A TARTALOMBÓL:

- Az MKE új főtitkára és IB-tagjai
- Nyugtató szavak a félelmetes GMO-ról
- Szimmetria – egy matematikus szemével
- EuCheMS Newsletter, 2015. szeptember

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXX. ÉVFOLYAM • 2015. SZEPTEMBER • ÁRA: 850 FT

A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap támogatja

Nemzeti Kulturális Alap

A kiadvány a Magyar Tudományos Akadémia támogatásával készült

NANOCOLOR® UV/VIS II

újfajta spektrofotométer

új!

Automata védelem zavaros minták hibás mérése ellen

MN

- spektrofotométer
- zavarosságmérő és
- színmérő egyben

AKTIVIT Kft.
Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök
1145 Budapest, Pétervárad u. 14.
Tel: (1)-470-0125, (1)-221-7865.
Fax: 252-9940 info@aktivit.hu www.aktivit.hu

TÁMOGATOTT ALKALMAZÁS

- Forradalmian új kezelési élmény
- 10 colos érintőképernyő
- Ikonalapú, önmagyarázó menüstruktúra
- Integrált zavarosságkontroll (NTU-Check)
- Laboratóriumi LAN hálózatba illeszthető
- CIE-konform színmérés és színanalízis
- Magyar nyelvű magyarázatok, 16 GB memória
- 6-féle automata készülékkontroll és 8-féle minőségbiztosítás
- 200 előkészített + 100 programotzható automata módszer

MACHEREY-NAGEL
www.mn-net.com

MN Since 1911

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA
HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL
LXX. évf., 9. szám, 2015. szeptember

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

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

Szerkesztők:
ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE, JANÁKY CSABA, LENTE GÁBOR, NAGY GÁBOR, PAP JÓZSEF SÁNDOR, ZÉKÁNY ANDRÁS
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

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

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

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

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

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

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

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

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

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

KEDVES OLVASÓK!

Új tanév kezdődik a közoktatásban és a felsőoktatásban. Reményekkel és bizakodással tölthetnek el bennünket a kormányzati ígéretek, de ezek a napi gyakorlatban néha másként jelennek meg.

Az elmúlt félév két utolsó Kari Tanács-ülésének emlékeit szeretném megosztani olvasóinkkal, melyek nem töltöttek el optimizmussal a felsőoktatás közeli jövőjét célzó kormányzati elképzelések megvalósulásainak realitásait illetően.

A június végi tanácsülésen tárgyaltuk a szegedi TTIK ügyrendjét. Az érdemi paragrafusok egyike az ügyrend elején a felsőbb szabályzatokból származóan kimondja: „A szabályzat a rektor, a kancellár, a dékán és a Szent-Györgyi Albert Klinikai Központ elnöke számára felhatalmazást adhat, hogy egyes kérdéseket utasításban szabályozzanak.” Ezt követően mintegy 40 oldalon keresztül részletezi a Kar és egységei demokratikus működésének feltételeit és módját. Teljes bizalmam van az egyetem első számú vezetőivel szemben, akikről nem tételezem fel, hogy vissza akarnának élni a szabályzat adta lehetőséggel. A rendszer nem tetszik, amely ezt lehetővé teszi. A Kari Tanács a dékán vonatkozásában korrigálta ezt a pontot, de a többi vezetőre nem terjedt ki a hatásköre.

A következő ülés a Kar költségvetését tárgyalta. Mint kiderült, a Szenátus által elfogadott egyetemi költségvetés alapján a Kar teljes normatív állami támogatása 1,8 milliárd Ft, a 2014. évi keret majdnem 98 százaléka. Ez 5000 hallgató éves oktatási költségeihez való állami hozzájárulás. Ha belegondolok, ez majdnem eléri a legutóbbi lottó ötös egyharmadát. Bár lehet, hogy a felsőoktatásra fordított állami költségvetési főösszeg, amit az országgyűlés elfogad, évről évre nagyobbnak tűnik, ez az összeg évről évre folyamatosan csökken. Felvetődött bennem a gondolat: talán érdemes volna lottózni, annak a valószínűsége ugyanis, hogy nyerünk a lottón, nullánál nagyobb. Az állami támogatás növekedéséé viszont az eddigi tapasztalatok szerint nulla.

Hogy a közoktatásról se feledkezzünk meg, csak utalnánk Czunyiné Bertalan Judit köznevelési államtitkár minapi megnyilatkozására, amikor nem túl szerencsésen kémiai példákon világította meg mondandóját egy oktatási konferencián. Ez a kémiatanárok körében kiverte a biztosítékot (az Index nyomán az ominózus nyilatkozat az MKE Facebook-oldalán is olvasható, www.facebook.com/mkeface).

A végére egy jó hírt hagytam. Az Egyesült Királyság népessége, egy friss felmérés szerint, egészen pozitívan vélekedik a természettudományok társadalmi hatásáról, amint a Chemical & Engineering News június 8-i számában olvasható. A cikk az MKL-ben hamarosan magyarul is megjelenik. Érdemes volna hazánkban is készíteni egy hasonló felmérést. Félek, hogy az eredmény mást mutatna.

Nem maradt már helyem, hogy olvasnivalót ajánljak szeptemberi számunkból, de ezen könnyen túltehetik magukat, ha végiglapozzák a folyóiratot. Ígérem, ebben a számban is találnak olyan cikket, ahol megállnak a lapozásban, és kicsit több időt töltenek el az átfutásával, netán alaposan elolvassák, át is gondolják, vitatkoznak a szerzővel. Jó böngészést!

2015. szeptember

Kiss Tamás

TARTALOM

TISZTÚJÍTÁS
Bemutatkozik az MKE új főtitkára, **Pálinkó István** és a hat új IB-tag: **Adányiné Kisbocskói Nóra, Demeter Ádám, Fábián István, Keglevich György, Murányi Zoltán, Szántay Csaba** 266

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY
Gyevi-Nagy László, Tasi Domonkos Attila, Remete Attila Márió, Tasi Gyula: Szimmetria – egy matematikus szemével. 90 éve született a kémiai Nobel-díjas Sir John Anthony Pople 271

Bruckner-termi előadás
Juhász László: Glükopiranozil-oxadiazol- és triazol-karboxamidok mint GP-inhibitorok: szintézis, enzimkinetika és szerkezet-hatás összefüggések 278

KÖNYVISMERTETÉS
Rácz László: Motorbenzinek *(Hancsók Jenő, Eller Zoltán, Kriván Eszter: Korszerű motor- és sugárhajtómű üzemanyagok. I. Motorbenzinek)* 280

KITEKINTÉS
Venetianer Pál: Nyugtató szavak a félelmetes GMO-ról 281
Lente Gábor: Könnyen emészthető, humoros tudomány. A 2014-es IgNobel-díjakról 283

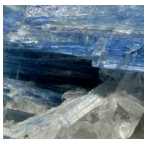
VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET
Kálmán Alajos: Mester és tanítvány: Sir Lawrence Bragg (1890–1971) és Náray-Szabó István (1899–1972) 284
Próder István: Felújított kiállítások az ötvenéves Vegyészeti Múzeumban. Negyedik rész 287
EuCheMS Newsletter, 2015. szeptember 291
Vegyészkalendárium (**Pap József Sándor** rovata) 295

MEGEMLÉKEZÉS
Kiss Attila, Kónya Krisztina, Somsák László: Prof. Dr. Patonay Tamás 296
Flórián Károly, Heltai György: Prof. Ing. Mikuláš Matherny DSc. 297

VEGYÉSZLELETEK
Lente Gábor rovata 298

EGYESÜLETI ÉLET 300

A HÓNAP HÍREI 301



Címlap: Kianitkristályok (fotó: Parent Géry, commons.wikimedia.org). Illusztráció Kálmán Alajos írásához

Bemutatkozik az MKE új főtitkára és a hat új IB-tag

A Magyar Kémikusok Egyesülete 2015. május 15-i Küldöttközgyűlésén új főtitkárt és hat új IB-tagot választott. Ebben a számunkban rövid beszélgetés keretében bemutatkozik Pálinkó István, az MKE új főtitkára és az IB tagjai, Adányiné Kisbocskói Nóra, Demeter Ádám, Fábián István, Keglevich György, Murányi Zoltán, Szántay Csaba.

Az új IB-tagok mindegyikének a következő kérdéseket tettük fel:

- Kaphatnánk egy rövid bemutatkozást?
- MKE-tagsága óta milyen kép alakult ki Önben az Egyesületről? Mennyiben érzett elégedettséget, miben voltak hiányérzetei? Van-e valamilyen különösen pozitív vagy negatív emléke az Egyesülettel kapcsolatban?
- Milyen elgondolásokkal, elképzelésekkel kezdi el intézőbizottsági munkáját?

A Pálinkó Istvánnal készült interjút és az IB-tagok válaszait az alábbiakban olvashatják. **K. T.**

Bemutatkozó beszélgetés Pálinkó Istvánnal, a Magyar Kémikusok Egyesülete új főtitkárával

– Kaphatnánk egy rövid bemutatkozást?

– A Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékén dolgozom már több mint harminc éve, jó néhány éve egyetemi docensként. Sokféle főkollégiumi és speciális tárgyat oktattam és oktatok, főként kémia alapszakos és vegyész MSc-szakos hallgatóknak mind magyar, mind angol nyelven. Az oktatás mellett tudományos munkát is végzek, főként a fizikai szerves kémia területén. Rendszeresen publikálok referált szakmai folyóiratokban, és ugyancsak rendszeresen veszek részt hazai és nemzetközi konferenciákon. Kiterjedt nemzetközi kapcsolatrendszerrel rendelkezem. Habilitált oktató vagyok, és 2007-ben elnyertem az MTA doktora címet. Oktató- és kutatómunkám összekapcsolódik. Eddig közel kétszáz hallgató készített nálam szakdolgozatot, projektmunkát, diplomadolgozatot, és hét hallgató doktorált témavezetésemmel. Különösen büszke vagyok diákköröseimre, akik sok díjat nyertek házi és országos diákköri konferenciákon. Egyetemi tanári kinevezésem szeptember 1-től esedékes, a pályázatom már minden szakmai fórumon keresztülment egyhangú támogatással.

– 1989 óta vagy tagja az MKE-nek. Mi az első emléked, ami az Egyesülettel kapcsolatos?

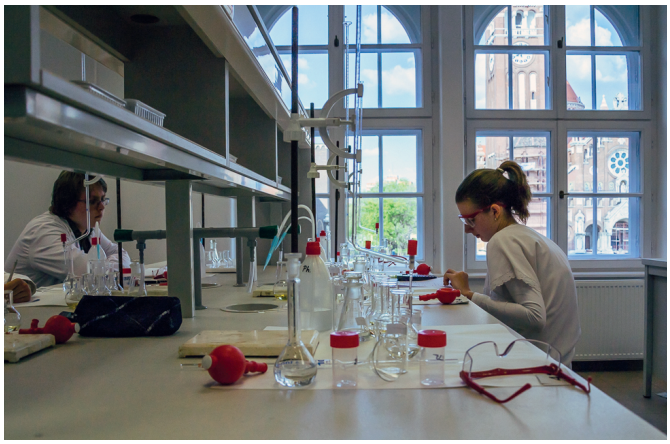
– Valóban, a Magyar Kémikusok Egyesületének már több évtizede tagja vagyok, valószínűleg igazad van, 1989 óta. Az első emlékem egy sikeres utazási pályázat volt. Akkor jártam először az Egyesület akkori központjában, amely még a Fő utcában volt. Mindez 1993-ban történt.

– Azóta több szálon is kötődtél/kötődsz az Egyesülethez. Például a Csongrád Megyei Csoporton keresztül, de talán az Irinyi János Középiskolai Versenybizottság vezetése, illetve a verseny szervezésében való többéves részvétel a legjelentősebb. Mit gondolsz erről a tevékenységedről?

– Az eddigiekben az Egyesület tehetséggondozó munkájában vettem részt; az Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny megyei elnökeként három évig, az országos verseny egyik szervezőjeként öt évig, a Versenybizottság és a zsűri tagjaként két évig, a Versenybizottság elnökeként pedig már öt éve dolgoztam, illetve dolgozom. A Szegeden szervezett kémiatáborban rész vettem előadóként, és többször is tartottam előadást a kémiatanárok szervezett továbbképzésein. A tehetséggondozás minden formája szerintem helyes, de ami az én munkámat illeti, a legfontosabbnak az Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny zökkenőmentes lebonyolításának érdekében kifejtett tevékenységemet tartom. Ez ma már tömegeket megmozgató, nagy hagyományú háromfordulós verseny. Ennek feladatsorait állítom össze a Versenybizottság tagjai és a szerencsére nem kisszámú feladatkészítőink segítségével. Személyes jelenlétemet csak a harmadik forduló követeli meg. Ebben több mint kétszáz középiskolás indul. Ez olyan többnapos esemény, amelyen az Egyesület Titkárságának dolgozói, a Versenybizottság tagjai és a helyi szervezők nagy aktivitással vesznek részt. Nélkülük a sikeres megvalósítás elképzelhetetlen lenne. A versenyt és általában a középiskolás versenyrendszert nagyon fontosnak tartom – magam is versenyző voltam középiskolás koromban –, ez igazi és nagyon fontos hungarikum. Megnövekedett elfoglaltságaim ellenére sem akarok kiszállni a versenyszervezésből.

– Az évek folyamán mennyire követted az Egyesület, a vezetés munkáját? Mennyire tudtál azonosulni az Egyesület célkitűzéseivel, mennyire érezted úgy, hogy ez a te egyesületed is?

– Azt tapasztaltam, és az utóbbi tíz évben egyre jobban belelátok az Egyesület mindennapi munkájába, hogy az Egyesület működik, egyre jobban elér a köz- és felsőoktatásban tevékeny-



kedő kémiatanárokhoz, egyetemi oktatókhoz és az ipari-mezőgazdasági szférákban dolgozókhoz egyaránt. A Titkárság nem kis erőfeszítése árán a működés anyagi alapjai biztosítottak. Az Egyesület sokrétű tevékenysége magában foglalja, többek között, a tehetségtámogatást, a tudományos-szakmai nemzetközi és hazai konferenciák rendezését, a hazai kémikustársadalom összefogását és a nemzetközi kapcsolatok bővítését. Az ügyvezető elnökkel és a Titkárság tagjaival sokszor dolgoztunk és dolgozunk együtt, emberi és munkakapcsoltunk, szerintem, kiváló. Ugyanez a helyzet az Egyesület elnökével is, aki az utóbbi évek Irinyi-versenyein nem csupán nézőként vett részt.

– Mi indított arra, hogy pályázz az MKE főtitkári posztra?

– Felkértek a pályázásra, talán azért, mert nem csak nekem voltak kellemes tapasztalataim az együttes munkával kapcsolatosan.

– Bár a főtitkári pályázatban részletesen megtalálható, összefoglalnád olvasóinknak, hogy milyen főbb elképzelésekkel vágysz neki az elkövetkező négy évnek?

– Az Egyesület működtetésének pénzügyi feltételei stabilak, de ezért minden évben meg kell küzdeni. A közdelem sikeréhez minden erőmmel igyekszem hozzájárulni. Természetesen az Egyesület mindenkori terveit, programjait és akcióit az anyagi feltételekkel összhangban kell megvalósítani, ami jelentős mértékben megköveteli a főtitkár szervező, koordináló munkáját. Az Egyesület tagságára koncentráltan kell figyelni. Időről időre elemzéseket kell végezni különféle szempontokból, úgymint a taglétszám, a korösszetétel, a jellemző munkahelyek, az aktivitási készség és az utánpótlás biztosítása. Alapvető feladat az egyesületi elnök munkájának támogatása a jogszabályok ismeretével, színvonalas döntés-előkészítő munkával. Szükség van a támogatók körének lehetőség szerinti bővítése, szorosan együttműködve a Titkársággal és különösen az ügyvezető igazgatóval. Az egyesületi szervezetek (szakosztály/társaság, szakcsoport, területi szervezetek és munkahelyi csoportok) helyzetének áttekintésére sort kell keríteni a tisztújítások után, segítséget kell nyújtani hatékony működésükhöz és az egymással való kapcsolatuk kiépítéséhez. Az egyesületi adminisztrációs tevékenység szolgáltatóképességének tovább kell javulnia. Szükséges a kémia társadalmi képének további javítása, az eddig elért eredmények megőrzése, segítségnyújtás további projektek kidolgozására, akciók megvalósítására. Az ipari-mezőgazdasági és akadémiai szféra minél szorosabb együttműködésének támogatása a kémikustársadalom létérdeke, az együttműködések kialakítására/kidolgozására alkalmakat kell teremteni. Az egyéb szakmai szervezetekkel történő hálózatépítés támogatása a minél szélesebb körű társadalmi beágyazottság elérése szempontjából alapvető. Az egyre eredményesebb nemzetközi kapcsolatépítés további támogatása szintén nagy fontosságú, hiszen tudományunk/szakmánk/hivatásunk hatékonyan a nemzetközi színtéren művelhető. A kémikustársadalom és/vagy még szélesebb kör számára kiemelkedő jelentőségű ügyek képviselete ugyancsak döntő fontosságú. A sokféle cél legalább részleges elérése összehangolt munkát kíván az Egyesület vezérkarának minden tagjától.

– Kívánunk az Egyesület megválasztott régi-új vezetőinek sikereket, sok örömöt munkájukhoz, erőt, jó egészséget elképzeléseik minél teljesebb valóra váltásához! Lapunk a jövőben is teljes odaadással szolgálja ezek megvalósulását.

Kiss Tamás

Adányiné Kisbocskói Nóra

1. A Budapesti Műszaki Egyetemen 1981-ben szervező mérnök szakon szereztem vegyészmérnöki diplomát. Az egyetemi évek alatt bekapcsolódtam az Általános és Analitikai Kémiai Tanszéken folyó munkába, mint TDK-hallgató, a folyamatos áramlású analizátorral végzett metodikák kidolgozásában vettem részt. 1981-től a Labor Műszeripari Művek Training Laboratóriumában helyezkedtem el beméró mérnökként, majd 1988-tól a Központi Élelmiszeripari Kutatóintézetben (ma NAIK, Élelmiszer-tudományi Kutatóintézet) dolgozom. Az élelmiszer-analitikai vizsgálatokon belül fő kutatási területem a bioszenzorok, immunszenzorok metodikai fejlesztése, alkalmazási területeinek szélesítése. 2004-ben a PhD-, 2014-ben az MTA doktora címet szereztem meg. Az Élelmiszeranalitikai Osztály osztályvezetője, a SZIE–MKK Állattudományi Alapok Intézetének keretében 2012-ben alakult Kihelyezett Élelmiszertudományi és Takarmánybiztonsági Tanszék tanszékvezetője vagyok.

A Magyar Kémikusok Egyesületében az Analitikai Szakosztály Elektroanalitikai Szakcsoport titkára, 2003 óta az Analitikai Szakosztály titkára vagyok. Rendszeresen részt veszek az Analitikai Napok és az Analitikai Ankét szervezésében, szerepet vállalok a Vegyész Konferenciák szakmai programjának összeállításában, lebonyolításában, a kiadványok szerkesztésében. Egyesületi munkámért 2009-ben Preisich Miklós-díjat kaptam.

2. Az elmúlt évek során azzal kellett szembesülni, hogy egyre kevesebben tudnak és/vagy akarnak az egyesületi programokon

részt venni, a szervezésben segíteni. Különösen a fiatalokat nehéz megszólítani, bár erre is volt számos jó példa. A Kémia Évének rendezvényei igen kedves emlékek számomra, mert akkor kiderült, hogy jó szervezéssel, vonzó programokkal sokakat meg lehet szólítani.

3. Az Intézőbizottsági munkám során az Egyesület adott helyzetétől és a körülményektől függetlenül a fenntartást, együtt maradást tartom az egyik legfontosabb feladatnak. Az ország vegyésztársadalmának szüksége van az összefogásra, szakmai együttműködésre és határozott érdekképviseletre. Az Egyesület nevében megjelenő nyilatkozatok, fellépések nagyobb figyelmet kapnak, mint egy szűkebb csoport akciói. Ugyanakkor a személyes felelősségünket növeli, hogy egy több mint százéves egyesület további útjának kijelölésében, annak egyengetésében vehetünk részt a következő négy évben.

Demeter Ádám

1. 1995-ben végeztem a Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Karán, Gyógyszeripari ágazaton. Az egyetemi évek alatt korán elköteleződtem a gyógyszerkutatás és az NMR-spektroszkópia mellett. A végzést követően 2005-ig a Richter Gedeon Nyrt. Kutatási Igazgatóságán működő Szerkezetkutatási Laboratóriumban dolgoztam kutató-fejlesztő, NMR-spektroszkópus munkakörben. Az ott eltöltött tíz év meghatározó volt számomra. A gyógyszer-analitika szeretetét Görög Sándor plántálta belém, kutatóvá pedig Ifj. Szántay Csaba formált. PhD-fokozatot 2002-ben szereztem richteres témákban végzett NMR-es kutatásokból, ifj. Szántay Csaba témavezetésével. 2004-ben MBA-diplomát szereztem a BME-n, pénzügyi és gazdasági szakirányon, valamint minőségmenedzsment szakirányon. 2006 óta a Richter Hatóanyag Morfológiai Osztályának osztályvezetője vagyok, ahol hatóanyagok szilárd fázisú analízisével, polimorfiakutatással, továbbá kristályosítási eljárások kidolgozásával és technológiai optimálásával foglalkozunk. 2014-től a Kémiai Főosztály főosztályvezető-helyetteseként feladatom a Richter K+F tevékenységéhez kapcsolódó fejlesztési fázisú projektek menedzsmentje, szintetikus és analitikai laboratóriumok, félüzemi egységek munkájának koordinálása.

1995-től az MKE NMR Munkabizottság tagja vagyok. 2006-tól veszek részt az MKE Kristályosítási és Gyógyszerformulálási Szakosztály vezetőségi munkájában. 2003-tól az MKE Richter gyári csoport vezetőségi tagja, 2011-től elnöke vagyok, ami nagyon komoly elköteleződést jelent számomra.

Fontosnak tartom, hogy az egyetemi oktatásban is részt vegyek. A Semmelweis Egyetem Gyógyszerésztudományi Karán és a BME Vegyészmérnöki Karán tartok előadásokat, ahol igyekszem a napi gyakorlatból származó példákon keresztül átadni az ipari gyógyszerkutatás szemléletét.

2. Az első pozitív élményem mindjárt az egyetem befejezéséhez köthető, amikor diplomamunkámmal elnyertem az MKE nívódíját és egyben egy éves MKE-tagságot. Ekkor ismerkedtem meg közelebbről az MKE-szervezettel. A VIII. Kémiai Előadói Napokon beszámolhattam diplomamunkámról, amire friss diplomásként nagyon büszke voltam. Aztán ott voltak az MKE Fiatal Analitikusok Előadóülései, az MKE NMR munkabizottsági ülések, a vegyészkonferenciák, egyszóval számos olyan, MKE által szervezett szakmai fórum, ahol egy kutatópalánta kipróbálhatja magát, lehetőséget kap a fejlődésre, belekerül a szakmai közösségbe, és szinte észrevétlenül elköteleződik, azonosul az MKE céljaival. Ez az elköteleződés a munkahelyen is folytatódhatott, egy szűkebb szakmai közösségben az MKE Richter gyári csoportban, a „homo Richtericus chemicus”-ok között.

Az évek során megismerhettem egy több mint százéves múltú szervezetet, annak kiemelkedő személyiségeit, és megtapasztalhattam azt a hálót, ami összeköti az MKE tagjait, és tágabb értelemben a magyar kémikusközösséget, határon innen és túl. Láttam sok elszánt, a kémiai ügyéért, saját szakterületének megbecsüléséért és a kémia pozitív társadalmi megítéléséért önzetlenül tenni akaró kollégát magam körül az Egyesületben. Hamar felismeri az ember, hogy ez egy önként vállalt szolgálat. Felismeri azt is, hogy milyen közel állnak egymáshoz például a Richter társadalmi szerepvállalásának egyes sarokkövei és az MKE céljai. Felismeri azt is, amin az Egyesület sikere nagymértékben múlik Az elköteleződés pedig egyre erősebb tenni akarással párosul, legyen az egy szűkebb szakmai, vagy a richteres kémikusok közössége, vagy éppen az MKE vezetősége.

3. Először is nagy megtiszteltetés, hogy viszonylag fiatalon bizalmat kaptam a tagságtól az intézőbizottsági munkára, igyekszem ezt a bizalmat legjobb tudásom szerint megszolgálni, hozzájárulni munkámmal az Egyesület operatív irányításával kapcsolatos feladatok ellátásához. Szeretnék az ipari és akadémia szféra szempontjainak összehangolására koncentrálni, hiszen egyre erősebb az összefonódás és az egymásra utaltság ebben a relációban. Fontosnak tartom, hogy megjelenítsük azokat a gyakorlati ipari elvárásokat is, amelyek a kémia oktatása szempontjából részben irányadók lehetek. Bízom benne, hogy megfelelő döntés-előkészítés mellett hatékony munkát tudunk majd végezni ebben a ciklusban.

Fábián István

1. A Kossuth Lajos Tudományegyetemen szereztem okleveles vegyész diplomát 1980-ban. Végzés óta az egyetemen dolgozom, jelenleg a Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék vezetője, egyetemi tanár vagyok. Pályafutásom során oktatási tevékenységem az általános, a fizikai, a szervetlen és az analitikai kémia különböző területeihez kapcsolódott. Jelenleg az Analitikai kémia című tárgy főelőadója, valamint a vegyész MSc-képzés szakfelelőse vagyok. Emellett a Debreceni Egyetem Kémiai Doktori Iskolájában törzstagként, a Koordinációs és analitikai kémia program vezetőjeként veszek részt.

Kutatómunkám az egyszerű szervetlen oxidálószerek redoxireakcióival, környezeti kémiával, analitikai kémiával, funkcionalizált aerogélekkel kapcsolatos. Számos kutatási pályázat témavezetője voltam, több mint 100 rangos nemzetközi folyóiratban

megjelent közlemény szerzője vagyok. Nemzetközi szakmai konferenciákon rendszeres részt veszek, két éve kezdeményezésemre indult el a *European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms* konferenciasorozat. A *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis* című folyóirat főszerkesztője vagyok. Pályafutásom során több évig dolgoztam az Egyesült Államokban meghívott kutatóprofesszorként (1988–1991), illetve Németországban, előbb Max Planck-ösztöndíjasként (1983–1984), majd Alexander von Humboldt-ösztöndíjasként (1992–1993).

A Debreceni Egyetemen számos testületnek voltam választott tagja. Két évig az egyetem rektorhelyettese, 2010 és 2013 között a rektora voltam. Több hazai és nemzetközi szakmai szervezetben is tag vagyok. A 2000-es évek második felében részt vettem az OTKA Kémia I zsűri, majd az OTKA Műszaki és Természettudományi Kollégium munkájában. Mintegy tíz évig az EU FP5, FP6 és FP7 keretprogramokban szakértő, bírálóbizottsági tag, illetve több uniós pályázat kémiai bírálóbizottságának elnöke és társelnöke voltam.

Meggyőződésem, hogy az arra alkalmas alapkutatási eredményeknek a gyakorlatban is hasznosulniuk kell. Ezzel az elképzeléssel összhangban az elmúlt évtizedekben számos, külső partner számára végzett (alkalmazott) kutatási projekt témavezetője is voltam. Jelenleg kutatócsoportommal intenzív szakmai együttműködésben veszek részt az AkzoNobel (Bohus, Svédország) céggel. Emellett a közelmúltban tanszékünkön létrehoztuk az Agilent Technologies atomspektroszkópiai mintalaboratóriumát.

