanak szerepet.

Egyes **anyagcsere-betegségek** esetében, legalábbis részben, miRNS-ek diszfunkciója állhat a háttérben, hiszen ezek a kis RNS-molekulák nélkülözhetetlenek a cukorháztartás és az inzulintermelés precíz szabályozásához. A miR-375 például kulcsszerepet játszik az inzulin szekréciójának szabályozásában a hasnyálmirigy béta-sejtjeiben. E miRNS-ek rendellenes működése csökkentheti az inzulinszintet, ami magas vércukorszinthez és végső soron cukorbetegséghez vezethet.

Gyulladásos és autoimmun betegségekben a miRNS-ek jelentős hatást gyakorolnak az immunválasz szabályozására. Például a miR-146 kulcsszerepet játszik a gyulladásos válasz és az autoimmun folyamatok kontrollálásában azáltal, hogy regulálja a gyulladásos folyamatokat beindító géneket. A miR-146 expressziós szintjének megváltozása hozzájárulhat a krónikus gyulladás fenntartásához, ami számos autoimmun betegség, például a reumatoid artritisz progressziójához vezethet.

Fertőző betegségek esetén bizonyos vírusok képesek manipulálni a gazdasejt miRNS-eit saját szaporodásuk elősegítése érdekében. A HIV például megváltoztatja a sejt miRNS-einek kifejeződését, ami gyengíti az immunválaszt, lehetővé téve a vírus hatékonyabb replikációját és a fertőzés terjedését. A hepatitis B vírus is képes a sejtek védelmi mechanizmusainak befolyásolására: megváltoztatja a gazdasejt miRNS-einek expresszióját, így gátolja a védelmi funkciókért felelős gének kifejeződését.

Fibrotikus betegségek: A tüdőfibrozis és májfibrozis esetében a miRNS-ek, mint például a miR-21, részt vesznek a kóros hegesedés folyamatában az extracelluláris mátrix termelését fokozó gének aktiválásával. Ez a szövetek hegesedését eredményezi, és súlyosbíthatja a szervi funkciók károsodását, például a tüdő légzésfunkcióját vagy a máj méregtelenítő képességét.

A mikro-RNS-ek mint biomarkerek

A miRNS-ek ígéretes biomarkerekké váltak különböző betegségek diagnosztikájában és prognosztikájában, mivel stabilan jelen

vannak biológiai folyadékokban, például a vérben és a vizeletben. Mint az előzőekben bemutattam, a specifikus miRNS-ek kifejeződési szintjének változásai gyakran összefüggésbe hozhatók különféle rendellenességekkel. Az egyes miRNS-ek jelenléte vagy hiánya korai jelzője lehet bizonyos patológiás folyamatoknak, ezáltal lehetővé téve a korai felismerést és a személyre szabott kezelési stratégiák kidolgozását.

A mikro-RNS-ek terápiás alkalmazása

A miRNS-ek felfedezése új terápiás lehetőségeket nyitott meg, különösen a rákkezelés és a regeneratív orvoslás terén. A miRNS-eket alkalmazó terápiák általában a működésük gátlására vagy éppen ellenkezőleg, a pótlásukra törekednek. Például az antagomiR-ek, amelyek kémiaiilag módosított, egyszálú RNS-ek, arra lettek tervezve, hogy specifikus miRNS-ekhez kötődve gátolják azok működését. Ezek az inhibitorok képesek csendesíteni az onkomiR-eket, csökkentve a tumor növekedését és áttétképző képességét. Ezzel szemben a miRNS-mimetikumok (miRNS-mimik), amelyek az eredeti miRNS-ek működését utánzó mesterséges molekulák,



A Nobel-díj bejelentésekor kivetített dia (nobelprize.org).

Az egyik újságírói kérdés kapcsán az is kiderült, hogy csak Gary Ruvkunt „sikerült felébreszteni” a jó hírrel, Victor Ambrosszal nem tudtak beszélni a bejelentés előtt

segíthetnek helyreállítani azoknak a tsmiR-molekuláknak a megfelelő szintjét, amelyek a rákos sejtekben lecsökkentek. A kardiovaszkuláris betegségek terén a miRNS-alapú terápiák célja a kóros állapotok során megváltozott miRNS-szintek normalizálása. Például a miR-21 inhibitorai ígéretesek lehetnek olyan hegesedés kezelésére, amelynek során túlzott kötőszövet-felhalmozódás alakul ki például a szívben, a májban és a vesékben.

Összegzés

Az utóbbi évtizedek során gyökeresen megváltozott az RNS szerepéről alkotott képünk, a korábban lényegtelennek vélt molekulák a sejtfunkciók szabályozásának kulcsszereplőivé váltak. A miRNS-ek, mint a nemkódoló RNS-ek egyik legjelentősebb típusai, poszttranszkripció szinten szabályozzák a génexpressziót, az egyedfejlődéstől a betegségekig számos biológiai folyamatra hatnak. A technológiák robbanásszerű fejlődése egyre nagyobb ütemben tárja fel a miRNS-ek szerepét és kínál új terápiás és diagnosztikai lehetőségeket.

A közlemény elkészítését az NKFIH Mecenatúra-pályázat (MEC_N149002) támogatta, amelynek címe: „A holnap útjain: a tudomány és orvoslás új dimenziói.”

Fejes Zoltán – Szentpéteri Sándor

Rekultivációs és fejlesztési folyamatok fenntarthatósági szempontú összehangolása a BorsodChemben

A BorsodChem Zrt. jogelődjét, a Borsodi Vegyi Kombinátot 1949-ben alapították. Kezdetben műtrágyagyártással foglalkozott, de a vállalat mára Európa egyik legnagyobb, piacvezető műanyag alapanyag és szerves vegyianyag gyártója lett. Mindennapi működése során a Társaság – rekultivációs és tevékenységeinek és projektjeinek tudatos összehangolásával – igyekszik a fenntarthatósági alapelveket minél inkább átültetni a gyakorlatba.

Az elmúlt években a BorsodChem Zrt. kiemelt figyelmet fordított a 75 éves múlt ipari tevékenységeiből fennmaradt – mára már használaton kívüli – épületeinek a bontására, illetve a területek megfelelő tájba illesztésére. Erre egyrészt a balesetveszélyes létesítmények eltávolítása miatt volt szükség, másrészt a számára égető fejlesztési területhiányt kívánta ezzel a lépéssel csökkenteni. A bontási munkálatokat összehangolta folyamatban lévő rekultivációs tevékenységeivel, és a keletkezett hulladékokat építőanyagként újra felhasználta, illetve a rekultivációs során hasznosította. Ezzel a lépésével mintegy **48 750 tonna építőanyagot váltott ki sikeresen**, illetve ennyi hulladék ártalmatlanítását kerülte el.

A sós vizes medencék rekultivációja a BorsodChem legsikeresebb projektjei közé tartozik. A medencékbe a régmúltban a technológiáikban keletkezett sós vizeket gyűjtötték össze, azonban a technológiai fejlesztéseknek és módosításoknak köszönhetően ezek tározóként feleslegessé váltak, és megkezdődhetett a területük újrahasznosítása. A terület rekultivációjához, melyet összehangoltan végeztek az új, IV. telepük építésével, több tízezer tonna földre volt szükség. A IV. telep teljes mértékben barnamezős beruházásként valósult meg, ennek során már a tervezési fázis kezdetétől kiemelt figyelemmel követték a fenntarthatósági alapelveket. A területre hulló csapadékvizeket teljesen elkülönítetten gyűj-



tik az útburkolatra hulló csapadékvizektől, így biztosítva megfelelő kiinduló alapot a jövőbeni víz-visszaforgatási fejlesztéseik számára.

Az épületek alapozásából és egyéb földmunkákból kikerülő, nem szennyezett föld elhelyezése komoly nehézséget jelentett volna a BorsodChem számára, így azonban sikeresen használták fel a földet a sósvíz-tároló medencék feltöltésére. A medencék rekultivációját az Aggteleki Nemzeti Park Igazgatósággal együttműködve végezték el. Az ő kérésükre a BorsodChem két meden-

cét a költöző madarak számára vizes élőhelyé alakított, így járulva hozzá a terület biodiverzitásának megőrzéséhez, amely azóta **számos védett madár- és állat-, illetve növényfaj** otthonává vált. A BorsodChem a részben EU-támogatású LIFE klímaadaptációs projekt keretében madárfigyelő tornyot és tanösvényt is kialakított itt. Az érdeklődőket információs táblák tájékoztatják a helyi madárpopulációról. A területen azóta az Aggteleki Nemzeti Park Igazgatóság és a Bükk Nemzeti Park Igazgatóság munkatársai rendszeres





időközönként folytatnak madármegfigyeléseket.

A bontásokból származó, bevizsgáltan nem szennyezett hulladékokat a régi hulladéklerakóik rekultivációjánál is felhasználták, ahol eddig több mint **200 000 tonna anyagot hasznosítottak** így sikeresen. A hulladék helyszínre szállításához új megközelítő utat is építettek, mely a lakott területek elkerülésével **csökkenti a közutak forgalmát, így a lakosságot érő por és zajterhelést**, valamint a rövidebb úthossz

miatt több mint **130 000 kg CO₂-kibocsátást** takarítottak meg. A rekultivációk végzetével a területen **naperőműparkot** terveznek kialakítani. A volt sóvíztároló medencéik területén, az Aggteleki Nemzeti Parkkal együttműködve különleges, tükröződés-csökkentett napelem beépítést tervezik; ez a felület így sikeresebben tartja távol a polarizált fényre érzékeny madarakat és vízi rovarokat.

Rekultivációs tevékenységeik mellett a BorsodChem sokat tesz környezete zöldí-



téséért is. Az utóbbi 8 évben Társaságunk több mint **2600 db fát** ültetett el telephelyén és a mellette fekvő területeken, így téve szebbé és élhetőbbé környezetét.

A szárazföldi környezet megóvása mellett a BorsodChem kiemelt figyelmet fordít a vízi környezet védelmére is. A vállalat közvetlen közelében található Sajó folyó kiemelt jelentőségű a működés szempontjából, mivel ez biztosítja az üzemeltetéshez szükséges vízmennyiséget. A Sajó Natura 2000-es besorolása miatt fokozott figyelmet fordítanak a folyó állapotára. A BorsodChem a folyóvíz mennyiségi és minőségi vizsgálatán felül **évente ökológiai állapotfelmérést is végez**. A vizsgálat legfőbb célja a Sajóban esetlegesen bekövetkező ökológiai állapotváltozások nyomomkövetése. A vízgazdálkodásra és vízvédelemre vonatkozó prioritásokat tartalmazó EU Víz keretirányelv alapján a cél a folyó jó ökológiai állapotának elérése, fenntartása és hosszú távú biztosítása.

Tevékenységeik eredményeképpen a BorsodChem 2024-ben elnyerte az „Év Zöld Nagyvállalata” díjat a Green Awards powered by Green Cloud pályázaton.

Fenntarthatósággal kapcsolatos elkötelezettségüket ékesen bizonyítja, hogy a BorsodChem 2023-ban immár sorozatban harmadjára nyerte el az EcoVadis platinaminősítést, ami alapján a vegyipari ágazat szereplői közül is a legkiválóbb 1 százalék közé tartozik. Az EcoVadis egyedi módszertannal dolgozó, független és nemzetközileg elismert szervezet, amely jelenleg 180 országban, 220 iparágban mintegy 130 000 szervezet fenntarthatósági tevékenységét elemzi és értékeli.

A fenntarthatósággal kapcsolatos további tevékenységeikről a már elkészült Fenntarthatósági jelentéseikből tájékozódhatnak, amelyek az alábbi linken érhetők el: <https://borsodchem.com/fenntarthatosagi-jelentesek>



A CHEMISTRY EUROPE TAGJAI



Új irányok és megoldások a vegyiparban

Beszámoló a 40. Borsodi Vegyipari Napról

A hagyományokhoz híven a Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából idén is megrendezték a Borsodi Vegyipari Napot (BVN). A 40., jubileumi eseménynek a Miskolci Akadémiai Bizottság patinás székháza adott otthont. A rendezvényen Szalay Péter, a Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke üdvözölte a résztvevőket. Köszöntötte szépkorú tagjainkat, előadásában pedig hangsúlyozta a kémikus utánpótlás fontosságát és ismertette a *Kémia mindenkinek* program előrehaladását.



Az idei ünnepeltek: dr. Paksy László (95) Kalmár Mihály (85), Nagy Istvánné (80), dr. Marossy Kálmán (75).
A fotó Marossy Kálmán köszöntéséről készült

A délelőtti szekció levezető elnöke Lakatos János, a délutáni Bánhidai Olivér volt. Elsőként a klímaváltozás vegyiparra gyakorolt hatásairól és az alkalmazkodási lehetőségekről esett szó. A Kazinbarcikán megvalósult projektek közül kiemelkedik a Sajó alacsony vízállása miatt elindított szennyvíz-újrahasznosítási kísérlet.

A BorsodChem által fejlesztett konténeres prototípus sikeresen tisztította a szennyvizet, ez a technológia gazdaságosabb megoldás lehet, mint a természetes vízkészletek feldolgozása. A hűtőtornyok párologásának csökkentésére is születtek megoldások: a talajvíz felhasználása hűtési kapacitásként ugyan ígéretes, de hosszú távú biológiai hatásait még vizsgálni kell.

A vegyipar területén zajló innovációk és kutatások jelentős előrelépéseket mutatnak a fenntarthatóság és a hatékonyság terén. A 40., jubileumi alkalmon bemutatták a legújabb projekteket és fejlesztéseket a hallgatóságnak, amelyek például a környezetvédelem, az energiahatékonyság, valamint az újrahasznosítás terén hozhatnak áttérést.

A fenntarthatóság jegyében a Life projekt keretében elindították az évi 2 millió m³ víz megtisztítását célzó programot. Az ehhez kapcsolódó megoldások között szerepel a szennyvízmedencék alternatív hasznosítása, például napelemparkok létesítése vagy puffertárolóként való használatuk.

A hulladékok újrahasznosítása szintén kiemelt téma volt. A lítiumion-akkumulátorok feldolgozása során kinyerhető lítium, nikkel és kobalt gazdasági jelentősége mellett rávilágítottak arra is, hogy Európában még nincs hidrometallurgiai újrahasznosító üzem, miközben Kínában már több ilyen működik. A PET-palackok újrafeldolgozása terén is született előrelépés: a MOHU és a MOL együttműködésében válogatás, tisztítás és szárítás után új palackokat készítenek, biztosítva a körforgásos gazdálkodás fenntarthatóságát.

Az analitikai fejlesztések terén NIR-spektroszkópiával eredetünk láthatatlan veszélyek nyomába. A módszer bizonyította hatékonyságát a foszgenmaradékok és a melléktermékek kimutatásának pontosságával és gyorsaságával. Ezután a „Bifunkciós diizocianátnál képződő polikarbodiimid gél vizsgálata rotációs viszkoziméterrel” című előadást hallgathattuk meg.



A FÉNYKÉPEKET GERA LÁSZLÓ ÉS HOLU ÁRPÁD KÉSZÍTETTE

Csoportkép a délelőtti szekció után

A technológiai fejlesztések sem maradtak el. Az új katalizátorok és a poliuretán hulladékokból készült nanokompozit habok új felhasználási területeket nyitnak meg. Emellett bemutattak egy megoldást, amely a CO₂ abszorpciójához szükséges MEA-oldatot vízzel helyettesítené, csökkentve a technológia környezeti terhelését.

A PVC-gyártás során használt víz újrahasznosítása is kiemelt figyelmet kapott. A BorsodChem már megkezdte egy ultraszűrő rendszer alkalmazását, amely lehetővé teszi, hogy a vizet ne csak egyszer, hanem többször is használják a gyártási folyamatokban.

A rendezvény záró előadásán egy jelentős fejtorést okozó témáról hallhattak a résztvevők: az alumínium eltávolítására sóoldatból. A lúgos pH-n történő alumíniumkivonásra szolgáló új technológiák hatékonyságát a hőmérséklet és ioncserélő gyanták optimalizálásával javították.

A Borsodi Vegyipari Napot Szabó János, az MKE ügyvezető igazgatója zárta.

Benke Máté, Hegedűs Marica

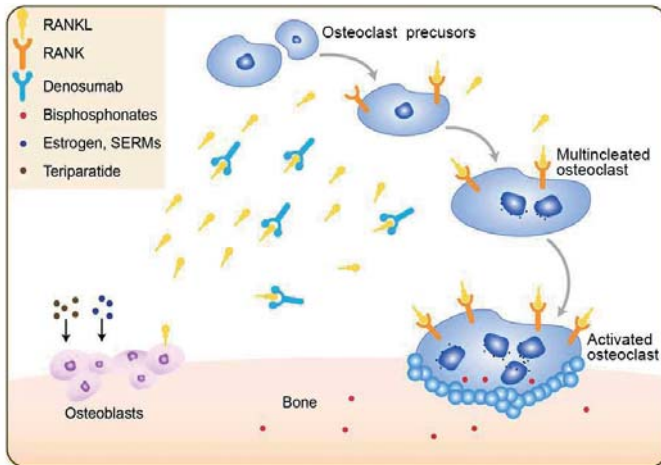


Hírek az iparból

Az FDA befogadta a denoszumab bioszimiláris készítmények engedélyeztetésének kérelmét

A Richter Gedeon Nyrt. és a Hikma Pharmaceuticals PLC bejelentette, hogy az Egyesült Államok Élelmiszer- és Gyógyszerügyi Hivatala (FDA) befogadta a denoszumab bioszimiláris jelöltjeire vonatkozó biológiai engedély kérelmét.

A denoszumab humán monoklonális antitest, amely csonttritkulás és csontáttétek okozta törések kezelésére szolgál. 2021 decemberében a Hikma kizárólagos értékesítési és licencmegállapodást kötött a Richterrel a bioszimiláris denoszumabra az Egyesült Államok esetében. A megállapodás értelmében a Richter feladata a termékek fejlesztése (beleértve a globális fázis 1 és fázis 3 klinikai vizsgálatok lefolytatását), valamint az amerikai piacra szánt késztermékek szállítása. A Hikma felel a termékek FDA-nál történő törzskönyvezéséért, és az FDA-jóváhagyást követően kizárólagos joggal értékesíti majd azokat az Egyesült Államokban.



A denoszumab hatásmechanizmusa

(<https://www.creativebiolabs.net/denosumab-overview.htm>)

Az FDA-hoz benyújtott engedélyeztetési kérelem befogadása megerősíti a Hikma elkötelezettségét amellyel, hogy javítsa az egyesült államokbeli betegek nagy értékű injekciós termékekhez való hozzáférést, és további bizonyítéka a Richter elköteleződésének amellyel, hogy bioszimiláris programokat fejlesszen globális piacokra, nagy hangsúlyt fektetve az Egyesült Államokra.

(<https://www.gedeonrichter.com/hu-hu/media/241212>)

Sikeresez konzorciumi projektet zárt a Pannon Egyetem

A Pannon Egyetem és konzorciumi partnerei sikeresen megvalósították a körforgásos gazdaságra való áttárást elősegítő projektjüket. Ennek eredményeként létrejött a Fenntarthatósági Kompetencia Központ, valamint kifejlesztettek egy öt reaktorból álló, félüzemi méretű fenntartható energetikai reaktorrendszert és egy kétkonténeres, ipari szennyvíz kezelésére alkalmas pilot berendezést.