2. Az MKE-t és tevékenységét sokáig egyfajta távolságtartással szemléltem. Természetes volt számomra, hogy van egy egyesület, ami a kémikusokat képviseli Magyarországon, és aminek én is tagja vagyok, de nem éreztem késztetést arra, hogy intenzívebben belemerüljek az egyesületi munkába. Időről időre részt vettem az MKE szervezésében lebonyolított rendezvényeken, de közvetlen „élményem" az Egyesület működésével kapcsolatban nem sok volt. Az elmúlt mintegy tíz évben viszont több olyan momentum is adódott, ami más dimenzióba helyezte számomra az MKE-t. Példaként említeném a nemzetközi kapcsolatrendszer építését és bővítését; a fiatal, kémiai iránt érdeklődő középiskolások felkarolását; vagy a Magyar Kémikusok Lapja modernizálását. Mindez számomra azt jelenti, hogy az MKE a folytonosan változó körülményekhez alkalmazkodó, dinamikusan fejlődő szervezetté tud válni.

3. Szerintem az IB-nek néhány kiemelt jelentőségű célt kell megfogalmaznia, és ezeket szem előtt tartva kell végeznie munkáját. A magam részéről ezek a prioritások a következők.

Elsődleges feladatnak tekintem a kémia össztársadalmi presztízsének erősítését. Napjainkban a kemofóbia számos megnyilvánulását tapasztalhatjuk közszereplők, politikusok és átlagemberek részéről egyaránt. Ennek elsődleges oka a természettudományos műveltség csaknem teljes hiánya, amit önjelölt küldetéstudatos „szakemberek" és különböző áltudományos termékekkel házaló sarlatánok még erősítenek is. Az MKE-nek nagyon aktív szerepet kell vállalnia a tudományos, és ezen belül a kémiai ismeretterjesztésben. Be kell mutatnunk, hogy a kémia nagyon sokféle módon és pozitívan jelen van mindennapjainkban, de azt is, hogy a kémikusok felelősségteljesen gondolkoznak a káros hatások felszámolásáról, kiküszöböléséről.

Ugyancsak fontos feladat a magyar kémikusok közösségének képviselete nemzetközi fórumokon, szervezetekben. Közhely, hogy a kémia nem ismer országhatárokat; akár kutatásról, akár képzésről, akár vegyiparról van szó, a kémiát színvonalasan csakis a nemzetközi normákat betartva lehet és érdemes művelni. Ott kell lennünk és lehetőségeinkhez képest képviselni kell a hazai kémikusközösség érdekeit azokon a fórumokon, ahol a szakterületünk jövőjét meghatározó elképzelések megfogalmazódnak.

További megoldandó feladatnak a hazai vegyipari cégek és az egyetemek, kutatóintézetek közötti együttműködések erősítését tekintem. Személyes tapasztalataim szerint a gazdasági szférában számos olyan szakmai probléma vetődik fel, aminek megoldásában az akadémiai szféra hatékonyan közre tudna működni, de a megfelelő információcsere hiányában a szükséges együttműködések nem alakulnak ki. Véleményem szerint szervezetileg az MKE alkalmas arra, hogy katalizálja ezeknek az együttműködéseknek a létrejöttét.

Az IB tagjaként elsősorban az említett célok megvalósításában szeretnék közreműködni. A feladatok ellátásában minden bizonnyal jól tudom majd korábbi szakmai és egyetemi vezetői tapasztalataimat hasznosítani.

Keglevich György

1. Tizenhat éve a BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, illetve az egyik elődtanszék vezetője vagyok. Szerves vegyipari technológiai és ipari indíttatású tárgyakat oktatok, kutatási területem a foszfororganikus és a környezetbarát kémia. A Tanszéken, a kutatócsoportomban és a szakmai közéletben (legfőképp többszörös editorként) „nagy lángon égek".

2. Több kapcsolódási pontom is volt és van a MKE-hez. Körülbelül két évtizede vagyok a MKL szerkesztőbizottságának tagja, ebből kifolyólag három teljesen eltérő habitusú főszerkesztővel dolgozhattam együtt, illetve tanulhattam tőlük. A Díjbizottságnak két cikluson át voltam elnöke. Ezen tevékenységeim révén elég jó rálátásom van az egyesületi életre. Az elmúlt időszakban mindig voltak erősségek/erények és nehézségek. A magam részéről mindig azt nézem, hogy az Egyesület mennyire professzionális. Véleményem szerint a dolgok jó irányban fejlődtek. Az idők során a – legkülönbözőbb okokra (de leginkább vitatható személyi döntésekre) visszavezethető – konfliktusok nem tettek jót az Egyesületnek és az ott dolgozóknak. Kiemelten fontosnak tartom, hogy a „vezérkar" összetartó és egymással szót értő csapat legyen.

3. Igazából nem vágytam erre az újabb pozícióra, de azt mondtam a Jelölőbizottságnak és Androsits ügyvezető igazgató asszonynak, hogy ha a közösség bizalmat szavaz, „belevetem magam" ebbe a munkába. Nyílván a minél olajozottabb működést és a jó célokat fogom támogatni. Idetartozik az ipari szakemberek és a fiatalok minél intenzívebb bevonása az egyesületi életbe. A fiatal végzetteket diplomájuk megszerzésekor kéne beszervezni az Egyesületbe. Az egyesületi szakcsoportokat és az MTA munkabizottságait közelíteni lehetne/kellene egymáshoz. Még több profi konferencia szervezésére lenne szükség, és ezeket a lehető legalacsonyabb áron kellene felkínálni. Nyitottnak kéne lenni továbbra is a „nagy öregek" tanácsaira.

Murányi Zoltán

1. Közel fél évszázada születtem, Miskolcon. Tanulmányaim (matematika-kémia szakos középiskolai tanár – 1990, műszeres és környezetvédelmi analitikus szakvegyész – 1995) és fokozatszerzéseim (dr. univ. – 1995, PhD – 2003) a Debreceni Egyetemhez kötődnek. 1990 óta az Eszterházy Károly Főiskolán (EKF) dolgozom, 2006 óta főiskolai tanárként, jelenleg tanszékvezetői és intézetigazgatói megbízást teljesítek. Fő területeim az élelmiszer-analitika, ezen belül is a borok nyomelem-tartalma és a termőhely összefüggése, illetve a kémiatanítás módszertana. Kedvenc elfoglaltságom a tudomány-népszerűsítés (látványkémia) és a tehetséggondozás (TUDOK, OTDT Kémiai és Vegyipari szekció Szakmai Bizottság elnöke, 2013–2015). Feleségem, Zagyvai Márta az EKF Német Nyelv és Irodalom Tanszékén főiskolai docens. Gyerekeink, Lili (2004), Réka (2004) és Péter (2006) az idei bizonyítványban összesen 21 dicséretes jeles eredményt jegyeznek, fő területük mégis a képzőművészet és Petinek a sakk. Kedvenc időtöltéseim – a családon túl – a túrázás, akvarisztika, ásványok. Elismerések, amire a leginkább büszke vagyok: Science on stage Fődíj és a Leginnovatívabb Kémiatanár Különdíj – 2010; a Magyar Felsőoktatásért Emlékplakett – 2011; Kiváló Testületi Munkáért, MKE – 2012.

2. Mindig is fontosnak tartottam az Egyesület munkáját és örömömre szolgált – lehetőségeim szerint – részt venni benne. Számomra a „Kémia Nemzetközi Éve” rendezvényei jelentették az eddigi legpozitívabb élményt, sok megmozdulás szervezésében, megvalósításában vettem részt, és reményeim szerint szereztem néhány ifjú hívet a kémiának!

3. Az új IB legkevésbé tapasztalt tagjaként várom a feladatokat, melyeknek szeretnék megfelelni. Biztos vagyok abban, hogy minden segítséget megkapok ehhez, és remélem, hogy főként kedvenc területeimen – melyek a tudomány-népszerűsítés és a tehetséggondozás – lesznek feladataim!

Szántay Csaba

1. 1982-ben szereztem vegyészmérnöki diplomát a Budapesti Műszaki Egyetem (BME) Vegyészmérnöki Karának Szerves és Biológiai vegyipari szakán. Ezt követően a Richter Gedeon Nyrt. (akkoriban Kőbányai Gyógyszerárugyár) kihelyezett kutatójaként a BME Általános és Analitikai Kémiai Tanszékének NMR-laboratóriumában dolgoztam 1988-ig, 1986-ban szereztem egyetemi doktori címet. 1988 és 1989 között a Leedsi Egyetem Szerves Kémiai Tanszéken dolgoztam, mint NMR-spektroszkópus. Hazatérésemet követően, 1989 végén kerültem a Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutatási Osztályára, amelynek 1994 óta vagyok a vezetője. 1991-ben lettem kandidátus, 2000-ben pedig az MTA doktora. 2002-ben a BME-n habilitáltam, 2003-ban ugyanott egyetemi magántanári kinevezést kaptam. Tagságaim: a Kutató Diákok Országos Szövetségének egyik mentora, a BME Vegyészmérnöki Kar Oláh Görgy Doktori Iskola törzstagja, az Egyetemi Habilitációs Bizottság és Doktori Tanács tagja, az ELTE Természettudományi Doktori Tanács tagja, az MTA Analitikai és Környezeti Kémiai Tudományos Bizottság választott tagja és egyben titkára, az MTA NMR Munkabizottság elnöke (2012-től), az MTA Kémiai Doktori Bizottság volt választott tagja, az MKE Richter munkahelyi csoportjának volt elnöke, az MKE Oktatási Bizottságának tagja, az MKE Analitikai Szakosztály tagja, az MKE NMR Szakcsoport elnöke, a Concepts in Magnetic Resonance (USA) című folyóirat szerkesztőbizottságának a tagja, a Magnetic Moments in Central Europe című közép-európai NMR-konferenciasorozat egyik alapítója és tudományos bizottságának tagja, a „Richter Gedeon Alapítvány a Magyar Kémia Oktatásért” elnöke. Főbb díjak: MTA Akadémiai Díj (2005), Preisich Miklós-díj (2011). Kutatómunkám középpontjában a nagy felbontású NMR-spektroszkópia elmélete és alkalmazása áll, ezekben a témákban mintegy 130 eredeti közleménynek vagyok a szerzője, illetve társszerzője. Nagyon szerencsésnek érzem magam, hogy egy kiváló szakemberekből álló gárdával, kiváló nagyműszerekkel (NMR, MS, IR) felszerelve dolgozhatunk egy olyan ipari környezetben, ami bár rendkívül kemény és dinamikusan változó kihívásokkal szembesít nap mint nap, ugyanakkor erősen innováció- és hozzáadottérték-centrikus. Fontos küldetésünknek tartjuk, hogy az ipari környezet lehetőségein belül tudományos műhelyként is tudjunk működni.

2. 1982 óta (azt hiszem!) vagyok MKE-tag. Az MKE-vel kapcsolatos kezdeti élményeim leginkább az évente megrendezett, és akkoriban „Vegyészkonferencia” néven ismert grandiózus eseményhez kapcsolódnak, ami számomra a hazai kémikustársadalom nagy évi „seregszemléjének” számított. Lenyűgözött, hogy az MKE által szervezett Vegyészkonferencia milyen fontos szerepet tölt be a hazai kémikusok egységbe kovácsolásában, mind szakmai, mind pedig szociális szempontból. Később, amikor az MKE tevékenységének egyéb formáit is jobban megismertem, ez a kép csak erősödött, hiszen láttam, hogy a kémia oktatásában, társadalmi szerepvállalásában, a kémikusok munkájának elismerésében, a szakmai értékrendek és a kapcsolatrendszerek kialakításában, a tudás megosztásában milyen meghatározó szerepe van az Egyesületnek. Összességében az én képem az Egyesületről kimondottan pozitív, negatív emléket nem tudok említeni.

3. Meggyőződésem, hogy az MKE rengeteget tehet a kémia mint természettudományos diszciplína helyének, szerepe fontosságának általános megértetéséért, oktatásának erősítéséért, a fiatalokkal való megszerettetéséért, a kémikusok és kémiatanárok megbecsülésének növeléséért, a kémikusok közötti kapcsolati hálózat kiterjesztéséért és a kapcsolatok szorosabbá tételéért, a tudásmegosztásért, a fiatalok előadói és publikálási hajlamának és tapasztalatának növeléséért stb. Úgy gondolom, az MKE-nek időről időre célszerű önvizsgálatot folytatni és felmérni, hogy hol és hogyan tudna többet vagy mást tenni mindennek érdekében. Érdekes megfigyelni, hogy míg az MKE bizonyos szakosztályai, szakcsoportjai és területi csoportjai igen aktívak, vannak kevesebb aktivitást mutató szervezeti egységei is. Úgy gondolom, érdemes és lehet is ezeket az egységeket is vitalizálni az előbb említett célok érdekében. Lényegesnek tartom a folyamatos megújulást, így nagyon bízom abban, hogy egy új gondolatokat, megközelítéseket, „energiákat” felmutató IB új formálóerőt is jelent az MKE jövőjét tekintve.

Gyevi-Nagy László[a] – Tasi Domonkos Attila[a] – Remete Attila Márió[b] – Tasi Gyula[a]

[a] Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék
[b] Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerkémiai Intézet
tasi@chem.u-szeged.hu

Szimmetria – egy matematikus szemével

90 éve született a kémiai Nobel-díjas Sir John Anthony Pople

Hargittai István és *Hargittai Magdolna* szimmetriáról szóló könyvei [1,2] a kémikus szemével mutatják be az anyagi világban, változatos formában megjelenő szimmetriát. Kétség nem férhet hozzá, hogy ezek az alkotások évtizedek óta kitűnően szolgálják a molekuláris kémiai szemlélet oktatását hazánkban és külföldön egyaránt.

A molekulák egyensúlyi geometriája [3,4], alakja [5] és mérete [6] központi szerepet játszik kémiai gondolkodásunkban. Már középiskolai tanulmányainkból tudjuk, hogy a molekulák – kémiai szempontból – atommagokból és elektronokból állnak. Az elemi matematikában használt Descartes-féle térbeli koordináta-rendszer jól alkalmazható a molekulageometria vizuális megjelenítésére. Az állandó rezgőmozgást végző atommagokat ekkor az egyensúlyi helyzetükben rögzítjük. Ezt – a rögzített atommagokból álló – merev struktúrát térbeli geometriai alakzatnak tekinthetjük, s beszélhetünk az alakzat időben állandó (sztatikus) geometriai szimmetriájáról. Tehát, ha ismerjük az atommagok (x, y, z) Descartes-koordinátáit, akkor pontosan ismerjük a merev molekulánk egyensúlyi geometriáját, egyensúlyi molekulaszerkezetét. Az egyensúlyi molekulageometria meghatározására kísérleti és számításos módszerek egyaránt rendelkezésünkre állnak [3]. A molekulák alakját és méretét pedig az elektronoknak az atommagok körüli mozgása, eloszlása határozza meg [5,6].

Felmerül a kérdés, hogy a molekulák szimmetriájának kvantitatív tárgyalásához szükséges matematikai alapokkal rendelkeznek-e a középiskolás diákok. Egészen napjainkig viszonylag bonyolult matematikai eszközöket alkalmaztak erre a célra [7,8], így ez a téma kimaradt a középiskolai oktatásból. Mostanában azonban megmutattuk, hogy egyszerű vektoralgebrai eszközök is elégségesek [9], így a középiskolában a molekulageometria menynyiségtani vizsgálatával színesíteni lehetne a kémia oktatását.

Nem véletlenül használtuk az előző mondatban a matematika régies magyar mennyiségtan elnevezését. Ha megnézzük *Mérey Gyula* –– a gimnázium és a leánygimnázium számára írt – *Mennyiségtan* könyveit [10], akkor kiderül, hogy a középiskolás diákok már a 20. század első felében megfelelő mértani és algebrai alapokkal rendelkeztek. Azt is tanították nekik, hogy a két tárgyalásmód ekvivalens egymással. A térmértan azonban jó térlátást, az algebra pedig jó számolóképességet igényel. Sajnos, jó térlátással nagyon sokan nem rendelkezünk, zsebszámológéppel és számítógéppel ellenben mindnyájan. Így napjainkban az algebrai szemléletmód egyértelműen felülkerekedett a geometriain. Érdemes megjegyezni, hogy a középiskolában is tanított Newton-féle klasszikus mechanika is vektoriális mennyiségekkel dolgozik: az erők – mint vektorok – összeadásáról, kivonásáról, skaláris és vektoriális szorzásáról beszélünk.

Ebben a cikkünkben bemutatjuk, hogy molekulák szimmetriájának a tárgyalásához csak egyszerű vektoralgebrai eszközök szükségesek. A szimmetria figyelembevétele molekuláris rendszerek esetén nemcsak csökkenti a szükséges numerikus kvantumkémiai számítások mennyiségét, hanem kitűnő rendezőelv is. Lehetőséget nyújt a molekuláris (elektron-, rezgési és forgási) energiaszintek, a molekulapályák, a molekularezgések stb. jelölésére és osztályozására, így a molekulaspektroszkópia nélkülözhetetlen alkotórésze lett.

A szimmetria fogalmának matematikai megalapozása

A szimmetria szó a συν (szün) és a μετρον (metron) görög szavak összevonásából keletkezett. Az első szó jelentése azonos, a másodiké mérték. Ennek megfelelően a szó eredeti jelentése azonos mérték.

Hermann Weyl

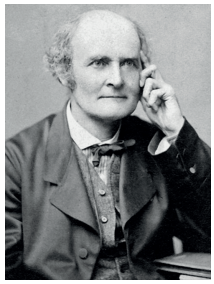
A szimmetria fogalmának természettudományos megalapozásához – a 130 éve született és 60 éve elhunyt – *Hermann Weyl* német származású amerikai matematikus és fizikus (1885–1955) egy kitűnő megfogalmazásából lehet kiindulni, miszerint akkor szimmetrikus valami (tárgy, törvény, jelenség stb.), ha azt meghatározott műveletnek alávetve nem tapaszta-

lunk változást [11]. A szimmetriavizsgálatok leghatékonyabb eszköze a csoportelmélet. Ahogy a számok nagyságot, úgy a csoportok szimmetriát mérnek.

Az absztrakt csoport speciális algebrai struktúra: egy halmaz elemekkel és algebrai műveletekkel. Szerencsére, a molekulák szimmetriájának konkrét meghatározásához nem kell csoportelméleti vizsgálatokat végeznünk.

Évariste Galois

Niels Henrik Abel



Arthur Cayley

Az absztrakt csoportelmélet kialakulásához számos matematikus járult hozzá. Mindenekelőtt *Niels Henrik Abel* (1802–1829) norvég és *Évariste Galois* (1811–1832) francia matematikusok nevét kell megemlítenünk. Mindketten fiatalon haltak meg, de munkájuk alapvető fontosságúnak bizonyult a csoportelmélet kialakulása szempontjából. *Arthur Cayley* (1821–1895) definiálta először úgy az absztrakt csoport fogalmát, amilyen formában azt ma is használjuk. Ugyancsak az ő nevéhez fűződik egyébként a mátrixalgebra alapjainak a lerakása is.

Arthur Schoenflies

Wigner Jenő

A csoportelmélet első gyakorlati alkalmazása – a röntgendiffrakciós szerkezetvizsgáló módszer kialakulása idején – *Artur Schönflies* (1853–1928) német matematikus nevéhez fűződik: csoportelméleti alapon megoldotta a kristályrácsok osztályozásának problémáját. Ennél jelentősebb volt azonban *Hermann Weyl* és *Wigner Jenő* (1902–1995) hozzájárulása, akik az 1920-as évek végén a csoportelmélet és a kvantummechanika kapcsolatát teremtették meg. Wigner Jenő 1963-ban fizikai Nobel-díjat kapott ezen a területen végzett munkásságáért. Az 1931-ben németül, majd később angolul megjelent *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren* könyve nagy hatással volt több fizikus- és kémikusgeneráció gondolkodásmódjára. A könyv 1979-ben magyarul is megjelent az Akadémiai Kiadó gondozásában, *Csoportelméleti módszer a kvantummechanikában* címmel.

Itt meg kell említenünk *Neumann János* (1903–1957) nevét is [12,13]. Ha Wigner Jenő matematikai problémával találta szemben magát, akkor rendszerint barátja, Neumann János sietett a segítségére [14,15]. Mikor Wigner Jenő először találkozott a csoport fogalmával, Neumann János egy délután bemutatta neki a csoportelméletet. A kvantummechanika megszületésekor azonban nagyon sok fizikus lenézte a csoportelméletet: például *Wolfgang Pauli* német fizikus (1900–1958) „*Gruppenpest*”-ről (Gruppe = csoport, Pest = pestis), azaz csoportpestisről beszélt.

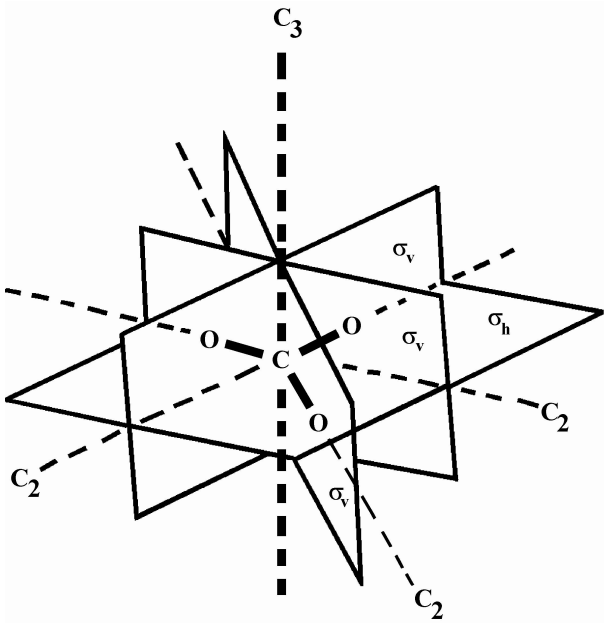
Atomok, molekulák és kristályok szimmetriájának leírásához általában más és más csoportot alkalmazunk. Általánosságban igaz, hogy minél nagyobb a rendszer szimmetriája, annál komolyabb matematikai apparátus kell a szimmetria kezeléséhez. Ennek megfelelően az atomok jelentik a legnagyobb problémát (teljes forgási csoport), majd a lineáris molekulák (axiális forgási csoport) és a nemlineáris molekulák (pontcsoportok, vázcsoportok és permutációs csoportok), végül pedig a kiterjedt szilárd rendszerek, azaz a kristályrácsok (tércsoportok) következnek [16].

Schönflies-féle pontcsoportok

A szimmetria egyik típusa a térbeli szimmetria. Egy test (térbeli geometriai alakzat) szimmetrikus, ha meghatározott szimmetriaműveletek (geometriai transzformációk) a testet önmagába viszik át. Minden lehetséges geometriai transzformáció három elemi transzformáció kombinációjaként állítható elő. Ezek a következők: a test meghatározott szögű forgatása egy tengely körül, egy síkra való tükrözése és a testnek valamilyen távolságra való párhuzamos eltolása. Ez utóbbi csak végtelen kiterjedésű test (pl. kristályrács) esetén jöhet szóba. Véges kiterjedésű test csak forgatással és tükrözéssel szemben lehet szimmetrikus.

Egy molekula egyensúlyi magkonfigurációja (egyensúlyi geometriája) a molekula szimmetriaműveleteivel szemben invariáns, azaz a transzformáció utáni konfiguráció a kiindulásitól fizikailag megkülönböztethetetlen. Azokat a geometriai elemeket, amelyekkel kapcsolatosak a szimmetriaműveletek, szimmetriaelemeknek nevezzük. Szimmetriavizsgálatokhoz a molekula tömegközéppontjában felvett, térbeli Descartes-koordinátarendszert alkalmazunk. Megjegyezzük, hogy a tömegközéppontot minden szimmetriaelem tartalmazza.

A szimmetriaműveleteknek általában öt típusát különböztetjük meg: 1) azonossági transzformáció (E), ami a magkonfigurációt változatlanul hagyja, azaz nem csinál semmit; 2) forgatás (C_n), a molekulát valamilyen tengely körül $2\pi/n$ szöggel elforgatja ($n = 1, 2, ...$). (Nyilvánvaló, hogy $C_1 = E$ (2π vagy 0 szögű forgatás). Ha C_n-t kétszer, háromszor, ..., k-szor megismételjük: $2(2\pi/n)$, $3(2\pi/n)$, ..., $k(2\pi/n)$, ismét szimmetriaműveletet kapunk: C_n^2, C_n^3,...,C_n^k. Ha n többszöröse k-nak, akkor $C_n^k = C_{n/k}$ és $C_n^n = E$. Az ellentétes irányban való $k(2\pi/n)$ szögű forgatás C_n^{n-k}-nak felel meg. Jelöljük ezt C_n^{-k}-val. Nyilvánvaló, hogy $C_n^k = C_n^{-(n-k)}$.); 3) tükrözés (σ), a magkonfiguráció valamilyen síkra való tükrözése; 4) tükrözéses forgatás (S_n), forgatás, majd a tengelyre merőleges síkra való tükrözés végrehajtása és 5) középpontos tükrözés (i), a magkonfiguráció egy pontra való tükrözése. A szimmetriaműveletek hatásának megkülönböztetése érdekében az atommagokat általában megszámozzuk. A molekula legnagyobb n-értékű forgástengelyét a molekula főtengelyének nevezzük. Szimmetriasíkok esetén a következő jelöléseket alkalmazzuk: σ_h: ha a szimmetriasík merőleges a főtengelyre (h = horizontális), σ_v: ha a szimmetriasík tartalmazza a főtengelyt (v = vertikális), σ_d: a σ_v speciális esete, ha a szimmetriasík tartalmazza a főtengelyt és megfelez két, a főtengelyre merőleges C_2 tengely által bezárt szöget (d = diéderes). A szimmetriaműveleteket jelölésben meg kell különböztetnünk a szimmetriaelemektől: mi dőlt betűvel fogjuk írni őket. Egyszerű példaként határozzuk meg a karbonátion



1. ábra. A karbonátion alapállapotú egyensúlyi geometriájának szimmetriaelemei

szimmetriaelemeit **(1. ábra)**! Az ábrán látható, hogy az ion planáris szerkezetű és 8 szimmetriaelemmel rendelkezik: C_3, $3C_2$, σ_h és $3\sigma_v$.

Ezek után definiáljuk a (forgatásos, tükrözéses) szimmetriaműveletek algebráját, csoportját! Legyen P és Q két tetszőleges szimmetriaművelet. Definiáljuk ezek $P \cdot Q$ szorzatát következőképpen: először hajtsuk végre Q-t, majd P-t. (Tehát a szorzás egymásután való végrehajtás.) Azonnal látszik, hogy a szorzat is szimmetriaművelet (zártság a szorzásra nézve). Általában $P \cdot Q \neq Q \cdot P$, azaz a szorzás nem kommutatív. Az így definiált szorzás azonban asszociatív: $P \cdot (Q \cdot S) = (P \cdot Q) \cdot S$. Ha $P \cdot Q = Q \cdot P = E$, akkor azt mondjuk, hogy P és Q egymás inverze ($P = Q^{-1}$ és $Q = P^{-1}$), azaz egymás hatását kioltják. A $P \cdot Q$ szimmetriaművelet inverze $Q^{-1} \cdot P^{-1}$, hiszen $(P \cdot Q) \cdot (Q^{-1} \cdot P^{-1}) = P \cdot (Q \cdot Q^{-1}) \cdot P^{-1} = P \cdot E \cdot P^{-1} = P \cdot P^{-1} = E$. Könnyen belátható, hogy az E, a C_n, a σ, az S_n és az i inverzei rendre E, C_n^{-1}, σ, S_n^{-1} és i. Annak ellenére, hogy öt szimmetriaműveletet vezettünk be, valójában csak kettő, a forgatás és a tükrözés létezik. A többi ezek segítségével előállítható: $S_n = C_n \cdot \sigma_h = \sigma_h \cdot C_n$, $i = S_2$ és $E = C_1$.

Tehát egy molekula (forgatásos, tükrözéses) szimmetriaműveletei csoportot alkotnak a fent definiált szorzással. Mivel ezek a szimmetriaműveletek szükségszerűen olyanok, hogy alkalmazásukkor legalább egy pont (a tömegközéppont) a helyén marad (más szóval a molekula szimmetriatengelyeinek és szimmetriasíkjainak van legalább egy közös metszéspontja), a kérdéses csoportot pontcsoportnak nevezzük. A molekulák így az egyensúlyi geometriájuk szimmetriája alapján pontcsoportokba sorolhatók (Schönflies-féle pontcsoportok). A Schönflies-féle jelölésrendszerben minden pontcsoport speciális jellel rendelkezik, amik szinte minden molekulaspektroszkópiával foglalkozó könyvben megtalálhatók [7].

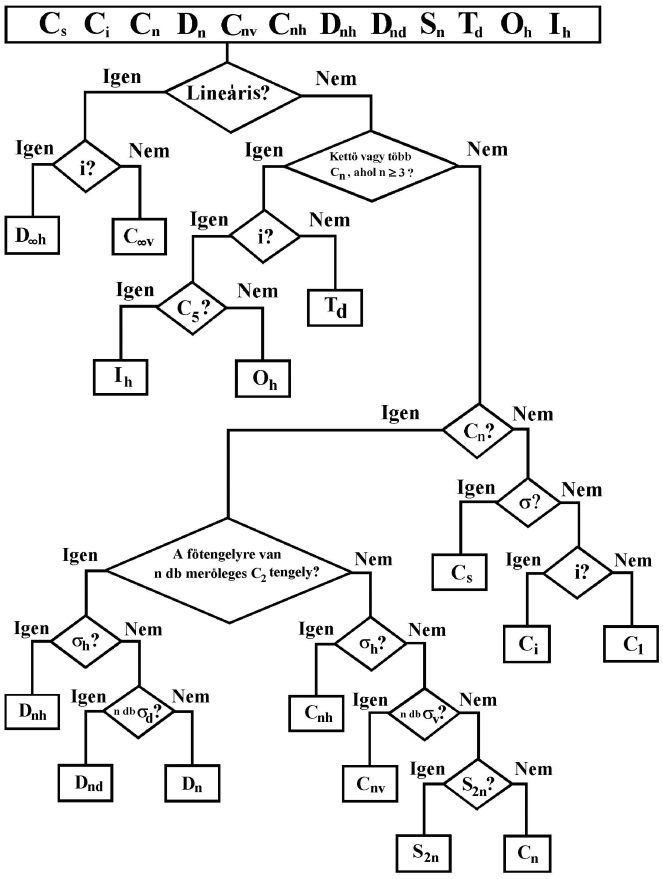
A szimmetriaműveletek hatásának tanulmányozásánál kétféle módon járhatunk el. Az első esetben a Descartes-féle koordinátatengelyeket és a szimmetriaelemeket mozgatjuk. A molekula magkonfigurációja ebben az esetben rögzített marad. A második esetben a magkonfiguráció változik, s a koordinátatengelyek, valamint a szimmetriaelemek maradnak rögzítettek. Az előző értelmezést passzív, az utóbbit aktív értelmezésnek nevezzük. Az elnevezés arra utal, hogy a molekula geometriája hogyan „viselkedik" a szimmetriaműveletek végrehajtásakor. Végeredményben mindkét módszer konzekvens alkalmazásával ugyanahhoz az eredményhez jutunk. Természetesen a részletekben azonban különbségek lesznek. Mi az aktív módszert alkalmazzuk.

Az élet kialakulása szempontjából legfontosabb molekula a vízmolekula [17]. *Nyilasi János* kis könyvéből nagyon sok mindent megtudhatunk a vízről. Többek között az izolált, alapállapotú vízmolekula szerkezetét is megismerhetjük. Az alapállapotú vízmolekula egyensúlyi geometriája hajlított: az OH-kötések hossza kb. 1 Å és a HOH kötésszög kb. 105°. Az adott molekulageometriának három szimmetriaeleme van: egy C_2 forgástengely és két σ_v szimmetriasík. Az oxigénatom a C_2 tengelyen fekszik, s a tengely megfelezi a HOH kötésszöget. A molekula jelentős állandó elektromos dipólusmomentummal rendelkezik. A dipólusmomentum-vektor a C_2 tengelyen található, s a pozitív töltések súlypontjából mutat a negatív töltések súlypontja felé. Mivel a C_2 tengely a két σ_v szimmetriasík metszésvonala, így az adott vektor mind a két szimmetriasík része is. Ennek következtében a molekula dipólusmomentum-vektora invariáns az összes szimmetriaművelettel szemben. (Ha egy molekulának több szimmetriatengelye van, eleve nem lehet állandó elektromos dipólusmomentuma. A dipólusmomentum-vektor ugyanis nem helyezkedhet el egyidejűleg több szimmetriatengely mentén.) Az adott szimmetriaelemekhez tartozó szimmetriaműveletek csoportja a Schönflies-féle C_{2v} pontcsoport: $C_{2v} = \{E, C_2, \sigma_v, \sigma_v'\}$. Az adott csoport véges, mivel elemeinek száma véges. Véges csoport esetén az elemek számát a csoport rendjének nevezzük. Megállapíthatjuk továbbá azt is, hogy a C_{2v} pontcsoport kommutatív, azaz a szimmetriaműveletek szorzása felcserélhető. A kommutatív csoportot Abel-csoportnak is nevezzük Niels Abel tiszteletére. A vízmolekula szerkezetéről az érdeklődő olvasó sokkal többet megtudhat egy kitűnő cikkből [18].

Az összes szimmetriaelem azonosításánál hasznos lehet tudni, hogy egy pontcsoportban mennyi szimmetriaművelet található. A kérdéses számok leírása és memorizálása helyett egyszerűbb módszer is létezik: a pontcsoport neve alapján azonnal meg lehet mondani az összes szimmetriaművelet számát [19]. A kezdőbetűk jelentsék ugyanis a következő számokat: C vagy $S = 1$, $D = 2$, $T = 12$, $O = 24$ és $I = 60$. Ezt a számot szorozzuk meg az esetleges n numerikus alsó indexszel. Végül, ha szerepel az alsó indexben betű (*s*, *v*, *d*, *h*, *i*) is, akkor szorozzuk meg a kapott számot 2-vel. Tekintsük pl. a D_{3h} pontcsoportot (az *1. ábrán* bemutatott karbonátion szimmetriája)! Az összes szimmetriaművelet száma ebben az esetben: $2 \times 3 \times 2 = 12$.

Jó térlátással rendelkező kémikusok egy folyamatábra segítségével meg tudják határozni, hogy egy molekula egyensúlyi geometriájának a szimmetriaműveletei melyik pontcsoportba tartoznak [1,7,16]. A **2. ábrán** egy ilyen folyamatábrát mutatunk be. Ez a folyamatábra be is programozható, s a program – ideális esetben – meg tudja határozni a megfelelő pontcsoportot [8]. A program bemenő adatai az atommagok töltései és Descartes-koordinátái. Hangsúlyozzuk azonban, hogy ebben az esetben nem ismerjük az összes szimmetriaelemet és szimmetriaműveletet, mivel nem határoztuk meg mindnyájukat. Előfordulhat az is, hogy a Descartes-koordináták nem pontosak, azaz a molekula geometriája egy kissé torzult. Ilyen esetben a torzultság mértékétől függ a szimmetriaanalízis sikere. A következőkben vizsgáljuk meg két molekula egyensúlyi geometriájának a szimmetriáját!

A **3. ábrán** az allén, a **4. ábrán** pedig az N_4S_4 molekula geometriájának a sematikus rajza látható. Tekintsük először az al-



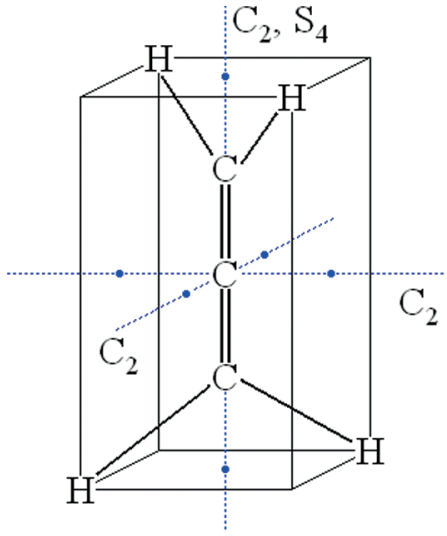
2. ábra. Folyamatábra molekulák pontcsoportjának meghatározására

lént, s használjuk a folyamatábránkat! Az egymás után következő kérdésekre adott válaszok: Nem, Nem, Igen, Igen, Nem, Igen. Vegyük most az N_4S_4 molekulát, s írjuk fel a válaszokat: Nem, Nem, Igen, Igen, Nem, Igen. A válaszok pontosan ugyanazok: mindkét molekula alapállapotú egyensúlyi geometriája a D_{2d} pontcsoportba tartozik. Reméljük, hogy az olvasó is erre a következtetésre jutott.

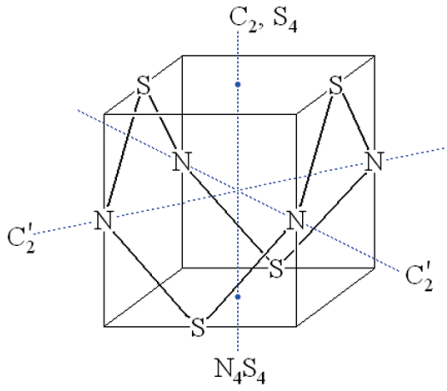
Látható, hogy azonos pontcsoport ellenére a két szimmetria a részletekben különbözik! Az allén esetében például egy szénatommag található a molekula tömegközéppontjában. A következőkben megmutatjuk, hogy egy matematikus hogyan tette „láthatóvá" a szimmetriában mutatkozó finom különbségeket.

Pople-féle vázcsoportok

Sir John Anthony Pople (1925–2004) a számítógépes kémia atyja [20,21]. Számítógépes kémiai tevékenységéért – a GAUSSIAN 70 programrendszer és a későbbi verziók létrehozásáért – először 1992-ben Wolf-díjat [22], majd 1998-ban kémiai Nobel-díjat kapott *Walter Kohn*nal megosztva [23,24]. 1946-ban BA-, 1950-ben MA-, 1951-ben PhD-fokozatot szerzett matematikából, Cambridgeben [25]. A matematika mellett fizikával (kvantummechanika, statisztikus mechanika, kozmológia) és elméleti kémiával (molekulapálya-elmélet, szemiempirikus és *ab initio* kvantumkémiai módszerek) is foglalkozott, később elkötelezte magát a számítógépes kémia mellett. A GAUSSIAN programrendszer fejlesztése napjainkban is FORTRAN nyelven [26,27] történik, s jelenleg a világ legnépszerűbb számítógépes kvantumkémiai programja. A számítógépes kémia jelentőségét az is mutatja, hogy 2013-ban ismét három számítógépes kémikus kapta megosztva a kémiai Nobel-díjat *„for the development of multiscale models for complex chemical systems"*, azaz *komplex kémiai rendszerek kezelésére alkalmas többszintű modellek kifejlesztéséért* [28].



3. ábra. Az allén alapállapotú egyensúlyi molekulageometriája



4. ábra. Az N_4S_4 molekula alapállapotú egyensúlyi molekulageometriája

Az előbbiekben láttuk, hogy az eddig tárgyalt pontcsoport fogalma még merev molekulák esetén sem alkalmas az egy pontcsoportba tartozó molekulák szimmetriatulajdonságainak pontos megkülönböztetésére. Molekulák szimmetriájának pontosabb leírása érdekében John Pople 35 évvel ezelőtt bevezette a vázcsoport fogalmát (J.A. Pople: *Classification of Molecular Symmetry by Framework Groups*, J. Am. Chem. Soc., 102, 4615 (1980)) [29].

Pople a teljes 3 dimenziós (3D) teret a szimmetriaelemeknek megfelelően részekre, alterekre osztotta. Az első alteret O-val jelölte, s ez egy centrális pontból áll. Ilyen centrális pont lehet például szimmetriacentrum, két forgástengely metszéspontja, vagy egy forgástengelynek szimmetriasíkkal vagy tükrözéses forgástengellyel való metszéspontja. A következő típusú, C_n-nel jelölt altér mindazon pontokat tartalmazza, melyek a kérdéses C_n tengelyen találhatók, kivéve az O centrális pontot. A harmadik típusú, σ-val jelölt altér mindazon pontokat tartalmazza, melyek a σ szimmetriasíkon találhatók, kivéve az O és a C_n altereket. Az O, a C_n és a σ altereket a 3D tér szimmetriaaltereinek nevezzük. A teljes tér maradék részét, amely tehát kívül esik a szimmetriaaltereken, X-szel jelöljük. Hangsúlyozzuk, hogy a kapott alterek nem fednek át, és a 3D tér minden egyes pontja csakis egy altérhez tartozik.

A C_{2v} pontcsoport esetén a teljes jelölés a következő: $C_{2v}[C_2,\sigma_v,\sigma_v',X]$. Ha valamely altérhez nem rendelhető atommag, akkor a kérdéses alteret elhagyjuk a jelölésből. A Pople-féle jelölésrendszer szerint tehát a vízmolekula alapállapotú egyensúlyi geometriájának a vázcsoportja: $C_{2v}[C_2(O1),\sigma_v(H2)]$.

Határozzuk meg az allén és az N_4S_4 molekula vázcsoportját is (*3.* és *4. ábra*)! Tudjuk, hogy mindkét geometria a D_{2d} pontcsoportba tartozik:

$$D_{2d} = \{E,C_2,2C'_2,2\sigma_d,S_4,S_4^3\}$$

Látható a *3. ábrán,* hogy az allén esetén egy szénatommag található a tömegközéppontban (O), így ez az atommag minden szimmetriaelemen előfordul. További két szénatommag található a C_2 tengelyen. Már csak a maradék négy hidrogénatomot kell elhelyeznünk: ezek közül kettő-kettő egy-egy σ_d szimmetriasíkon található. Ennek megfelelően a kérdéses molekulageometria vázcsoportja a következő:

$$D_{2d}[O(C1),C_2(C1.C1),2\sigma_d(H2)]$$

A két szénatom közötti pont azt jelzi, hogy azok a tömegközéppontra vonatkozóan szimmetrikusan helyezkednek el az adott tengelyen.

Az N_4S_4 molekula esetén nincs atommag a tömegközéppontban. A két tengely két-két nitrogénatomot tartalmaz. A maradék négy kénatom párosával fordul elő a két σ_d szimmetriasíkon. Ennek megfelelően a vázcsoport a következő:

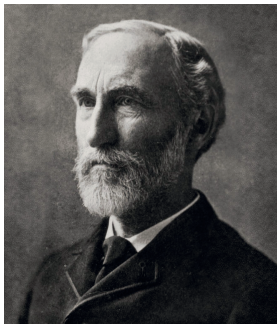
$$D_{2d}[2C'_2(N1.N1),2\sigma_d(S2)]$$

Megállapíthatjuk, hogy a két – azonos pontcsoportba tartozó – molekula vázcsoportja más, s a vázcsoportok segítségével a szimmetriában mutatkozó különbségek pontosan kimutathatók.

A következőkben felvázoljuk, hogy hogyan tudjuk vektoralgebra segítségével meghatározni az egyensúlyi molekulageometria összes szimmetriaelemét és az atommagoknak a szimmetriaelemekhez viszonyított helyzetét [9].

A szimmetriaelemek meghatározása vektoralgebrai alapon

A vektoralgebrát *Josiah Willard Gibbs* amerikai matematikus és elméleti fizikokémikus (1839–1903) fogalmazta meg modern formában 1879 és 1884 között [30]. *Albert Einstein* (1879–1955) szerint Josiah Gibbs volt az amerikai történelem legnagyobb gondolkodója.



Josiah Willard Gibbs

A geometria pontokkal, vonalakkal és síkokkal foglalkozik [10,31]. Ezek a geometriai objektumok azonban vektorokkal reprezentálhatók a vektoralgebrában: a pont egy helyvektornak felel meg ($\mathbf{P}_0$), a vonal egy helyvektornak és egy irányvektornak ($\mathbf{P}_0$ és $\mathbf{d}$), végül a sík egy helyvektornak és egy normálvektornak, ami merőleges az adott síkra ($\mathbf{P}_0$ és $\mathbf{n}$). (A vektorokat félkövér betűvel írjuk.) A szimmetriaműveletek – mint geometriai transzformációk – egyszerűen ezekre a vektorokra hatnak. Mivel a molekula tömegközéppontja (COM) minden szimmetriaművelettel szemben invariáns, ezért a COM helyvektora, $\mathbf{P}_{com} = (x_{com},y_{com},z_{com})$, minden szimmetriaelem definiálására alkalmazható.

A 3D térben az egyensúlyi molekulageometriát az atommagokhoz húzott helyvektorokkal reprezentálhatjuk. A vektorok összeadása és kivonása mellett csak két további vektoralgebrai műveletre van szükségünk a molekulák szimmetriájának tanulmányozásához: két vektor skaláris és vektoriális szorzására.

Legyen $\mathbf{P}_1 = (x_1,y_1,z_1)$ és $\mathbf{P}_2 = (x_2,y_2,z_2)$ két helyvektor a 3D térben. Ekkor a két vektor skaláris szorzata:

$$\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{P}_2 = \|\mathbf{P}_1\|\|\mathbf{P}_2\| \cos(\alpha) = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2,$$

ahol $\|\mathbf{P}_1\|$ és $\|\mathbf{P}_2\|$ a két vektor hossza és a α ($0 \le \alpha \le \pi$) a két vektor által bezárt szög. Látható, hogy a skaláris szorzás eredménye egy skalár, azaz egy szám.

A $\mathbf{P}_1 \times \mathbf{P}_2$ vektoriális szorzás eredménye egy $\mathbf{P}_3 = (x_3,y_3,z_3)$ vektor úgy, hogy

$$\|\mathbf{P}_3\| = \|\mathbf{P}_1\|\|\mathbf{P}_2\| \sin(\alpha)$$

és $\mathbf{P}_3$ merőleges mind a $\mathbf{P}_1$, mind a $\mathbf{P}_2$ vektorra. Továbbá a ($\mathbf{P}_1$, $\mathbf{P}_2$, $\mathbf{P}_3$) vektorhármas kielégíti a jobbkéz-szabályt. A $\mathbf{P}_3$ vektor koordinátáit egyébként könnyen megkaphatjuk a $\mathbf{P}_1$ és a $\mathbf{P}_2$ vektorok koordinátáiból.

Szimmetriaanalízis előtt meghatározzuk az egyensúlyi molekulageometria tömegközéppontját, azaz a $\mathbf{P}_{com}$ helyvektort:

$$x_{com} = \frac{\sum_{i=1}^{N} m_i x_i}{\sum_{i=1}^{N} m_i}, \quad y_{com} = \frac{\sum_{i=1}^{N} m_i y_i}{\sum_{i=1}^{N} m_i}, \quad z_{com} = \frac{\sum_{i=1}^{N} m_i z_i}{\sum_{i=1}^{N} m_i},$$

ahol N az atommagok száma, (x_i,y_i,z_i) az i-edik atommag Descartes-koordinátái és m_i az i-edik atommag tömege. Általában a legstabilabb izotóp tömegét vesszük figyelembe. (Ha szükséges, a rendszám mellett figyelembe vehetjük a tömegszámot is, így izotopológ molekulák szimmetriaanalízisét is végre tudjuk hajtani.) A COM meghatározása után a koordinátarendszerünk origóját a tömegközéppontba helyezzük. Ezt egyszerűen úgy érjük el, hogy minden egyes atommag helyvektorából kivonjuk a $\mathbf{P}_{com}$ helyvektort.

Előfordulhat, hogy az atommagok Descartes-koordinátái nem pontosak, azaz a molekula geometriája többé-kevésbé torzult. A torzultság mértékének jellemzésére, mérésére egy torzultsági paramétert vezetünk be, s a szimmetriára vonatkozó kijelentéseink adott torzultsági paraméter mellett lesznek érvényesek. Egy konkrét pontcsoport és vázcsoport esetén minél kisebb a torzultsági paraméter értéke a szimmetriaanalízisnél, annál pontosabb a molekulageometriánk. A következőkben megmutatjuk néhány szimmetriaelem vektoralgebrai meghatározását. A többi szimmetriaelemre itt nem térünk ki: a részletek az irodalomban megtalálhatók [9].

Először vizsgáljuk meg, hogy a struktúránk rendelkezik-e szimmetriacentrummal! Szorozzuk meg az atommagok koordinátáit (–1)-gyel, azaz invertáljuk az atommagok helyvektorait, s nézzük meg, hogy az új konfiguráció megegyezik-e az eredetivel! Ha megegyezik, akkor a molekulageometriának van szimmetriacentruma. Továbbá, ha az atommagok egyikének a helyvektora nullvektor, azaz a hossza zérus, akkor az adott atommag a tömegközéppontban helyezkedik el.

Ha az összes atommag egy egyenesen található, akkor a molekula lineáris, azaz van egy C_∞ forgástengelye. Ez vektoralgebrai szempontból azt jelenti, hogy a különböző atommagok helyvektoraira teljesülnie kell a következő összefüggésnek:

$$\left| \frac{\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{P}_j}{\|\mathbf{P}_i\|\|\mathbf{P}_j\|} \right| = 1$$

Ezzel az összefüggéssel az atommagok helyvektorai által bezárt szög koszinuszát vizsgáljuk meg ($\cos(180°) = -1$). A $C_{\infty v}$ és a $D_{\infty h}$ lineáris pontcsoportok közül csak az utóbbi rendelkezik középpontos tükrözéssel.

A lineáris, azaz 1D molekulaszerkezet után kiterjedésben a 2D szerkezet következik. Ha minden atommag ugyanazon a síkon helyezkedik el, akkor a 2D szerkezet síkalkatú, azaz planáris. Vizsgáljuk meg a kérdést vektoralgebrai szempontból! Két ($\mathbf{P}_i$ és $\mathbf{P}_j$), nem párhuzamos helyvektor egy síkot határoz meg, melynek a normálvektora $\mathbf{n} = \mathbf{P}_i \times \mathbf{P}_j$. Ha az $\mathbf{n} \cdot \mathbf{P}_k = 0$ összefüggés teljesül minden egyes k atommagra, akkor a molekulageometria planáris: az összes atommag helyvektora a molekulaszerkezet síkjában fekszik. (Az $\mathbf{n}$ és a $\mathbf{P}_k$ vektorok ekkor egymásra merőlegesek: $\cos(90°) = 0$.)

Ha minden szimmetriaelem a kezünkben van, akkor az összes szimmetriaművelet előállítása már egyszerű feladat. A vázcsoport megállapításához azonban még meg kell határoznunk az atommagok helyzetét a szimmetriaelemekhez viszonyítva. Egyszerű vektoralgebrai eszközökkel ezt is meg tudjuk tenni.

Program molekulák szimmetriájának analízisére

Néhányatomos molekula esetén a szükséges vektoralgebrai számítások papíron ceruzával megvalósíthatók. Nagyobb molekula esetén azonban a sok rutinszerű, de fáradságos számítást érdemes számítógépre bízni.

Ennek megvalósítására egy programot készítettünk FORTRAN nyelven, ami automatikusan elvégzi egy tetszőleges molekulageometria szimmetriaanalízisét. Először is meghatározza az összes szimmetriaelemet és szimmetriaműveletet, majd megadja a molekula pontcsoportját és vázcsoportját. Ennél azonban sokkal többre is képes a program: például meghatározza – az atommagok kismértékű elmozdításával – a legmagasabb rendű szimmetriának megfelelő pontos geometriát, majd az alacsonyabb rendű szimmetriákhoz (a részcsoportokhoz) is ad pontos molekulageometriákat. A kapott molekulageometriákat pedig felhasználhatjuk molekulamodellezésre a Pople-féle GAUSSIAN program futtatása révén.

A közel 7000 soros FORTRAN forráskód tartalmazza a pontcsoportok karaktertáblázatait, így a program molekulaspektroszkópiai számítások végzésére is képes: például meghatározza a normálrezgések szimmetriatulajdonságait. A programot – kérésre – középiskolák és egyetemek rendelkezésére bocsátjuk.

Alkalmazás

A következő – első látásra bonyolultnak tűnő – feladat egy kitűnő spektroszkópiai könyvből származik [32]:

Az N_4S_4 molekula térbeli szerkezetét röntgendiffrakciós módszerrel határozták meg. Az atommagok (x,y,z) Descartes-koordinátái a következők:

$N_1 : x = b, y = 0, z = 0$; $N_2 : 0,b,0$

$N_3 : -b,0,0$; $N_4 : 0,-b,0$

$S_1 : a,-a,a$; $S_2 : -a,a,a$

$S_3 : a,a,-a$; $S_4 : -a,-a,-a$

ahol $a = 3$Å és $b = 2$Å.

(a) Milyen pontcsoportba tartozik a molekula kérdéses geometriája? Adja meg a molekula vázcsoportját is!

(b) Milyen szimmetriával rendelkeznek a rezgési normálkoordináták?

(c) Mennyi egyedi rezgési frekvenciával rendelkezik a molekula?

(d) Mennyi alapsáv várható az IR- és a Raman-spektrumban?

Az előzőekben már megállapítottuk – a *4. ábra* alapján – a molekula pontcsoportját és vázcsoportját. Most futtassuk le a programunkat a megadott molekulageometriára, s ellenőrizzük, hogy azonos eredményre jutunk-e! A program által szolgáltatott eredmények közül az **5. ábrán** csak azokat mutatjuk be, amelyek az előző kérdések megválaszolásához szükségesek.

5. ábra. Az N_4S_4 molekulára kapott számítási eredmények egy része

```
Job starts at  9 April 2015  6:03:02.171 PM
-- Delta (distortion parameter)=      0.01000000
-- Title: N4S4
-- Molecular geometry (Angstroms) --
 Atomic
 number        x             y             z             w
   7        2.000000      0.000000      0.000000       14.003070
   7        0.000000      2.000000      0.000000       14.003070
   7       -2.000000      0.000000      0.000000       14.003070
   7        0.000000     -2.000000      0.000000       14.003070
  16        3.000000     -3.000000      3.000000       32.060000
  16       -3.000000      3.000000      3.000000       32.060000
  16        3.000000      3.000000     -3.000000       32.060000
  16       -3.000000     -3.000000     -3.000000       32.060000
-- Molecular weight=       184.252280
-- Number of symmetry operations (including E) =     8
-- SYMMETRY OPERATIONS --
            g       E       i       SG       Cn       Sn
        ------------------------------------------------
            8       1       0       2        3        2
-- POINT GROUP --
   D2d = { (E) 3*(C2) (S4) 2*(SG)}
   The molecule is not polar and not chiral.
-- FRAMEWORK GROUP --
    D2d[ 2C'2(N.N),2SGD(S2)]
-- VIBRATIONS --
     Reducible representation generated by the normal coordinates:
               g     E     S4     C2    C2'    SGD
          gi   8     1      2      1      2      2
        ------------------------------------------------
                   24.0    0.0    0.0   -2.0    2.0
     Decomposed into irreps:
         3 A1 +   3 A2 +   2 B1 +   4 B2 +   6 E
     Irreps of translation: B2, E
     Irreps of  rotation:   A2, E
     Irreps of the vibrational normal coordinates:
         3 A1 +   2 A2 +   2 B1 +   3 B2 +   4 E
     There are  14 different vibrational frequencies:
    -   7  IR   active vibrations, with symmetry:  B2, E
    -  12 Raman active vibrations, with symmetry:  A1, B1, B2, E
-- VARYING TOLERANCE --
     Scanning range: 0.00100000 < delta < 0.20000000
     D2d point group found in range 0.00000000 < delta < 0.11559025
     Largest symmetry should be D2d.
     Available subgroups:
           C1,   Cs,   C2,   D2,  C2v,   S4,  D2d
Job ends at  9 April 2015  6:03:02.281 PM
```

Látható, hogy az egyezés tökéletes, és a molekula 14 különböző rezgési frekvenciával rendelkezik, melyekből 7 IR- és 12 Raman-aktív. Ennek megfelelően amíg az IR-spektrumban 7, addig a Raman spektrumban 12 alapsáv várható.