A projekt megvalósítása 2020 márciusában kezdődött, amikor a Pannon Egyetem és konzorciumi partnerei (a MOL Nyrt., a

Hidrofilt Kft., a Netta Pannónia Kft., a Bay Zoltán Alkalmazott Kutatási Közhasznú Nonprofit Kft., valamint a Nagykanizsai Városfejlesztő Kft.) a körforgásos gazdaságra való áttárást elősegítését támogató kutatási tevékenységek és technológiai fejlesztések elvégzését vállalták öt kulcsterületen: megújuló energiák, hulladékgazdálkodás, víztechnológiák, fenntartható turizmus, fenntartható városfejlesztés.

Ennek keretében megvalósult egy öt reaktorból álló, félüzemi méretű fenntartható energetikai reaktorrendszer, amely a termikus hulladékkezelési eljárások fejlesztését szolgálja. Célja, hogy olyan, Magyarországon egyedülálló kompetenciát építsen ki a MOL és a Pannon Egyetem közösen, amely a hulladékalapú szénhidrogén-előállítási technológiák fejlesztésére alkalmas az ipari igényeknek megfelelően. A víztechnológiai projektben az olajos szennyvizek kezelésére szolgáló víztisztító berendezéseket készítettek a Pannon Egyetem, a MOL és a Hidrofilt Kft. munkatársainak közös fejlesztésében.

A projektzáró rendezvényen a Pannon Egyetem és a MOL három éves, kutatás-fejlesztési és innovációs (K+F+I) együttműködési megállapodást írt alá, amely megerősíti közös elköteleződésüket a fenntartható megoldások és az innováció iránt.

Az ünnepélyes aláírásán Csillag Zsolt, a Pannon Egyetem kancellára elmondta, hogy az intézmény mindig is élen járt a fenntarthatóság és a körforgásos gazdaság területén; ötven éve elindította Magyarország első környezetvédelmi szakmérnök-képzését, majd a környezetmérnöki szakot is. „A kutatási portfólióinkban meghatározó szerepet töltenek be a hulladékgazdálkodás, vízgazdálkodás, megújuló energiák és fenntartható városfejlesztés témái” – emelte ki.

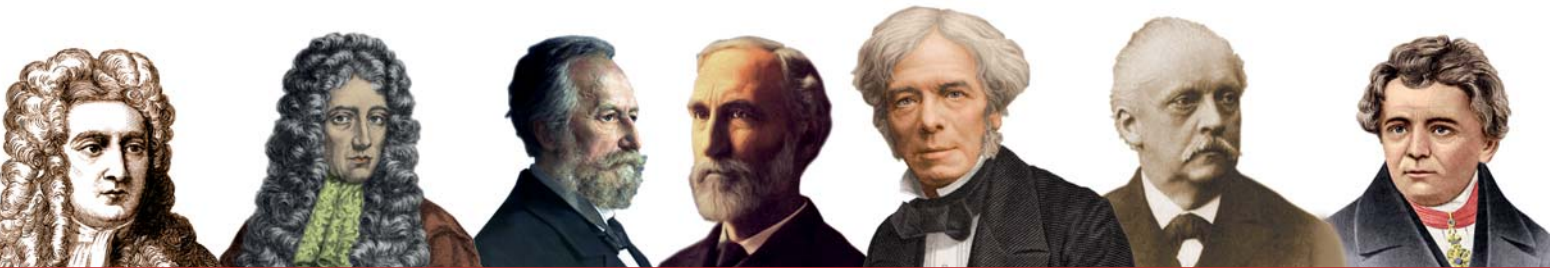
A közös kutatás célja a kémiai újrahasznosítási technológiák vizsgálata, különös figyelmet fordítva a szelektív hulladékból, a műanyag- és gumiabroncs-hulladékból történő újrahasznosítási lehetőségekre. Ezen belül a projekt a különböző hulladékforrások feldolgozási eljárásait és azok hatékonyságát kívánja feltérképezni.

Az együttműködés másik területe a biológiai és nem biológiai eredetű fenntartható üzemanyagok, repülőgép-üzemanyagok (SAF) előállítási lehetőségeinek kutatása. Emellett a fosszilis alapanyagokkal történő együttes feldolgozásukat (co-processing) is részletesen vizsgálni fogják.

Az együttműködés aláírása után került sor a „Körforgásos gazdasági alapokon nyugvó fenntarthatósági kompetenciaközpont létrehozása” című projekt zárókonferenciájára, amely az eredmények átfogó bemutatását és értékelését szolgálta. Miskolczi Norbert a megújuló energiák, Kurdi Róbert a hulladékgazdálkodás, Galambos Ildikó pedig a víztechnológiák területén elért fejlesztéseket mutatta be. A fenntartható turizmus eredményeiről Lőrincz Katalin, míg a fenntartható városfejlesztés innovációjáról Németh Kornél tartott előadást. Az ipari partnerek szemszögéből Holló András a MOL, Lakner Gábor a Hidrofilt Kft., Chrabák Péter a Bay Zoltán Kutatóközpont képviselőjében értékelték a projekt hatásait.

A konferencia résztvevői a bemutatók mellett beszélgetésekre is lehetőséget kaptak, ahol kiemelték a közös munka során megvalósított innovációkat, amelyek hozzájárultak a körforgásos gazdaság hazai fejlődéséhez. (mol.hu)

Dobó Dorina összeállítása



KIRÓL NEVEZTÉK EL?

Inzelt György

ELTE Fizikai Kémiai Tanszék

A Polányi-szabály Első rész

A Polányi-szabály eredetileg egy $AB + C \rightarrow A + BC$ típusú kémiai reakció aktiválási energiája (ΔH^\ddagger) és reakcióhője (ΔH) között állapított meg lineáris kapcsolatot, ha az A, B, illetve C közül valamelyiket homológjaival helyettesítjük, például egy RX halogenidben R-et vagy X halogént változtatjuk, míg a velük reagáló alkálifém ugyanaz marad [1], azaz

$$d\Delta H^\ddagger = \alpha d\Delta H \quad (1)$$

ahol α arányossági tényező. Ma ezt a következőképpen írjuk:

$$d\Delta G^\ddagger = \alpha d\Delta G \quad (2)$$

ahol ΔG^\ddagger a reakció Gibbs-féle aktiválási szabadenergia-változása, ΔG pedig a reakció Gibbs-féle szabadenergia- (szabadentalpia-) változása (a reakciót kísérő szabadentalpia-változás).

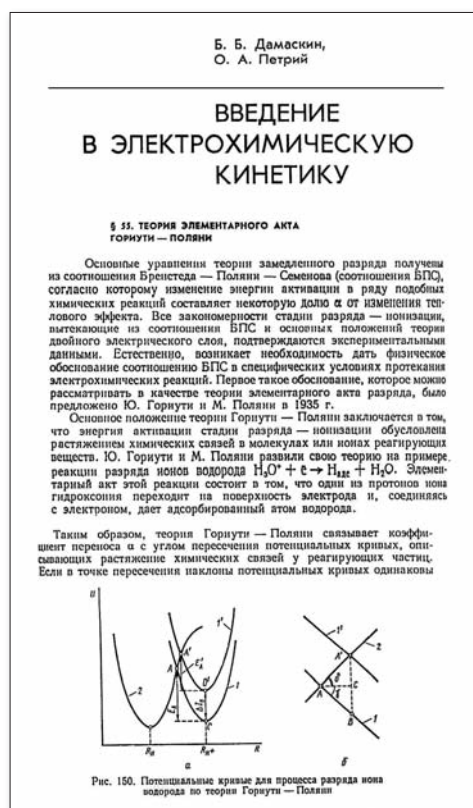
John C. Polanyi (1929, Nobel-díj 1986) a később Polányi-szabálynak hívott összefüggést és az átmenetiállapot-elmélet kidolgozását nevezte édesapja legfontosabb alkotásainak: „Talán a két legfőbb fogalmi újítás, mely Polányi laboratóriumában a manchesteri években született, egyrészt a kémiai reakciók rokon családjában megfigyelt reakcióhő és reakciósebesség közötti pár-

huzamosság levezetése (és magyarázata), másrészt pedig a kémiai reakciók »átmenetiállapot-elméletének« kidolgozása” [2].

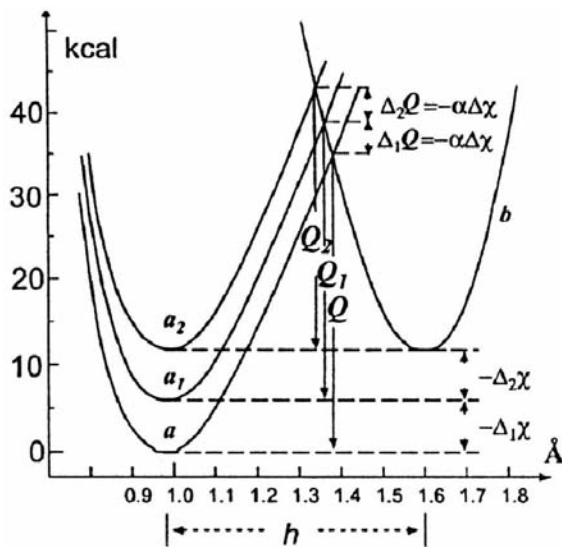
A Polányi-szabályt Horiuti és Polányi cikkének [3, 4] egyik ábrájával tesszük szemléletessé, amelyen az energia a részecskék távolságának függvényében látható (1. ábra).

Az aktiválási energiára (ΔQ) és a reakcióhőre ($\Delta\chi$) a [3] közlemény eredeti jelöléseit használjuk (1. ábra). Megjegyzendő, hogy a parabola alak a harmonikusoszillátor-közelítésből származik. A (2) egyenlet akkor adódik matematikailag, ha a parabola érintett szakaszát egyenessel helyettesítjük, ami általános szokás, ahogy az alábbi könyv (2. ábra) is mutatja, ahol Horiuti és Polányi elméletének fontosságát elemzik. [5]

2. ábra. Horiuti és Polányi elméletének bemutatása Damaszkin és Petrij könyvében [5]



1. ábra. A reakcióhő és az aktiválási hő közötti összefüggés, $\Delta Q = -\alpha \Delta\chi$, $\alpha < 1$ illusztrálása [3]

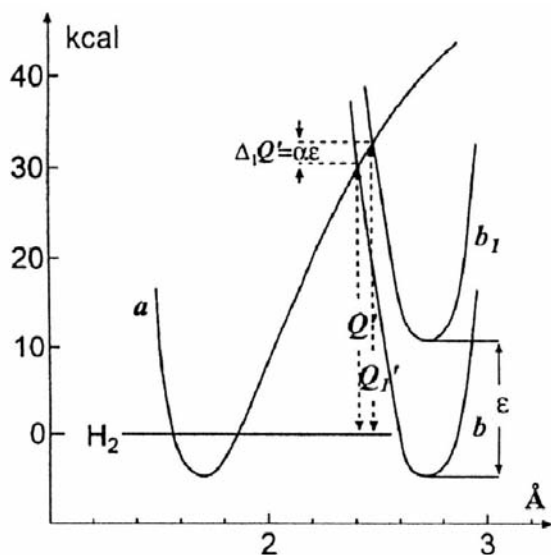


Ezzel az elmélettel fizikai jelentést lehetett adni Erdey-Grúz és Volmer által bevezetett α tényezőnek [4, 6], amit elemi reakcióknál szimmetriatényezőnek (ugyanis értéke függ a parabolagörbe alakjától), általánosságban átlépési tényezőnek nevezünk. Ha egy töltött részecske elektromos erőterbe kerül, annak energiája változik, tehát egy elektrokémiai cellában az elektród potenciáljával változtatni tudjuk az energiáját (a parabola felfelé vagy lefelé mozdul el).

$$\Delta G_c^\ddagger = \Delta G_c^\ddagger + \alpha_c z_{ox} FE \quad \text{vagy} \quad \Delta G_a^\ddagger = \Delta G_c^\ddagger - \alpha_a z_{red} FE \quad (3)$$

ahol ΔG_c^\ddagger és ΔG_a^\ddagger a katódos, illetve az anódos folyamathoz tartozó aktiválási szabadentalpia-változás, ΔG_c^\ddagger az egyensúlyi vagy formális szabadentalpia-változás a két görbe metszéspontjánál, E az elektródpotenciál, F a Faraday-állandó, z_{ox} és z_{red} a reagáló részecske töltése, α_c és α_a a katódos, illetve az anódos átlépési tényező. Katódos folyamatoknál $E < 0$, míg anódosnál $E > 0$, és $\alpha < 1$. Általában $\alpha_a = \alpha_c = 0,5$, ami azzal van összefüggésben, hogy a parabola szimmetrikus, és ettől eltérő, ha ez a feltétel nem teljesül.

Tehát például a $H^+ + e^- \rightarrow H$ elektródreakció esetében a hidrogénionra hat az erőter, a töltés nélküli hidrogénatomra nem (3. ábra).



3. ábra. A $H^+ + e^- \rightarrow H$ reakció potenciálgörbéjének változása az elektródpotenciál függvényében [3], $\varepsilon = z_{H^+} FE$

Horiuti és Polányi cikke (4. ábra) 1935-ben jelent meg, azonban hosszú út, sok számítás és kísérlet vezetett ideig. Ennek főbb lépéseit az alábbiakban nagyon röviden bemutatjuk. Reakciókinetikával, reakciódinamikával Polányi az 1920-as évektől [7] 1949-ig [8] foglalkozott. Érdekes, hogy Polányi [7] cikke megtermékenyítőleg hatott később a magreakciók elméletére is, amint Wigner Jenő (1902–1995, Nobel-díj 1963) publikációjából [9] megtudhatjuk: „A közbenső-mag-modell valamely magreakciót két szukcesszív eseményre bontva értelmez. Az első esemény: az ütköző magok egyesülése egyetlen egységgé, az ún. közbenső maggá. [...] A második esemény a közbenső mag bomlása vagy azokra a magokra, amelyekből képződött, vagy valamilyen más magpárra. [...] Az imént leírt modellt javasolták kémiai reakciók számára is.” [A Wigner idézte cikk: M. Polányi, Z. Physik, 2, 90 (1920)].

Polányi kiindulópontja az volt, hogy a kémiai reakciókra vonatkozó addigi elméletek nem lehetnek érvényesek, mert a két

Grundlinien einer Theorie der Protonübertragung

Elektrolytische Dissoziation; Prototropie; spontane Ionisation und elektrolytische Abscheidung von Wasserstoff an Elektroden; Wasserstoffionenkatalyse

Von J. Horiuti und M. Polanyi

Die Anschauungen, die wir in der Folge darlegen, stellen die Resultate unserer Theorie in vereinfachter Form dar. Da die Fertigstellung der genauen Ausarbeitung, welche unter Berücksichtigung aller erlassbaren Faktoren auch eine genauere Begründung unserer Vorstellungen darlegen soll, im Hinblick auf den Umfang des Materials, längere Zeit erfordert, mag es berechtigt erscheinen, hier zunächst die Ergebnisse in abgekürzter Form mitzuteilen.

1. Einleitung

Unsere Methode schliesst sich an die allgemeine Theorie ionogener Reaktionen von Ogg und Polanyi¹ an. Diese Theorie ist bisher angewendet worden auf die Reaktionen, von Alkalimetalldämpfen mit organischen Halogenverbindungen², sowie auf die Reaktionen von Alkalimetalldämpfen mit den Halogenen³ und den Halogenwasserstoffen⁴, ferner auf die Reaktionen von Na₂-Molekülen mit Halogenatomen⁵. Ausserdem liegen vor Anwendungen auf eine Gruppe von Ionenreaktionen in Lösungen, nämlich auf die elektrolytische Dissoziation und Hydrolyse organischer Halogenverbindungen und auf die Substitution organischer Halogenverbindungen durch Halogenionen⁶. Weitere Untersuchungen über Substitution orga-

¹ Ogg u. Polanyi, Proc. Manchester. Lit. Phil. Soc., 78, 41 (1933–34)

² Unveröffentlichte Resultate von Ogg u. Polanyi.

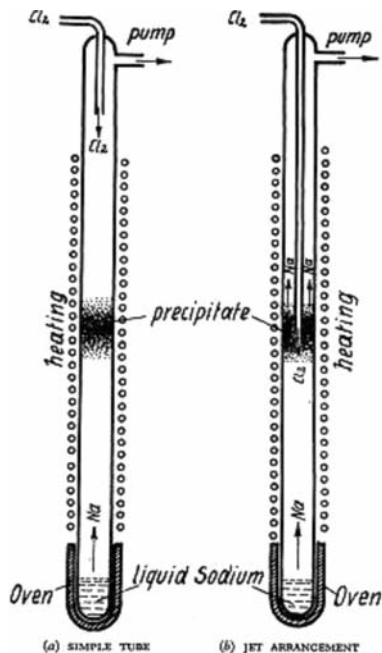
³ M. G. Evans u. A. G. Evans, Trans. Farad. Soc. im Druck.

⁴ Ogg u. Polanyi, Trans. Farad. Soc., 31, 604 (1933)

4. ábra. Horiuti és Polányi cikkének [3] első oldala

irányban lejártszódo reakciók sebességei nem adják ki azt az egyensúlyt, amit a termodinamika törvényei megkövetelnének [1, 2]. Az ütközési elmélet alapján nem kaptak megfelelő értéket a reakciók sebességi együtthatójára. Az Arrhenius-féle törvényt használták azzal a magyarázattal, hogy az aktiválási hő, amely mindig pozitív energiamennyiség, a reakciógátlás leküzdésére szolgál, azaz az átlagosnál nagyobb energiájú molekulák képesek reakcióra. Általában csak termikus aktiválású reakciókkal foglalkoztak. Fotokémiai vagy elektromos kisülés hatására végbemenő reakciókat, amelyekre nem érvényes Arrhenius törvénye, nem vizsgáltak. Az értelmezéshez szükséges molekuláris modell megalkotása várt Polányira és kortársaira, akik már támaszkodhattak a statisztikus mechanika és a kvantummechanika új eredményeire. Jelentős lépés volt az asszociációs és disszociációs reakciókra kidolgozott Polányi–Wigner-féle elmélet [10]. Az egyszerűbb reakció típusra, például $H + H_2 \rightarrow H_2 + H$ vagy $H + HBr \rightarrow H_2 + Br$, Polányi London elméletét [2] alkalmazta, amely szerint az atommagok a klasszikus mechanika törvényei szerint mozognak olyan potenciál szerint, amelyet a kvantummechanika rendel a magok egy adott konfigurációjához (Born–Oppenheimer-közelítés). Ily módon ezeknek a reakcióknak az energiafelületei kiszámíthatók voltak. Az ilyen reakciók aktiválási energiájának megadásánál az elméleti számításokon kívül a mérési adatokra is támaszkodtak.

Gyors reakciók vizsgálatára kifejlesztették a „nagy ritkítású atomi láng” módszert (5. ábra). Ebben a munkában részt vettek magyarok, így Schay Géza (1900–1991) és Bogdándy István (Stefan von Bogdándy 1890–1933) is, akiknek Hans Beutlerrel (1896–1942) együtt a kísérleti technika fejlesztésében volt oroszánrszük [11–13]. Schay Géza a magyar fizikai kémiai meghatározó, iskolateremtő személyisége lett, különösen reakciókinetikai, termodinamikai és adszorpciók kutatásai voltak jelentősek.