Köszönetnyilvánítás. A szerzők köszönik a munkájukhoz nyújtott TÁMOP pályázati támogatást (TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0047).

IRODALOM

[1] Hargittai I., Szimmetria – egy kémikus szemével. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1983.
[2] M. Hargittai, I. Hargittai, Symmetry through the Eyes of a Chemist. Springer, New York, 2009.
[3] J. Demaison, J.E. Boggs, A.G. Császár, eds. Equilibrium Molecular Structures: From Spectroscopy to Quantum Chemistry. CRC Press, Boca Raton, 2011.
[4] R.J. Gillespie, Molecular Geometry. Van Nostrand, New York, 1972.
[5] P.G. Mezey, Shape in Chemistry: An Introduction to Molecular Shape and Topology. VCH Publishers, New York, 1993.
[6] G. Tasi, I. Pálinkó, Á. Molnár, I. Hannus, THEOCHEM, (2003), 666-667, 69.
[7] D.M. Bishop, Group Theory and Chemistry. Dover Publications, New York, 1993.
[8] Tasi Gy., Számítógépes kémia. JATEPress, Szeged, 2010.
[9] G. Tasi, L. Gyevi-Nagy, R. Tóbiás, T.S. Tasi, J. Math. Chem., (2013), 51, 2187.
[10] Mérey Gy., Sárközy P., Lovas A., Mennyiségtan könyvek: A gimnázium és a leánygimnázium számára. Franklin-társulat, Budapest, 1941.
[11] H. Weyl, Szimmetria. Gondolat, Budapest, 1982.
[12] Tóbiás R., Tasi Gy., Magy. Kem. Lapja, (2013), 68, 267.
[13] Lente G., Magy. Kem. Lapja, (2014), 69, 15.
[14] Hargittai I., Az öt világformáló marslakó. Vince Kiadó, Budapest, 2006.
[15] Marx Gy., Marslakók érkezése. Akadémiai Kiadó, Budapest, 2000.
[16] Tasi Gy., Matematikai kémia. JATEPress, Szeged, 2009.
[17] Nyilasi J., A víz. Gondolat, Budapest, 1976.
[18] A. G. Császár, G. Czakó, T. Furtenbacher, J. Tennyson, V. Szalay, S. V. Shirin, N. F. Zobov, O. L. Polyansky, J. Chem. Phys., (2005), 122, 214305.
[19] O.J. Curnow, J. Chem. Educ., (2007), 84, 1430.
[20] J.E. Del Bene, John Pople: The Man and His Science, in Pioneers of Quantum Chemistry. 2013, American Chemical Society. p. 301–315.
[21] Papp J.S., Magy. Kem. Lapja, (2013), 68, 346.
[22] H.F. Schaefer, Isr. J. Chem., (1993), 33, 240.
[23] A.J. Pople, Angew. Chem. Int. Ed., (1999), 38, 1894.
[24] J.A. Pople, Rev. Mod. Phys., (1999), 71, 1267.
[25] N.C. Handy, H.F. Schaefer III, J. Phys. Chem., (1990), 94, 5417.
[26] I. Chivers, J. Sleightholme, Introduction to Programming with Fortran: With Coverage of Fortran 90, 95, 2003, 2008 and 77. Springer-Verlag, London, 2012.
[27] A. Markus, Modern Fortran in practice. Cambridge University Press, Cambridge, 2012.
[28] Fogarasi G., Magy. Kem. Lapja, (2014), 69, 38.
[29] J.A. Pople, J. Am. Chem. Soc., (1980), 102, 4615.
[30] J. Johnston, J. Chem. Educ., (1928), 5, 507.
[31] J.E. Marsden, A.J. Tromba, Vector calculus. Macmillan Higher Education, New York, 2012.
[33] P.F. Bernath, Spectra of Atoms and Molecules. Oxford University Press, Oxford, 1995.

ÖSSZEFOGLALÁS

Gyevi-Nagy László, Tasi Domonkos Attila, Remete Attila Márió, Tasi Gyula: **Szimmetria – egy matematikus szemével. 90 éve született a kémiai Nobel-díjas Sir John Anthony Pople**

Molekulák szimmetriájának pontosabb leírása érdekében a Nobel-díjas Sir John Anthony Pople 35 évvel ezelőtt bevezette a vázcsoport fogalmát a kémiába. Cikkünk egy egyszerű vektoralgebrai módszert mutat be egyensúlyi molekulaszerkezetek összes szimmetriaelemének és szimmetriaműveletének a meghatározására. Mivel az elemi vektoralgebra sokkal egyszerűbb, mint a hagyományosan alkalmazott mátrixalgebra, ezért a bemutatott módszer alkalmas fiatal kémikusoknak a molekuláris szimmetria világába való bevezetésére. FORTRAN programot készítettünk egyensúlyi molekulaszerkezetek pont- és vázcsoportjának a meghatározására. A program képes alacsonyabb rendű szimmetriákhoz tartozó molekulageometriák előállítására és spektroszkópiai számítások végzésére is. Sir John Anthony Pople 90 éve született.

Pétfürdőn új Dolomitőrlő üzemegység épült

A Nitrogénművek Vegyipari Zrt. a Gazdaságfejlesztési Operatív Program „Komplex technológiai fejlesztés és foglalkoztatás támogatása” című konstrukciója keretében több mint 369 millió forint vissza nem térítendő uniós támogatást nyert el. A közel 1,7 milliárd forint összköltségű beruházás során az új üzemegység építése mellett új technológiafejlesztés és kapacitásbővítés valósult meg.

Az új ingás dolomitőrlő malom és befoglaló épület 2014-ben épült meg. Az alapterveket és az alapberendezéseket a francia „Broyeurs Poittemill Ingenierie S.A.” szállította, a kivitelező a magyar „Bilfinger IT Hungary Kft.” fővállalkozó volt. Az új dolomitőrlő malom irányítástechnikai rendszere „Emerson Delta V” rendszerrel épült, mely jelenleg az egyik legmodernebb folyamatirányító rendszer.

Az üzemegység a magyar szabadalommal védett „Pétisó” műtrágyagyártásnak egyik nélkülözhetetlen alapanyagát gyártja, amely a kiváló minőségű sajátos dolomit kőzet előnyeit használja ki. Ezt az alapanyagot jelenleg a Bakony-hegység lábánál fekvő „Inota” bányájából szállítják az új Dolomitőrlő malomba. Az újonnan létesült üzemegység a jelenleg működő Pétisó üzem, majd a közeljövőben termelésbe álló Granuláló üzem műtrágyagyártásához szükséges dolomitpor alapanyag ellátását biztosítja.

A rendszerhez kapcsolódó dolomitport szállító, pneumatikus porszállító rendszer az „IBAU mbH.” német cég által szállított alapberendezésekkel valósult meg.

A jelenleg megépült ingás dolomitmalom kiváltja a 60 éves, leállított golyós malmot. A BAT-„Best Available Technology” a porkibocsátás tekintetében alatta van a 10 mg/Nm^{3}h-nak. Az új üzemegység a régi készenlétre leállított golyósmalomhoz képest több mint dupla gyártási kapacitású, valamint energiahatékonyabb és a rugalmas porellátási kialakítása miatt a régi üzemegységeket is el tudja látni dolomitpor alapanyaggal, a meglévő malom 1 tükörüzem szállítócsigás átadáson keresztül.

A foglalkoztatást támogató komplex technológiafejlesztési projekt 2013. június 27-én indult és 2015. június 30-án zárult.

Földy Ferenc

Bruckner-termi előadás

Juhász László
DE Szerves Kémiai Tanszék, Kémiai Glikobiológiai Kutatócsoport

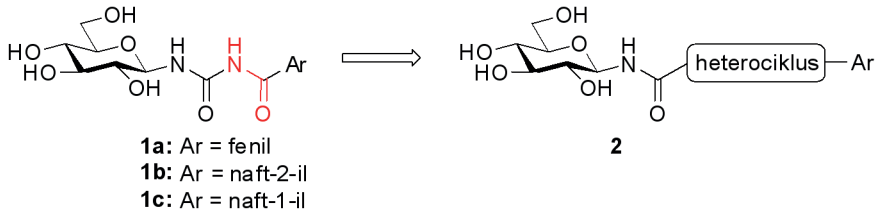
Glükopiranozil-oxadiazol- és triazol-karboxamidok mint GP-inhibitorok: szintézis, enzimkinetika és szerkezet-hatás összefüggések

A cukorbetegség a fejlett nyugati társadalmak lakosságának 9–10%-át érinti, és a 2013-ban közzétett statisztikák alapján a regisztrált betegek száma meghaladta a 382 millió főt, a jelenlegi előrejelzések alapján 2035-re az 592 millió főt is elérheti. [1] Kialakulásának pontos folyamata nem ismert, elsősorban genetikai eredetűnek vélik, míg a nagymértékű elterjedés hátterében az életmóddal kapcsolatos problémák is fontos szerepet játszanak, például a rendszertelen étkezések, a mozgásszegény életmód, a nagyfokú elhízás, illetve a stressz.

Mivel a kialakulás pontos mechanizmusa nem ismert, a betegség gyógyítására nincs lehetőség, csak tüneti kezelésre, ami a normális vércukorszint egyensúlyban tartását jelenti.

A betegség két altípusa ismert, melyek közül az I. típusú, vagy inzulinfüggő cukorbetegség esetében a különböző inzulinkészítmények alkalmazása jelenti a legfontosabb kezelési módot. A II. típusú, nem inzulinfüggő cukorbetegség esetében több különböző hatóanyag-tartalmú gyógyszer is hozzáférhető a vércukorszint szabályozására, például a szulfonil-karbamid, a biguanidin-származék, az α-glikozidázgátló, a $PPAR_\gamma$-agonista tiazolidindion vagy az SGLT-receptor-inhibitor tartalmú készítmények. [2]

Meg kell jegyeznünk, hogy a betegek 90–95%-a II. típusú cukorbetegségben szenved, amely a rövid és hosszú távú szövődmények miatt az egyik legjelentősebb halálozási okká lépett elő. [3] A napjainkban alkalmazott gyógyszeres terápiák esetében a fellépő mellékhatások mellett problémát jelent az is, hogy az alkalmazott készítmények az esetek 35–40%-ban hatástalanok, így új terápiás célpontú és mechanizmusú gyógyszerek fejlesztése szükséges. [4,5]



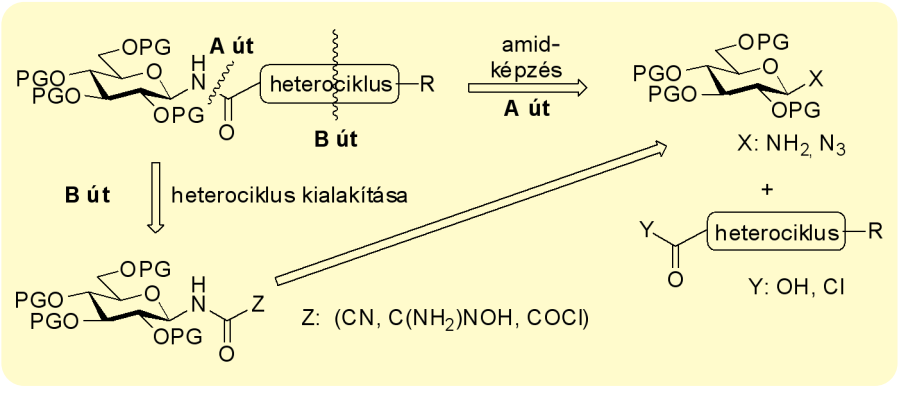
A vércukorszint szabályozásának egyik lehetőségét jelentheti a máj glükóztermelésének a szabályozása, mely folyamat kulcsenzime a máj glikogén-foszforiláz (lGP), ami a glikogénben található α-1,4-típusú glikozidos kötések foszforolitikus hasítását végzi. [6] Mivel a megfigyelések szerint mind a szervezet által termelt, mind pedig a külső forrásból bevitt glükóz áthalad a glikogenolitikus körön, így a szabályozásával mind a két forrásból származó glükóz mennyisége befolyásolható, ami lehetőséget teremthet a szervezet vércukorszintjének a szabályozására.

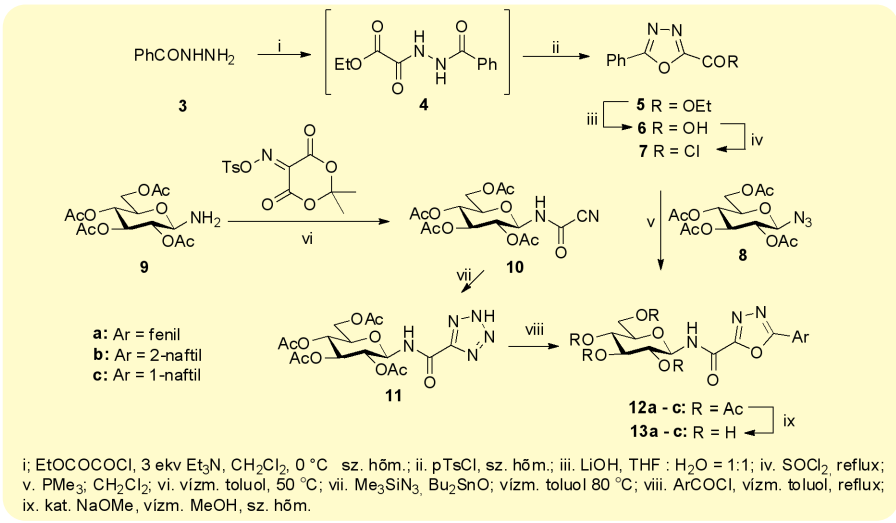
Az elmúlt 20 évben nemzetközi és hazai kutatók nagy számban szintetizáltak változatos szerkezetű vegyületeket, melyek a GP-enzim hatásos inhibitorainak bizonyultak, az elvégzett enzimkinetikai mérések és fehérje-röntgenkrisztallográfiás vizsgálatok segítségével részletes szerkezet-hatás összefüggéseket állítottak fel. [7,8]

Ezen vegyületek közül az *N*-2-naftoil-*N*'-(β-D-glükopiranozil)-karbamid (**1b**, Ar = 2-naftoil) az egyik legjobb glükózanalóg GP-inhibitor, mely nanomolos tartományban gátolja az enzimet. [8]

Kutatócsoportunkban e vegyületcsalád

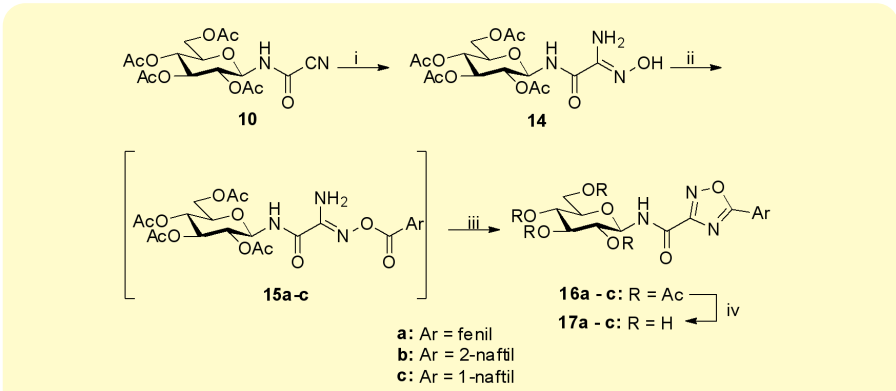
1. ábra. Az N-(β-D-glükopiranozil)-oxadiazol-karboxamidok retroszintetikus analízise





i; EtOCOCOCl, 3 ekv Et_3N, CH_2Cl_2, 0 °C sz. hőm.; ii. pTsCl, sz. hőm.; iii. LiOH, THF : H_2O = 1:1; iv. $SOCl_2$, reflux; v. PMe_3; CH_2Cl_2; vi. vízm. toluol, 50 °C; vii. Me_3SiN_3, Bu_2SnO; vízm. toluol 80 °C; viii. ArCOCl, vízm. toluol, reflux; ix. kat. NaOMe, vízm. MeOH, sz. hőm.

2. ábra. 1,3,4-Oxadiazol-karboxamid-származékok előállítása



i. NH_2OH x HCl, absz piridin; 50 °C; ii. ArCOCl, vízm. piridin - toluol, 110 °C; iii. TBAF, THF - absz toluol, 110 °C; iv. kat. NaOMe, vízm. MeOH

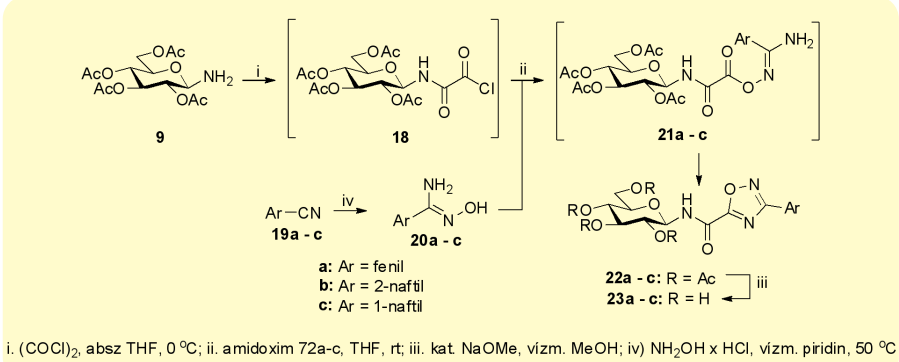
3. ábra. 1,2,4-Oxadiazol-3-karboxamidok előállítása

(**1a–c**) részletes szerkezet-hatás összefüggés vizsgálatai során olyan származékok előállítását végeztük el, melyekben a karbamidegység harmadik NHCO-csoportját helyettesítettük nem klasszikus bioizoszter heterociklusokkal (1,3,4-oxadiazol, 1,2,4-oxadiazol és 1,3,4-triazol), és tanulmányoztuk az így kapott vegyületek GP-enzim-gátló aktivitását. [9,10]

A célvegyületek előállítását az **1. ábrán** bemutatott két retroszintetikus úton kívántuk elvégezni, amelyek kulcslépései az amidkötés kialakítása a heterociklusos karbonsav és a glikopiranozil-amin között (**A út**), illetve a heterociklus kialakítása az amidkötés jelenlétében (**B út**).

A szintézist először az **A úton** kíséreltük megvalósítani, az 5-fenil-1,3,4-oxadiazol-2-karbonsavat (**6**) jó hozammal állítottuk elő, melyből azonban a **12a** származékot csak alacsony kitermeléssel (10%) kaptuk.

4. ábra. 1,2,4-Oxadiazol-5-karboxamidok előállítása



i. $(COCl)_2$, absz THF, 0 °C; ii. amidoxim 72a-c, THF, rt; iii. kat. NaOMe, vízm. MeOH; iv) NH_2OH x HCl, vízm. piridin, 50 °C

A **12a–c** 1,3,4-oxadiazol-származékok jó hozamú előállítását ezért az *1. ábrán* jelzett **B út** szerint a **11** tetrazolból végeztük, amelyet a megfelelő savkloridokkal reagáltatva a termékeket közepes/jó hozammal nyertük **(2. ábra)**. A védőcsoportokat Zemplén-féle körülmények között eltávolítva a **13a–c** védetlen származékokat jó hozammal izoláltuk.

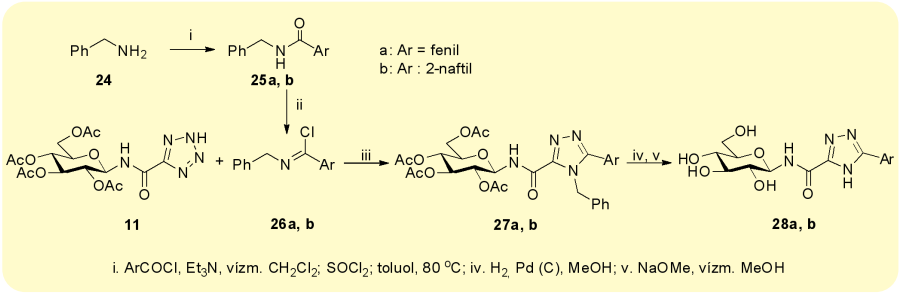
A **17a–c** 1,2,4-oxadiazol-3-karboxamidok szintézise a **3. ábra** szerint négy lépésben történt: a **10** cianokarbonil-származékot a **14** amid-oximmá alakítottuk, melyet a megfelelő savkloridokkal acilezve (**14**⟶**15a–c**), a gyűrűzárást követően jutottunk a **16a–c** 1,2,4-oxadiazolokhoz, melyekből a védőcsoportokat Zemplén-féle körülmények között távolítottuk el.

A regioizomer **23a–c** 1,2,4-oxadiazolok előállítását a **9** glükopiranozil-aminból kiindulva a **4. ábrán** látható szekvenciának megfelelően végeztük.

Az előállított vegyületek glikogén-foszforiláz (GP) enzimmel szemben végzett inhibíciós vizsgálatai azt mutatták, hogy ezen származékok kevésbé gátolják a GP-enzimet, a gátlási állandóik nagyságrendekkel kisebbek, mint az **1** *lead* vegyületé (K_i = 0,36 mM). Külön említést érdemel, hogy vegyülettípusonként más-más aromás oldalláncot tartalmazó származék bizonyult a legaktívabbnak (**13b:** 2-naftil, K_i = 30 mM; **17c:** 1-naftil, K_i = 22 mM; **23a:** fenil, K_i = 104 mM), ami arra utalhat, hogy az NHCO-egység helyettesítésére használt oxadiazol-heterociklusok jelentős szerepet játszanak az enzim-szubsztrát kölcsönhatás kialakulásában. E kölcsönhatás tisztázására végzett dokkolási számításokkal a heterogyűrűk eltérő orientációjából származó különböző gátlási állandókat azonban nem sikerült egyértelműen reprodukálni, így ez a kérdés csak fehérjekristallográfiás vizsgálatokkal dönthető el.

A dokkolási számítások során új molekulák (**28a, b**) hatékonyságát jeleztük előre, melyek szintézise az **5. ábrán** látható. Az előállított vegyületek közül a fenil-szubsztituált (K_i = 1 mM) származék az eddig előállított legjobb *N*-(β-D-glükopiranozil)-heteroaril-karboxamid típusú inhibítor.

A vegyületek farmakokinetikai sajátságait (ADMET; felszívódás, kiválasztódás, metabolizmus és toxicitás) is előjeleztük, melyek alapján e vegyületek teljesítik a gyógyszerhatóanyagokkal szemben támasztott



5. ábra. 1,3,4-Triazol-karboxamidok előállítása

feltételeket (pl.: Lipinski- és Jörgensen-szabályok, $logK_{hsa}$, log BB stb.).

Köszönetnyilvánítás. A kutatás az Országos Tudományos Kutatási Alapprogramok (OTKA CK77712, CNK-80709), továbbá a TÁMOP-4.2.2.-08/1/2008-0014, TÁMOP 4.2.1./B-09/1/KONV-2010-0007, és TÁMOP-4.2.2./B-10/1-2010-0024 konstrukció keretében az Európai Unió támogatásával, a Európai Regionális Fejlesztési Alap és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

IRODALOM

[1] International Diabetes Federation IDF Diabetes Atlas, 6th ed., http://www.idf.org/diabetesatlas, (letöltés: 2014. július 29.)
[2] L. Somsák, É. Bokor, K. Czifrák, L. Juhász, M. Tóth, in: Topics in the Prevention, Treatment and Complications of Type 2 Diabetes, ed. M. B. Zimering, In-Tech Open Access Publisher, Rijeka, 2011, 103–126.
[3] P. Zimmet, K. G. M. M. Alberti, J. Shaw, Nature (2001) 414, 782–861.
[4] Z. H. Israili, Am. J. Ther. (2011) 18, 117–152.
[5] R. M. Jones, ed., New Therapeutic Strategies for Type 2 Diabetes: Small Molecule Approaches, Royal Society of Chemistry, 2012.
[6] N. G. Oikonomakos, Curr. Protein Pept. Sci. (2002) 3, 561–586.
[7] N. G. Oikonomakos, L. Somsák, Curr. Opin. Investig. Drugs. (2008) 9, 379–395.
[8] L. Somsák, K. Czifrák, M. Tóth, É. Bokor, E. D. Chrysina, K. M. Alexacou, J. M. Hayes, C. Tiraidis, E. Lazoura, D. D. Leonidas, S. E. Zographos, N. G. Oikonomakos, Curr. Med. Chem. (2008) 15, 2933–2983.
[9] M. Polyák, G. Varga, B. Szilágyi, L. Juhász, T. Docsa, P. Gergely, J. Begum, J. M. Hayes, L. Somsák, Bioorg. Med. Chem. (2013) 21, 5738–5747.
[10] J. Begum, G. Varga, T. Docsa, P. Gergely, J. M. Hayes, L. Juhász, L. Somsák, Med. Chem. Commun. (2015) 6, 80–89.

Motorbenzinek

Hancsók Jenő, Eller Zoltán, Kriván Eszter:
Korszerű motor- és sugárhajtómű üzemanyagok.
I. Motorbenzinek.
Második, bővített és teljesen átdolgozott kiadás.
Pannon Egyetem, Veszprém, 2014.
Sorozatszerkesztő: Hancsók Jenő egyetemi tanár, az MTA doktora

E kötet első kiadása azonos címmel 1997-ben jelent meg. Az időközben bővült ismereteket „Mobilitás és környezet" sorozatcímmel, Hancsók professzor szerkesztésében, harminc közleményben a Magyar Kémikusok Lapja is közzétette 2005 márciusa és 2008 augusztusa között.

A 2014-es, második kiadású, bővített, teljesen átdolgozott és kiemelkedően gazdagon illusztrált, 543 számozott oldalas kötet nyolc fejezetet tartalmaz.

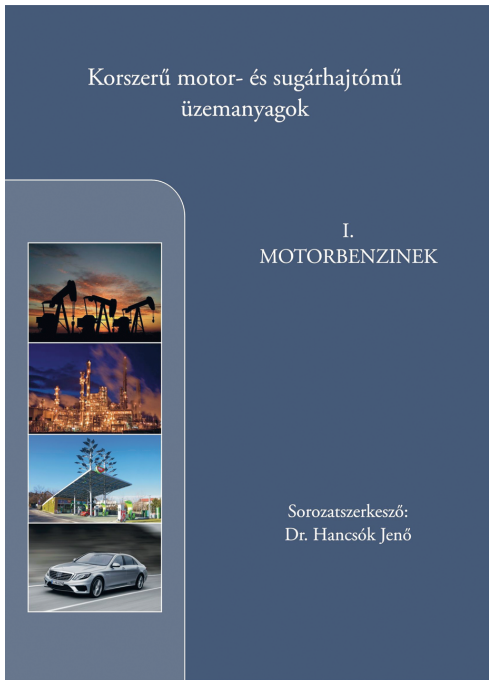
A „Mobilitás" rész, mint a kötet második legnagyobb, gazdagon illusztrált (170, túlnyomórészt színes ábrát és 69 táblázatot is tartalmazó) fejezete taglalja a közlekedés és szállítás elsődleges energiaforrásait (köztük a nukleáris energiát és a megújulókat is), jellemzi a motorbenzinmeghajtású Otto-motorokat, és foglalkozik a gépjárművek károsanyag-kibocsátásának szabályozásával. A mobilitást a fenntartható fejlődés egyik feltételének tekintik.

A második, legterjedelmesebb fejezet az Otto-motorok hajtóanyagainak, a hagyományos (kőolajalapú) motorbenzinkomponensek gyártási eljárásaival, a motorbenzin-adalékokkal és a motorbenzinek komponensekből és adalékokból történő kikeverésével foglalkozik; 201 ábra és 72 táblázat segíti az ismeretek megértését. E fejezet törzsét a motorbenzin-keverőkomponensek előállítására szolgáló kőolaj-feldolgozási eljárások (köztük például izomerizálás, reformálás, krakkolás, alkilezés és a maradék-feldolgozás) ismertetése és értékelése adja.

A harmadik fejezet a motorbenzinek jellemző tulajdonságait (pl. illékonyság, oktánszám, stabilitás, korróziós tulajdonságok, összetétel) tárgyalja.

További, rövidebb részek áttekintést adnak a benzinüzemű járművek utóátalakító katalizátorairól, a motorbenzinek és a motorolajok kölcsönhatásairól, a motorbenzinek kezeléséről, a (dugattyús motorokhoz készült speciális igényeket teljesítő) repülőbenzinekről.

A kötet utolsó fejezete a motorbenzinek fejlesztési tendenciáit vázolva rámutat arra, hogy az évtized végéig a motorbenzinek aromástartalmának csökkentése érdekében a komponensek sorában az izoparaffinok (izomerizátumok, alkilátumok) és a bioetanol részarányát növelni szükséges a reformátum- és a krakkbenzin-bekeverés visszafogása mellett.



Az ötkötetesre tervezett mű sorozatszerkesztője és első szerzője Hancsók Jenő egyetemi tanár, a veszprémi Pannon Egyetem MOL Tanszékének volt vezetője, szerkesztőbizottságunk tagja. A kiadvány a legújabb irodalom, saját kutatási eredmények és tapasztalatok alapján készült; korszerű és átfogó ismereteket kínál a témával foglalkozók és az újdonságok iránt érdeklődők számára egyaránt.

Érdeklődéssel várjuk a sorozat további köteteit: a (már készülő) dízelgázolajok, továbbá az alternatív motorhajtóanyagok, sugárhajtómű-üzemanyagok és belső égésű motorok kenőanyagai témákkal foglalkozó kiadványokat.

Rácz László

Venetianer Pál
MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont | venetpal@brc.hu

Nyugtató szavak a félelmetes GMO-ról

De szép volna, ha egy tudományosan képzett olvasótáborral rendelkező lapba egyszerű ismeretterjesztésként lehetne írni arról, hogy mit is jelent a „genetikailag módosított élőlény” kifejezés. Ez igen egyszerű feladat is volna, szinte egyetlen bekezdéssel elintézhető. Minthogy azonban e kérdés körül világszerte viharos politikai és társadalmi viták zajlanak, amelyben a vitatkozók olykor félelmetes tudatlanságról és dogmatikus előítéletességről tesznek tanúbizonyságot, nem elkerülhető a legfontosabb ellenérvek közül legalább néhánynak az ismertetése és kritikai vizsgálata. De mielőtt erre rátérnék, intézzük el az egyszerű ismeretterjesztést.

Nyilván minden olvasó tudja, hogy valamennyi földi élőlény örökletes információját egy egyszerű lineáris polimer molekula, a DNS határozza meg. A DNS-t alkotó négyféle monomer, a négy nukleotid sorrendje kódolja ezt az információt, mint egy számítógépes program. A kód – azaz a rejtjelkulcs, amely a négy elem sorrendjében megfogalmazott üzenetet „lefordítja” a fehérjék húsz különböző elemből (aminosavból) álló nyelvére – szintén azonos minden élőlényben, és (többé-kevésbé) azonosan működik a leolvasó-fordító apparátus is. Némi leegyszerűsítéssel azt is mondhatjuk, hogy a DNS-molekula meghatározott szakaszai – hasonlattal: a program egyes sorai – azonosnak tekinthetők a génekkel, az átöröklés egységeivel. Ebből az is következik, hogy a gének az élővilágban cserészabatosak. Ezt elvben már régen így gondolták a biológusok, kísérletesen azonban a négy évtizede megszületett, magyarul köznyelven „génsebészet”-nek nevezett eljárás bizonyította be. Alapjában véve ez egy egyszerű biokémiai technika, amelyet az tett lehetővé, hogy sikerült módszert találni a DNS-molekulák meghatározott pontokon történő, specifikus elvágására. Minthogy a töredékek összekapcsolására is volt lehetőség, meg lehetett csinálni a DNS-sel *in vitro*, laboratóriumban ugyanazt, amit a technikusok a film- vagy videoszalaggal tesznek: egyes szakaszokat kivágni és beilleszteni más DNS-molekulákba.

Baktériumokba már korábban is tudtak bevinni kívülről úgy DNS-t, hogy az részévé vált a baktérium saját örökletes anyagának, tehát kipróbálható volt – sikerrel –, hogy egy baktérium egyetlen génjét átvigyék egy másikba. Egy évtizeddel később sikerült ezt a trükköt magasabb rendű élőlényekben, állatokban és növényekben is megvalósítani. Az ily módon idegen génekkel felruházott szervezeteket nevezik GMO-nak („genetically modified organism”). Az azóta elmúlt évtizedek során a génsebészeti technika minden élettudományi kutatás nélkülözhetetlen eszközévé vált és széles körű alkalmazásra talált a gyógyszer-, élelmiszer-, és vegyipar számos területén. Ezeket a felhasználási módokat a társadalom ma már világszerte elfogadja.

Az először két évtizede realizált mezőgazdasági alkalmazások azonban igen heves társadalmi-politikai vitákat, ellenállást váltottak ki. Mielőtt ennek tárgyalására rátérnénk, érdemes leszögezni, hogy a technológia lehetőségeit mind ellenfelei, mind hívei hajlamosak túlbecsülni. Az kétségtelenül igaz, hogy a DNS *in vitro* átszabásának, manipulálásának lehetőségei szinte korlátlanok. Ezzel szemben a DNS élő sejtbe való bejuttatásának jelentős nehézségei, korlátai vannak, és sikeres bejuttatás esetén sem mindig biztos a bevitt idegen gén(ek) működése, és a működés kompatibilitása az akceptor szervezet normális életével. Szó sincs tehát arról, hogy a kutatók tetszés szerinti gólemeket, sellőket vagy más kimérákat tudnának előállítani. Mindig csak egy (kivételesen 2–3 gén) bejuttatásáról lehet szó. Ezért is van az, hogy noha ma a világon már 18 millió gazda 28 országban, 181 millió hektáron termel GM-növényt, e jelentős elterjedtség igen szűk választékot takar. Nagy területen mindössze öt kultúrnövényt (szója, kukorica, gyapot, repce, cukorrépa) termelnek, és ezek mindössze kétféle új tulajdonsággal lehetnek felruházva (különböző gyomirtó szerek, illetve különböző rovarkártevők elleni védelem képessége). Semmi alapja sincs tehát annak a széles körben elterjedt hiedelemnek, hogy bármely különös formájú vagy méretű zöldségre, gyümölcsre ráfogják, hogy bizonyára génmanipulált.

A GMO-mezőgazdaság elleni érvek felsorolása és részletes tárgyalása köteteket igényelne, de valójában ez azért is szükségtelen, mert a kifogások nagyobbik része egyáltalán nem specifikusan a géntechnológia ellen irányul. A gazdasági-politikai érvek például (amelyek a multinacionális cégeket, a globalizációt, vagy az Egyesült Államok gazdasági imperializmusát célozzák meg) igazságtartalmuktól függetlenül éppúgy elhangozhatnak a nem-

GM vetőmagtermeléssel, a gyógyszeriparral vagy az informatikával kapcsolatban. Kevesen tudják például, hogy az ellenfelek által patás ördögnek tekintett Pioneer és Monsanto multinacionális cégektől vásárolják a magyar gazdák a nem-GM kukorica-vetőmag több mint 90%-át. Ugyancsak nem releváns a géntechnológiával kialakított tulajdonság veszélyeinek emlegetése (például, hogy a beültetett gén átkerülhet a nem-GM fajtársra, vagy hogy a megcélzott rovarkártevőben idővel kialakul a rezisztencia a növény által termelt toxinnal szemben), mert ezek a (valóban létező) lehetőségek akkor is fennállnak, ha a kérdéses tulajdonságot hagyományos nemesítés alakította ki, vagy természetesen fordul elő (mindkettőre bőven van példa).

Mik tehát azok a leggyakrabban hangoztatott érvek, amelyek valóban specifikusan a génsebészeti technikával előállított organizmusokra vonatkoznak? A közvélemény, az „utca embere" elsősorban a GMO-élelmiszerek biztonsága miatt aggódik. „Ne legyenek idegen gének a fogyasztott növényekben!" Azt ugyan komolyabb vitákban nem szokás hangoztatni, hogy az idegen gén önmagában ártalmas (hiszen ha ez igaz lenne, akkor az egyedül ajánlható táplálkozás a kannibalizmus volna), azt azonban igen, hogy a bevitt gén szabályozása, működésmódja, valamiképpen veszélyt jelenthet. Jelenlegi biológiai ismereteink szerint ugyan semmilyen racionális magyarázat nincs e „veszély" mibenlétére, realitására, és ilyen magyarázatot egyetlen kritikus sem tudott produkálni, de ezek az ismeretek valóban hiányosak lehetnek, tehát a kérdés megnyugtatóan csak kísérleti vizsgálatokkal dönthető el. Az ellenzők kevesellni szokták az elvégzett kísérleteket. Nos, egy összesítés 2012-ig bezárólag 1783, a GMO-k biztonságára vonatkozó közleményt talált az irodalomban, ezek közül 770 foglalkozott az élelmiszer-biztonsággal (ismét ellentétben a kritikusok állításaival: ezeknek jelentős hányada nem a gyártó cégektől, hanem független kutatóktól származott). Az elmúlt két évtized során mindössze 5 (öt!) olyan közlemény jelent meg, amely GMO-val etetett állatoknál káros hatásról számolt be. Ezek természetesen „headline news"-ként azonnal bejárták a világsajtót, míg a közleményeket cáfoló számtalan kritika, kontrollvizsgálat, illetve ellenbizonyíték nem kapott nyilvánosságot a populáris médiumokban. Bátran kijelenthető, hogy egyetlen, szakmailag hitelesnek tekinthető, reprodukálható vizsgálat sem mutatott ki eddig semmiféle káros hatást. Ehhez hozzá kell tenni, hogy két évtizede emberek százmilliói és háziállatok milliárdjai fogyasztanak rendszeresen GMO-növényeket, illetve azokból származó élelmiszereket, illetve takarmányokat és soha semmiféle egészségkárosodásra utaló adat nem került elő.

Egy másik érv: az idegen gén beépülésének helye nem irányítható pontosan; ha rossz helyre épül be, megbéníthat fontos géneket, vagy fokozott működésre késztethet másokat. Az sem kizárható, hogy a beépülés során nem tervezett átrendezések történhetnek a genomban, új mutációk keletkezhetnek. Ezek az állítások igazak, értékelésükhöz azonban tudni kell, hogy a rossz helyre történő beépülés csak a kutató eredményességét csökkenti, ugyanis a fejlesztés során csak azokat a sejteket válogatják ki, ahol ilyen esemény nem történt. Ma már az új DNS-szekvenáló technikáknak hála, a forgalomba kerülő fajtáknál meghatározzák a DNS-szekvenciát a beépült gén körül. Átrendezések és új mutációk pedig a természetes szaporodás, a hagyományos nemesítés során is történhetnek. Semmilyen adat nem utal arra, hogy a génsebészeti eljárás ezek előfordulási valószínűségét növeli. Összehasonlító vizsgálatok kimutatták, hogy egy GMO-kukorica és annak nem GMO-változata között DNS-szinten jóval kisebb a különbség, mint két különböző nemesített nem-GMO fajta között. Minthogy a jelenlegi törvényi szabályozás rendkívül sokoldalú vizsgálatokat követel meg az új GMO-fajtáknál, amelyeket nem követelnek meg a hagyományosan nemesítetteknél, kimondható, hogy a GMO-fajták minden szempontból biztonságosabbak, mint a hagyományosan nemesítettek. Ugyanez vonatkozik arra az érvre is, hogy az idegen gén által kódolt fehérje allergiás reakciót válthat ki a fogyasztónál. Ez a lehetőség elvileg nem kizárható, de tekintve, hogy a GM-növényeket vizsgálják allergenicitásra, míg a hagyományosan nemesítetteket nem, biztosan állítható, hogy ez a veszély is sokkal kisebb a GM-növényeknél, mint a hagyományosan nemesítetteknél.

Végül felmerülhet a kérdés, hogy ha nincs is veszélye a GM-növényeknek, mi az előnyük. A fogyasztó számára ugyanis a jelenleg forgalomban lévő GM-növények semmilyen előnyt nem kínálnak. A termelőknek, gazdáknak viszont igen. Egy 2014-ben végzett metaanalízis 150 vizsgálat összesítésével megállapította, hogy a GM növények termelése 37%-kal csökkentette a rovarirtó vegyszerek használatát, 22%-kal növelte a terméshozamokat, és 68%-kal növelte a gazdák nyereségét. És az emberiségnek? Egyetlen évben (2013) 28 milliárd kilogrammal csökkentették a szén-dioxid-kibocsájtást, ami 12,4 millió autó által egy év alatt kibocsájtott szén-dioxiddal egyenértékű.

A GMO-problematikát tárgyaló cikkben feltétlenül indokolt arra is kitérni, hogy a tudomány fejlődése hamarosan elavulttá tesz sok erről szóló vitát. Az utóbbi évtizedekben ugyanis több olyan módszert dolgoztak ki, amely lehetővé teszi a DNS *in vivo,* élő sejtekben történő, specifikus és irányított módosítását, tetszőleges pontmutációk előidézését. A legnagyobb jelentőségű ezek között a 2012-ben leközölt CRISPR-Cas9 elnevezésű technika, amely példátlan gyorsasággal terjedt el a világon. Lényege az, hogy a manipulálandó sejtbe bejuttatnak egy rövid szintetikus RNS-molekulát, amelynek szerkezete komplementer a DNS módosítandó szakaszával. Ez a „vezető-RNS" odaviszi a Cas9 nevű DNS-hasító enzimet a kérdéses szakaszhoz, és az enzim ott elvágja a DNS-t. Ezután az endogén DNS-helyreállító mechanizmusok – szintén a vezető-RNS segítségével – úgy reparálják a DNS-t, hogy abban ott legyen a kívánt pontmutáció (a CRISPR betűszó jelentése: „clustered regularly interspersed short palindromic repeats", csak a technológia felfedezésének eredetére utal). Jelenleg e módszer lehetséges emberi alkalmazásának problémái állnak az etikai viták gyújtópontjában, de mikroorganizmusok, állatok és növények esetében már nagyon sokan használták sikerrel.

Tekintettel arra, hogy a közforgalomban lévő GMO-növények között vannak olyanok, amelyekben a beültetett idegen gén és az akceptor szervezet homológ génje között mindössze egyetlen pontmutáció a különbség, nyilvánvaló, hogy ilyen konstrukciót elő lehet állítani (és elő is állítottak) a fenti technológiával, idegen gén beültetése nélkül. Ez pedig felveti a kérdést, hogy vonatkoznak-e az így előállított növényre a GMO-kra megalkotott törvényi korlátozások, illetve elvi ellenvetések. A magyar (és a legtöbb külföldi) GMO-törvény ugyanis explicite úgy definiálja a GMO-kat, hogy azokban más szervezetből származó, vagy szintetikusan előállított DNS van, azaz törvény szerint a CRISPR-Cas9 technikával mutagenizált növény nem GMO, noha mind nyelvileg, mind tartalmilag „génmódosított élőlény". Jelenleg ilyenek még nincsenek közforgalomban, mert a cégek kivárnak, nem akarják kitenni magukat olyan támadásoknak, hogy kizárólag a törvények megkerülése céljából alkalmazták az új technológiát. Előbb-utóbb azonban a GMO ellen harcoló aktivistáknak és politikusoknak szint kell vallani, hogy üldözendő, vagy tolerálható-e az új módszer.

Könnyen emészthető, humoros tudomány

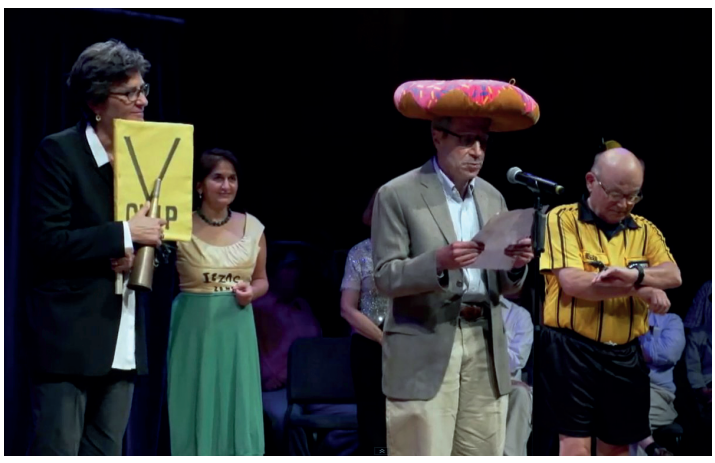
A 2014-es IgNobel-díjakról

2014. SZEPTEMBER 18-ÁN a Harvard Egyetem Sanders-termében huszonnegyedik alkalommal adták át a mulatságos vagy haszontalannak látszó felfedezésekért járó IgNobel-díjakat. Az ünnepség videofelvétele a mostanra már kialakult szokásoknak megfelelően teljes egészében megtekinthető az Interneten (https://www.youtube.com/watch?v=LfpbEjs5umk).

Az ünnepségre minden díjazott a saját költségén utazik, s ott valódi Nobel-díjasoktól veheti át az elismerést; tavaly Carol Greider (orvostudomány, 2009), Eric Maskin (közgazdaságtan, 2007), Rich Roberts (orvostudomány, 1993) és Frank Wilczek (fizika, 2004) szerepelt a ceremónián. A díjátadás már-már kötelezőnek tekintett elemei mind megvoltak: papírrepülő-hajigálás, a mindössze két szóból álló „Welcome, welcome" beszéd, s az idén is bemutattak egy minioperát, ezúttal „What's Eating You" címmel, Mozart zenéjét kölcsönvéve. Az utóbbi években mindig van a díjátadókon egy központi téma is, ez 2014-ben az élelmiszer volt.

Az ünnepségen a következő tudományos eredményeket, illetve megfigyeléseket díjazták:

- Egy cipő és egy banánhéj, illetve a banánhéj és a talaj közötti súrlódási erőket összehasonlító tanulmány (fizikai díj, cikk: *Tribology Online* **2012**, *7*, 147).
- Olyan emberek gondolkozásának megértését célzó munka, akik egy pirítós felszínén Jézus arcát vélik felfedezni (idegtudományi díj, cikk: *Cortex* **2014**, *53*, 60).
- Annak igazolása, hogy a későn lefekvő emberek általában narcisztikusabbak, manipulatívabbak és hajlamosabbak a pszichopata viselkedésre, mint a korán kelők (pszichológiai díj, cikk: *Personality and Individual Differences* **2013**, *55*, 538).
- A macskák által a tulajdonosra gyakorolt mentális veszély tanulmányozása (közegészségügyi díj, cikk: *PloS ONE* **2013**, 8, e70585).
- Annak bizonyítása, hogy a kutyák vizelés közben előszeretettel vesznek fel a Föld geomágneses vonalaival párhuzamos testtartást (biológiai díj, cikk: *Frontiers in Zoology* **2013**, *10*, 80).
- Annak kimutatása, hogy egy erős lézerimpulzus által kiváltott fájdalomszintre különböző hatást gyakorol, ha a kísérleti alany szép vagy ronda festményt szemlél a kísérlet közben (művészeti díj, cikk: *Consciousness and Cognition* **2008**, *17*, 1152).
- A pácolt disznóhús terápiás hatásának felfedezése máshogy elállíthatatlan orrvérzések kezelésében (gyógyszertudományi díj, cikk: *Annals of Otology, Rhinology and Laryngology* **2011**, *120*, 732).
- Annak vizsgálata, hogy a rénszarvasok hogyan reagálnak egy jegesmedvének álcázott ember látványára (sarkkutatási díj, cikk: *Arctic, Antarctic, and Alpine Research* **2012**, *44*, 483).
- Újszülöttek bélsarából izolált tejsav kolbászkészítés közbeni, probiotikumként történő felhasználására tett javaslat (táplálkozástudományi díj, cikk: *Food Microbiology* **2014**, *38*, 303).



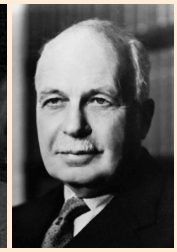
Díjátadó a színpadon

Ezeket a díjakat a cikkek szerzői a színpadon át is vették. A díj az egyik mellékelt fényképen látható: egy ételes tálca rögzített tányérral és evőeszközökkel.

Végül a közgazdasági díjat az Olasz Nemzeti Statisztikai Hivatal kapta azért a világszenzációt jelentő újításért, amely szerint a nemzeti összterméket kiszámításában a prostitúcióból, kábítószer-árusításból, csempészetből és más illegális tevékenységekből származó bevételeket is figyelembe vette. A hivatal részéről senki nem tudta – vagy nem akarta – átvenni a kitüntetést.

Ha valakinek esetleg hiányérzete lenne: a díj odaítéléséről döntők alighanem megsejtették, hogy a Svéd Királyi Tudományos Akadémia a 2014-es kémiai Nobel-díjat kémiának csak igen nagy jóindulattal nevezhető eredményekért adja majd, így ők egyszerűbb megoldást választottak: 2014-ben nem tudtak – vagy nem akartak – kémiai IgNobel-díjat kiadni. Mulasztásukat az idei, jubileumi, 25. díjátadón, 2015. szeptember 17-én tehetik jóvá. **Lente Gábor**

NÁRAY-SZABÓ ISTVÁN


SIR LAWRENCE BRAGG

Kálmán Alajos

Mester és tanítvány:

Sir Lawrence Bragg (1890–1971) és Náray-Szabó István (1899–1972)

Az ENSZ által a *Krisztallográfia Nemzetközi Évének* nyilvánított 2014 januárjában, a Nemzetközi Krisztallográfiai Unió (International Union of Crystallography, IUCr) és az UNESCO által közösen rendezett ünnepségek kétnapos párizsi megnyitóján az 1912-vel kezdődő „száz esztendő" során megbecsülést/hírnevet szerzett számtalan tudós közül a legemblematikusabb személy *William Lawrence Bragg* volt. Ugyanis cambridge-i diákként, 22 évesen, Max von Laue röntgenfelvételeinek helyes értelmezésével, már 1912 végén felderíti a kősó (NaCl) és számos köbös kristály szerkezetét, megnyitva ezzel a röntgenkristallográfia máig tartó diadalútját. Az édesapjával, *William Henry Bragg*-gel 1915-ben elnyert fizikai Nobel-díjával mindmáig a legfiatalabb a díjazottak hosszú sorában. Az első világháború után, 1919-től 1937-ig, Manchesterben a fizika Langworthy-professzora. 1921-től a Royal Society tagja. Ásványok, elsősorban egyre bonyolultabb szilikátok szerkezetmeghatározásával, majd a megismert szerkezetek számának növekedésével, azok rendszerezésével foglalkozik. Ebbe a programba számos angol és külföldi fiatal kutató kapcsolódik be, akik közül sokan később ugyancsak hírnevet szereznek, például *Linus Pauling* és a magyar *Náray-Szabó István*.

Náray-Szabó István vegyészmérnök a báró Klebelsberg Kuno ifjú magyar tudósokat külföldön kiképző programjában, 1926 és 1928 között Berlinben, a Kaiser Wilhelm Institut für Faserstoffchemieben, Herzog mellett keményítőkön röntgendiffrakciós vizsgálatokat végez. Publikálható eredményei [Lieb. Ann. *465,* 299 (1928)] dacára a keményítők kutatása álmait nem elégítetik ki. Klebelsberg hazahívása ellenére, a kristályszerkezetek megoldásában akkor már elhíresült manchesteri Bragg-csoporthoz csatlakozik. Az anyagi feltételeket édesatyja fedezi. Eredményes bemutatkozása, a bonyolult *staurolit* első szerkezeti modelljének [1] gyors felállítása megteremti azt a mester/tanítvány kapcsolatot, ami közel egy időben bekövetkező halálukig fennmarad. Manchesteri évei alatt (1928–1930)[1] meghatározza még az *apatit* [2] szerkezetét, *W. H. Taylor*ral együtt felderíti az *apofillit* [3] és *W. W Jackson* bevonásával leírja [4] a *kianit* kristályrácsát. Azzal a felismerésével, hogy a kianit szerkezete bennefoglaltatik a staurolit rácsában, a kristálykémia egyik úttörőjévé minősítik.

Hazaérkezése után Szegeden, nem kevés nehézség mellett, kezdi meg magántanárként a kutatómunkát, amelyben *Sasvári Kálmán* lesz egy életre szólóan a segítőtársa. Első jelentősebb közös munkájuk [5] a *kriolit* (Na_3AlF_6) szerkezete. Az akkor még szokatlan alternatív $P2_1/n$ tércsoportválasztásuk tankönyvi például szolgál. Még Szegeden határozza meg, többek között, a *pollucit* [6] és az *analcit* [7] szerkezetét, mielőtt, éppen Bragg ajánlatával, 1938-ban elnyeri a megpályázott professzori kinevezést a budapesti József Nádor Műszaki Egyetem Kémiai Fizikai Tanszékére. Bragg ajánlásának fő érve az, hogy az addig felderített 300 kristályszerkezetből 10 Náray-Szabó munkája. Ugyanebben az évben Bragg, a hírnevét továbbnövelő manchesteri évek után, Cambridge-ben a Kísérleti Fizika Cavendish-professzora lesz. Három évvel később már a Brit Birodalom lovagja.

A továbbiakban a két életút egyre aszimmetrikusabbá válik. Csomópontjaik sajátos megvilágítását adják annak a vérzivataros történelmi kornak, melyben a Csatorna két oldalán az emberi sorsok másként alakultak. A háborús évek ellenére Sir Lawrence érdeklődése, mineralógiai kutatásai mellett, a 40-es években a fehérjeszerkezetek vizsgálata felé fordul. Együttműködése cambridge-i tanítványaival akkor is fennmarad, amikor 1953-ban Londonban a Royal Institution Davy Faraday Laboratóriumának igazgatója lesz. Párhuzamosan, a Budapestre költözött Náray-Szabó 1938-tól 1944-ig (a német megszállásig) egész életének talán legeredményesebb kutatói korszakát valósítja meg. Ehhez a vele együtt Szegedről a fővárosba költöző Sasvári Kálmán, befejezve doktori értekezését, a röntgendiffrakciós adatgyűjtésben végez jelentős fejlesztést. Első jelentősebb munkája a *Pócza Jenő*vel meghatározott $AgClO_3$-szerkezet [8]. Ezután a *perovszkit* [9] rácsát tanulmányozva jut el az izomorfia általánosabb megfogalmazásához, az ún. *testvérszerkezetekhez* [10]. E korszak méltó lezárása a Julius Springer felkérésére írt, de már csak magyarul megjelentetett (1944. október!) 272 oldal terjedelmű *Kristálykémia* könyve, amit természetesen „*mesterének,* Sir Lawrence Bragg professzornak" ajánl. Sajnos, az ezt követő, a főváros elpusztításával kezdődő évtized a *tanítvány* Náray-Szabó számára a veszteségek, szenvedések és megaláztatások hosszú sorát rejti magában.

E sorok írója, aki 14 évig (1972-ig) kötődött Náray-Szabóhoz, időszerűnek érzi, hogy a *Krisztallográfia Nemzetközi Évének* nyilvánított 2014 megemlékezéseinek részeként a hazai kémikustársadalmat megismertesse a *mester* és *tanítvány* általa megőrzött levelezésével.[2] Ez *sine ira et studio* tanúsítja életük utolsó 25 évében is fennmaradó (elszakíthatatlan) emberi és kutatói kapcsolatukat.