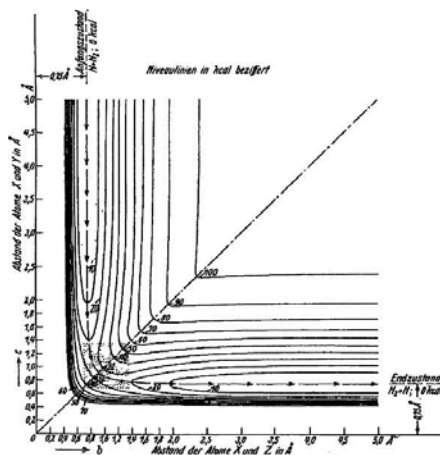
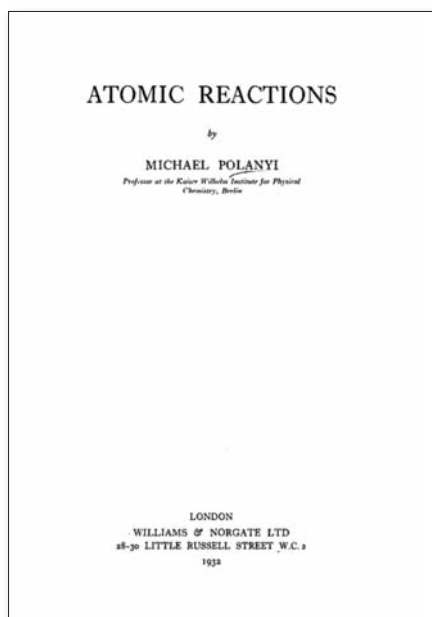


5. ábra. Polányi és munkatársai egyik kísérleti eszköze egyik kísérleti eszköze reakciósebességek mérésére

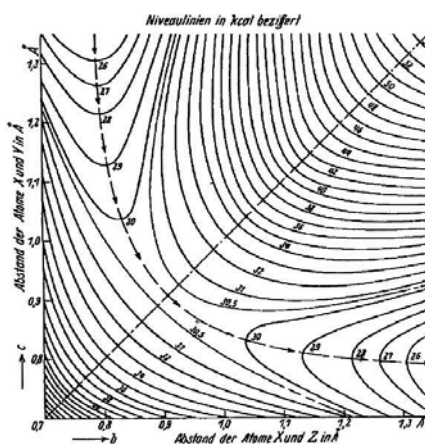
Az 5. ábrán a reakció: $\text{Na} + \text{Cl}_2$. Az egymással reakcióba lépő gázok a kb. 1 m hosszú, 3 cm átmérőjű cső két végén lépnek be nagyon kis nyomás mellett. A reakció a cső közepén megy végbe. Itt mérték a kemilumineszcenciát vagy a szilárd lerakódást a cső falán. A reakciózóna hosszából a diffúzió és a gázkinetikai hatáskeresztmetszet ismeretében meg lehet becsülni, hogy hány szóródáshoz vezető ütközés történt a belépő atomok (molekulák) között a reakciót megelőzően [14]. Polányi a korai eredményeket könyvben foglalta össze 1932-ben (6–8. ábra).

A potenciálisenergia-felületeket Polányi és Eyring [15–16], illetve az általuk kidolgozott átmenetiállapot-módszer alapján H. Pelzer és Wigner [17] sikerrel alkalmazta az aktiválási energia és a reakciósebesség kiszámítására. Érdekes, hogy Wigner nemcsak Polányi mellett dolgozott a reakciókinetika elméletén, hanem még azután is évekig, sőt a Polányi vetélytársává váló Eyringgel is publikált [18–22].

6. ábra. Polányi addigi eredményeit összefoglaló könyvének címlapja [14]

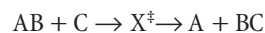


7. ábra. Három, egyvonalban elhelyezkedő hidrogén rezonancia-energiája a köztük lévő távolság függvényében a H_2 -molekula optikai energiagörbéje alapján számolva, a Coulomb-kölcsönhatást elhanyagolva [15]



8. ábra. A 7. ábra nyeregpontról körüli része kinagyítva [15]

A 8. ábra topográfiai térképéhez hasonló, de a magassági vonalak azonos potenciális energiájú felületeket jelölnek. Az aktiválási potenciálgát nyergének megfelelő konfigurációjú rendszert aktiválási komplexumnak nevezik. Az átmeneti állapotban lévő komplexumra meg lehet adni a termodinamikai függvényeket, ehhez a kinetikai mérések szolgáltatnak adatokat, és ebből a komplexum mibenlétére lehet következtetni. A függvényeket a statisztikus mechanika módszereivel lehet kiszámítani. A statisztikus elmélet az aktivált komplexum (X^\ddagger) reagáló anyagokból való képződését asszociációs reakciónak tekinti, amelynek endoterm hőeffektusa az aktiválási energia.



Amennyiben egyensúlyra vezető reakcióról van szó, akkor az egyensúly elérése után a két egymást követő lépésnek ugyanolyan sebességgel kell végbemennie mindkét irányba [23]. Az egyensúlyi állandót a komponensek és az aktivált komplexum állapotösszegeiből a zéruspont-energiákat figyelembe véve lehet kiszámolni. Az aktivált komplexumnak a reakciótermékekre való szétesését úgy veszik figyelembe, hogy a termékek állapotösszegeből leválasztják a szétesésre vezető normálrezgést [1]. Igazából már Angliában születtek Polányi azon cikkei, amelyek reakciókinetikai elmélete, az átmenetiállapot-elmélet betetőzését jelenteli.

Polányi Mihály

Fiatal évei és munkásságának kezdete Magyarországon



9. ábra. Polányi Mihály aláírt arcképe [2]

Polányi Mihály (Budapest, 1891. március 11. – Northampton, Egyesült Királyság, 1976. február 22.) (9. ábra) Pollacsek Mihály (1848–1905) és Cecilia Wohl (1861–1939) ötödik gyermekeként született [2, 24–30]. Apja a zürichi Eidgenössische Technische Hochschule hallgatója volt, itt szerzett mérnöki diplomát 1870-ben. Építésvezetői állást kapott a svájci államvasutaknál. Komoly feladatokkal bízták meg, így 1876-ban ő vezette a Seebach–Zürich vasútvonal építését. Ezt követően Bécsben vállalt vasútervezési munkát. 1892-ben Budapestre költöztek, itt az apa építési vállalkozóként folytatta a munkáját. Magyarországon több mint 1000 km vasutat épített a vállalkozása. A gyerekek gondos nevelésben, az elemi iskolák helyett magántanításban részesültek. Már korán

10. ábra. Az 1882-ben, Feszty Adolf tervei szerint épült Foncière-palota korabeli képeslapon (FSZEK Budapest Gyűjtemény)



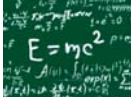
elsajátították a magyaron kívül a német és az angol nyelvet is. A család jómódban élt, azonban a századvégi gazdasági válság miatt 1899-ben elvesztették vagyonuk és jövedelmük nagy részét. Ki kellett költözniük a Foncière-palotából (Andrássy út 2.) (10. ábra) lévő nagypolgári lakásukból. A ház még ma is az Andrássy út elejének ékessége, noha a 2. világháborúban elpusztult kupoláját nem állították helyre. Polányi Mihály születésének 100. évfordulójára a ház falára emléktábla került (11. ábra).



11. ábra. A Polányi család emléktáblája az Andrássy út 2. házon

Polányi édesapja Németországban vállalt munkát. Vélhetően a megfeszített munka és a megrázkódtatások hatása miatt 1905-ben elhunyt. Polányi gimnáziumi tanulótársai korrepetálásával kereste meg a család megélhetéséhez szükséges pénz egy részét. A Magyar Királyi Tanárképző Intézet Gyakorló Főgimnáziumába járt. Ma ez az iskola az Eötvös Loránd Tudományegyetem Gyakorlóiskolája és Trefort Ágoston nevet viseli. Ebből a gimnáziumból sok kiválóság került ki, így Kármán Tódor (1881–1963), Szilárd Leó (1898–1964), Hevesy György (1885–1966), Erdey-Grúz Tibor (1902–1976), Teller Ede (1908–2003), Kürti Miklós (1908–1998), valamint Schay Géza, csak azokat említve, akik a jelen írásban is szerepelnek.

Az érettségi után, 1908. szeptember 23-án Polányi Mihály orvostanhallgató lett a Budapesti Magyar Tudományegyetemen. Ez édesanyja kívánsága volt, aki szerette volna azt, hogy fiának biztos megélhetése legyen. Polányi első orvosi szigorlatát 1910 júniusában tette le kitűnő eredménnyel. Orvosi kémiából Buchböck Gusztávnál (1869–1936) kitűnőt kapott. Egyre inkább a kémia iránt érdeklődött, egyes orvosi tárgyakból kevésbé volt szorgalmas. Tangl Ferenc (1866–1918) orvosprofesszor hatására, aki akkor az Állatorvosi Akadémián dolgozott, Polányi már elsőévesként elkezdte a kutatómunkát. Első, biokémiai tárgyú dolgozata 1910-ben jelent meg. Ekkor kezdett el termodinamikával is foglalkozni.



1912-ben Karlsruheba ment tanulmányútra Georg Bredig (1868–1944) kémiai intézetébe, aki katalízissal, reakciókinetikával és elektrokémiával foglalkozott. Hazatérte után írt dolgozatai a termodinamika és a kvantumhipotézis összefüggéséről, valamint a termodinamika harmadik főtételének kiterjesztéséről még Einstein tetszését is elnyerték. Einsteinnel később több levelet is váltott, a Chicagói Egyetem könyvtárában található Polányi-archívum összesen hármát őriz – 1920-ból, 1922-ből és 1932-ből. Keves olyan 20. századi tudós van, akivel Polányi nem levelezett. Ebben az archívumban számos levél található Max Born-tól, Niels Bohrtól, William H. és William L. Braggtól, Bredigtől, Otto Hahntól, Fritz Habertól, Werner Heisenberg-től, Hevesy György-től, Kürti Miklóstól, Max von Lauétól, Walter H. Nernst-től, Edwin Schrödinger-től, Szilárd Leótól, Kármán Tódortól és Wigner Jenőtől. Thomas Kuhn amerikai tudományfilozófussal folytatott levélváltásából pedig az derül ki, hogy a későbbiekben nagy karriert befutó „paradigma” fogalmát Kuhn Polányitól vette át.

Polányit 1914. április 7-én fogadták orvosdoktorrá. 1914. július 28-án kitört az 1. világháború, hősiességéből pedig katonaoorvos lett. A szerbiai hadszíntéren nap mint nap rengeteg súlyos sebesültet látott el, és a járványokkal is meg kellett küzdenie. Az ifjú segédorvost hamarosan főorvossá nevezték ki, de nemsokára ő is megbetegedett. Először diftériát kapott, majd vesebeteg lett. Még ellátott ugyan kórházi szolgálatot, de idővel nyugdíjazták. A katonai szolgálat alatt is folytatta kutatásait, és levelezett a vezető német tudósokkal. A Kir. Magyar Természettudományi Társulat kémiai-ásványtani szakosztályának 155. ülésén, 1917. január 30-án tartott előadásáról ez áll az emlékeztetőben: „Polányi Mihály az adszorpció címen e jelenség természetét kutató vizsgálatait terjesztette elő. Az előadás a M. Ch. Folyóiratban megjelenik”. (Meg is jelent – hosszúsága miatt – több részletben.) Az adszorpció tárgykörében írt disszertációját be tudta nyújtani a Budapesti Tudományegyetemen, és 1918-ban megszerezte bölcsészdoktori címet. A többrétegű adszorpció modell, amit Polányi felállított, a hazai és a német kollegák kritikáját is kiváltotta. Csak két évtized után derült ki, hogy Polányinak volt igaza. Ehhez az kellett, hogy Fritz London (1900–1954) megalkossa a diszperziós erők elméletét, amivel magyarázni lehetett a felület és az adszorbeálódó molekulák közötti, illetve a molekulák egymás közti kölcsönhatását [31]. Az adszorpció és a kemisorpció problémájával gyakorlatilag egész vegyészeti pályafutása alatt foglalkozott.

Polányi Mihály ugyan egyik alapító tagja volt a Galilei Körnek, aminek első elnöke (1908–1910) bátyja, Károly volt, de bátyjával ellentétben nem vonzódott a politikához, és szkeptikus volt a szocialista ideológiákkal kapcsolatban. Polányi Károly (1886–1964) elhagyta Magyarországot 1919-ben, a Tanácsköztársaság kikiáltása után, mert ellenezte a proletárdiktatúrát. Ő is világhírű tudós lett, gazdaságtörténetet és szociológiát tanított az Oxfordi Egyetemen, majd Kanadában, illetve a New York-i Columbia Egyetemen.

A politikai helyzet miatt és tudományos törekvéseinek megvalósítása végett Polányi Mihály úgy döntött, hogy visszatér Né-

metországba. Németországi és angliai életével és munkásságával folytatjuk a 2. részben.



IRODALOM

- [1] Erdély-Grúz T., Schay G., Elméleti fizikai kémia II. Tankönyvkiadó, Budapest, 498–554.
- [2] E. P. Wigner, R. A. Hodgkin, Michael Polányi. Biographical Memoirs of Fellows of Royal Society (1977), 423–448 [magyarul Polányiana (2002) 1–2/11, 19–62].
- [3] J. Horiuti, M. Polányi, Grundlinien einer Theorie der Protonübertragung. Acta Physicochimica U.R.S.S. (1935) 2, 505–532.
- [4] Inzelt Gy., Egyetlen cikk elég a halhatatlansághoz, avagy Polányi Mihály elektrokémiai kirándulása. Polányiana (2003) 12, 75–90.
- [5] B. B. Damaszkín, O. A. Petrij, Vvegyenyije v elektrokhimiceszkuju kinetiku (Bevezetés az elektrokémiai kinetikába). Vűszsaja skola, Moszkva, 1975.
- [6] Inzelt Gy., Milestones of the development of kinetics of electrode reactions. J. Solid State Electrochemistry (2011) 15/7–8, 1373–1389.
- [7] M. Polányi, Zur Theorie der Reaktionsgeschwindigkeiten. Z. Physik (1920) 90–110.
- [8] M. Polányi, Mechanism of chemical reaction. Endeavour (1949) 8, 3.
- [9] E. P. Wigner, Richtmyer Memorial Lecture, 1955. On the development of the compound nucleus model. American Journal of Physics (1955) 23, 371–380. A közbensőmag-modell fejlődése. Wigner J., Szimmetriák és reflexiók. Válogatott tanulmányok. Gondolat, Budapest, 1972. 121–123.
- [10] M. Polányi, E. Wigner, Formation and decomposition of molecules. Z. Physik (1925) 33, 429–434.
- [11] H. Beutler, M. Polányi, Über hochverdünnte Flammen. I: Flammen im einfachen Rohr. Vorläufige Analyse des Reaktionsmechanismus. Reaktionsgeschwindigkeit, Leuchtvorgang. Z. phys. Chem. (1928) B1, 3–20.
- [12] S. von Bogdandy, M. Polányi, Über hochverdünnte Flammen. II.: Düsenflammen. Anstieg der Lichtausbeute bei wachsendem Partialdruck des Natriumdampfes. Z. phys. Chem. (1928) B1, 21–29.
- [13] M. Polányi, G. Schay, Über hochverdünnte Flammen. III.: Die Natrium-Chlorflamme. Beweis und Ausbau des Reaktions- und Leuchtmechanismus. Die beiden Reaktionstypen. Überblick über die ganze Untersuchung. Z. phys. Chem. (1928) B1, 30–61.
- [14] M. Polányi, Atomic reactions. Williams & Nordgate Ltd., 1932.
- [15] H. Eyring, M. Polányi, Über einfache Gasreaktionen. Z. phys. Chem. (1931) B12, 279–311.
- [16] H. Eyring, The energy of activation for bimolecular reactions involving hydrogen and the halogens, according to the quantum mechanics. J. Am. Chem. Soc. (1931) 53, 2537–2549.
- [17] H. Pelzer, E. Wigner, Über die Geschwindigkeitskonstanten von Austauschreaktionen. Z. phys. Chem. (1932) B 15, 445–471.
- [18] E. Wigner, Über das Überschreiten von Potentialschwellen bei chemischen Reaktionen. Z. phys. Chem. (1933) B 19, 203–216.
- [19] E. Wigner, H. Eyring, On the Rate of Chemical Reactions. Scientific Monthly (1937) 44, 564–567.
- [20] E. Wigner, Calculation of the Rate of Elementary Association Reactions. J. Chem. Phys. (1937) 5, 720–725.
- [21] E. Wigner, The Transition State Method. Trans. Faraday Soc. (1938) 34, 29–41.
- [22] E. P. Wigner, Some Remarks on the Theory of Reaction Rates. J. Chem. Phys. (1939) 7, 646–652.
- [23] Veszprémi T., Általános kémia. Akadémiai Kiadó, Budapest, 2008, 435–462.
- [24] Czeizel E., Tudósok, gének, tanulságok. A magyar természettudós géniuszok családfaellenőzése. Galenus Kiadó, Budapest, 2006, 153–186.
- [25] Szapor J., A világhírű Polányiak. Egy elfelejtett család regényes története. Aura Kiadó, 2017.
- [26] Inzelt Gy., Vegyönyhájjában szintén megteszi. A kémiáról és más dolgokról. Akadémiai Kiadó, Budapest, 2006. 291–312.
- [27] Hargittai I., Móza Sz., Beck M., Bérces T., Keszei E., Inzelt G., Bényei A., Schiller R., Fűstöss L., J. C. Polányi, G. A. Olah, G. A. Somorjai, Polányi Mihály, a kémikus. Polányiana (2003) 12 (1–2) 3–129.
- [28] M. J. Nye, Working Tools for Theoretical Chemistry: Polányi, Eyring, and Debates Over the “Semiempirical Method”. J. Computational Chemistry (2007) 28, 98–108.
- [29] B. Friedrich, Michael Polányi (1891–1976) The Life of the Mind. Bunsen-Magazin (2016) 18, 160–167.
- [30] G. Palló, Michael Polányi’s Early Years in Science. Bulletin History of Chemistry (1998) 39–43.
- [31] M. Polányi, F. London, Über die atomtheoretische Deutung der Adsorptionskräfte. Naturwissenschaften (1930) 18, 1099–1100.



Béke és civilizáció

Polányinak mint generációja minden tagjának életét megváltoztatta az 1. világháború. Hosszú tanulmányban fejtette ki azokat a gondolatait, amelyek tartós békehez vezethetnének. Többek között ezt javasolta: „Civilizációnk fennmaradását csak az egyesült Európa eszméje biztosíthatja; ne várjunk, míg a népek elkeseredése forradalmak szenvedéseit át valósítsa meg azt. [...] Csak gyors, határozott és messzemenő rendezése a nemzetközi jognak a népek önrendelkezési joga alapján mentheti meg Európát oly megrázkódtatástól, mely borzasztóbb lenne, mint minden, amit eddig átéltünk. Csak egy megoldás van: a legfőbb hatalmat a nemzetek földé helyezni, állandó európai hadsereget állítani fel, mely az Egyesült Államokkal egyetemben biztosítsa civilizációnk uralmát a földön.”

Polányi M.: A békeszerzőkhöz. Nézetek az európai háború és béke feltételeiről. Huszadik Század (1917) szeptember–október



Kutasi Csaba

Kompozitanyagok a repülőgépgyártásban

A kompozitszerű hajléképtetés (pl. sár/szalma, falagyag) az ősidők óta létezik. A mongol harcosok (i. sz. 12-ben) társított anyagokból (szarvasmarhainak és -szarv, bambusz, fenyőgyantával kevert selyem) készítettek olyan íjakat, amelyek gyorsabbak és erősebbek voltak minden addiginál. Az időben nagyot előre lépve, 1907-ben Leo Hendrik Baekeland (belga származású amerikai vegyész) kifejlesztette az első szintetikus gyantát, a bakelitet. A műanyag igen törékeny volt, ezért lágysággal és cellulózzal kombinálva alkotta meg a modern kompozitot.

Az 1930-as évek elején két amerikai vegyipari vállalat (az American Cyanamid és a DuPont) újabb polimerekkel kísérletezett, mindkettőn önállóan állították elő a *poliészter gyantát*. Ennek az évtizednek a végén kifejlesztették (Owens-Illinois Glass Company) az *üvegszálhúzást*, majd az *üvegszövet-előállítás*at. Az üvegszálás szerkezet poliészter gyantával társítva nagy szilárdságú és könnyű kompozitok gyártását tette lehetővé. 1942-ben Ray Greene mérnök (Ohio) készített egy üvegszálból és poliészter gyantából felépülő csónakot. A második világháború alatt nagy igény támadt a katonai légi és vízi járművek súlyának csökkentésére, a szilárdság és a tartósság, valamint az időjárás-állóság növelésére. Az 1950-es évek elején olyan gyártási módszereket fejlesztettek ki (pl. pultrúzió, nagyméretű száltekerceselés stb.), amelyek az úrkutatás elindításához is hozzájárultak. Később a felfedezett *nananyagok* szálakba és gyantákba történő beépítése újabb fejlődést indított be a kompozitok területén.

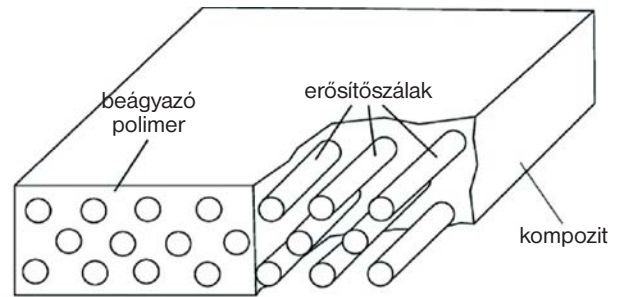
A kompozitokról általában

A kompozitok heterogén rendszerek, amelyeket egy vagy több különböző anyag társításával (összekapcsolásával) alakítanak ki. Az egyik alkotó a *diszperz fázis* (vázszerkezet), ezt veszi körül a másik összetevő, a folytonos *mátrix*. A részt vevő anyagok kémiai összetétele különböző. A társított szerkezettel olyan tulajdonságkombinációk hozhatók létre, amelyek az alkotókkal külön nem valósíthatók meg. A fázisok közötti határfelületek a kompozit képességeit (főleg mechanikai tulajdonságok javítása) alapvetően befolyásolják.

A kompozitanyagok előállítása során gyakran külön képezik a diszperz és a mátrixfázist, és utólagos keveréssel alakul ki a társított anyag. A diszperz összetevő részecskéinek méretcsökkenése vezetett az in-situ (eredeti helyén) módszerhez, az *eutektikum* létrehozásához.

A kompozitokat az anyagpárok szerint, a mátrix (pl. polimer stb.) alapján és a diszperz összetevők morfológiája (pl. szálás, lemez laminátum stb.) figyelembevételével csoportosítják (1. ábra).

A repülőgépgyártásban főként a *szálerősítéses kompozitok* kerülnek előtérbe. Ezek javítják a szilárdság/tömeg arányt, valamint



1. ábra. A kompozitok elvi felépítése

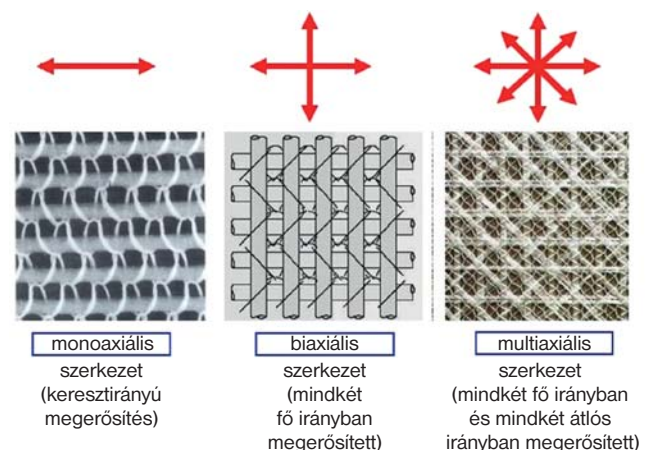
a tribológiai (pl. az egymásra ható és elmozduló felületek súrlódása) jellemzőket.

A szilárdság jelentős növeléséhez általában elengedhetetlen a szálak és a mátrix közötti erős *adhézió*. Ez úgy érhető el, ha a két fázis határfelületén a mátrix optimálisan „nedvesíti” a váz szerkezetet. Például szénzál alumíniumolvadékba való beágyazásához a szálat nikkellel vagy tantállal előzetesen be kell vonni.

Az igény szerinti fokozott *szívósságot* nagy szilárdságú és merev szálanyagok beépítésével lehet elérni. Például az alkalmas kerámiaszálak jelentős szilárdsággal rendelkeznek, ugyanakkor ridegségük miatt nem alakíthatók képlékenyen. Ennek ellensúlyozására kivételesen a szál és a mátrix között közepes erősségű kötést szükséges kialakítani. Fokozott túlterhelés esetén a *mikrorepedés* először csak a kötés bomlását okozza. A további nagyobb igénybevétel miatt következhet be száltörés, ami nem jár együtt a mátrix azonnali tönkremenetelével.

A szálasanyagok [roving (lapított végtelenszálköteg), vágottszál stb.]] elrendezésével, geometriájával, *térfogatarányával* lehet befolyásolni a kompozit különböző képességeit. Az egyirányú, az

2. ábra. Különböző orientációjú vázerősítő szerkezetek





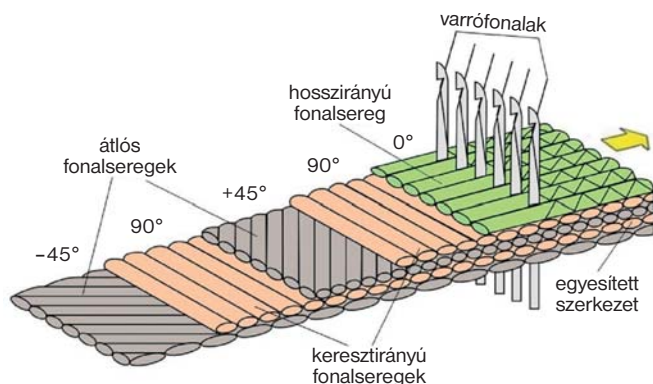
egymással szöglet bezáró folytonos, véletlen orientációjú rövid és hosszabb vágott szálak az igénybevételi körülményekhez igazodhatnak. A szálak hosszúságának és átmérőjének nagyobb hányadosa (akár ezerig), a szálak térfogatarányának növelése a szilárdságot fokozza (2. ábra).

A vázerősítők jellemzői

A kompozit vázerősítő szálanyagok többfélék lehetnek, ugyanakkor az elvárások közesek:

- *kis fajlagos sűrűség* mellett kiváló mechanikai tulajdonságok [szilárdság, modulus (az adott anyag merevségéről ad információt, ill. arányossági tényező a húzó/nyomó feszültség és a fajlagos nyúlás kapcsolatában)];
- *optimális kötődés* a mátrixszál és hasonló hőtágulási jellemzők;
- *kis átmérő, amely nagy fajlagos felületet* és kevesebb hibahelyet garantál.

A szálanyagok nemcsak elemi és végtelenszálak formájában, hanem *szövött* vagy *kötött* szerkezetek, valamint *összedolgozott fonalseregek* formájában kerülnek felhasználásra. Előfordul, hogy különböző anyagú szálakat építenek be az azonos mátrixba, ezek az ún. *hibrid kompozitok* (3. ábra).

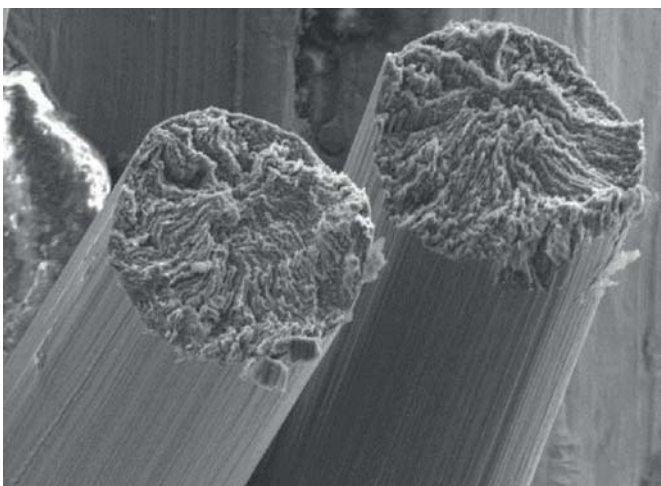


3. ábra. Többrétegű, összekapcsolt fonalseregekből felépülő vázszerkezet

A felhasznált szálanyagok jellegzetes fajtái:

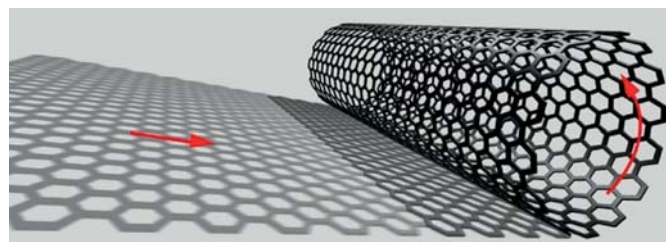
A *szénszál*at az alkalmas polimerekből (pl. poliakrilnitril mint prekursor) ellenőrzött gázatmoszférában végrehajtott termikus bontással (pirolízis) állítják elő. A szénszálak tengelyirányba ren-

4. ábra. Szénszál pásztázó elektronmikroszkópos felvétele



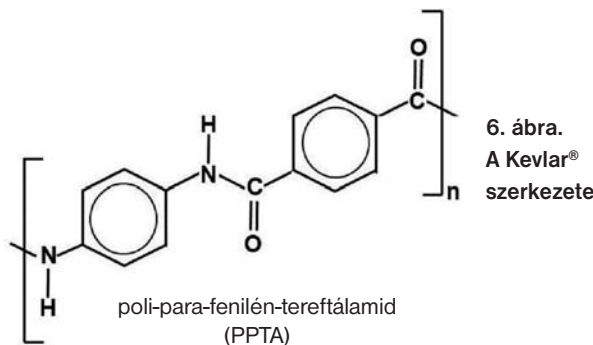
dezódott grafitcsíkokból épülnek fel, szerkezetük erősen torzult *grafitácsra* hasonlít (közöttük a változó távolság és a termikus bomlásnál keletkező gázok miatt pórusok fordulnak elő). [A kristályos grafitban a rács alapsíkjában levő szénatomok között erős kémiai kötések vannak, így a nagy modulus ($E = 1,060 \text{ GPa}$) jellemző, a síkok közötti viszont kicsi ($E = 36,5 \text{ GPa}$).] A szénszálak modulusa az előállítás körülményeitől függően változó ($E = 230\text{--}500 \text{ GPa}$), tehát a grafiténál kisebb a szilárdságuk. A felhasznált multifilamentet (szálköteget) több ezer kb. $8 \mu\text{m}$ átmérőjű szál alkotja (4. ábra).

A *szén nanocsövek* felhengerelt grafitcsíkok, átmérőjük $0,5\text{--}100 \text{ nm}$ (hosszuk rendszerint a μm -es tartományba esik), esetenként több koncentrikus csőből épülnek fel. Fejlesztések folynak a fullerén vázerősítők nanokompozitokban való alkalmazására. Ezeket a nagy szilárdságú ($E = 200\text{--}1000 \text{ GPa}$) képződményeket a szén elektromos ívben vagy lézerral történő elpárologatásával nyerik (5. ábra).



5. ábra. Szén nanocső képzése grafitból

A polimerszálak közül az *aromás poliamidok* gyakran alkalmazott kompozit vázerősítők. Ennek az aránylag régóta felfedezett szintetikus szálnak a gyártását hosszú ideig nehezítette a magas olvadáspont előtti bomlás (így nem volt ömleszthető a nagy-molekulás anyag a szálképzéshez), valamint alkalmas oldószerének átmeneti hiánya. A kellő megoldást a határfelületi és az alacsony hőmérsékletű oldószeres polikondenzáció bevezetése jelentette (utóbbinál a polimer oldat közvetlenül felhasználható szálképzésre). Az aromás poliamidoknál meghatározó az ún. folyadék-kristályos polimer szerkezet (átmenet a folyékony és a kristályos állapot között), amellyel a pálcika alakú, merev láncmolekulák térbeli elfordulása meggátolható (így garantálható a nagy szilárdságot biztosító belső szerkezet). Például a paraaramid *Kevlar®* száltípust alkalmazzák szálerősítésű anyagként (6. ábra).



Ismertek *fém mátrixú* kompozitok is. Ezek szemcsés változatait a fémbe ágyazott részecskék (keményfémek vagy kerámiaanyagok) alkotják. A szálak típusoknál a fémbe másik fém, két vagy több fémes elemből képzett intermetallikus vegyület vagy kerámiaszálak kerülnek. A szálerősítésű könnyűfém-kompozitokat (pl. szén- vagy bórszállal erősített alumínium) a repülőgép- és járműgyártásban alkalmazzák.



Mátrixanyagok

A kompozitok mátrixanyagaként főként hőre lágyuló, kisebb mértékben hőre keményedő polimereket használnak.

A *hőre lágyuló* műanyagokat magas hőmérsékleten képlékenyen állapotban alakítják, főbb mátrix anyagaik a következők:

A *polipropilén* nagy mennyiségben alkalmazott mátrixanyag, főleg gépkocsialkatrészek készülnek belőle. Az üvegszálalás polipropilénből gépipari termékeket gyártanak.

Polifenilén-szulfid-alapú mátrixkompozitból készítik a repülőgépek szárnyának mozgatható belépőjét, az ún. orrsegédszárnyat.

Az *alifás poliamidok* nagy szilárdsággal, ütés- és kopásállósággal, kedvező hőállósággal és sűrűlódási jellemzőkkel rendelkeznek. Vegyszerállóságuk jó (kivételek: savak), ezért üvegszálalás változatokat – többek között – a szénhidrogéniparban hasznosítják.

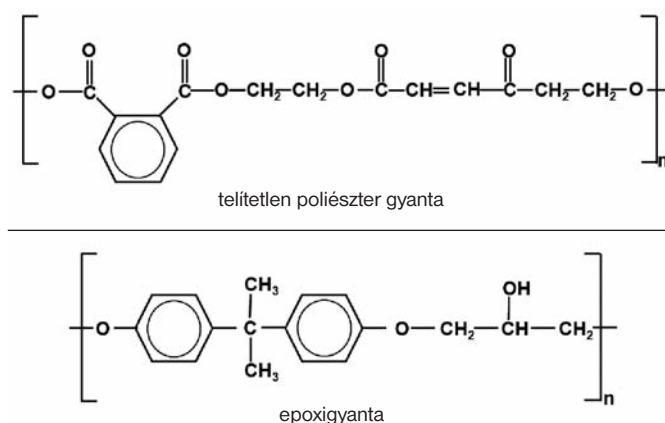
A *hőre keményedő* mátrixanyagok térhálós szerkezetét kémiai reakció eredményeként érik el a szerszámban készülő kompozit kialakítása során. Hő formájában energiát visznek be a rendszerbe, így alakítható állapotba kerül a mátrixanyag, ezt követi az formaadás és az alakrögzítés hűlés/hűtés következtében. Az erősítőszálak megfelelő megválasztásával nagyobb teherbírási szerkezetek gyárthatók. Ebbe a kategóriába sorolják tipikusan a következő mátrixanyagokat:

A *telítetlen poliészter* (UP) gyanta viszkózus keverék, amely tulajdonképpen sztirolban oldott poliészter oligomer. Szobahőmérsékleten térhálósodik, a gélesedés magától megindul. Az üvegszállal erősített nagy szilárdságú szerkezeti anyagok (pl. vízi járművek, gépkocsikarosszéria-elemek) iniciátorral gyorsított láncreakció során készülnek.

Az *epoxigyanta* (EP) epoxi-poliéter és fenol vagy epoxi-poliéter és amin poliaddíciója során képződik. (Az „epoxi” elnevezés az alapvegyület két szénatomja közötti oxigénatomot tartalmazó kémiai csoportra utal.) Kis zsugorodású, jó tapadású és mechanikai tulajdonságú, környezeti hatásoknak ellenálló tulajdonságai miatt az így kialakított mátrixokat sokrétűen hasznosítják a repülőgépgyártásban, az elektronikában és az űrtechnikában.

Az *egyéb műgyantatípusok* közül a vinil-észter-, furán- és akrilgyanták említendők, amelyeket speciális tulajdonságok elérésére alkalmaznak mátrixként (7. ábra).

7. ábra. Mátrixanyagok



Kompozitok a repülőgépekben

A kompozitokat széleskörűen alkalmazzák a repülőgépiparban, miután könnyűek, a magas hőmérsékletnek ellenállnak, korrózióállóak, kedvező szakítószilárdsággal és nyomásállósággal, kellő

hajlítási és csavarási ellenállással rendelkeznek. Ennek alapján lehetővé teszik a nagy teljesítményű, gazdaságos repülőgéptervek megvalósulását. Ezekkel a társított anyagokkal a fémötvözetekéhez hasonló *szerkezeti szilárdság* érhető el, de számottevően *kisebbs tömeggel*. Használatukkal csökken az üzemanyag-fogyasztás, mérsékelhetők a repülőgépek közvetlen üzemeltetési költségei. A társított anyagok elősegítik a különféle formák kialakítását, továbbá rétegezhető, még úgy is, hogy a vázerosztók minden rétegben más-más irányban helyezkedhetnek el. A kompozitszerkezeteket alkotó anyagok megőrzik azonosságukat (nem oldódnak és más módon nem olvadnak egymásba), ugyanakkor a hibrid anyag *javított szerkezeti tulajdonságokkal* rendelkezik. Olyan szerkezet is létesíthető, amely az egyik irányba hajlik, de egy másikba nem.

Az alapkompózitban az egyik összetevő az ún. diszperz rendszer (alapállvány, tartóváz, erősítőszerkezet), és a másik anyag erre épülve megerősíti a kész anyagot. A vázerosztó például magas hőmérsékleten és nyomáson az igényelt formába kerül, ezt követően *folyékony műgyanta* tölti ki a szerszámot, és lehűtésekor alakul ki a nagy szilárdságú kompozit. Amennyiben *húzó igénybevétel* lép fel és ha a kompoziton belüli szálanyagok egy vonalban állnak a kifejtett erő irányával, biztosított a nagy szilárdság. Az optimális nyomásállóság a vázszerkezet tapadási és merevségi tulajdonságainak eredménye. A polimer (gyanta) a szálakat mintegy egyenes oszlopként tartja fenn, így kihajlásuk nem következik be.