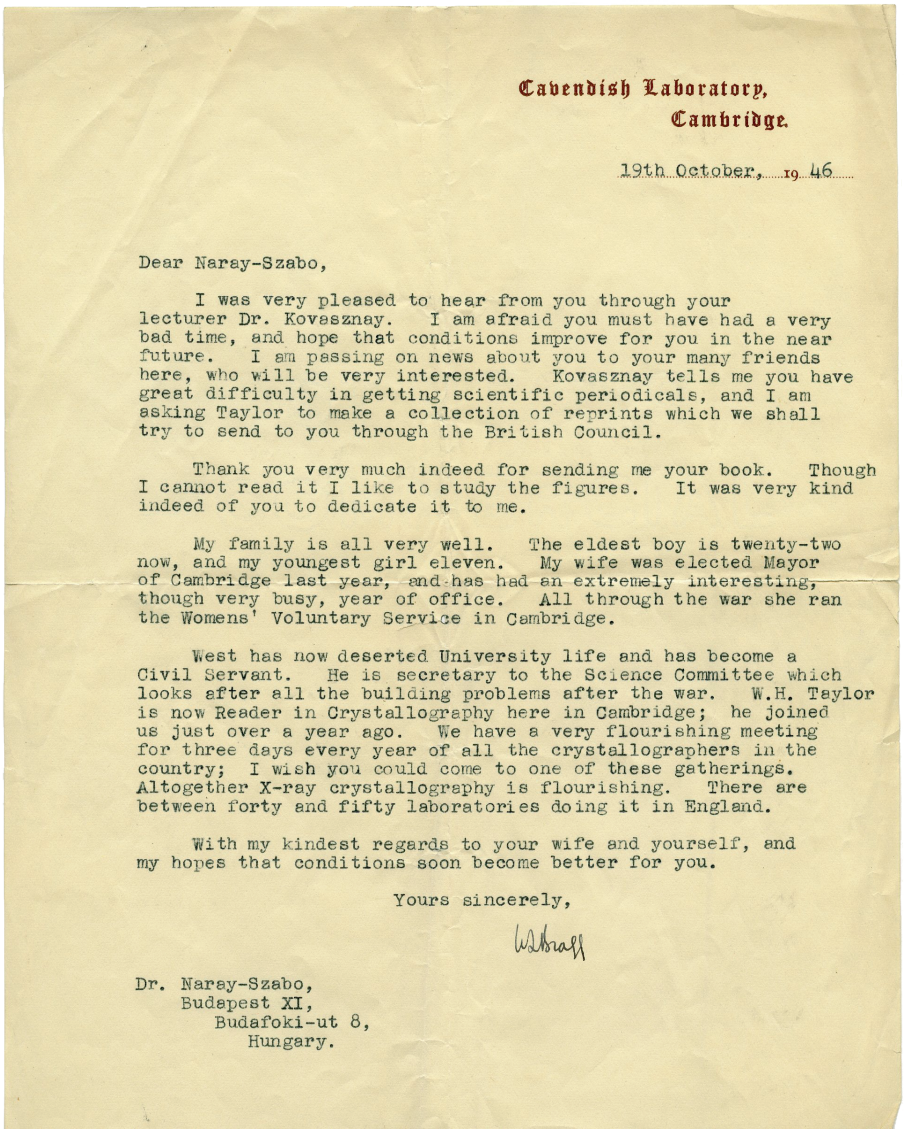
A levelezésből, sajnos, az is követhető, hogy szemben az angliai sikerekkel (Nobel-díjak), Budapesten a technikai elmaradottság oly magas, hogy érdemi felzárkózás még évekig (a hetvenes évekig) várat magára.

A háború utáni kapcsolatfelvétel Bragg 1946. október 19-én kelt levelével **(1) (1. ábra)** kezdődik.

Ebben Náray-Szabó asszisztensének, *dr. Kovásznai*nak látogatására reagálva és a vendég által kézbesített, dedikált *Kristálykémia* könyvet megköszönve, Bragg beszámol a körülötte történtekről. Hat nap-

[1] 1970-ben a Manchester School of W. L. Bragg című dolgozattal (Acta Cryst. A26, 179) köszönti mesterét 80. születésnapján.

[2] A levelek a szerző személyes tulajdonában vannak, kettőt cikkében is bemutat. A többit csak a levelek után kerek zárójelben írt szám (X) jelzi (a szerk.).



Cavendish Laboratory,
Cambridge.

19th October, 19 46

Dear Naray-Szabo,

I was very pleased to hear from you through your lecturer Dr. Kovasznay. I am afraid you must have had a very bad time, and hope that conditions improve for you in the near future. I am passing on news about you to your many friends here, who will be very interested. Kovasznay tells me you have great difficulty in getting scientific periodicals, and I am asking Taylor to make a collection of reprints which we shall try to send to you through the British Council.

Thank you very much indeed for sending me your book. Though I cannot read it I like to study the figures. It was very kind indeed of you to dedicate it to me.

My family is all very well. The eldest boy is twenty-two now, and my youngest girl eleven. My wife was elected Mayor of Cambridge last year, and has had an extremely interesting, though very busy, year of office. All through the war she ran the Womens' Voluntary Service in Cambridge.

West has now deserted University life and has become a Civil Servant. He is secretary to the Science Committee which looks after all the building problems after the war. W.H. Taylor is now Reader in Crystallography here in Cambridge; he joined us just over a year ago. We have a very flourishing meeting for three days every year of all the crystallographers in the country; I wish you could come to one of these gatherings. Altogether X-ray crystallography is flourishing. There are between forty and fifty laboratories doing it in England.

With my kindest regards to your wife and yourself, and my hopes that conditions soon become better for you.

Yours sincerely,

W.L. Bragg

Dr. Naray-Szabo,
Budapest XI,
Budafoki-ut 8,
Hungary.

1. ábra. Az 1946. októberi levél

pal később, 1946. október 25-én kelt rövid levélkében (**2**) Bragg informálja tanítványát, hogy W. H. Taylor (a korábbi szerzőtárs) a Kovásznain keresztül kért különlenyomatokból egy csomagot állított össze. Ezután (1947-től 1957-ig) következik a személyes megpróbáltatások és az arról való hallgatás évtizede.

Kézzel írott sorokkal ismét Bragg veszi fel (1957. július 24.) a levelezés fonalát. A jeles krisztallográfus, majd nagy formátumú (baloldali) politikus, *John Bernal* (a Béke Világtanács elnöke) Budapesten felkeresi Náray-Szabót (akkor már az MTA KKKI munkatársát), és az alkalmat megragadva átadja neki Sir Lawrence levelét (**3**). E levélben a mester kifejezi azon reményét, hogy tanítványa hamarosan Angliába látogathat. Sajnos, erre a látogatásra csak 13 év múltán kerül sor. Náray-Szabó 1957. szeptember 3-án hosszú levélben (**4**) válaszol mesterének. Ebben, többek között, beszámol az internálásának végétől eltelt négy esztendőben végzett munkáiról, amelyek – az eredmények ellenére – messze sodorták a kristályok szerkezetétől. De reménykedik, hogy Sasvári Kálmán csatlakozásával ismét elkezdődhet a „kristálykémiai kutatás”.

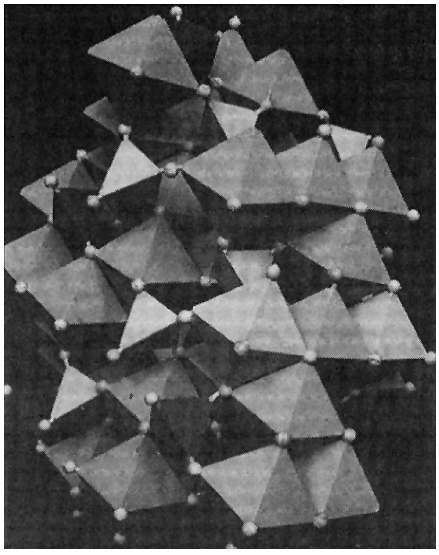
A kiváló elméleti kémikus, Linnett professzor budapesti látogatásától Sir Lawrence ismét indítatva érzi magát, hogy levelet írjon (1958. június 17.). A rendkívül személyes hangú, a közös múltat felidéző sorok (**5**) után Bragg informálja Náray-Szabót, hogy bár a Cavendish Laboratóriumot öt éve elhagyta a Royal Institutionért, a proteinkutatások továbbra is Cambridge-hez kötik. Beszámol arról, hogy *John Kendrew* háromdimenziós Fourier-sorokkal feltárta a mioglobin szerkezetét. Személyes örömének tekinti, hogy a „röntgenelemzés” már olyan molekulákra is alkalmazható, amelynek mólsúlya eléri a tizenhétezret! Augusztus 21-én kelt válaszában (**6**) Náray-Szabó örömmel nyugtázza Kendrew sikerét, majd saját lehetőségeire utalva megjegyzi, hogy szerény eszközökkel (oszcillációs és Weissenberg-felvételekkel,[3] de modern számítógépek nélkül) is lehet eredményeket felmutatni. Beszámol arról, hogy folyamatban van és publikálás előtt áll [11] klasszikus szerkezetmeghatározása, a *staurolit* revideált modellje **(2. ábra)**.

Végül beszámol arról, hogy korszerű röntgendiffrakciós eszközök nélkül milyen lehetőségeket talált az üvegek szerkezetének vizsgálatára.

Következő levelében (1960. január 16.) informálja (**7**) Sir Lawrence-t arról, hogy 1956 és 1958 között megjelent *Szervetlen kémiájá*nak három kötete, melyből az elsőt német fordításban is kiadták. Ezt küldi mesterének „legmagasabb fokú nagyrabecsülésének apró jeléül”. Egyben örömmel közli, hogy sikerült egy modern diffraktométert (por), valamint egy retigráfot beszerezni. Sajnos, jegyzi meg végül, a használatukhoz továbbra is hiányzik a modern számítástechnikai eszköz.

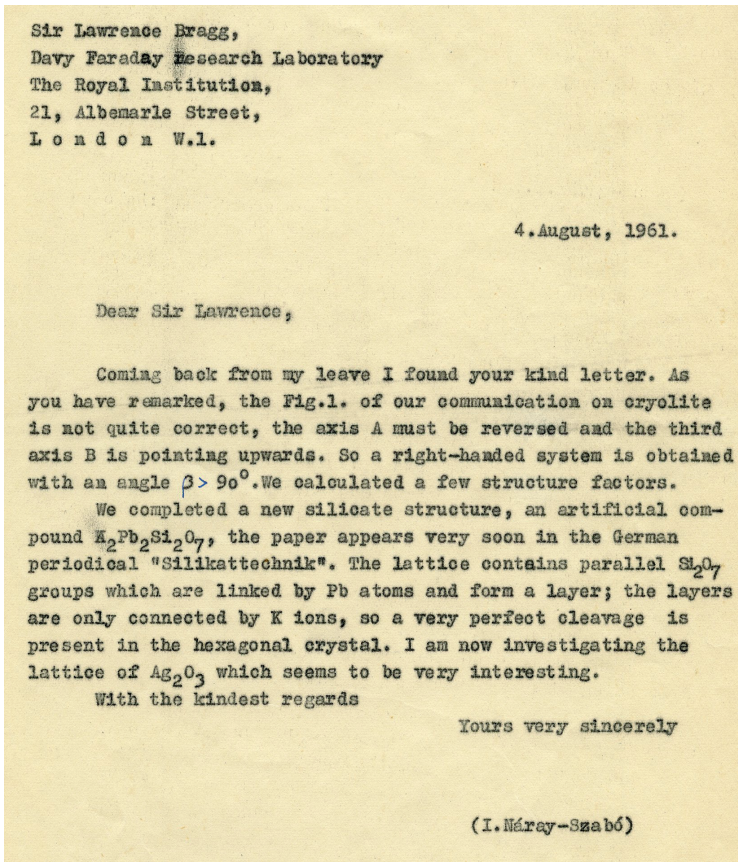
Bragg 1960. február 1-jén kelt válaszában (**8**) megköszöni a *Szervetlen kémia* első kötetét, és készül az áttanulmányozására. Továbbra is reménykedik, hogy Náray-Szabó meghívottként részt vehet[4] az IUCr augusztusban Cambridge-ben meg-

2. ábra. A staurolit kristályszerkezete



[3] A levél írásakor a csoport használható Weissenberg-kamrával nem rendelkezett. Ez csak 1959 végén került a csoport használatába.

[4] Természetesen nem utazhatott ki! Szerencsére, Sasvári Kálmán, az elvtársak beprogramozott akadékoskodását kijátszva, kijutott a kongrsszusra és az azt követő manchesteri „Nyári iskolára”, ami a korszerű krisztallográfia számítógépi programjainak megismerésével mérföldkő lesz Náray-Szabó kutatócsoportja számára.



Sir Lawrence Bragg,
Davy Faraday Research Laboratory
The Royal Institution,
21, Albemarle Street,
L o n d o n W.1.

4.August, 1961.

Dear Sir Lawrence,

Coming back from my leave I found your kind letter. As you have remarked, the Fig.1. of our communication on cryolite is not quite correct, the axis A must be reversed and the third axis B is pointing upwards. So a right-handed system is obtained with an angle $\beta > 90^{o}$. We calculated a few structure factors.

We completed a new silicate structure, an artificial compound $K_2Pb_2Si_2O_7$, the paper appears very soon in the German periodical "Silikattechnik". The lattice contains parallel Si_2O_7 groups which are linked by Pb atoms and form a layer; the layers are only connected by K ions, so a very perfect cleavage is present in the hexagonal crystal. I am now investigating the lattice of Ag_2O_3 which seems to be very interesting.

With the kindest regards

Yours very sincerely

(I.Náray-Szabó)

3. ábra. Náray-Szabó István levele

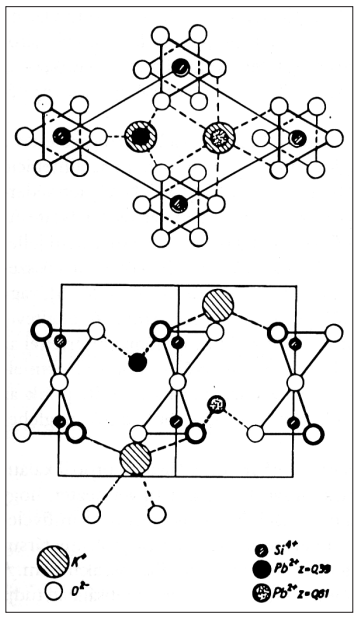
rendezendő V. kongresszusán. A levél további részében Sir Lawrence John Kendrew mioglobin- (2500 atom), valamint *Max Perutz* 6 Å felbontású hemoglobinszerkezetét méltatja, kiemelve annak a (történelmi) jelentőségét, hogy a hemoglobinban négy mioglobinegység tetraéderes elrendeződést[5] alkot.

Bragg következő, 1961. július 24-én kelt levelében (**9**) ásványtani könyvének új kiadásával kapcsolatban az 1938-ban publikált *kriolit* atomi koordinátái és ábrája közötti ellentmondásra hívja fel a figyelmet. Kéri tanítványát, hogy a talált hiba korrigálásával segítse munkáját. Augusztus 4-én levelében (**10**) **(3. ábra)** Náray-Szabó a Sir Lawrence által sejtett kristálytanitengely-korrekciókat helybenhagyja.

Ezt követően ismerteti egy mesterséges szilikát, a $K_2Pb_2Si_2O_7$ szerkezetének meghatározását **(4. ábra)** és közeli publikálását a német *Silikattechnik* nevű lapban [12]. Náray-Szabó az ólomatomokkal összekapcsolt párhuzamos lineáris Si_2O_7-csoportok alkotta rétegek közötti gyenge kölcsönhatással magyarázza a kristályok tökéletes hasadását.

A hátrahagyott dossziéban talált mester–tanítvány levelezés utolsó lapja (**11**) egy viszonylag rövid tudósítás, 1961. november 21-i keltezéssel. Bragg megköszöni a neki küldött, feltehetően a $K_2Pb_2Si_2O_7$ szerkezetét ismertető különlenyomatot, és örömét fejezi ki, hogy Náray-Szabó folytatni tudja kutatásait. Végül a fehérjeszerkezet-kutatásban elért legutóbbi eredményekre utalva (alig egy évvel tanítványai Nobel-díja előtt), Sir Lawrence (nem ok nélkül) az *X-ray analysis* (röntgendiffrakció) hatalmas erejét dicséri.

4. ábra. A $K_2Pb_2Si_2O_7$ rétegszilikát *a* és *c* tengelyre merőleges vetületei



Epilógus

Sir Lawrence Bragg és Náray-Szabó István levelezésének a *Krisztallográfia Nemzetközi Éve* részeként történt bemutatása hozzájárulhat a tudománytörténet fehér lapjainak kitöltéséhez. Segíthet a rágalmakból és hazugságokból font ködöt oszlatni, amit „Rákosi Mátyás legjobb tanítványai" 1947-től még halála után is terjesztettek Náray-Szabó Istvánról. A két életpálya markáns különbségei elemezhetők sokféleképpen, de a fennmaradt levelezésből számunkra, magyarok számára egyértelműen nyilvánvalóvá válik Sir Lawrence Náray-Szabó iránt érzett szakmai megbecsülése és emberi szeretete.

A sors végül is, bár jelentős késéssel, megadta, hogy egy, illetve két évvel haláluk előtt, Londonban, a Sir Lawrence 80. születésnapján (1970) rendezett ünnepségen találkozhattak. Hazaérkezése után örömmel és büszkeséggel hallgattuk Náray-Szabó István beszámolóját arról a kitüntető megbecsülésről, amellyel Sir Lawrence és családja fogadta.

A magyar röntgenkrisztallográfia atyjának szellemi örökségét gondozva, immár ugyancsak nyolcvanévesen, munkatársaimmal együtt büszkeséggel érzem magam a magyar tanítvány Náray-Szabó után Sir Lawrence unokájának, tanítványaim pedig szellemi dédunokáknak. S remélem, hogy e rendhagyó dolgozatból az MKL olvasói jobban megértik, miért viseli az MKE tudományos díja Náray-Szabó István akadémikus nevét.

[5] Felfedezéseikért 1962-ben Kendrew és Perutz Kémiai Nobel-díjra érdemesül.

IRODALOM
[1] Náray-Szabó I.: The structure of staurolite; Z. Krist. (1929) 71, 103.
[2] Náray-Szabó I.: The structure of apatite; Z. Krist. (1930)75, 387.
[3] Taylor W. H., Náray-Szabó I.: The structure of apophyllite; Z. Krist. (1931) 77, 146 .
[4] Náray-Szabó I., Taylor W. H., Jackson, W. W.: The structure of cyanite; Z. Krist. (1929) 71, 117.
[5] Náray-Szabó I., Sasvári, K.: Die Struktur des Kryoliths; Z. Krist. (1938) 99, 27.
[6] Náray-Szabó I.: Die Struktur des Pollucits; Z. Krist. (1938) 99, 277.
[7] Náray-Szabó I.: Note on the structure of analcite; Z. Krist. (1938) 99, 291.
[8] Náray-Szabó I., Pócza J.: Die Struktur des Silberchlorats; Z. Krist. (1942) 104, 28.
[9] Náray-Szabó I.: Der Strukturtyp des Perovskit; Naturwiss. (1943) 31, 202.
[10] Náray-Szabó I.: Die Strukturen von Verbindungen ABO3 „Schwesterstrukturen"; Naturwiss. (1943) 31, 466.
[11] Náray-Szabó I., Sasvári, K.: On the structure of staurolite HFe2AL9Si4O24; Acta Cryst. (1958) 11, 862.
[12] Náray-Szabó I., Kálmán A.: Die Struktur des K2Pb2Si2O7 und der Bleigläser; Silikattechnik (1961) 12, 316.

Próder István
Várpalota

Felújított kiállítások az ötvenéves Vegyészeti Múzeumban

Negyedik rész

Előző három cikkünk a múzeum nagytermének kiállításaival foglalkozott, melyek a magyar kémia és vegyipar fejlődési periódusait ismertették, és bemutatták a fejlődést megalapozó személyiségek munkásságát is. [1]

A nagyterem után következő három kisebb helyiség kiállításainak berendezésekor hasonlóképpen jártunk el. Ezekben a múzeumi kémiai laboratórium, a vegyipari számítástechnika kezdetei, régi kémiai technológiák és az egykor energiát szolgáltató eszközök makettjei láthatók.

Kémiai laboratórium

A gyakorlati kémia a laboratóriumban kezdődik. Az első cikkben részleteztük, hogy a 18. században a világon először Magyarországon, a selmecbányai Bányászati Akadémián végeztek a hallgatók laboratóriumi kísérleteket. Laboratóriumunk mind a klaszszikus kémiai analízis, mind a műszeres analízis eszközeiből mutat be válogatást. Minden diáknak, aki kémiai tanulmányokhoz kezd, érdemes ellátogatni a múzeumba, ahol testközelből ismerheti meg a tan-

Kémiai laboratórium

Üvegtechnikus asztala

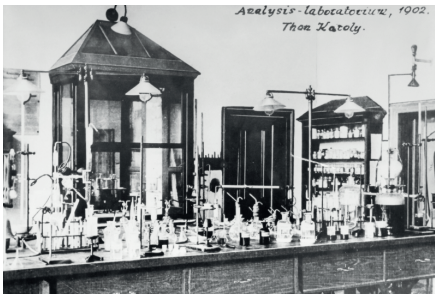
könyvekben szereplő eszközöket. Itt kapott helyet az üvegtechnikus asztala is, a különféle üvegeszközök: büretták, pipetták, menzúrák jelölésére alkalmas pantográffal együtt.

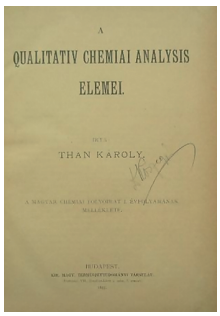
Than Károly laboratóriumának szerepe az oktatásban

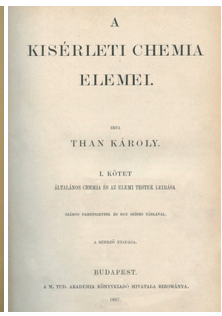
Than Károly (1834–1908) a kémiatanítás és kutatás sikeresebbé tétele érdekében már 1862-ben kezdeményezte egy új intézet létesítését. Az építkezés minisztériumi jóváhagyása után külföldi intézeteket tanulmányozott, közreműködött az épület kialakításában, a laboratóriumok tervezésében. Hosszú és részletes levelezést folytatott mind hazai, mind külföldi szakemberekkel azért, hogy minden a legjobb minőségben készüljön el és a legjobban szolgálja az oktatást. Az intézet 1872-ben készült el az akkori füvészkertben (Trefort-kert) és európai szinten is a legkorszerűbbek közé tartozott.

Than jelentősen hozzájárult a magyar kémia fejlődéséhez. Tudományos tevékenysége mellett foglalkozott többek között a főváros vízellátásával kapcsolatos vizsgálatokkal, közegészségügyi problémákkal, vagy a világítógáz használata során bekövetkezett gázrobbanások okaival.

Than Károly és laboratóriuma




A
QUALITATIV CHEMIAI ANALYSIS
ELEMEI.
THAN KAROLY


A
KISÉRLETI CHEMIA
ELEMEI.
THAN KÁROLY.
I. KÖTET
BUDAPEST.

A tanítást szolgálta az ő kezdeményezésével és anyagi támogatásával létrejött Magyar Chemiai Folyóirat első mellékleteként megjelent: „Qualitatív chemiai analysis elemei" című könyve, majd a kimagasló értékű fő műve, a több mint ezer oldalas „Kísérleti chemia elemei" című tankönyv.

Szebellédy László coulombmetriás eljárása

Szebellédy László (1901–1944) az egyik legnagyobb elektroanalitikus vegyész. Nemzetközi viszonylatban az elsők között teremtette meg a modern fizikai kémiai elemzéseket és az ultramikroanalízist. Nevéhez fűződött a coulombmetriás titrálás, a meny-

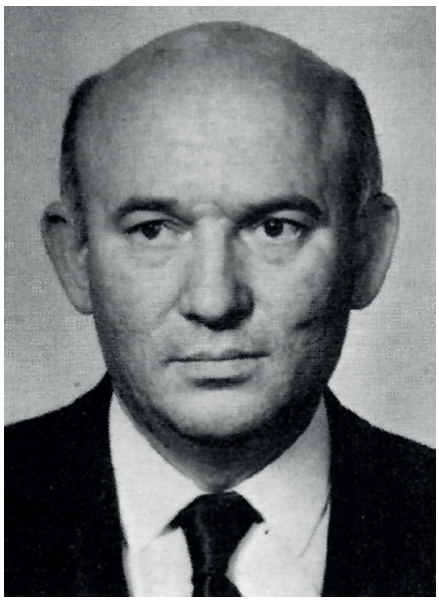
Szebellédy László

nyiségi katalitikus nyomelemzés, a fluoreszcens és redoxindikátorok bevezetése a kémiai analitikai gyakorlatba. Sokat fáradozott a gyógyszerészképzés és -továbbképzés előreviteléért.

1937-ben Somogyi Zoltán disszertációjának irányítása alatt dolgozta ki coulombmetriás mérési módszerét, amely az anyagok elektrokémiai átalakításával kapcsolatos töltésmennyiségek mérésén alapul. A mennyiségi meghatározás alapja a Faraday II. törvénye. Eljárásukat 1938-ban „Die coulometrische Analyse als Präzisionsmethode" címmel adták közre a Zeitschrift für anal. Chemie folyóiratban (112. Bd. 1938. 313–323.). Dolgozatukban a coulombmetria alapjai rakták le; Szebellédy első coulombmetriás eljárása óta ez a módszer az egész világon elterjedt, több ezer tudományos dolgozat foglalkozik alkalmazásával. Bár a kutatók néhány újabb fogással, korszerű műszerrel gazdagították az eljárást, az alapelv kidolgozása – és ezzel a módszer megteremtése – Szebellédy érdeme.

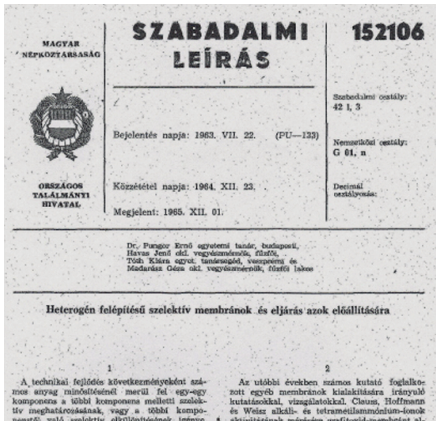
Pungor Ernő (1923–2007)

Munkásságának jelentőségét mind itthon, mind külföldön tudományos fórumokon és közleményekben számos szerző méltatta, többek között Tóth Klára, Sohár Pál és Havas Jenő.



Pungor Ernő

Tudományos karrierjét az adszorpciós indikátorok területén végzett munkái indították el, amelyhez kapcsolódtak a nagyfrekvenciás méréstechnika, a lángfotometria és a gázanalízis terén elért eredményei. Az ötvenes évek második felében kezdte el a később világsikert jelentő, ionszelektív elektródok fejlesztésére irányuló kutatásait. Érdeme, hogy meghonosította a műszeres analízis elektroanalitikai ágát és megteremtette a hazai elektroanalitikai műszergyártást. A Veszprémi Vegyipari Egyetemen (ma: Pannon Egyetem) analitikai kémiai iskolát alapított, melynek fő profilja az elektroanalitika, ezen belül az ionszelektív elektródok kutatása volt. Már munkája kezdetén felismerte az újfajta potenciometriás elektródokban rejlő lehetőségeket. Munkatársaival együtt bejelentett szabadalma alapján indult el Magyarországon, a világon elsőként, az ionszelektív elektródok gyártása. Fontos kutatási területe volt még a voltammetria és a spektrokémia is.


MAGYAR NÉPKÖZTÁRSASÁG

SZABADALMI LEÍRÁS

152106

Szabadalmi osztály: 42 l, 3

Nemzetközi osztály: G 01, n

Decimál osztályozás:

ORSZÁGOS TALÁLMÁNYI HIVATAL

Bejelentés napja: 1963. VII. 22. (PU—133)

Közzététel napja: 1964. XII. 23.

Megjelent: 1965. XII. 01.

Dr. Pungor Ernő egyetemi tanár, budapest,
Havas Jenő okl. vegyészmérnök, Tata,
Tóth Klára egyet. tanárnő, veszprémi és
Madarász Géza okl. vegyészmérnök, Tatabánya

Heterogén felépítésű szelektív membránok és eljárás azok előállítására

1

A technikai fejlődés következményeként számos anyag minőségének mérő fel egy-egy komponens a többi komponens mellett szelektív meghatározásának, vagy a többi kompo-

2

Az utóbbi években számos kutató foglalkozott egyéb membránok kialakítására irányuló kutatásokkal, vizsgálatokkal. Clauss, Hoffmann és Weiss alkáli- és tetrameziliammónium-ionok

Szelektív membránok

1970-től húsz éven át volt tanszékvezető professzor a Budapesti Műszaki Egyetem Analitikai Kémia Tanszékén. Tovább bővítette kutatásait az ionszelektív elektródok elmélete és új típusú szenzorok fejlesztése irányában. Elindította az áramló oldatos technikákat, bevezette a kemometriát az oktatásba és a kutatásba. Ezekben az években alapozta meg igazán a magyar elektroanalitika nemzetközi elismertségét.

Mérés- és számítástechnika a vegyiparban

A kémia és vegyipar módszerei és eszközei egyre korszerűbbé válnak. Jelentős a fejlődés a vegyipari műveletek, a méréstechnika és a számítástechnika vegyipari alkalmazása területén. A kiállítás a kémia és a vegyipar műszereiből és számítástechnikai eszközeiből mutat be válogatást. Képünkön háttérben egy NMR-készülék látható, középen üvegszekrényben a kereskedelemben, tervezésben, illetve tudományos kutatásokban is használt mechanikus és elektronikus számológépek több példányát gyűjtöttük össze. A kép jobb oldalán az a gázkromatográf szerepel, amely az 1951-ben Pétfürdőn alapított Nagynyomású Kísérleti Intézet (később Nitroil Vállalat, jelenleg Huntsman Corp.) ajándékaként került a múzeumba.

Napjainkban, amikor a számítástechnika az élet minden területén mindennapi tevékenységünk fontos és kikerülhetetlen részévé vált, alig gondolunk azokra a kezdeti próbálkozásokra, amelyek az ipar különböző területein – így a vegyiparban is – az első lépéseket jelentették a számítógépek alkalmazásában.

Műszerek, számológépek

Ilyen lépés volt a magyar vegyipar első számítógépének, egy Gier típusú berendezésnek az üzembe állítása. A számítógépet a Péti Nitrogénművek 420 t/nap kapacitású, az 1960-as években korszerű ammóniaüzeme optimalizációjához vásároltak. A kiállítás a műtárgynak olyan környezetet teremtett, amely a készülék ipari fontossága mellett annak tudományos jelentőségét is hangsúlyozza. Így került a számítógép fölé az a fényképfelvétel, amely Benedek Pál és László Antal professzorokat ábrázolja, amint éppen a kiállított géppel dolgoznak.

Az első számítógép

Benedek Pál (balra) és László Antal a számítógép előtt

A Gier (Geodetic Institute's electronic computer) számítógép a maga korában a korszerűbbek közé tartozott. Pultján helyezték el az írógépet, a lyukszalaglyukasztó és -olvasó egységeket. A központi egységhez mágnesdobtároló, háttértár-vezérlő puffermemória, mágneslemez-, mágnesszalag- és mágnesdobtároló tartozik. A készülék tervezője: Geodetic Institute's Electronic Computer; gyártója: Regnecentralen, Dánia; gyártásának éve: 1966; üzembe állításának időpontja: 1966. október 22.; múzeumba szállításának időpontja: 1988. március 2.; adományozó: ECONORG Számítástechnikai Közös Vállalat.

A készüléket nem szállították Pétfürdőre a Nitrogénművekhez, hanem úgy működött, hogy a műszerek által kibocsátott jeleket, az üzemi paramétereket egy telexgép segítségével továbbították a Budapesten levő számítógéphez. A felküldött adatokat a gép értékelte és a beállításra vonatkozó értékeket visszaküldték a működő üzemhez. A készülék elhelyezését a Vegyipari Tröszt számítástechnikai központjában oldották meg. A cég neve többször változott, nevezték a Magyar Vegyipari Egyesülés Mérnöki Társulásának (VSZFT) is. A rendszerváltozás után a cég ECONORG Számítástechnikai Közös Vállalat néven folytatta tevékenységét.

Régi kémiai technológiák

Irodalmi források, főként Szatmáry László (1880–1944) munkái alapján három egykori kémiai technológiáról készült makett. A hamuzsír-, salétrom- és timsógyártás alapműveletei hasonlóak, ha a nyersanyaggyűjtés, előkészítés, oldás, bepárlás (főzés), kristályosítás munkafolyamatait tekintjük. Mindhárom régi technológia a 18–19. században széleskörűen elterjedt Magyarországon.

Hamuzsírfőzés

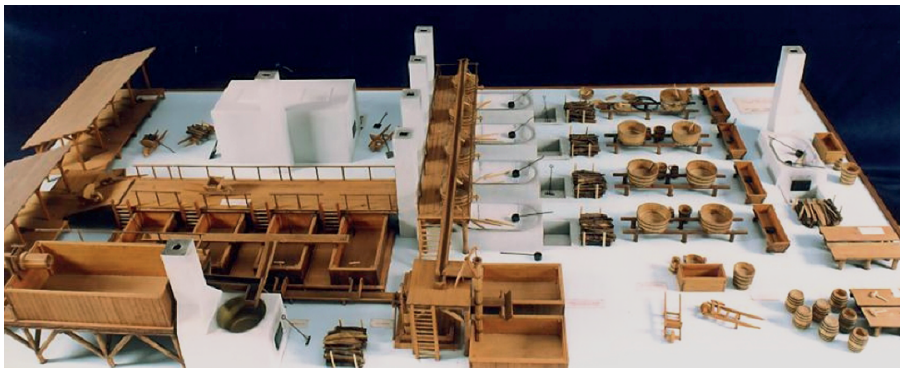
A hamuzsírfőzés Európában az erdős vidék lakosságának egyik legjövedelmezőbb foglalkozása volt. Már a 13. században állítottak elő hamuzsírt (kálium-karbonátot) primitív eszközökkel, kis mennyiségben, főként az üveghuták és a szappanfőzők, saját szükségletükre. A fa elégetésekor visszamaradt hamuból vízzel oldották ki a kálium-karbonátot, ezt tovább dolgozva, zsíros, síkos tapintású hamuzsírt kaptak. A hamuzsírfőzés fő korszaka a 18. század második felében, a 19. század fordulóján volt. A hamuzsír világszerte keresett cikk lett. Az üveggyártás és a szappankészítés mellett egyre több alkáliát igényelt a textilipar, amely ebben az időben fejlődött ki Nyugaton. Később a mesterséges alkálisógyártás bevezetése visszaszorította a hamuzsírfőzést.

Hamuzsírfőző üst

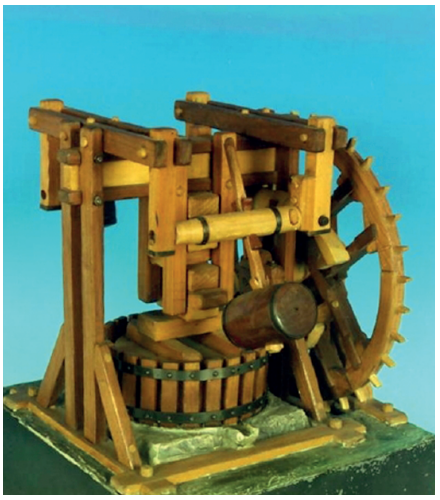
Magyarországon a19. század közepéig összesen kb. 4 millió hold erdőt égettek fel hamuzsírkészítés céljából. Általában 8–10 000 hold erdő kellett egyetlen hamuzsírhuta táplálására.

Salétromgyártás

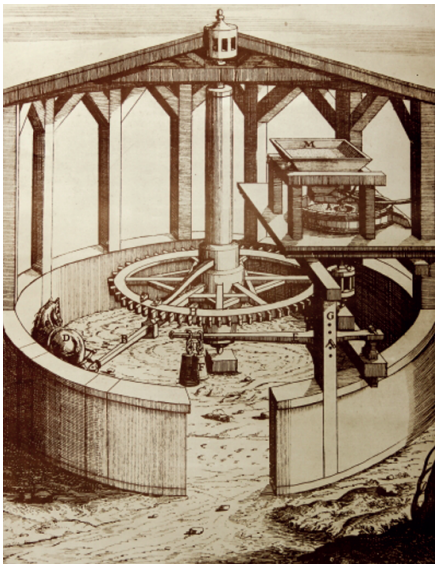
Salétromra a puskapor felfedezése óta volt szükség. A salétrom, kén és faszén porának keveréke a háborúk nélkülözhetetlen anyaga lett. Hazánk területe pedig történelmünk folyamán sokszor volt csatatér. A salétromfőzésnek ezért régi hagyományai vannak ebben a régióban. Ez a vegyi jellegű ipar a felvidéken már a 15. században virágzott: Bártfa város számadáskönyve 1439-ből megőrizte János salétromfőző és puskaporgyártó nevét. Magyarországon a puskaporgyártásra elsősorban a Debrecen környéki száraz, alföldi területen kivirág-



Timsógyártás



Lengőkalapácsos sajtoló



Járgányos hajtás

zott, sepert salétromot használták fel. Később ez kevésnek bizonyult, ekkor az istállók földjének kilúgozásával állították elő a puskapor egyik fő alkotórészét. Az igények további növekedésével fedett salétromtermelő tereket, ún. „plantage-okat" hoztak létre. A salétromfőzés jelentősége tovább növekedett, miután a lőport várfalak felrobbantására is kezdték használni. Ismereteink szerint a módszert hazánkban először 1533-ban, a várpalotai vár ostromakor alkalmazták. A bányászatban forradalmi változást hozott a robbantásos fejtés, melyet a világon először 1627. február 8-án próbáltak ki a Selmecbánya melletti Felső-Biber tárában. A salétromfőző iparág a 19. végén a chilei salétrom behozatalával, majd a vegyi úton való salétromgyártás kidolgozásával teljesen megszűnt.

Timsógyártás

Timsót az európai államok, így hazánk is a 16. századig keletről, később az itáliai Tollfáról szerezték be. Közismerten Magyarország azok közé az európai államok közé tartozott, ahol a cserzés és az irhabőr-készítés keletről elsőnek terjedt el. A bőrök cserzésénél, a pácfestésnél régóta alkalmazták a timsót. Később a gyógyászatban és a savak előállítására is használták. A középkorban a timsófőzés az egyik legnagyobb kémiai iparnak számított, melynél a valóban nagy kémiai tisztaságot talán elsőként érték el. 1763-ban Markhot Ferenc egri orvos vízanalízis közben a parádi sósvízből mutatta ki a timsót. Parádon az első timsógyárat 1782-ben építették fel.

1811-ben felépítették a muzsályi timsófőzőt. Az üzem a mai ellenáramú üzemek elődjének tekinthető. Technológiájának kidolgozásában és tökéletesítésében Kitaibel Pál (1757–1817) neves mineralógus is részt vett.

Kitaibel Pál

Energia biztosítása

Számos energiaigényes művelethez, mint a gabona őrlése, vagy az ércek aprítása az évszázadokon át jól bevált energiaforrásokat, a vízi energia és állati erő hajtotta szerkezeteket makettek és tablók szemléltetik.

IRODALOM

1] Próder István: Felújított kiállítások az ötvenéves Vegyészeti Múzeumban, Magyar Kémikusok Lapja (2014) 69, 279–283. és 383–386.; Magyar Kémikusok Lapja (2015) 70, 55–57.

Pályázati kiírás „Kémia Oktatásért" díjra

A Richter Gedeon Nyrt. 1999-ben díjat alapított általános, közép- és szakközépiskolai tanárok részére, hogy támogassa és erősítse a kémia színvonalas iskolai oktatását. Kuratórium ítéli oda a rangos elismerést, a személyenként 400 ezer forintos díjat.

„A Richter Gedeon Alapítvány a Magyar Kémia Oktatásért" kuratóriuma a díjazottakat azok közül a jelöltek közül választja ki, akik több éve elismerten a legtöbbet teszik a kémia iránti érdeklődés felkeltésére, a kémia megszerettetésére, továbbá akiknek tanítványai az utóbbi években sikeresen szerepeltek a hazai és a nemzetközi kémiai jellegű tanulmányi versenyeken. A „Kémia Oktatásért" díjat 1999 óta eddig összesen 68 tanár nyerte el (http://www.richter.hu/hu-HU/felelossegvallalas/alapitvanyok/Pages/Alapitvany-Magyar-Kemia-Oktatasert.aspx).

Az Alapítvány a díjat a 2015. évre is kiírja.

Kérjük, hogy a kuratórium munkájának elősegítésére tegyenek írásos javaslatokat a díjazandó tanárok személyére. A rövid, legfeljebb egyoldalas írásos ajánlás tényszerű adatokat tartalmazzon a javasolt személy munkásságára vonatkozóan. A díj elsősorban a magyarországi kémiatanárok elismerését célozza, de a határon túli iskolákban, magyar nyelven tanító kémiatanárok is javasolhatók (ebben az esetben egy magyarországi és még egy helyi ajánlás is szükséges). Jelölést az iskolák igazgatóin, tanári munkaközösségein, kollégákon kívül egykori és jelenlegi diákok is adhatnak. A javaslatot tevő személy aláírását, elérhetőségét és intézményi hovatartozását is tartalmazó írásos ajánlásokat legkésőbb **2015. szeptember 11**-ig kell eljuttatni a kemiaoktat@richter.hu e-mail címre pdf formátumban, vagy az Alapítvány postacímére (Richter Gedeon Alapítvány a Magyar Kémia Oktatásért, 1475 Budapest, Pf. 27.). A díjak ünnepélyes átadására 2015 őszén, később megjelölendő időpontban kerül sor.

Richter Gedeon Alapítvány a Magyar Kémia Oktatásért

EuCheMS NEWSLETTER
September 2015

Commemorating the first victims of chemical weapons

22 April 1915 marked the first large scale introduction of chemical weapons in warfare, when chlorine gas was released into enemy trenches near Ypres, Belgium. Since that time many hundreds of thousands of people have been killed or injured by chemical weapons. As recently as 2012, chemical weapons were used in the current Syrian conflict.

100 years after the first use, on 21 April 2015, Ambassadors to the Organisation for the Prohibition of Chemical Weapons (OPCW) gathered in Ypres to commemorate those who have died as a result of these awful agents, to present a commemorative plaque to the town of Ypres, to reveal a new declaration on chemical weapons, the Ypres Declaration, and to review progress in eliminating these weapons.

Chemists were represented by Thomas Geelhaar (President of the Gesellschaft Deutscher Chemiker), David Phillips (a past President of the Royal Society of Chemistry) and David Cole-Hamilton (President of EuCheMS). They called for a complete world-wide ban on chemical weapons and for no chemist to take part in their development or deployment.

Following presentations by regional representatives of the Organisation for the Prohibition of Chemical Weapons, the Defence Minister of Belgium, a representative of the UN Secretary General and the Mayor of Ypres, the plaque was unveiled and the Ypres Declaration read out. Delegates then moved to the Menin Gate for the last post and a bagpipe lament. It was a very moving occasion where it was very important that chemists showed that they are totally opposed to the use of chemical weapons.

David Phillips (RSC, left), David Cole-Hamilton (EuCheMS, middle) and Thomas Geelhaar (GDCh) in front of the plaque commemorating those who have died as a result of the use of chemical weapons.

The Organisation for the Prohibition of Chemical Weapons, which justly won the Nobel Peace Prize in 2013, is renewing its efforts to complete the total elimination of chemical weapons. Of 196 countries in the world, 191 have signed and ratified the treaty which means they must disclose and dispose of all stockpiles of chemical weapons, the most recent being Syria in 2012 and Myanmar (Burma) in 2015. Israel has signed but not ratified whilst Angola, Egypt, North Korea and Southern Sudan have not signed.

However, we were sharply reminded that some chemicals which have perfectly innocent uses, such as chlorine for water treatment, can be misused as chemical weapons. A few days before the commemoration, barrel bombs containing chlorine were dropped from a helicopter in Syria, reminding us that such chemicals must be kept under strongly controlled conditions.

David Cole-Hamilton, EuCheMS President
djc@st-andrews.ac.uk

Zero carbon energy

As an early contribution to the European Sustainable Energy Week, EuCheMS, the Royal Society of Chemistry and the Royal Society of Edinburgh jointly organised a conference on "Zero Carbon Energy – The Future" at the Royal Society of Edinburgh on 27 May.

About 50 people were addressed by world experts in the field. After the opening words of David Cole-Hamilton, EuCheMS President, Mercedes Maroto-Valer (Heriot-Watt University, Edinburgh) introduced the "Energy Trilemma": Resources of fossil fuels are running out, their use is causing global warming and many places that have reserves of fossil fuels are politically delicate, leading to worries about the security of supply. She went on to discuss methods for reutilising CO_2 in fuel manufacture.

Mohammad Khaja Nazeeruddin (EPFL, Lausanne) then spoke about dye-sensitised solar cells of which he is one of the inventors, along with Michael Grätzel. The transparency of such cells allows them to be used as windows with variable colours. These cells have been commercialised and efforts are now being made to improve their efficiency.

James Durrant (Imperial College London) talked about systems which allow sunlight to decompose water directly into hydrogen and oxygen. Recent research has shown that efficiencies as high as seven percent are possible. Ten percent would allow all the world's energy needs to be met by the amount of sunlight falling on an area the size of Libya.

Peter Wasserscheid (University Erlangen-Nuremberg) talked about a new process for storing hydrogen by reaction with aromatic hydrocarbons that are already used commercially as heat transfer fluids. Such a fluid with six percent hydrogen can easily be transported in current gasoline handling equipment. This might have great potential for use in mobile applications such as trucks and cars.

Each lecture was followed by a lively discussion. EuCheMS thanks Bristow Muldoon (Royal Society of Edinburgh) and Mindy Dulai (Royal Society of Chemistry).

Nineta H. Majcen

EuCheMS and ENMIX

At the EuCheMS General Assembly 2014, the European Nanoporous Materials Institute of Excellence (ENMIX) was approved to become a supporting member of EuCheMS.

ENMIX is a non-profit organisation arising from the EU-FP6 Network of Excellence "In situ study and development of nanoporous materials". ENMIX was an appropriate measure to secure the established contacts and constitutes an attractive platform for research organisations, governmental bodies and industry. It acts as a unique and international competence and knowledge center for research and consultation in the field of nanoporous materials. Application of nanoporous materials can play a pivotal role in solving problems such as increasing energy demand, limited fossil feedstocks, global warming and environmental pollution. The strength of ENMIX lies in the integrated approach covering all fields from the synthesis and characterization of materials to their final application. Another objective of ENMIX is to strengthen European industry and to contribute to its global competitiveness.

Elias Klemm and Venceslav Kaucic, ENMIX
elias.klemm@itc.uni-stuttgart.de
venceslav.kaucic@ki.si
www.enmix.org

Evonik and EYCN cooperate

The European Young Chemists' Network (EYCN) signed a three-year cooperation agreement with Evonik Industries at the 10th Delegate Assembly in Berlin in April. The agreement provides travel grants and internships for members of EYCN while allowing Evonik Industries to present itself to young scientists as an employer in EYCN's media activities. This agreement between European academics and industrialists is a rather new experience. EuCheMS President David Cole-Hamilton says: "This will set an example for others and create good opportunities to promote exchange of knowledge, expertise and experience. It is the first agreement of its kind, but we hope not the last." EuCheMS is confident that this and future similar agreements will represent a positive channel of communication between academia and industry. *kjs/EuCheMS*

ECTN General Assembly in Ljubljana

The European Chemistry Thematic Network (ECTN) held its General Assembly in Ljubljana, Slovenia, on 27 to 29 April, together with the 19th Annual Meeting of the European Chemistry and Chemical Engineering Education Network (EC2E2N2).

During the event a Memorandum of Understanding between EuCheMS and ECTN (see EuCheMS newsletter May 2015) was signed by the presidents of the two associations, Francesco de Angelis (ECTN) and David Cole-Hamilton (EuCheMS). Also, Pavel Drasar (Czech Chemical Society) was elected the new President of ECTN, following de Angelis, who becomes vice-president. Thirdly, the ECTN held a joint session with their partner agencies ASIIN (Germany), UKA (Poland), the Italian Chemical Society and ANECA (Spain) for the award of Eurolabels. The General Assembly was also the occasion for five new working groups of ECTN to begin work.

The EC2E2N2 project is coming to the end of its three year funding period. After 19 years of continuous funding from the European Commission Erasmus programme, there will be no opportunity to apply for further funding. The project has created seven working groups dealing with a wide range of topics, e.g. sustainable entrepreneurship, the impact of chemistry on everyday life and virtual education. All groups will be making their final reports before the end of 2015.

Francesco de Angelis (ECTN, left) and David Cole-Hamilton (EuCheMS) signed a Memorandum of Understanding between ECTN and EuCheMS.

Anthony Smith, General Secretary ECTN
anthony.smith@cpe.fr, www.ec2e2n.net

Policy News

Round table on science policy

Ulrich Schubert, EuCheMS Vice-President, participated in a round table on "Influencing EU science policy" at the European Physical Society Council 2015. Schubert spoke about how EuCheMS provides policy input through workshops organised for EU officials and Members of European Parliament.

(Re)searching for jobs

The event "(Re)searching for jobs", organised by EuCheMS in Brussels on 2 June, brought together academia, industry, policy-makers and citizens to discuss the many barriers that young researchers face when entering the labour market. After the opening words of MEP Catherine Stihler, EuCheMS President David Cole-Hamilton provided his view on how universities can embed transferable skills in their courses and allow young students and researchers to make the best out of their degrees. Following presentations by invited speakers many questions arose from the audience on how to develop further the quality of curricula and teaching.

Changes to Juncker Plan

There is encouraging news regarding the reallocation of Horizon 2020 Funds to a European Investment Fund, the so-called Juncker Plan. Following pressure from the scientific community, amongst others from EuCheMS, and other negative feedback, the European Commission presented a new proposal safeguarding funding for ERC, Marie Skłodowska-Curie actions and the programme "Spreading excellence and widening participation", even though cuts will be made to the budget. The proposal will still have to be approved by the European Parliament and the Council of the European Union.

EuCheMS, secretariat@euchems.eu

Women ahead as presidents

Margaret Franklin was elected President of the Institute of Chemistry of Ireland for a period of two years. Margaret Franklin obtained her Master of Science at University College Dublin. In 1975 she took up a lecturing position at Athlone Regional Technical College (now Athlone Institute of Technology, AIT). She retired from her position as senior lecturer in inorganic chemistry in 2009 and concentrated in the work for the Institute of Chemistry of Ireland. She was elected vice-president in 2013. During her time at AIT, she had a major input into the development of the chemistry programmes and helped to establish the Eurachem Analytical Measurement Competition, which is a contest in laboratory skills open to undergraduate chemistry students in Ireland.

Christina Valanidou was elected President of Pancyprian Union of Chemists. Born in Nicosia, Cyprus, she studied chemistry at the National and Kapodestrian University of Athens. She received her Master of Science at the Albany State University, New York, and her PhD on Pedagogy at Patra's University in Greece. For several years she worked as a teacher and principal of school in Cyprus. As cultural attaché and counsellor she was the representative of the Ministry of Education and Culture in the Permanent Representation of the Republic of Cyprus in the EU in Brussels. Christina Valanidou is a member of various social, academic, political and trade union bodies and has worked in youth, students and women's organisations.

Luísa Margarida Martins was elected President of the Portuguese Electrochemical Society. She graduated in Chemical Engineering in 1990 and received her PhD in Chemistry in 1996, both at the Technical University of Lisbon. In 1996 she was appointed as adjunct professor at the Chemical Engineering Department of Polytechnic Institute of Lisbon and is also the vice-president of this department. Luísa Margarida Martins has been a researcher at the University of Lisbon since 1992. She is author of more than 75 peer-reviewed papers and over 150 conference presentations.

HCS: Sarkadi re-elected

At the General Assembly of the Hungarian Chemical Society (HCS) in Budapest on 15 May the general election was held. At the beginning Attila Kovács, General Secretary, summarized the achievements in the last four years: Sixty percent increase in the membership of young chemists (age 35 or below) is significant progress as a result of the efforts taken towards the younger generation. Livia Simon Sarkadi (Corvinus University of Budapest) was re-elected as President of HCS for the term 2015 to 2019. István Pálinkó (University of Szeged) follows Attila Kovács as General Secretary, and Csaba Szántay jr. (Gedeon Richter Ltd.) and Tamás Kiss (University of Szeged) will act as vice-presidents. The General Assembly was closed by an award ceremony.

Ágota Tóth, atoth@chem.u-szeged.hu

Congratulations to twelve IUPAC distinguished women

The twelve awardees of the IUPAC 2015 Distinguished Women in Chemistry or Chemical Engineering have now been revealed. The awardees have been selected based on excellence in basic or applied research, distinguished accomplishments in teaching or education, or demonstrated leadership or managerial excellence in the chemical sciences.

EuCheMS congratulates all the awardees and is very pleased to see that EuCheMS supported nominees have received the award. The award ceremony took place during the IUPAC World Chemistry Congress in Busan, Korea, in August. A list of the awardees is published on the IUPAC website.

EuCheMS, secretariat@euchems.eu

www.iupac.org/news

Talking about energy

The Energy Science & Technology International Conference and Exhibition (EST) took place in Karlsruhe, Germany, from 20 to 22 May. Over 600 participants from all over the world attended the event. EST 2015 merged similar existing initiatives at the European level, such as the European Energy Conference (E2C) series, co-organised by EuCheMS since 2010. The key idea was to make a single big European event with the highest possible degree of multidisciplinarity – e.g. chemistry, physics, engineering, biology and other disciplines – in order to promote a tighter interaction between the academic and the industrial sector and to discuss both scientific and technological aspects of the ongoing energy transition.

Plenary lectures at EST 2015 were focused on key technological drivers of the energy mix transformation and on the decarbonisation of the energy system, in the light of the last IPCC report. A public evening lecture by Dieter Zetsche, Chairman of the Board of Directors of Daimler and Head of Mercedes-Benz Cars, was attended by over 1000 people and outlined the future of car transportation.

Chemists gave a crucial contribution to the success of EST 2015, particularly in the area of photovoltaic and magnetic materials, hydrogen production and storage, fuel cells and biomass conversion.

Nicola Armaroli, nicola.armaroli@isof.cnr.it

Prize to Malcolm L. H. Green

The first European Prize for Organometallic Chemistry was awarded to Malcolm L. H. Green, Emeritus Professor at Oxford University. This prize of 5000 Euro was created by the EuCheMS Division of Organometallic Chemistry and is to be awarded every two years for a single piece of outstanding work or for a body of outstanding work primarily done in Europe. The Prize ceremony and a lecture by the winner took place on the occasion of the 21st European Conference on Organometallic Chemistry in Bratislava in July. *kjs/EuCheMS*

European Employment Survey

The report of the European Employment Survey for Chemists and Chemical Engineers 2013 was published in *Chemistry – A European Journal*. It provides insights into the structure of the European chemical workforce and in variations in salaries between several European countries. The shares of graduation disciplines and the most targeted qualification levels vary distinctly among countries.