Eleinte a gyantamátrixba ágyazott *üvegszálakból* felépülő kompozitok terjedtek el. Az üvegszálakat először az 1950-es években használták szélesebb körben csónakok és autokarosszériák készítéshez, valamint a *Boeing 707* utasszállító repülőgépben mindössze két százalékos előfordulással. A *Boeing 787 Dream-liner* volt az első olyan repülőgép, amelyben az alumíniumötvözet helyett *kompozitanyagokból* készültek a fő szerkezeti elemek (például váz, tartók is). Előfordult a fejlesztések során, hogy az *üreges szárnytest* megépítéséhez használt kompozitanyagok merevsége nem volt megfelelő, de *újabb konzolok* beépítésével sikerült az elvárt ellenálló képességet elérni.

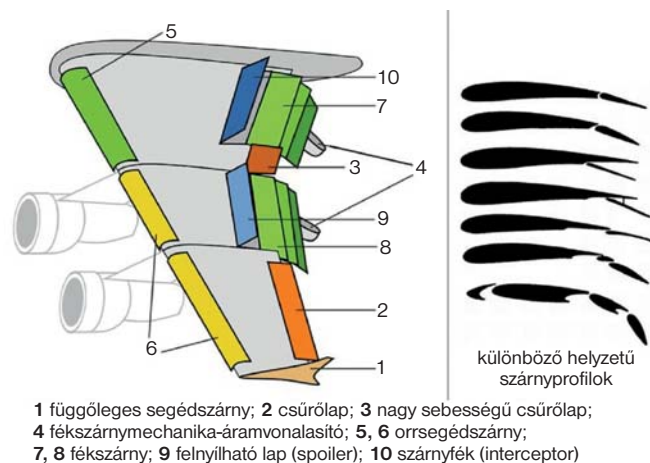
A kompozit alkatrészek eredményeképpen a Boeing 767-es sorozathoz képest *20%-os üzemanyaghatékonyság-növekedést* értek el (8. ábra).



8. ábra. Kompozitalkalmazások a repülőgépen

A fejlődés abba az irányba mutat, hogy a repülőgépek kompozit tartalma a *70%-ot* is éri majd (9. ábra).

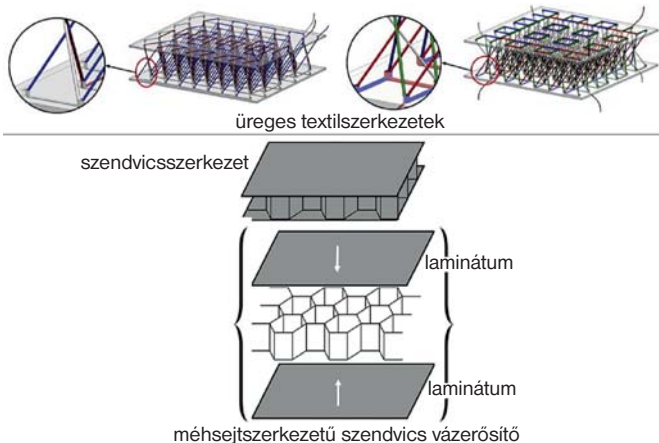
A repülőgép-kompozitok terén a *szénszál-erősítésű* műanyag (CFRP, carbon fibre reinforced polymer), valamint a *kevlár* (aro-



1 függőleges segédcsárny; 2 csűrőlap; 3 nagy sebességű csűrőlap; 4 fékcsárnymechanika-áramvonalasító; 5, 6 orrsegédcsárny; 7, 8 fékcsárny; 9 felnyíltható lap (spoiler); 10 szárnyfék (interceptor)

9. ábra. A kompozitból készült repülőgépszárny részei

más poliamid) és a műgyanta rétegzett kombinációi is kezdtek elterjedni. Az esetleges problémás leszállás miatti tűz esetén mérgező gőzök keletkezhetnek, de a kompozit égéstermékai nem veszélyesebbek, mint a tipikus repülőgépvázakból származó anyagok. Az archaikus üvegszál-as hibridanyagokat egyre jobban felváltják a fejlettebb *szénlaminátumok* és *szén-szendvics kompozitok*. A szénszál-as laminátum két vagy több, egyrétegű lemezből álló szerkezeti rész. A rétegek közötti a kapcsolási hatás csökkenthető vagy akár el is hagyható, hogy a síkban fellépő belső erők okozta hajlítót, csavarót és síkdeformációt elkerülhető legyen. A szendvics-szerkezetek lehetnek *méhsejt* jellegűek vagy készülhetnek például mikrogömböket tartalmazó poliészter nemszótt anyagokból vagy egyéb textiltechnológiai vázerezítőkből. A kompozitvázat például alumíniumszalagokkal is ellátják a villámvédelem érdekében (10. ábra).



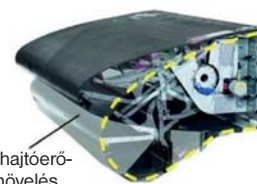
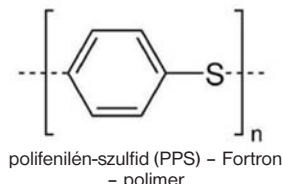
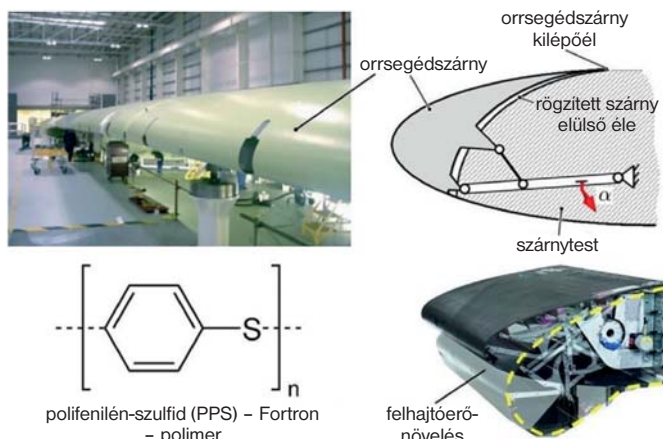
10. ábra. Szendvicsszerkezetű kompozit

A szénszál-erősítésű műanyagokat a *nagy méretű elemek* előállításához alkalmazzák. Ilyen elemek például a függőleges vezérsík, a kormánylapát és a magassági kormányok, az első fedélzet oszlopai és a hátsó nyomástartó válaszfal.

A szárny rögzített *belépőéle* hőre lágyuló anyagból, például könnyebb polifenilén-szulfid- (PPS) alapú kompozitból készül. Ennek keménysége és méretstabilitása magas hőmérsékleten sem változik, így társítható üvegszállal vagy szénszállal. Az egyes részek nyomás alatt könnyen összehesztethetők a PPS olvadási hőmérsékletén (megtakarítható az alumíniumot gyengítő fúrás, a szegecselés) (11. ábra).

A repülőgéptörzs felső héjához laminált szerkezetű anyagot

használnak. Ebben például *alumínium-* és *erős üvegszálrétegek* követik egymást (sűrűségük kb. 10%-kal kisebb a tiszta alumíniuménál). Rendkívül szívós (fémekre jellemző), anyagkifáradással szemben ellenálló szerkezetet képez. A külső üvegszálréteg megköti a nedvességet, így nem jut víz az alumíniumréteghez, ami biztosítja a *korrózióállóságot*.



11. ábra. A szárny belépőéle (orrsegédcsárny) kialakítása, működése

Kutatások szerint *nanoméretű széncsővek* szálakba és fóliákba történő bevitelével a szerkezet merevebbé tehető, csökkentve a zsugorodást és növelve a hőállóságot. A bekeverhető nanocsővek 20%-os aránya esetén a szálak elektromos vezetővé válnak. Az előállítás során az egyfalú nanocsőveket oldószerben oszlatják el, majd a disperzióban elkeverik a szálképző polimert, és a keverékből szálakat húznak.

A különleges csoportot képező *szén-szén kompozitokban* a mátrix és a szálerezítő váz egyaránt szénből áll. A gyártás során a szálakat átitatják műgyantával, amely az izzítás során elbomlik és csak a szén marad vissza. Ezt többször ismételve egyre nagyobb szilárdságú termék keletkezik. Repülőgépek *kerékfék-szerkezeteiben*, a visszatérő üreszközök hővédő pajzsjaiban alkalmazzák ezeket az anyagokat, ahol 1300 °C hőmérséklet is előfordulhat (12. ábra).



12. ábra. Szén-szén kompozittárcsák a repülőgépkerék-fékben

Kompozit-előállítási eljárások

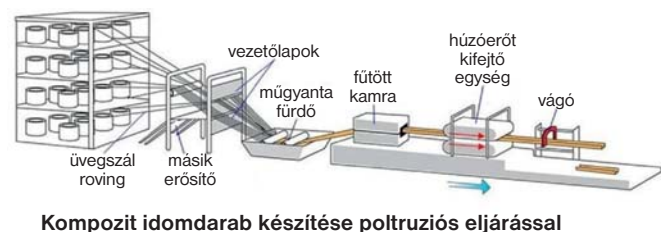
A szálhúzásos folyamatos eljárással – *pultrúzió* – azonos keresztmetszetű rudak, csövek, profilanyagok állíthatók elő. A vázanyag lehet roving (lapított folytonos szálköteg), monoaxiális szerkezet, biaxiális kelme, unidirekcionális textilfelület, amelyet előzőleg gyantafürdőben átitatnak. A húzóbélgyegekben alakul ki a kívánt profil, a fűtött szerszámban térhálósodik a gyanta. Így készül többek között a szénszál-erősítésű kompozit padlógerenda egyes repülőgépekben.

A hengeres, illetve „alakos” forgástestek – például lokátorkúpok, torziós és transzmissziós tengelyek, hajtóműgyártáshoz szük-



séges palackok, nyomástartó edények – gyártására használják a szál- és szalagtekerceselés technológiát. A szálköteg vagy a szalag felcsévéelését forgó magon végzik; a kúpos képződmények keménykrómolt és polírozott acélból, az „alakos” forgástestek olcsó, eltávolítható maganyagból készülnek (utóbbi a munkadarab elkészülte után roncsolással eltávolítható). Tartályok esetében fémből készült, vékony falú, üreges magot alkalmaznak, amely eltávolítás nélkül a tartály belső burkolata lesz.

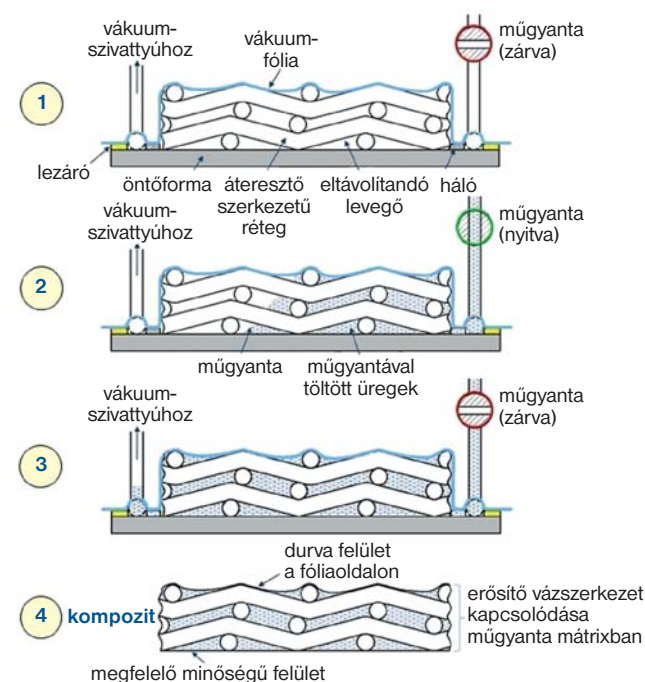
Az automatikus szalagfektető eljárás esetében a szénszálakat felmelegítik, és így viszik fel az előformára (13. ábra).



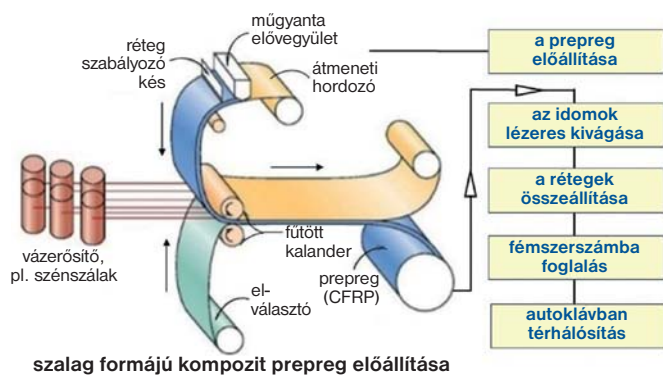
13. ábra. Kompozitalapú profilanyagok, hengeres és más alakú forgástestek előállítás

Az *impregnáló* (mügyanta-infúziós) eljárásnál a száraz vázerősítőanyagot, valamint a szilárd és előformázott gyantafilmet egymásra rétegezik, majd vákuumozzák. Ezután autoklávba (esetleg hőkamrába) helyezik, és légritkítás hatására a magas hőmérsékleten folyékony gyantafilm mintegy magába szívja az erősítőszervezet, így együtt térhálósodva alakul ki a kompozit (14. ábra).

14. ábra. A mügyanta-infúziós kompozit-előállítás menete



A kompozitanyagú repülőgéppalkatrészek során elterjedt a *prepregből* képzett gyártástechnológia. A mátrix – hőre keményedő – folyékony polimerjének alapvegyületét először keses rétegfelvitellel egy átmeneti hordozóra felhordják, majd fűtött kalanderhengerek közé vezetik a vázerősítő szálanyagkötegekkel együtt (elválasztó közvetítésével). Az így előállított, többretegű szerkezetből lézeres technikával kivágják a megfelelő alakzatú idomokat, amelyeket egyesítve a fém nyomószerzámba helyeznek. A társított anyag mátrixát felszívja az erősítő szálrendszer, majd zárt rendszerben, nyomás alatti hőkezeléssel valósul meg a térhálósítás (kikeményítés) (15–16. ábra).



15. ábra. Prepregből történő kompozitalkatrész gyártásának elve



16. ábra. Az autoklávban térhálósodva alakul ki a kompozit alkatrész



Anyagvizsgálatok

A roncsolásmentes vizsgálatok közül többek között a hagyományos röntgensugaras és a CT-vizsgálatok terjedtek el, például a víz behatolásának és az alumínium méhsejtmaggal ellátott szendvicsszerkezetű alkatrészek sérüléseinek kimutatására. A CT anyagvizsgáló rendszer esetén az alkatrészeket 360°-ban elforgatják, közben több digitális radiográfias (DR) képet készítenek különböző vetítési szögekben. A háromdimenzióssá alakított felvételek segítségével elvégezhető az ellenőrzés. A kompozitszerkezetek esetében néhány ultrahangos vizsgálati módszert is alkalmaznak (17. ábra).

A szerkezeti részeket például jelentős hajlító és csavaró igénybevételekkel tesztelik, olyan a feszültségeknél kitevé őket, amelyek a valós repülések legrosszabb körülményeit is jóval meghaladják.

Roncsolásos módszerrel többek között szakítószilárdságot, nyomásállóságot, szívósságot és hőtűrést vizsgálnak.



ultrahangos kompozitborítás-vizsgálat



digitális radiográfias képek készítése

17. ábra. Roncsolásmentes anyagvizsgálatok

Környezeti hatások

A forgalomból kivont repülőgépek törzseit – széles körű átvizsgálás után – jelenleg is képesek újrahasznosítani, igaz, a végrehajtási mód még nem elég hatékony. A hagyományos módszer az anyagok „kollektív módon történő kinyerésével” történik ahelyett, hogy szétválasztanák a paneleken belüli különféle anyagokat. A kedvező újrafelhasználást a repülőgépgyártásba való bevonással lehet elérni. A fejlett újrahasznosítási folyamat várhatóan javítani fogja a légiközlekedési ipar fenntarthatóságát.

A nehezebb alternatívákhoz képest a könnyebb kompozit alkatrészek alkalmazása eleve hozzájárul a kisebb környezetterheléshez. A kompozitok a jó korrózióállóság következtében hosszabb élettartamúak, mint a fémalkatrészek – ez is előnyös környezetvédelmi szempontból. Ugyanakkor a kompozitanyagok – miután alapvetően kőolajalapú vázszerkezetekből és gyantákból készülnek – biológiailag nem bomlanak le. Életciklusa végén a legtöbb kompozit hulla-



18. ábra. A forgalomból kivont repülőgép kompozitszerkezetei újrahasznosítás hiányában a hulladéklerakóba kerülnek

déklerakóba kerül, ezért széles körű kutatás folyik a biológiailag lebomló társított anyagok kifejlesztésére (18. ábra).

IRODALOM

Fenyvesi Éva: Újszerű textilipari és műszaki szálanyagok, Magyar Textiltechnika, 1994/6.

https://en.wikipedia.org/wiki/Composite_material

https://en.wikipedia.org/wiki/Composite_aircraft

<https://pirancomposites.com/news/composite-manufacturing-process/>

Háy György: Amit a repülésről tudni kell, Typotex, Budapest, 2006.

<https://quattroplast.hu/muanyagipariszemle/2004/04/kompozitok-a-repuleggyartasban>
Gáti Balázs, Koncz Imre: Repülőgépek szerkezete, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar, 2012.

In memoriam Tőke László



Tőke László, a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Szerves Kémiai Technológiai Tanszékének állami díjas professzor emeritusa, korábban tanszékvezetője, az MTA rendes tagja életének 92. évében, 2024. december 30-án, rövid szenvedés után elhunyt.

Tőke László a Vas vármegyei Vönöckön született egy sokgyermekes családba 1933. május 3-án. Nagy szegénységben éltek, részt kellett vennie a mezőgazdasági munkákban, az állattartásban. Egy tehetségkutató kampány kapcsán került be a soproni Evangélikus Líceumba. Innét aztán egyenes út vezetett a BME Vegyészmérnöki Karára, ahol 1957-ben végzett, majd szép karriert futott be. A Beke-iskolában kezdte. Fiatalon lett docens, és „Tőke docens” fogalom volt. Sokáig részt vett az esti képzésben is az elméleti szerves kémia oktatásával. Szántay professzor alkaloidkémiai kutatócsoportjában dolgozott és jelentős eredményei születtek többek között a johanbin alkaloidok témában. Aztán posztdoktor volt Samma professzor kutatócsoportjában az Egyesült Államokban. 1974-ben megszerezte a „kémiai tudományok doktora” címet. Munkásságát 1975-ben az Állami Díj II. fokozatával ismerték el. A díjat Szántay Csabával és Szabó Lajossal megosztva kapta a nagy hatású alkaloidok szintetikus módszereinek kidolgozásáért. Ebben az évben lett egyetemi tanár is.

1976-ban átkerült a Szerves Kémiai Technológia Tanszékre. A gyógyszeripari részleg vezetését kapta feladatul. 1986-tól Tőke

professzor öt éven át vezette a Tanszékot, ahol következetes munkával erősítette meg a tudományos tevékenységét. A szabadalmi visszatérítésekéből évente jutalmazta a komoly publikációk szerzőit. Elsősorban a koronaéteres, fázisztranszfer- és foszforkémiai kutatásokban vett részre. Egyik oktatási feladatát a „Biológiailag aktív anyagok szintézise” tárgy előadása képezte. Sok érdekes szintézis mellett a sajátjairól is mesélt. Kiváló előadó volt, jellegzetes írásképével mindent írt a táblára. Másik tárgyát, a „Gyógyszerkémia” talán még inkább élvezték a hallgatók. A záróvizsgák jó légkörben zajlottak. Abban az időben igen jól ment a tanszéknek, személyzete bőven 100 fő felett volt. 1990-től Tőke Lászlót az MTA-kutatócsoport vezetőjévé nevezték ki. Habár ebben az időben nagyon erős 40-es korosztály képezte a Tanszék törzsét, a tanszékvezető kiemelten kezelte a fiatalítást. 1993-ban az MTA levelező, 1998-ban rendes tagságát nyerte el, amivel szakmai pályája kiteljesedett. 2003-tól professzor emeritusként segítette a tanszék munkáját. Tudományos életműve a 360 cikkel és 70 szabadalommal, valamint a többezres idézettséggel valóban teljesnek és példaértékűnek mondható.

Amíg Pasaréten lakott, viszonylag gyakran láttuk. Amikor viszont Balatonfenyvesre költözött, ritkultak a találkozások. Az MTA Kémiai Osztály üléseire azonban a pandémia kitéréséig gyakran feljárt. Több mint két éve Pécsen laktak, és már csak a 90. születésnapjának utazott Budapestre.

Egyszerű ember volt, jókedélyű, beszédes, erős igazságérzettel – nem rejtette véka alá a véleményét –, szerette a vidéki életet, a gasztronómiai élvezeteket.

Emlékét kegyelettel megőrizzük. Nyugodjon békében!

Keglevich György



Pavláth Attila 1930–2024

Pavláth Attila 2024. november 22-én egye-sült államokbeli otthonában, rövid szenvedés után, 94 éves korában elhunyt. A magyar származású tudós a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem rubindiplomás vegyészmérnöke (diplomáját 1952-ben vette át), a Montreali Egyetem és több amerikai állami intézmény volt munkatársa. Címeit, tiszteletbeli címeit, hazai és külföldi kitüntetéseit felsorolni is nehéz volna. A számunkra fontosabbakat említeném: 1998-ban az American Chemical Society (ACS) elnökévé választották, eddig az egyetlen közép-európai születésű elnöke volt a több mint 160 ezer kémikust tömörítő társaságnak. 2002-ben az ő kezdeményezésére jött létre az ACS magyar tagjait összefogó szekció, az ACS Hungary Chapter, melynek örökös tiszteletbeli elnöke. A Magyar Tudományos Akadémia külső tagja (2004). A magyar–amerikai tudományos és tudományos szervezeti kapcsolatok erősítése terén kifejtett kiemelkedő munkássága elismeréseként a Magyar Kémikusok Egyesülete centenáriumi ünnepi ülésén a külföldi tudósoknak adományozható legmagasabb kitüntetésben, a Fabinyi Rudolf-emlékéremben részesítették.

Pavláth Attila 1930-ban született Budapesten. Tanulmányait is itt végezte. A diplomaszerezés után pályáját is a Budapesti Műszaki Egyetemen kezdte, Oláh György munkatársaként új kutatási területet honosítva meg: szerves fluorvegyületeket állítottak elő és vizsgálták tulajdonságaikat. 1954-ben szerezte meg doktori fokozatát. Az 1956-os forradalmat és szabadságharcot követően családjával (feleségével és gyermekével) az ország elhagyására kényszerült. Kétéves kanadai tartózkodás után (McGill Egyetem, Montreal) az Egyesült Államokban telepedtek le, és a kaliforniai Stauffer Chemical Companynél helyezkedett el. 1967-től nyugállományba vonulásáig az USA Földművelésügyi Minisztériuma Kaliforniai Kutatóintézetét vezette, ahol szerves alapvegyületek (zsírok, szénhidrátok, fehérjék) agrokémiai hasznosításával foglalkozott. Az alap kutatás mellett mindig nagyon izgatta az eredmények gyakorlati alkalmazása. Munkáiból 130-nál több közleménye, 35 szabadalma és 3 könyve jelent meg.

Sok nemzetközi együttműködésben vett részt. Csak két magyar kapcsolatot említek: Darvas Ferenc budapesti csapatával és Janáki Csaba szegedi csoportjával évek óta



Pavláth Attila az Amerikai Kémiai Társaság Charles Lathrop Parsons-díjának átvételekor (2019)



A kémia szegedi mérföldköve: a bronz-tábla Szent-Györgyi Albert kutatásainak állít emléket. Kálmán Alajos, az MKE elnöke (balra) és Pavláth Attila az avatáson (2002)

tartó sikeres kutatásokat folytattak a hidrogénnel végzett homogén katalitikus reakciók megvalósításában, különös tekintettel a szén-dioxid katalitikus redukációjára, melynek az energiagazdálkodásban lehet kiemelkedő jelentősége. Később az űrkémia is az érdeklődésük előterébe került. Attila érdeklődése a világűr iránt már fiatalkorában megnyilvánult, hiszen az Egyesült Államokba érkezése után nem sokkal jelentkezett az USA űrprogramjába, ahová végül nem került be, de mint látható, az űrben lejátszódó folyamatok iránti vonzalma nem múlt el.

Attilával először 2002-ben találkoztam, amikor az általa kezdeményezett „A ké-

mia mérföldköve” (Historic Chemical Landmarks) program keretében Szegeden Szent-Györgyi Albert Nobel-díjas magyar biokémikus felfedezésének állított emléket közösen az ACS és az MKE. (Akkor az MKE főtítkárhelyetteseként az események egyik helyi szervezője voltam.) Örökre emlékezetes marad ez a találkozás, mert egy páratlanul friss, nyitott, alkotó gondolkodású, az új iránt fogékony kémikust ismerhettem meg. Akkor határoztuk el a Hungary Chapter megalapítását, amit tettek követték. Azóta Attila legtöbb magyarországi látogatása során találkoztunk, legutóbb 2022-ben, rubindiplomájának átvételekor, amikor ünnepi ülést is rendeztünk a tiszteletére az Akadémián. Utána baráti körben ünnepeltük 92. születésnapját. Nem gondoltuk, hogy ez lesz az utolsó találkozásunk.

Nem könnyű búcsúzni egy ilyen embertől, aki emberségével, egyenes tartásával, tudásával, segítőkészségével, önzetlenségével ennyit adott embertársainak. Sokat tanultam tőle emberségből. Bár életének nagy részét szülőföldjétől távol töltötte, szívében megmaradt magyarnak, nem feledte kötődését. A magyar kémikus közösség nevében búcsúzom tőled, Attila: szívünkben büszkén élz tovább! Nyugodj békében!

Kiss Tamás



A Ranyák Üvegtechnika neve mára egyet jelent a minőségi, kézzel készült üvegtermékekkel és a generációkon átívelő szakértelemmel. A budapesti családi vállalkozás 1967-ben indult útjára Ferencváros szívében, ahol azóta is változatlan elkötelezettséggel szolgálja ki ügyfeleit. Az alapító, Ranyák György üvegtechnikus mester vízióját immár a harmadik generáció viszi tovább, megőrizve az üveges mesterség hagyományait, folyamatosan alkalmazkodva a modern kor igényeihez, nem megfélemlítve a legújabb technológiák adaptálásáról sem.

A széles termékpalettaival rendelkező Ranyák Üvegtechnika fő profilja a **laboratóriumi és az orvostechikai üvegeszközök gyártása és javítása**, ami kiemelkedő precizitást és szakértelmet igényel. Emellett a vállalkozás borászati termékeket, kozmetikai üvegeket, ajándéktárgyakat és antik üvegkiegészítőket is készít. Az egyedi tervezésű üvegtárgyak és gravírozott ajándékok különösen népszerűek, hiszen személyre szabott megoldást kínálnak mind a magánszemélyek, mind pedig a cégek számára.

A cég innovációs törekvései számos elismerést hoztak az évek alatt. Kiemelkedő eredménynek tekinthető a 2014-ben elnyert Magyar Termék Nagydíj, amit az általuk kifejlesztett orrszívó porszívóval érdemeltek ki, és amelyet a cég sikerrel értékesített több mint 15 országban. 2018-ban Ranyák György Pro Urbe Ferencváros díjat is kapott a családi hagyomány szerint végzett minőségi és innovatív munkásságáért.

A vállalkozás működése során mindig nagy hangsúlyt fektetett a hagyományok ápolására, ugyanakkor lépést tartott a modern technológiákkal is. A családi jelleg szavatolja, hogy a szakmai tudás és a minőség generációról generációra öröklődjön, miközben a cég modern felfogásának köszönhetően a mai kor követelményeinek megfelelő innovációk is helyet kapnak úgy a termelésben, mint a Ranyák Üvegtechnika mindennapi életében.



Ranyák Üvegtechnika – tradíció & innováció az üvegművészetben



A modern igényeknek megfelelő műhely, a folyamatos fejlesztések, az aktuális trendeknek megfelelő weboldal és webshop az aktív közösségimédia-jelenléttel kiegészülve mára elengedhetetlen és szükséges egyveleget alkotnak az ügyfél-elégedettség maximalizálásában.

A műhely és a bemutatóterem Budapesten, a IX. kerületben, a Tompa utca 15/b szám alatt található, ahol az érdeklődők személyesen is megtekinthetik az elkészült üvegtárgyakat. Az online vásárlást előnyben részesítők számára a cég webshopja is elérhető, ahol a teljes termékinlátat megtekinthető és rendelhető.

A Ranyák Üvegtechnika célja, hogy a tradíciót és innovációt ötvözve továbbra is élen járjon az üveges mesterség területén, hogy minőségi, időtálló termékekkel szolgálja ki ügyfelei igényeit. Akár laboratóriumi üvegeszközökre, akár egyedi üveg ajándéktárgyakra van szükség, a Ranyák Üvegtechnika mindig a minőség és a kreativitás záloga.

További információkért látogasson el a cég hivatalos weboldalára:

www.ranyakuveg.hu

Vagy vegye fel a kapcsolatot személyesen, címünk:

Budapest, IX. kerület, Tompa utca 15/b

Nyitvatartás: hétfő–péntek (7:00–16:00)



TÚL A KÉMIÁN

Újraértelmezett Pompeii-tudomány

A Vezúv kitérője i. sz. 79-ben pusztította el Pompeii városát, a maradványok régészeti elemzéséről már könyvtárnyi tanulmány jelent meg. Az utóbbi időben ezek közül kettő is olyan követke-



zetésre jutott, amely ellentmond a korábban biztosnak tartott ismereteknek. Az első a kitérő dátumára vonatkozik: az ifjabb Plinius biztonságos távolságból ugyan, de az események közvetlen szemtanúja volt, s egy általa évtizedek-

kel később írt levél alapján az időpontot minden kétséget kizáróan i. sz. 79. augusztus 24-re tették. A levél azonban csak egy olyan középkori fordításban maradt fent, amelynek a pontosságát több részletben is cáfolták, miközben számos apró természettudományos jel arra utal, hogy inkább késő ősszel történt a katasztrófa. A kérdés akkor zárult le, amikor a ma is zajló pompeii ásatások egy falfelírason október 17-i dátumot találtak. A második hasonló eset az „Anya gyermekével” néven világhírűvé vált megkövült emberi maradvány genetikai vizsgálata: itt a csontmaradványok DNS-elemzése egyértelműen bizonyította, hogy a felnőtt áldozat férfi volt.

Earth-Sci. Rev. 231, 104072. (2022)

Curr. Biol. 34, 5307. (2024)



A tintahalak meleg fénye

A tintahalak életét már csak azért is célszerű alaposan megismerni, mert ez a tudás akár új találmányokat inspirálhat. Erre példa az a nemrég kifejlesztett textilféleség, amely laza állapotban viselve megőrzi a test melegét, míg kinyújtva elősegíti a fölösleges hő kisugárzását. Az anyag mosható és az eddigi tanulmányok szerint egészségügyi szempontból is kifogástalan. Működési elvét a tintahalak gyors színváltásának tanulmányozása ihlette. Az élőlények bőrének visszaverési tulajdonságai a látható hullámhossztartományban változnak jelentősen a mechanikai feszültség hatására, az elkészített textilé pedig az infravörösben. A mesterséges anyag alapja egy sztírol-etilén-butilén polimer, amelyre nagyon vékony rézfilmet visznek fel. A létrejövő rézszigetecskék egymástól mért átlagos távolságának változása az, ami alapvetően megváltoztatja a hővezetési tulajdonságokat.

APL Bioeng. 8, 046101. (2024)

CENTENÁRIUM



S. P. L. Sørensen: The Solubility of Proteins

Journal of the American

Chemical Society, Vol. 47, pp. 457–469.

(1925. február 1.)

Søren Peter Lauritz Sørensen (1868–1939)

dán kémikus volt, a pH fogalmának bevezetése fűződik a nevéhez. 1901 és 1938 között a koppenhágai Carlsberg Laboratóriumban dolgozott, munkájában elsősorban az egyes oldott ionok fehérjékre gyakorolt hatását vizsgálta. A hidrogénion koncentrációja bizonyult messze a legfontosabbnak, ezért adott a mennyiségnek külön nevet.

Kolumbiai kakaó- és kadmiumtérkép

A kakaóbab Kolumbia egyik lényeges exportterméke, azonban az Európa Unióban megengedett, igen szigorú, 0,8 mg/kg-os szintet meghaladó kadmiumkoncentráció gyakran problémát jelent az ország gazdálkodóinak a szabályozás 2019-es bevezetése óta. A mezőgazdaság megsegítése érdekében nemrégiben ICP-s mérésekre alapozva részletes kadmiumtérképet készítettek mind az országban termő kakaóbabról, mind a termőhelyek talajáról. A kettő közötti szoros összefüggés jól látszott az adatokból, így az ültetvényeken elvégzett kémiai analízis már a kakaónövény telepítése előtt is előre jelezhetővé teszi, hogy az ottani termés várhatóan megfelel-e az exportkövetelményeknek.

Sci. Total Environ. 954, 176398. (2024)



APRÓSÁG



A Tibetben, 4400 méteres tengerszint feletti magasságban található, mintegy 250 km² felszínű Zabuye-tó a nevét a zabuyelit ásványról kapta (Li₂CO₃), amelynek koncentrációja a vízben közel 10 g/dm³.

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

Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg1206@gmail.com.

A rovatszerkesztő korábbi írásait is tartalmazó blog elérhető a következő internet-oldalon:

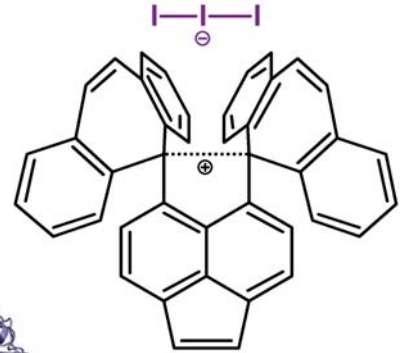
http://lenteg.ttk.pte.hu/ScienceBits/index_magyar.html



A HÓNAP MOLEKULÁJA

Az ábrán látható, több aromás gyűrűt is tartalmazó ionvegyület (C₄₆H₂₆I₃) két spiro-típusú szénatomja között egyelektronos szén-szén szigmatkötés van. A röntgenkristallográfiai adatok szerint ennek hossza 292 pm, vagyis kétszerese egy szokásos, kételektronos, egyszeres szén-szén kötésnél tapasztalható értéknek. A gyökkationt úgy sikerült előállítani, hogy az egy elektronnal többlet tartalmazó aromás szénhidrogént jóddal oxidálták.

Nature 634, 347. (2024)



Hulladék és globális felmelegedés

A hulladéklerakók metánkibocsátásának folyamatos mérése elég nehéz az ott folyó gépesített munka közben. Ez a vizsgálat a CH₄ üvegházhatása miatt lényeges. A közelmúltban repülőgépre telepített mérőműszerek segítségével végeztek nagyszabású felmérést az Amerikai Egyesült Államokban. A tapasztalatok szerint a vizsgált 217 hulladéklerakó mintegy fele jelentős metánkibocsátási forrás, s a folyamat általában ott a legintenzívebb, ahol a munkagépek dolgoznak. A legfurcsább felefedezés az volt, hogy a legnagyobb mennyiségben olyan szemételepeken kerül a levegőbe a legegyszerűbb szénhidrogén, ahol egyébként azt még gyűjteni is megpróbálják.

Environ. Sci. Technol. 58, 21545. (2024)

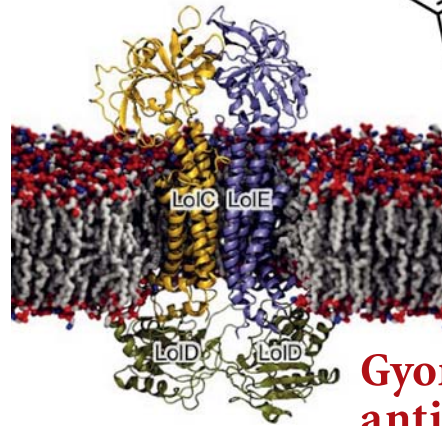


Az egysejtes RNS-szekvenálás egyedisége

Noha egy-egy sejtben általában a szervezet teljes genetikai információja benne van, a különböző típusú sejtben nagyon eltérő génexpresszió miatt egyáltalán nem magától értetődő, hogy egyedi élőlényeket azonosítani lehet egyetlen sejtből származó RNS elemzése révén is. Eddig ezért az ilyen típusú adatokat lényegében névtelennek, adatbázisokban szabadon megoszthatónak tartották. A közelmúltban azonban publikáltak egy olyan cikket, amelyben fejlett statisztikai módszerek segítségével alig néhány sejt típus RNS-adataiból sikerült az egyed teljes genomját reprodukálni. Így a jövőben valószínűleg változtatni kell majd a genetikai diszkriminációt tiltó törvényeken.

Cell 187, 6537. (2024)

	V ₁	V ₂	V ₃	V _i	V _m	
Do	2	2	0	1	0	+
DoDo	2	2	0	0	1	-
DoDoDo	1	1	2	0	1	-
DoDoDoDo	2	2	1	2	2	+
DoDoDoDoDo	1	0	2	0	1	+



Gyomorbarát antibiotikum

Egy amerikai kutatócsoport a közelmúltban fedezte fel a Lolamincinnek nevezett, Gram-negatív baktériumok (például *Escherichia coli*, *Klebsiella pneumoniae* és *Enterobacter cloacae*) ellen hatásos antibiotikumot, amely a bélben hasznos szerepet betöltő mikroorganizmusokra nincs jelentős negatív hatással. A szer azt akadályozza meg, hogy a sejtmembrán belső oldalán lévő lipoproteinek a külső részre kerülhessenek. A további felhasználás fő gátja jelenleg az, hogy a labor kísérletek szerint a baktériumok könnyen rezisztenssé válnak az új hatóanyagra.

Nature 630, 429. (2024)

Bioragasztó

A tintahalak élete olyan rejtély, amelyet számos biológus szívesen megfejtene. Ehhez viszont megfigyeléseket kell végezni, így nem árt, ha az állatokhoz valamilyen módon érzékelőket rögzítenek. Erre a célra fejlesztettek ki egy új anyagot, amelynek alapja az emberi sérüléseknél gyakran használt szövetragasztó. Az elkészítéséhez szükséges komponensek a poliakrilsav, a polivinilalkohol és az N-akriloxi-szukcinimid. A száraz kompozit tulajdonságai megfelelőek ahhoz, hogy a ragasztó a szokásos szenzorok polimer anyagához hozzátapadjon, majd a tintahal bőrének viztartalma a felszínhez is tapadó gélt hoz létre.

Nat. Commun. 15, 2958. (2024)





OKTATÁS

Zechmeister László előadói díj – 2024

Tavaly novemberben harmadik alkalommal rendezte meg a Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Biológiai Munkabizottsága a Zechmeister Lászlóról elnevezett előadói versenyt, ahol a kémia és a biológia határterületén kutató doktorandusz és doktorjelölt hallgatók mutathatták be eredményeiket. A névadó életpályája előtt tisztelgő, idén a Természettudományi Kutatóközpontban megrendezett, tavaly óta kétfordulós verseny kiírása új elemeket is tartalmazott. A zsűri idén ugyanis a szakmai tartalom (eredmények újszerűsége, jelentősége) és a felkészültség, valamint az előadói készség mellett külön hangsúllyal vette figyelembe az előadás közérthetőségét és olyan, a kutatómunka alatt szerzett személyes benyomások, élmények bemutatását, melyek akár a kutatásban, akár az élet egyéb területén befolyásolták a fiatal kutatók látásmódját. A felhívásra 31 pályamű érkezett, a zsűri előzetes értékelése alapján ebből 15 jutott tovább a második fordulóra.

A versenykiírásban megfogalmazott szabályok értelmében a második fordulóban a résztvevők egyenként 10 percen mutatták be a pályaműveket, majd válaszoltak a bírálóbizottság kérdéseire. A zsűri értékelése szerint a versenyzők mind az előadások szakmai minősége, mind az idén bevezetett új szempontoknak való megfelelés szempontjából kiváló teljesítményt nyújtottak. A bemutatott pályaművek élményekkel fűszerezett tálalása, illetve az élmények kutatói hozzáállást is befolyásoló hatásáról



A nyertesek a zsűri és a szervezőbizottság „gyűrűjében” (balról jobbra: Bősze Szilvia, Szántay Csaba, Keserű György Miklós, Varga Soma, Kern Dóra, Petróczi Ferenc Dániel, Monostory Katalin, Kele Péter, Németh Krisztina)



A 3. Zechmeister előadói verseny résztvevői

adott – kérdésekkel serkentett – beszámolóik nem hagytak kétséget a fiatal tehetségek szakmai elhivatottsága felől. Ezek után bizony nem volt könnyű dolga a Keserű György Miklós (HUN-REN TTK) elnöketével működő, Bősze Szilviából (HUN-REN-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport), Monostory Katalinból (HUN-REN TTK) és Szántay Csabából (Richter Gedeon Nyrt.) álló bírálóbizottságnak. Hosszas egyeztetést követően Kern Dóra, Varga Soma és Petróczi Ferenc Dániel vehették át az I., II. és III. helyezettnek járó okleveleket és a Richter Nyrt. felajánlásának köszönhetően a 250, 200 és 150 ezer Ft értékű pénzjutalmakat, melyek mellé a Magyar Kémikusok Egyesülete egyéves tagságot is felajánlott. Az eredményhirdetést követően Keserű György Miklós, a bírálóbizottság elnöke méltatta az előadók kiválóságát, elhivatottságát. Szántay Csaba pedig a kiírás új elemeinek bemutatásához elengedhetetlen „Z-faktor” jelentőségére hívta fel a figyelmet, és arra buzdította a fiatal kutatókat, hogy eredményeik jelentőségét merjék még bátrabban tálalni. Ehhez, mintegy útmutatásnak, a nyerteseket megajándékozta Szabó János című könyvével. A továbbiakban a Magyar Kémikusok Egyesületének ügyvezető elnöke, Szabó János Zoltán felajánlotta a díjazottaknak, hogy munkájukat a Magyar Kémikusok Lapjában is közzétegyék.

Kele Péter munkabizottsági elnök, a verseny kezdeményezője és főszervezője az MTA Kémiai Osztályának jóvoltából felajánlott Akadémia Borával köszönte meg a bírálóbizottság alapos munkáját. Zárszavában kiemelte, hogy az idén harmadik alkalommal megrendezett előadói verseny mára az egyik legnagyobb presz-



A díjazottaknak járó oklevél, amelynek motívumai – Zechmeister László stilizált portréján kívül – a szerves kémiában általa meghonosított kromatográfiára és karotinoid-kutatásaira utalnak



tízzsel bíró, doktoranduszokat célzó előadói eseménnyé nőtte ki magát, köszönhetően a kiemelkedően magas színvonalnak: „Az új arculat egyedülálló lehetőséget nyújt a fiatal tehetségeknek, hogy a szakmai megmérettetésen túl kipróbálják magukat a tudománykommunikáció kihívásokkal teli világában is, egyben számot vessenek a doktori évek során szerzett pozitív és negatív élmények, tapasztalatok kutatómunkán túlmutató hatásaival.” A szervezők és a bírálóbizottság javaslatai alapján az idei versenyre kialakult, egyedülálló bírálati szempontokat megtartva jövőre újabb izgalmas feladatok elé is állítja majd a jelentkezőket.

Gratulálunk a nyerteseknek és minden résztvevőnek!

Kele Péter, Németh Krisztina

az MTA Kémiai Biológiai Munkabizottság
elnöke, ill. titikára

21. Nemzetközi Junior Természettudományi Diákolimpia

Bukarest, Románia, 2024. december 2–12.

A Nemzetközi Junior Természettudományi Diákolimpiát (International Junior Science Olympiad, röviden IJSO) 2004-ben Indonézia alapította. A versenyen való részvétel egyik leglényegesebb kritériuma, hogy csak 16. életévüket be nem töltött diákok indulhatnak. Magyarországon ez azt jelenti, hogy érdemben a középiskolát épp elkezdő, illetve – szerencsés esetben – egyes 10. osztályos középiskolások, kivételes esetben igen tehetséges 8. osztályos általános iskolások mérhetik össze tudásukat.

A versenyen elvileg egyenlő arányban szerepel a három természettudományos tantárgy (fizika, kémia, biológia), így azoknak, akik több tárgybán is járatosak, a felkészítőn kevesebbet kell hozzátanulniuk a korábbi ismereteikhez. A felkészítőre azokat a diákokat hívjuk, akik az olimpiát megelőző tanévben bejutottak egy vagy több korosztályi természettudományi verseny országos döntőjébe. 2024-ben sikerült 31 diák figyelmét felkelteni. Közülük a nyár folyamán többen feladták az első válogatón való megmérettetést, így a szeptember elején megírt dolgozatban 22 diák mérte össze tudását.

Ezt az olimpiát az oktatási kormányzat 2007 és 2017 között anyagi segítséggel is támogatta. A versenyek támogatási rendszerének átalakulása után, 2017 óta a Nemzeti Tehetség Program (NTP) ide illő pályázatából kapunk támogatást. Az utazás anyagi oldalának kezelését, illetve a pályázatok lebonyolítását a Magyar Kémikusok Egyesülete (MKE) végzi, ami óriási segítséget jelent a csapat számára.

A program részben a Kulturális és Innovációs Minisztérium és a Nemzeti Tehetség Program által meghirdetett NTP-NTMV-24-B-0013 pályázati támogatásból valósult meg. A verseny további állandó támogatója, a Richter Gedeon Nyrt. szponzorálása tette lehetővé, hogy időben átutaljuk a csapat regisztrációs díját és megvegyük a repülőjegyeket. A felkészítés helyszínét az ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium és Kollégium biztosította.

A felkészítést ebben az évben is júniusban kezdtük meg (Gyertyán Attila matematikából és fizikából, Varga Bence és Villányi Attila kémiából, Papp Ádám biológiából), ugyanis a megtanulandó tananyag olyan nagy, hogy a tanévkezdés utáni három hónap felkészítés nem lenne elegendő. Néhány napos elméleti bevezető után az általános és középiskolai tankönyvekből jelöltük ki az elsajátítandó (vagy átismétlendő) ismereteket, összefüggé-

seket, illetve az általunk készített prezentációkból kellett az új anyagot megtanulniuk a versenyre készülőknek. Szeptember 8-án, vasárnap írtuk az első selejtező dolgozatot. A válogató eredménye alapján és a korábbi hagyományok szerint a legalább 50%-os teljesítményt elérő legjobb diákokat terveztük kiválasztani. Nagy örömmel konstatáltuk, hogy a megjelent 22 diák közül tizenketten érték el a kritériumként meghatározott 50%-os határt. A pontok abszolút értékei alapján végül úgy döntöttünk, hogy közülük 9 diákkal folytatjuk a felkészítést. És egyben örömmel jelenthettük be, hogy ebben az évben ismét a teljes, hatfős csapattal vehet részt Magyarország a 21. IJSO-n.

A diákokat szeptember és október folyamán minden hétvégén – és több esetben hét közben is – a korábbi versenyek tapasztalatai és a követelmények alapján készítettük a versenyre az ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnáziumban. A román szervezés kezdettől fogva nagyon áttekinthetetlen volt. Eredetileg augusztus végére szeretnék volna a vissza nem téríthető részvételi (regisztrációs) díjat átutaltatni, amit végül hajlandók voltak októberre elnapolni. A kommunikáció is nehézkes volt, mert az elmúlt húsz év szokásától eltérően a román szervezők nem kommunikáltak senkivel, csak a verseny Nemzetközi Bizottságának (Executive Committee) tagjain keresztül lehetett minden kérés és kérdést továbbítani. Ebben az évben a repülőjegy ára, a kis távolság és a viszonylag gyakori járatok miatt, nem tűnt drágának, ezért idén október végén megtartottuk a második válogatót, és annak pontszáma, illetve a felkészítés során íratott kisdolgozatok eredményének 2:1 arányú összegzésével kapott pontszám alapján állapítottuk meg a bejutási rangsort. A válogató után még betegség miatt elmaradt órákat pótoltak a kollégák, illetve novemberben három hétvégén a gyakorlati munkát próbálták ki a csapat tagjai a három tantárgyból.

A legjobban teljesítő hat diák került a csapatba, név szerint: a tavalyi IJSO ezüstérmese, *Bense Tamás István* 9. osztályos tanuló a budapesti Eötvös József Gimnáziumból, *Desics Panni* 9. és *Milovecz Fruzsina Panka* 10. osztályos tanuló a budapesti Fazekas Mihály Gyakorló Általános Iskola és Gimnáziumból, *Kiss Mihály* és *Szell András* 9. osztályos, *Hetényi Lőrinc Attila* 10. osztályos tanuló, az ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium és Kollégiumból.

A hat diákból és három kísérő tanárból (Gyertyán Attila, Varga Bence és Villányi Attila) álló csapat december 2-án indult el Bukarestbe. A diákokat és a tanárokat már az érkezés napján elkülönítették, két külön hotelben szálltunk meg. A verseny első napjától az utolsóig – a verseny szabályzatának megfelelően – az ott tartózkodás teljes ideje alatt a szervezők biztosították a csapat transzferét, szállását és teljes ellátását. A nyitóünnepélyre december 3-án délelőtt a bukaresti Parlament épületében került sor. Ezután a kísérő tanárok begyűjtötték csapatuk tagjainak összes kommunikációra alkalmas eszközét, amelyet csak a verseny utolsó fordulójára után kaptak vissza a diákok.

A kísérő tanárokból álló nemzetközi zsűri (International Board) a harmadik, ötödik és hetedik napon vitatta meg az egyes fordulók feladatait, majd a nem angol nyelven kommunikáló országok tanárai hajnalig fordították a feladatlapokat a saját nyelvükre, másnap pedig a diákok versenyeztek. Az első forduló 30 feleltválasztásos tesztfeladatból állt, 10–10 fizika, kémia és biológia tárgyú kérdésből. A második forduló is elméleti jellegű volt, itt egy-két téma köré csoportosuló kérdéseket kellett megválaszolni. A harmadik, gyakorlati forduló kísérleti feladatait a diákok 3 fős csapatokban oldották meg. Erre a versenyrészre az adott csapat minden tagja ugyanazt a pontszámot kapta.



Ebben az évben elsősorban a fizikafeladatok voltak az átlagosnál jóval nehezebbek. Az első, feleletválasztós tesztfordulón például szinte kizárólag paraméteres megoldásokat kellett leveletetni, ami az ilyen korosztálynál még igen nehezen megy. A kémiafeladatok nem voltak könnyűek, de örömmel konstatáltuk, hogy a felkészítő során gyakorlatilag nagyon hasonló problémákat oldottunk meg a gyerekekkel. A biológiafeladatok egy része – a korábbi évekhez hasonlóan – olyan megtanulandó ismereteken alapult, amelyeket – a biológia szerteágazó ismeretrendszer miatt – a diákjaink épp nem vagy csak érintőlegesen tanultak. A gyakorlati fordulóban fizikából egymástól szinte független méréseket kellett végrehajtani. A kémiagyakorlat titrálás volt, amelynek a kémiai alapjait szerencsére megtárgyaltuk (amúgy nem egy 9–10. évfolyamú diák kémiatudásához igazított feladat volt), így nem okozott gondot a két magyar csapatnak. A biológiagyakorlat egyik fele jószerivel egy elméleti feladat megoldása volt, a másikban részben növényteni metszeteket kellett készíteni – amihez nem voltak megadva a megfelelő eszközök, így nagyon rossz minőségű metszeteket lehetett készíteni –, majd a mikroszkópos kép alapján kellett azonosítani különféle szöveteket.

A versenyzők a versenyek közötti napokon, a tanárok a diákok versenynapjain vettek részt különféle programokon. A szervezők az alacsony költségvetés miatt a négy autóbusznyi tanárt sokszor csak két busszal szállították a különböző helyszínekre, ami többórás várakozásokat eredményezett – kinek a szállodában, kinek a program helyszínén.

A verseny szervezése elég kaotikus volt, rövid idő alatt kiderült számunkra, hogy a szervezésben részt vevő három „csapat” (a feladatokat készítő bizottság, a Minisztérium embere(i), valamint a versenyek helyszínét adó, illetve a pénzügyeket intéző Egyetem emberei) gyakorlatilag egymástól függetlenül, mindenféle egyeztetés nélkül dolgozott. A minisztériumi szervezők ráadásul a verseny előtt egy hónappal felmondtak, így akkor került egy magyar származású hölgy kezeibe az intézés, és gyakorlatilag ő hozta össze a verseny logisztikáját. A szakmai zsűri munkája – a feladatok nehézségén túl – jónak mondható, a dolgozatokat és értékelésüket mindig időben megkaptuk. Az értékelés is nagyrészt megfelelően történt. Egyedül a gyakorlati forduló értékeléséhez nem kaptunk egyértelmű javítókulcsot. Az idei versenyen 52 ország 303 hivatalos versenyzője mérte össze tudását. Ebben az évben is valamennyi diákunk éremmel tért haza. Az elérhető 100 pontból Hetényi Lőrinc Attila 76,30, Bense Tamás Ist-

A versenyzők és kísérő tanáraik



ván 75,25, Milovecz Fruzsina Panka 71,05, Kiss Mihály 68,30, Széll András 68,10, Desics Panni 67,00 pontot szerzett.

Az országok közti nem hivatalos versenyben mindössze két ország, India és Tajvan versenyzői szereztek 6 aranyérmeket. Mi a 3 ezüst- és 3 bronzérmünkkel körülbelül a tizennegyedik helyen végeltünk.

Évek óta gondot okoz, hogy kevés ország vállalja ennek a versenynek a megszervezését. Az anyagi feltételeken kívül lassan az is gátat szabhat, hogy a laborgyakorlat színhelyét nem lehet korlátlanul bővíteni. (Ebben az évben Románia is csak 55 ország fogadását tudta vállalni, amiből végül – az EU-s vízumok kiadása körüli bonyodalmak miatt – kevesebb lett.) A 22. IJSO megrendezését eredetileg Oroszország vállalta. A jelenlegi politikai körülmények között a független delegáció állama továbbra is fenntartja, hogy Szocsiban megrendezik a versenyt 2025 decemberében. Az viszont már most is jól látható, hogy Európából alig lesz olyan ország, amelyik erre az eseményre csapatot küldene – akár kormányzati támogatás hiányában, akár azért, mert a kísérő tanárok és a szülők nem éreznék biztonságosnak az odautazást. A többség esetében pedig az sem változtatna ezen a döntésen, ha addig a háborús helyzet megoldódna. A 2025 utáni évekre nincs jelentkező ország az IJSO lebonyolítására. Magyarországot szellemi potenciálja egyelőre még meglelne a verseny színvonalas megszervezésére, de az oktatási kormányzat támogatása hiányában továbbra sem tudunk ilyen ígéreteket tenni a közeljövőre.

Villányi Attila

A TÁMOGATÓK:



KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM



Nemzeti
Tehetség Program



RICHTER GEDEON



ELTE Apáczai Csere János
Gyakorló Gimnázium
és Kollégium

Nemzetközi Kémia Torna (IChTo): hazai válogató

Idén nyolcadik alkalommal rendezik meg a Nemzetközi Kémia Tornát. A versenynek ezúttal Románia ad otthont 2025. augusztus 19. és 24. között. A két, egyenként hatfős magyar csapatot a téli időszakban választották ki egy egyéni válogatóverseny keretei között. A válogatóra a Covid-19 óta növekvő számú jelentkezés érkezik be, ugyanakkor a pályázatok általános színvonala egyre magasabbnak tűnik, így kitűnő válogatóverseny valósulhatott meg 2025. január 4–5-én az ELTE előadóiban.

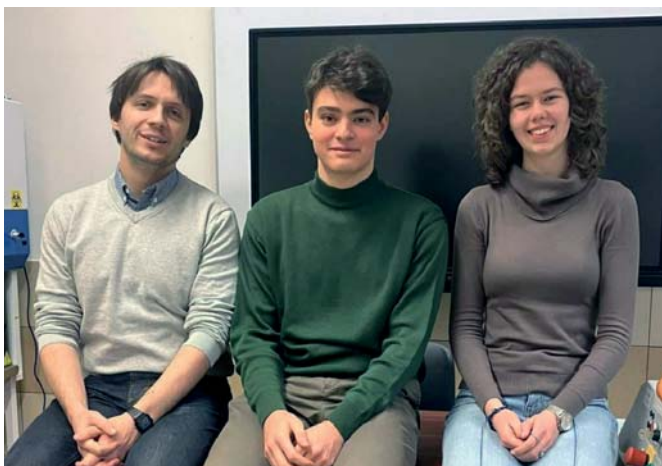
A válogatóra – a nemzetközihez hasonló módon – a versenyzőknek nyitott végű kémiai problémákra kellett megoldási tervet összeállítaniuk, ezt nyolc percen előadniuk, majd a versenytársak és a zsűritagok előtt szakmai vita keretei között megvédeniük. Az idei feladatsorban is többféle téma közül válogathattak a versenyzők, a kitűzött feladatok között szerepelt például egy olyan pH-indikátor bemutatása, amely nem színváltozással, hanem valamilyen más módon jelzi a kémhatás változását, de lehetett vállalkozni az ipari forradalom tisztábbá tételére vagy a mézhamisítás felderítésére is. Az izgalmas előadások és viták során a versenyzők demonstrálhatták tudományos ismereteiket és kreativitásukat, számos rendkívül ötletes és átgondolt megoldást láthattunk.



A válogatóverseny szervezői, zsűrije és a versenyzők

Az első 12 helyezett versenyző: Róthy-Gruber Péter (ELTE Bolyai János Gyakorló Általános Iskola és Gimnázium, Szombathely), Erdélyi Kata (Fazekas Mihály Gyakorló Általános Iskola és Gimnázium, Budapest), Kakuk Mihály (Árpád Gimnázium, Tatabánya), Yanxing Wu (British International School, Budapest), Bencze Kinga (Török Ignác Gimnázium, Gödöllő), Nagy Bence (Szent István Gimnázium, Budapest), Gombos Dávid (Zrínyi Miklós Gimnázium, Zalaegerszeg), Kele Áron (Kőbányai Szent László Gimnázium, Budapest), Budai Míra Vilma (Deák Téri Evangélikus Gimnázium, Budapest), Kutas Katalin (Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnáziuma, Pécs), Horváth Vitéz Adorján (VSZC Boronkay György Műszaki Technikum és Gimnázium, Vác), Viczkó Csaba Péter (ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium, Budapest).

A nemzetközi versenyre a legmagasabb pontszámot elért 12 versenyző kapott meghívást, akik örvendetes módon az ország hét városából érkeztek, ami jól mutatja az országos kiegyenlített-



Róthy-Gruber Péter (középen) felkészítőivel, Szabó Bence Farkassal és Káldy Fruzsínával

séget és hogy szerte az országban vannak olyan lelkes tanárok, akik élen járnak a felkészítésben. Ezúttal az első helyezett Róthy-Gruber Péter lett, felkészítői Szabó Bence Farkas tanár, valamint Káldy Fruzsina, az iskola végzős diákja, aki az előző tanévben a Mexikóban rendezett Nemzetközi Kémiai Torna aranyérmese volt.

Hatalmas köszönettel tartozunk Dr. Szalai Istvánnak és az ELTE Természettudományi Karának, mely a helyszínt adta a válogatóverseny lebonyolításához, Dr. Szántay Csabának és a Richter Ge-

deon Nyrt.-nek, valamint Dr. Szabó Jánosnak és a Magyar Kémikusok Egyesületének a versenyhez nyújtott segítségért és támogatásukért.

A 8. Nemzetközi Kémia Tornán a magyar csapat részvétele részben a Kulturális és Innovációs Minisztérium megbízásából, a Nemzeti Tehetség Program által meghirdetett NTP-NTMV-24-B-0012 azonosító számú pályázati támogatásból valósul meg.

Buzafalvi Dénes

A TÁMOGATÓK:



KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS
MINISZTERIUM



Nemzeti
Tehetség Program



RICHTER GEDEON

euROAPI
Active Solutions for Health



ELTE
EÖTVÖS LORÁND
TUDOMÁNYEGYETEM

A 2024. évi Rátz Tanár Úr Életműdíjak

2014-ben is nyolc kiemelkedő teljesítményű tanárt részesített elismerésben az Ericsson Magyarország, a Graphisoft és a Richter Gedeon Nyrt. támogatásával létrehozott Alapítvány a Magyar Természettudományos Oktatásért kuratóriuma. A matematika, fizika, kémia és biológia két-két kiváló tanára december 10-én ünnepélyes keretek között vette át az egyenként 2,5 millió forintos pénzjutalommal járó Rátz Tanár Úr Életműdíjat. Az esemény helyszíne a Budapest-Fasori Evangélikus Gimnázium volt: itt tanított Rátz László, akinek emlékére a díjat alapították.

A díj különösen nagy elismerés, hiszen a pedagógusokat nemcsak szakmai és társadalmi szervezetek, hanem diákok, szülők és pedagógustársak is jelölhették. A kitüntetések odaítélését megalapozó döntést a Bolyai János Matematikai Társulat, az Eötvös Loránd Fizikai Társulat, a Magyar Kémikusok Egyesülete, a Magyar Biológiai Társaság, a Magyar Biokémiai Egyesület, a Magyar Immunológiai Társaság és a Magyar Genetikusok Egyesülete szakmai ajánlásai nyomán hozták meg.

A 2024-ben díjazott kémiatanárok – *Baranyi Ilona* (Dabasi Táncsics Mihály Gimnázium) és *dr. Miklós Endréné* (Kaposvári Táncsics Mihály Gimnázium) – lapunk későbbi számaiban írnak majd pályájukról.

A díjazottak az alapító cégek képviselőivel





Vegyipari mozaik

A biogáz jövője a mi jövőnk is. Az Európai Unió a tízszeresére akarja emelni a térség biogáztermelését és -felhasználását 2030-ig, ami Magyarország számára is esélyt és lehetőséget tartogat. A biogáz a hazai energiamixben jelenleg 0,9%-ot képvisel, ami némi szándékkal és szervezéssel könnyedén lehetne a tízszerese is, de a 15% sem elérhetetlen cél.

Ha minden olyan keletkező anyagot biogáztermelésre használna az ország, ami erre alkalmas, akkor a jelen viszonyok között – elméleti értéként, az Agrárközgazdasági Intézet számítása szerint – akár az összes hazai földgázfelhasználás harmadát is meg lehetne termelni – mutatott rá a technológia lényegére Assaf Onn, az Anaergia vezetője. A biogázüzemek építésében világelső Anaergiát a több magyarországi befektetéssel is rendelkező Marny Investissement S.A. irányítja.

A biogáz mindenre használható, amire a földgáz, például az áramtermelésen túl járművek közvetlen hajtására, de betáplálható a gázvezeték-hálózatba is, csökkentve Magyarország sokat emlegetett energetikai kitétségét.

Nagyon fontos, hogy teljesen zöld, megújuló és környezetbarát energiáról és termelésről van szó, ami nemcsak hogy nem terheli a környezetet – karbonlábnyma negatív, de szagterhelést sem jelent a mai technológia mellett. Az Anaergia technológiája azáltal, hogy megakadályozza az erős üvegházhatású metán felszabadulását a lebomló szerves hulladékból a lerakókban, hozzájárul a szén-dioxid-semlegességhez és mérsékli a globális felmelegedést. Az eljárás végén pedig olyan szagtalan, de magas tápértékű, szerves trágya marad hátra, ami a földekre juttatva igazoltan jobb paraméterekkel rendelkezik, mint az állati trágya közvetlen kijuttatása. Gazdagítja a talajt és gyorsítja a humuszképződést, ezzel is a fenntartható gazdálkodást szolgálva.

A megoldandó feladatok nagy része nem is a feldolgozóhoz, hanem az alapanyagokhoz kapcsolódik. Bár a MOHU például elindította a háztartási élelmiszer-hulladék szelektív gyűjtését, az alapanyag döntő hányada mégiscsak a közműrendszerekben és az agráriumban keletkezik, ezeket a mennyiségeket kellene minél inkább – akár szó szerint – becsatornázni a biogáztermelésbe. Ennek megoldásán sokan és sok szinten dolgoznak, de az országos lefedettség és az egységes támogatási rendszer még a távoli jövő.

(https://www.technokrata.hu/egazdasagipar/2024/12/17/biogaz-jovoje-mi-jovonk/?utm_campaign=&utm_medium=email&utm_source=weboldal+h%C3%ADrek)



Az új magyar elektromos busz. Hosszas és alapos hatósági, valamint műszaki engedélyeztetési folyamatot követően a GANZ-



SOR EBN8 megkapta a szükséges típusengedélyt, amely lehetővé teszi, hogy 250 darabig megkezdődjön az új busz gyártása. A típusengedély megszerzése alapvető fontosságú mérföldkő, hiszen enélkül nem lehet az Európai Unió területén új járművet gyártani és forgalomba helyezni.

„A teszteken számos műszaki és környezetvédelmi előírás teljesítését vizsgálták az erre hivatott szakemberek. A típusengedély után megtörtént a forgalomba helyezés is, a GANZ-SOR EBN8 zöld rendszámot kapott, így a közlekedés teljes jogú tagjaként róhatja a kilométereket a közutakon. A midibusz legutóbb Bábolnán szerepelt egy szakmai bemutatón, ahol a résztvevőket fuvarozta. Készen állunk a sorozatgyártás beindítására, hiszünk benne, hogy a midibusz fontos piaci úrtölt be, hiszen látjuk, hogy évről évre nagyobb az igény a közepes méretű elektromos buszokra” – mondta el Pencz Rudolf, a bajai GANZ Transelektro Közlekedési Berendezéseket Gyártó Kft. (GTKB) ügyvezető igazgatója.

Az új, nyolc méter hosszú, alacsony padlós elektromos midibuszt nyáron mutatták be a sajtónak és a szakmának. A prototípus magyar–cseh koprodukcióban készült, a GTKB felelt a jármű „szívé”, vagyis az elektromos hajtás kifejlesztéséért, míg a cseh SOR a kocsiszekrényt alkotta meg. A legmagasabb hozzáadott értéket képviselő rendszerintegrációs és szoftverfejlesztési feladatok is Magyarországon zajlottak.

Az új járműben 35 utas fér el kényelmesen, tizenhat ülőhellyel rendelkezik, hatótávolsága pedig eléri a 300 kilométert. A midibusz mellett a GANZ töltőberendezéseket is kifejlesztett, egy OppCharge típusú, pantográfós gyorstöltőt és egy két töltőfejes, kábelcsatlakozós, 120 kW teljesítményű töltőberendezést. Az elektromos busz egyben a megújuló energián alapuló közösségi energiafelhasználás fontos alkotóeleme lehet. Akkurendszerének köszönhetően képes arra, hogy energiát tároljon vagy adjon vissza, és így az utasszállítás mellett energetikai feladatokat is ellásson. (https://www.muszaki-magazin.hu/2024/11/27/midibusz-uj-magyar-elektromos-busz/?utm_campaign=&utm_medium=email&utm_source=weboldal+h%C3%ADrek)

Dobó Dorina összeállítása

Küzdelem a kaliforniai lángokkal

A 2025-ös év első hetében Los Angelesben kipattanó tűzvész lehet – egyes vélemények szerint – az Egyesült Államok történetének legnagyobb pusztítást okozó természeti katasztrófája. A szeles időjárás, a fel-fellépő oltóvízhiány külön megnehezítette az oltást. Az írás a légi tűzoltó egységek által használt vegyi anyagok többségét veszi górcső alá.

Los Angeles klímáján a keménylombú erdő (fáinak levelében sok a szilárdító szövet) honos. Láng hatására a fa 105 °C-ig me-

legszik, miközben a vízgőz és más könnyen bomló anyagok távoznak. A magasabb hőmérsékleten, kb. 350–400 °C-on keletkező éghető gázok a levegő oxigénjének hatására meggyulladnak. A gyulladáspont elérése, 260–290 °C után a tűz már magától továbbterjed, a faanyag tartósan ég. A szél csökkenti az éghető anyag nedvességtartalmát és növeli a tűz oxigénellátását. A szélsebesség növekedésével a tűz terjedési sebessége is nő, viharos szélben a terjedés intenzív és kiszámíthatatlan. A tűz miatt ki-



alakuló feláramlás magával ragadja a parazsat, ami tovább növeli a lángoló területeket.

A különböző *foszfát*- és *szulfátsók* tűzoltásra is használhatók, megakadályozzák a cellulóztartalmú (növényzet) anyagok égését. A száraz porként vagy koncentrált folyadékként előállított hatóanyagokat a felhasználás előtt vízzel hígítják. A *guargumi* (guarbab mézgája) és az *agyag* (attapulgit) sűrítőszer adagolása megakadályozza a hatóanyag szétszóródását a levegőben. A tűzoltó vegyi anyagot több színben gyártják, például egy vörös vas-oxidot és illanó anyagokat tartalmazó keverék szétszóródva vörös színű, de napfény hatására fokozatosan földszínűvé halványul. A feltűnő szín a légi személyzetet segíti a retardáló cseppek megcélzásában. A tűz eloltása után a természetbe kiszórt foszfátvegyületek műtrágyaként is hatnak.

A foszfort és az alkalmas foszforvegyületeket már régóta hasznosítják tűzgátlóként. Az égés során a foszforvegyületek bomlanak, miközben a nem éghető folyékony foszforsavból (forráspontja 300 °C) filmréteg képződik a növényzeten, reptérnyakon. Ugyanakkor a foszforsav tovább dehidratálható metafoszforsavvá, és ennek polimerizációjával kialakul a polimetafoszforsav. Így nemcsak a foszforsav által képzett védőréteg jön létre, hanem az erősen savas vegyület karbonizálja a természetes polimert (cellulóz) is. A felületeken képződő „szénfólia” a levegőt és a hőt szigeteli, ezzel fokozódik az égésgátló hatás. Az égéscsökkentő képesség főként a polimer bomlási szakaszában érvényesül, az éghető anyag dehidratálódásával mérséklődik a hőbomlás során keletkező gyúlékony gázok mennyisége.



A légi tűzoltó egységek oltóanyaga

A természetben keletkezett tűz elfojtására a foszforvegyületek közül elterjedt a diammónium-foszfát (DAP), az ammónium-polifoszfát (APP) és a monoammónium-foszfát (MAP), a szulfátsók közül a diammónium-szulfát (AS). A diammónium-foszfát és az ammónium-szulfát kombinált alkalmazása hatékony égéscsökkentő keveréket biztosít.

Az erdő- és bozóttüzek leküzdésében nitrogéntartalmú vegyületeket is használnak, a felszabaduló nitrogéngáz mintegy hígítja az éghető illékony elegyet. A vegyi anyagok egyúttal hozzájárulnak a hűtéshez, az oxigénhez való hozzáférés csökkentésével gátolják az újragyulladást. A pirolízis hőmérsékletének mérséklése csökkenti a rendelkezésre álló éghető anyag mennyiségét.

Az egyre korszerűbb oltóanyagok mellett továbbra is a víz a legelterjedtebb. A víz oltóhatása döntően abban nyilvánul meg, hogy az égő felületre jutó víz felforr és gőzzé alakul. Ennek során jelentős mennyiségű hőt von el az égő anyagtól, így azt a gyulladási hőfok alá hűtheti. A hőelvonó hatás a víz porlasztásával fokozható. Az oltóvíz az oxigént is elzárja az égő anyagtól.

Kutasi Csaba

MKE-hírek

Intézőbizottsági ülés Debrecenben

Az Intézőbizottság, az MKE vezető szerve Debrecenben tartotta 2024. évi utolsó ülését. December 13-án, pénteken a BMW Group Gyár Debrecen meghívására a BMW Laboratóriumában tettünk látogatást és tartottunk ülést, majd 14-én a Debreceni Egyetem Kémia Intézetében folytattuk a munkát. Köszönjük a meghívást!



Az MKE IB tagjai és a BMW Laboratórium munkatársai

Az MKE további hírei az oktatási blokkban és a lap belső borítóján szereplő hirdetésben kaptak helyet.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXX. No. 2. February

CONTENTS

Nobel prizes 2024

Chemistry 34

ZOLTÁN GÁSPÁRI

Physics 38

TAMÁS KÉGL

Physiology or medicine 41

ZSOLT BOLDOGKÓI

Sustainable harmonization of recultivation and development at BorsodChem 44

ZOLTÁN FEJES and SÁNDOR SZENTPÉTERI

New trends and solutions in chemical industry. 40th Borsod Chemistry Day 46

MÁTÉ BENKE and MARICA HEGEDŰS

Whom is it named after? Polanyi's rule. Part I 48

GYÖRGY INZELT

Composite materials in aircraft construction 53

CSABA KUTASI

Obituaries

In memoriam László Tőke 58

GYÖRGY KEGLEVICH

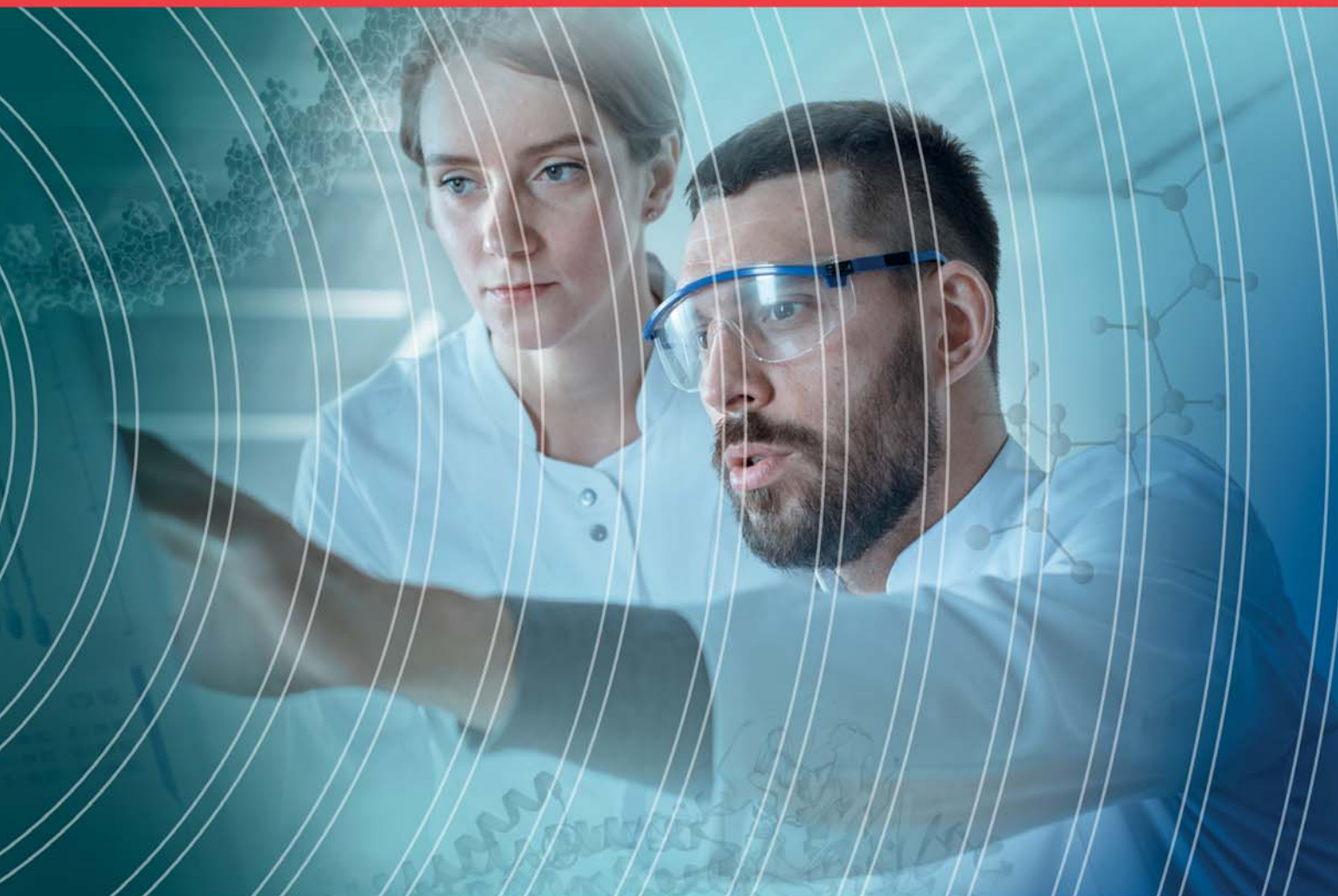
Attila E. Pavlath (1930–2024) 59

TAMÁS KISS

Chembits 62

GÁBOR LENTE

News of the month 64



Lépje át a határokat

eddig elérhetetlen LC/MS teljesítménnyel

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



Thermo Scientific™ Orbitrap
Eclipse™ Tribrid™ MS



Thermo Scientific™ Orbitrap
Fusion™ Lumos™ Tribrid™ MS



Thermo Scientific™ Orbitrap
ID-X™ Tribrid™ MS

További információk: thermofisher.com/tribrid

Kizárólagos képviselő:

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

UNICAM