The report also provides a comparison between the preferences of chemical graduation disciplines and the availability of jobs in these disciplines. The importance of employer sectors and industry sectors varies among European countries. The data provide important clues for the chances in the job market in particular countries and in Europe as a whole.

Another topic investigated was continuing education. It turned out that most chemists never attended a single event in continuing education, whereas a particular group repeatedly participates.

The results of the survey were presented at a EuCheMS event in Brussels in June. The report is available at http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201501364/full.

Reiner Salzer, reiner.salzer@tu-dresden.de

New initiative for antibiotics

The Community for Open Antimicrobial Drug Discovery (CO-ADD) is a not-for-profit initiative funded by the Wellcome Trust and The University of Queensland (Australia). The goal is to combat the superbug crisis. CO-ADD performs primary antibacterial screening for academic research groups from anywhere in the world for free. Only 1 mg of a compound is needed for the screening, the researchers do not need to provide a structure. No claim on results or Intellectual Property is made.

In the primary screening CO-ADD tests against five key pathogens. In case of any hits here the compound can be re-screened against more specific panels. With hits the organisation back screens for cytotoxicity.

Participants have 18 months to publish or patent positive hits. After this period the data will be made available in an open access database.

Ruth Neale, r.neale@imb.uq.edu.au
info@co-add.org, www.co-add.org

Events 2015

2 – 4 September 2015, Évora, Portugal
International Symposium on Synthesis and Catalysis
http://isysycat.eventos.chemistry.pt

5 – 9 September 2015, Camerino, Italy
International School of Organometallic Chemistry
http://d7.unicam.it/isoc

6 – 10 September 2015, Bordeaux, France
EuroAnalysis 2015, www.euroanalysis2015.com

9 – 12 September 2015, Aveiro, Portugal
Chemical Biography in the 21st Century
http://10ichc-2015.web.ua.pt

13 – 17 September 2015, Beaune, France
6th EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands
www.nligands2015.com

14 – 18 September 2015, Catania, Sicily, Italy
1st European Conference on Physical and Theoretical Chemistry, www.1stphyschemconference.unict.it

20 – 24 September 2015, Kalamata, Greece
IMA 2015, Instrumental Methods of Analysis – Modern Trends and Applications, www.ima2015.teikal.gr

21 – 25 September 2015, Gdansk, Poland
58th Annual Scientific Meeting of the Polish Chemical Society, http://ptchem2015.ug.edu.pl

22 – 25 September 2015, Leipzig, Germany
15th EuCheMS International Conference on Chemistry and the Environment, www.icce2015.org

4 – 7 October 2015, Lisbon, Portugal
2nd EuCheMS Congress on Green and Sustainable Chemistry, http://web.ist.utl.pt/~jnlopes/2EUGSC

13 – 16 October 2015, Madrid, Spain
Euro Food Chem, www.ictan.csic.es/eurofoodchem2015

21 – 23 October 2015, Braga, Portugal
20th Meeting of the Portuguese Electrochemical Society, www.quimica.uminho.pt

European Young Chemists' Network elected a new board

Every year, the European Young Chemists' Network (EYCN) organises a meeting with all representatives from its member societies: the EYCN Delegates Assembly. This year, it took place from 8 to 12 April in Berlin, Germany. Prior to this 10th Delegates Assembly, a one-day chemistry symposium was celebrated. During the assembly a new board (photo) was elected. The new board thanks their predecessors for all the work during their mandate and for their unconditional support. The new board also thanks Evonik Industries for signing a contract that makes them partners of EYCN for the next three years.

Fernando Gomollón-Bel, chair@eycn.eu

The new board (from left): Michael Terzidis (Greece, Network team), Oana Fronoiu (Romania, Scientific team), Fernando Gomollón-Bel (Spain, Chair), Camille Oger (France, Secretary), Sarah Newton (UK, External Communication) and Emanuel Ehmki (Austria, Membership team).

EuCheMS Newsletter

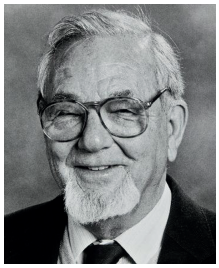
Newsletter coordinator: Karin J. Schmitz
Please send all correspondence and manuscripts to k.schmitz@gdch.de
Editors: Wolfram Koch (responsible), Karin J. Schmitz, Uta Neubauer, Frankfurt am Main
Advisory board: David Cole-Hamilton (President), Ulrich Schubert (Vice-President), Franco De Angelis (Treasurer), Eckart Ruehl (Member of Executive Board), Nineta Majcen (Secretary General).
Layout: Jürgen Bugler, Frankfurt am Main
Production: Nachrichten aus der Chemie

Publisher: Gesellschaft Deutscher Chemiker on behalf of EuCheMS
Postfach 900440
D-60444 Frankfurt am Main
EuCheMS General Secretary:
Nineta Majcen, Rue du Trône, 62
1050 Brussels, Belgium
secretariat@euchems.eu
www.euchems.eu
EuCheMS is registered as "Association internationale sans but lucratif" (AISBL, international non-profit association), AISBL-Registered office: Rue du Trône, 62, 1050 Brussels, Belgium

Vegyészkalendárium

Pap József Sándor rovata

ARTHUR JOHN BIRCH (1915. AUGUSZTUS 3.) – MAGÁNYOS FARKAS. Apja igazi világjáró, Kanada, Fidzsi és Új-Zéland után Sydneyben telepedik le, ahol tasmaniai feleségével egy gyermekük születik. Ezt a gyermeket hidegen hagyja az iskola, többnyire csak lézeng a tanórák között.



Más a helyzet a természettudományokkal. Apja (egy nagynéni örökségét felhasználva) könyveket és kísérleti felszerelést vásárol számára, így otthon, magától fejleszti szerves kémiai ismereteit. Felveszik a sydneyi műszaki főiskolára, ahol a követelményeknek megfelelően teljesít, de eközben saját ötletein dolgozik. A kémia kezdetben inkább szépérzékét érinti meg. Ausztrália növényvilágának gazdag illatai és színei, az eukaliptusz- és fűfafélék furcsa színű gyantái táplálják kíváncsiságát. Tudományos karrierje során már inkább intellektuális vágya kerekedik felül: először megérteni, először megmutatni a világnak az általa felismert törvényszerűségeket.

A Sydneyi Egyetemen eredményeivel tandíjmentességhez jut, s hogy eltartsa magát, dolgozik. Illusztris vetélytársai és egyben barátai között van Cornforth és Nyholm, valamint legnagyobb „riválisa”, Rita Harradence (később Cronforth felesége), akivel 1936-ban megosztva kapják meg az egyetem kémiai díját. Negyedéves korában kapcsolódik be J. C. Earl kutatásaiba. Earl egy eukaliptuszolajjal teli üveggel hagyja kettesben, mielőtt féléves tanulmányútra indul. Az eredmény öt cikk az olajban található természetes monoterpénekről és egy PhD-ösztöndíj Angliába, Ausztráliában ugyanis a ’30-as években nem lehet doktorálni.

Hosszú hajóút után érkezik meg Oxfordba, a háború előszobájában toporgó britekhez. Birch vegyes érzelmekkel lát munkához, aminek több oka is van. Egyfelől minden vegyszerhez jóformán azonnal hozzáfér, s ez jó, másfelől azonban az oxfordi laborok felszerelése csapnivaló. Ráadásul témavezetője, Robert Robinson spekuláción alapuló témával bízza meg, mely szerint a lipidmembránok zsírsavmolekulái a β-szénatomon kétszeresen elágaznak, ami ugyan megér egy PhD-fokozatot, de Birch soha többé nem akar zsírsavakkal foglalkozni. Annál többet kell sorbaállással és húskonzervekkel: a háború sújtotta szigeten nem túl változatos az étrend, de legalább Oxfordot nem éri bombázás.

Robinsont a háborús megbízások elvonják csoportjától. Ez kedvező fordulat Birch, az önfejű kutató számára. Legfontosabb felfedezését 1943-ban teszi. Cornforth 1941-es publikációját alapul véve, amely szerint metoxi-naftalin nátriummal, forró etanolban redukálható, a jóval inertebb benzolt veszi célba. Talál egy cikket, ahol Wooster cseppfolyós ammóniában lejátszódó redukciókról számol be. Ennek nyomán születik meg a Birch-redukcióként ismert eljárás. Első alanya az anizol, amelynek redukciós termékét dinitro-fenil-hidrazin sósavas oldatával reagáltatva narancsvörös hidrazonhoz jut. Az eredeti termék tehát nem lehet más, mint a 2-es és 5-ös helyen hidrogénezett metoxi-ciklohexadién. Nagyjából ezzel egy időben a hadsereg megbízásából férfi nemi hormonok analógjait állítja elő, miközben ICI-ösztöndíjat kap. Sikere bonyodalmat okoz, mivel az ICI kartell egyezménye miatt a vizsgálatok csak egy másik csoporttal közösen folytathatók. Új módszerével Birch ösztronból nandrolont képes előállítani, de számos más hormonhatású szteroidot is szintetizál. A hormonok más területen is szerephez jutnak: röviddel távozása előtt vezeti oltár elé Jessie Williamst, akivel öt gyermeket nevelnek fel hosszú házasságuk során.

Az ezt követő cambridge-i (’49–’52) és sydneyi (’52–’55) évek legfontosabb eredménye kétségtelenül az „acetát-hipotézis”, mely szerint számos növényi fenoloid ecetsav építőegységekből állhat össze. A poliketid-szintézisként ismert folyamatról szóló cikkét Angliában visszadobják, mivel nem tartalmaz kísérleti bizonyítékokat, így 1953-ban az *Australian Journal of Chemistry*ben jelenik meg. Radioizotópos nyomjelzéses technikával, ^{14}C-acetáttal 1955-re kísérleti bizonyíték is kerül a feltételezés mellé. A frissen alakult ausztrál akadémia 1954-ben tagjává választja, állásajánlatot is kap, Birch azonban torkig van a hazai felsőoktatással, hallgatóival együtt 1956-ban Manchesterbe költözik. Nincs egyedül, kor- és pályatársai közül sokan ezt az utat választják. Távozásuk sajtóvisszhangja végül szerepet játszik az ország felsőoktatásának átszervezésében. Birch önéletrajzi visszaemlékezésében száraz humorral ezt a lépését nevezi meg az ausztrál tudományos felsőoktatásért tett legnagyobb hozzájárulásaként.

Az ötvenes években a Sydneyi Egyetem két hallgatója egy zsúfolt villamoson tartott hazafelé. Egyikük az új szerveskémia-professzor felől érdeklődött, mire a másik áradozni kezdett: „Az aztán remek srác, képzeld, még szexhormonokkal is foglalkozik. Mire hátulról egy csendes hang: „Nem árt óvatosnak lenni, fiúk. Sosem tudhatjátok, hogy ki ül mellettetek ezen a villamoson.”

A közbeszóló, mondani sem kell, Birch volt, akit rendkívüli módon szórakoztatott az eset. Nem úgy a halálra vált hallgatókat. A történet később a laborban folytatódott. A hallgatók egyike, Rodney Rickards (később maga is kémiaprofesszor) csatlakozott Birch csoportjához, sőt, Manchesterbe is követte.

Kísérleti biokémiai kutatásai Manchesterben bontakoznak ki. Radioizotópos nyomjelzéssel kombinálva a mikroorganizmusok metabolikus folyamatai új eredményeket hoznak. Egyik volt cambridge-i PhD-hallgatójával, Herchel Smithszel is újra kapcsolatot épít, nemi hormonokat szintetizálnak, de Smith magának szeretné fenntartani a területet (a ’70-es évekre ebből olyan vagyont szerez, ami 2001-es halála után 100 millió fontra rúg, és jórészt volt egyetemeire hagyja). Birch a redukciós reakció kiterjesztésével foglalkozik. Ennek eredménye a vas-karbonilok gyűrűs diénkomplexeivel végzett szintetikus eljárások széles palettája. Manchesterben szerencsés helyzetben vannak: a szerves analitikában egyre nagyobb teret nyerő tömegspektrometrométereket épp a szomszédban gyártja az AEI, de az egyetem Varian NMR-készülékeket is beszerez. Birch nemzetközi szerves kémiai szaktekintéllyé válik, ideje nagy részét konferenciákon, külföldi szakmai utakon tölti. Így kerül újra kapcsolatba szülőhazájával, ahol az Australian National University titkos tervének részese lesz. A „Project C” során kémiai kutatóközpontot kell tervezniük. Az ANU támogatásával doktoranduszokat és posztdoktori hallgatókat toboroznak, s 1967-ben útjára indítják az intézményt.

Birch egészen 1980-as nyugdíjba vonulásáig Canberrában marad és leginkább vas-trikarbonilon alapuló redukciókat fejleszt. Már ha éppen ideje engedi, mert leggyakrabban vezetői elfoglaltságai, meghívások és nemzetközi szervezetekben betöltött tisztségei kötik le idejét. Épp 80. születésnapja előtt jelenik meg *To see the obvious* címmel önéletrajzi munkája. 1995. december 8-án, hosszas betegség után éri a halál. Carl Djerassi szavaival Birch „világot járó magányos farkas” volt. (Forrás: R. W. Rickards, J. Cornforth, *Historical Records of Australian Science*, vol. 18, no. 2, 2007.)

Prof. Dr. Patonay Tamás

2015. június 23-án, 63. életévében elhunyt Dr. Patonay Tamás egyetemi tanár, aki közel negyven évig volt a szerves kémiai tudományok művelője és oktatója a Debreceni Egyetemen. Tanítványai között legendás volt humora, közvetlen stílusa. Emberszeretete, rugalmassága, nagy munkabírása miatt megbecsülésnek örvendett. Gyakorlatias gondolkodásmódja a legváratlanabb problémák megoldásában is segítségére volt, és szép, elegáns megoldásokat eredményezett nemcsak a szerves kémiában, hanem számos egyéb tevékenységében is. Nagyon szeretett spatulát ragadni, és kiszakadva az adminisztratív teendők véget nem érő papírhegyei közül odaadással művelte az általa oly nagyra becsült szintetikus kémiát. Rendkívül jó felkészültsége mellett igazán hamar megfertőzte tanítványait is a szakma szeretetével. Őszinte vonzódása a természethez és a természetjáráshoz példaértékű, egész életében szerette és tisztelte a hegyeket. Ezt a szeretetét, a hegyre menés izgalmát is teljes szívéből megosztotta barátaival, sok tanítványára is átörökítette. Minden tudását átadta úgy, ahogyan azt ő is kapta mestereitől. Nevelt, tanított a szó igaz értelmében, ugyanakkor valódi csapattárs volt. Olyan ember, akire csak azt mondták: Tanár Úr. A tanszéki kollektíva vezetőjeként bölcsességével, tapasztalatával folytatta elődei értékes munkáját.

Patonay Tamás nemzetközileg elismert alapkutatásokat végzett a preparatív szerves kémia területén, ehhez iskolateremtő oktató-nevelő munka, valamint áldozatkész tudományszervező közéleti tevékenység párosult.

1971-ben kezdte meg tanulmányait az akkori Kossuth Lajos Tudományegyetemen, ahol 1976-ban kapott okleveles vegyész diplomát. 1973-ban néhai Bognár Rezső akadémikus kutatócsoportjába, így a professzori laborba került a Szerves Kémiai Tanszéken. 1980-ban egyetemi doktori címet, 1988-ban kandidátusi, 2002-ben MTA doktori fokozatot szerzett. 2004-től a Debreceni Egyetem egyetemi tanára, 2008-tól a Szerves Kémiai Tanszék vezetője volt. A tanszék vezetésén túl a Természettudományi és Technológiai Kar több tanácsában és bizottságában vállalt feladatot, valamint dékánhelyettesként is segítette a kar munkáját. 2009-től betöltötte a Természettudományi Doktori Tanács elnöki tisztét, illetve a Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Tudományok Osztályának doktorképviselője volt. 2014-ben választották meg az MTA Szerves és Biomolekuláris Kémiai Bizottsága titkárává. Hosszabb-rövidebb tanulmányutakon a világ számos egyetemén is látogatást tett, melyekből eredményes tudományos kooperációk születtek. Ezek közül kiemelkedik a Würzburgi Egyetemmel 1991–1998 között kialakított együttműködés, az amerikai Új-mexikói Állami Egyetem Szerves Kémiai Tanszékén (Las Cruses, USA) 1993-tól eltöltött egy év, valamint az utóbbi években a Rostocki Egyetemmel folytatott közös kutatás.

Kutatási tevékenysége felölelte a kén- és oxigéntartalmú heterociklusos vegyületek, például a flavonok, kromonok, kumarinok és származékaik szintézisét; a 2-azido-, 2-halogén- és 2-szulfonil-oxi-ketonok kémiáját; új típusú oxidáló- és redukálószerek alkalmazását a heterociklusos vegyületek körében; aszimmetriás oxidációk és redukciók tanulmányozását. Vizsgálta szén-szén, illetve szén-nitrogén kötés kialakításának lehetőségét modern, fémkatalizált keresztkapcsolási reakciók alkalmazásával oxigéntartalmú heterociklusokon. Tudományos közleményeinek száma több mint 160, amely magába foglal több szabadalmat is. Ezek szakmai értékét a közel 900 független idézet egyértelműen jelzi.

Patonay Tamás aktív résztvevője volt hazai és nemzetközi szakmai egyesületek és társaságok tevékenységének (Magyar Kémikusok Egyesülete, American Chemical Society, American Chemical Society Hungary Chapter, European Chemical Society, International Society of Heterocyclic Chemistry, MTA Heterociklusos Kémiai Munkabizottság, Society of Combinatorial Sciences), konferenciák szervezésének és folyóiratok szerkesztésének (*European Journal of Organic Chemistry* – Advisory Board, *Trends in Organic Chemistry* – Editorial Advisory Board).

Sikerekben, eredményekben gazdag életpályáját számos kitüntetéssel ismerték el: Felsőoktatási Tanulmányi Érdemérem (1977), Kiváló Munkáért (1986), FUNDP Ösztöndíj (1996), Széchenyi Professzori Ösztöndíj (1998), Novicardin-díj (2006), Akadémiai-díj (2015).

Az elmúlt négy évtized alatt széles körű szerves kémiai oktatómunkát végzett, és folyamatosan készített egyetemi jegyzeteket. Vezetésével több PhD-értekezés készült, számos diplomamunka, szakdolgozat mellett. Mindig támogatta a hallgatók tudományos diákköri munkáját, amivel lehetőséget nyitott a kutatás élményének, szépségének megismerésére, továbbadására. Nemcsak a legfiatalabb növendékei számára, de a felnőtté lett egykori tanítványoknak is képes volt útravalóval szolgálni, mindig tartogatott egy-két jó szót a hozzá bekopogtató kollégáknak.

Tanár Úr most elment, de a hegyek várnak rá… Távozásával családjában, tanítványai, barátai, a Debreceni Egyetem oktatói és dolgozói körében, valamint a szerves kémiai társadalomban nagy űrt hagyott maga után. A Debreceni Köztemetőben búcsúztattuk 2015. július 7-én. Emlékét megőrizzük.

Kiss Attila, Kónya Krisztina, Somsák László

Prof. Ing. Mikuláš Matherny DSc.

1930. 07. 03. – 2015. 06. 22.

Június 22-én elhunyt Matherny Miklós, a Kassai Műszaki Egyetem *emeritus professora,* a szlovákiai kémikustársadalom kimagasló egyénisége, Magyarországon az Egyetemes Kultúra Lovagja címmel kitüntetett, nemzetközileg elismert tudós spektrokémikus kollégánk, jó barátunk.

Matherny professzor Eperjesen született 1930. július 3-án, s ott érettségizett az ismert evangélikus kollégiumi gimnáziumban. 1952-ben Pozsonyban, a Szlovák Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Karán szerzett diplomát. Szakmai pályafutását a Comenius Egyetem Természettudományi Karának Ásványtani és Kristallográfiai tanszékén kezdte, 1960-ban politikai okok miatt Kassára távozott az ottani Műszaki Egyetem Kohómérnöki Karának Kémia tanszékére, és a tanszéket egészen 1973-ig vezette. Emellett a kassai Šafárik Egyetem Természettudományi Karán is vállalt feladatokat, megszervezte és 1973-ig vezette is az Analitikai Kémiai tanszéket. Céltudatosan választotta meg munkatársait, és kiépítette azt a munkahelyet, amelyet úgy hazai, mint nemzetközi szinten „a kassai színképelemző iskola" néven tartanak számon. Tanítványait a Faradaytől származó jelszóval „work – finish – publish" buzdítja, s ez a jelszó Matherny professzor úr életén át tartó célkitűzése is. Céltudatosan építette ki a nemzetközi kapcsolatokat is, elsősorban magyarországi és németországi kollégákkal. A Magyar Spektrokémiai Társaság és az MTA Spektrokémiai Munkabizottsága rendezvényeinek számos alkalommal volt előadója, munkatársait rendszeresen küldte magyarországi kutatóhelyekre dolgozni, s többször fogadott tanszékén magyar kollégákat kutatási együttműködések keretében. A magyar–szlovák tudományos együttműködés megvalósításában elért eredményeiért 2001-ben a Magyar Spektrokémiai Társaság *Török Tibor-emlékéremmel* tüntette ki.

Kiemelkedő munkát végzett a Szlovák, illetve a Csehszlovák Tudományos Akadémia keretében működő tudományos társaságokban is. 1962-ben megalapította a Szlovák Kémiai Társaság Kelet-szlovákiai Bizottságát és ezt egészen 1990-ig vezette. E tevékenységéért a társaság aranyérmével (1990), illetve tiszteletbeli tagsággal (1995) jutalmazta. Aktívan részt vett a Csehszlovák színképelemző társaság munkájában, ezért a *Joanes Marcus Marci-emlékéremmel*, valamint a Szlovák Színképelemző Társaság *Konkoly-Thege-emlékérmével* tüntették ki.

Matherny professzor úr tudományos és egyetemi oktatói tevékenysége elsősorban az analitikai kémia, a színképelemzés és a kemometria területein érvényesült, eredményeit közel 250 tudományos közleményben ismertette. Tizenhat kandidátusnak volt tudományos vezetője, munkatársai közül ketten a kémiai tudomány doktorai, hárman az analitikai kémia egyetemi tanárai lettek. 1998-ban Matherny professzor úr nyugdíjba vonult, de *professor emeritusként* 2013-ig aktív szerepet vállalt a tanszék tudományos tevékenységében. A Kassai Műszaki Egyetem 50 éves jubileuma alkalmából az egyetem aranyérmével tüntették ki.

Magyarországi kollégái és barátai szeretettel őrzik emlékezetükben Matherny Miklós professzort, aki életművével példát adott a határokon átívelő együttműködés alkotó megvalósítására.

Flórián Károly, Heltai György

A Kassai Műszaki Egyetem

A pozsonyi Comenius Egyetem

A kassai Pavol Jozef Šafárik Egyetem

TÚL A KÉMIÁN

Elefántcsont-csempészet és genetika

Afrika egyes részein olyan méreteket öltött az illegális elefántcsont-kereskedelem, hogy az ormányosokat már-már a kihalás veszélye fenyegeti. Ezért nagyon fontos, hogy nemzetközi erőfeszítésekkel küzdjenek az orvvadászok és a zugkereskedők ellen, s ehhez tudósok is hozzájárulhatnak. Ennek jegyében genetikai analízist végeztek 1996 és 2014 között a hatóságok által világszerte lefoglalt 28 nagyobb, egyenként fél tonnát meghaladó illegális elefántcsont-szállítmányon. Az eredményekből egyértelműen beazonosítható a földrajzi terület, ahol a tiltott vadászat folyt. A tapasztalatok azt mutatták, hogy a csempészett csontok nagy része a teljes vizsgált időszakban mindössze két központból származott, a 2006 után lefoglalt szállítmányok pedig mind erről a két helyről indultak. Így aztán az orvvadászat elleni küzdelmet is erre a két területre érdemes összpontosítani – és persze közben remélni, hogy az orvvadászok nem olvassák a tudományos szakirodalmat.

Science 349, 84. (2015)

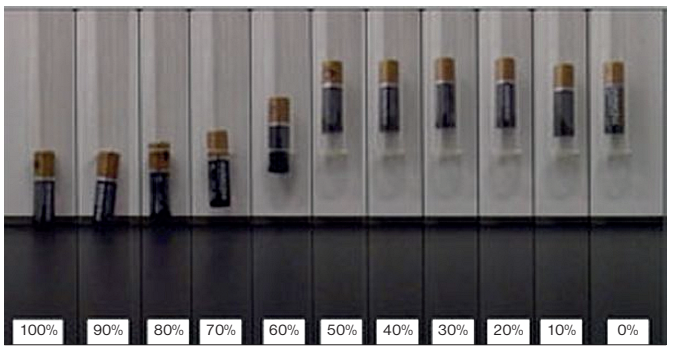
BICENTENÁRIUM

Vauquelin: Kohlensäure-Gehalt mehrerer Mineralien, und Analyse des Arragonit. *Annalen der Physik*, Vol. 51, pp. 98–103. (1815. szeptember)

Louis Nicolas Vauquelin (1763–1829) francia kémikus és gyógyszerész volt. Pályája kezdetén Fourcroy hercegének, Antoine François-nak a laboratóriumában volt kisegítő. Később önálló tudóssá vált, közel 400 tudományos cikket publikált. A Párizsi Egyetem professzora és a Svéd Királyi Akadémia tagja volt, nevéhez fűződik a berillium és a króm elemek felfedezése. Legismertebb művének címe „Manuel de l'essayeur" (Az elemző kézikönyve).

APRÓSÁG

A Föld óceánjai kb. 4,5 milliárd tonna uránt tartalmaznak a stabil és inert $Ca_2[UO_2(CO_3)_3]$ komplex formájában, amelynek 11 kristályvizet tartalmazó szilárd formáját *liebegit*nek hívják.

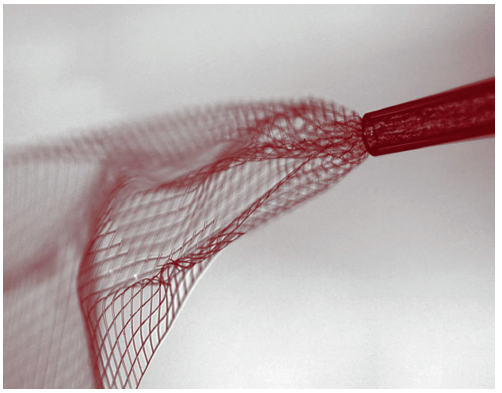


Pattogó elemek

Az AA méretű ceruzaelemek egy érdekes új tulajdonságára derítettek fényt a közelmúltban: leejtés után a visszapattanás magasságából következtetni lehet arra, hogy mennyire van feltöltve az elem. Használat közben az elem cinktartalma cink-oxiddá alakul, amely a kiindulási fém rugalmasságával éles ellentétben meglehetősen rideg, kerámiaszerű fázist képez. Egy elem visszapattanási tulajdonságaira jellemző kvantitatív mennyiség, a restitúciós együttható meghatározásával a feltöltöttség mértékét nagyjából annyira pontosan lehet meghatározni, mint a sokkal költségesebb energiadiszperzív röntgendiffrakciós mérésekkel.

J. Mater. Chem. A 3, 9395. (2015)

Injekcióban beadható mikroelektronika



A Harvard Egyetem egyik laboratóriumában olyan ultraflexibilis elektronikai eszközöket készítettek, amelyek akár egy injekciós tűvel is bejuttathatók az emberi szervezetbe vagy más, kis helyre. Az összecsomagolt állapotban 100 mikrométernel is kisebb gombolyag megfelelő helyen akár centiméteres nagyságú hálóvá képes kinyílni, elektromos vezető sajátságai pedig tervezhetők, így áramkörök létesíthetők rajta. Ez sokban segítheti az agy aktivitásának kutatását, de a tervezett alkalmazások nem korlátozódnak *in vivo* módszerekre: polimerszerkezetekben kialakuló feszültségek is detektálhatók ily módon.

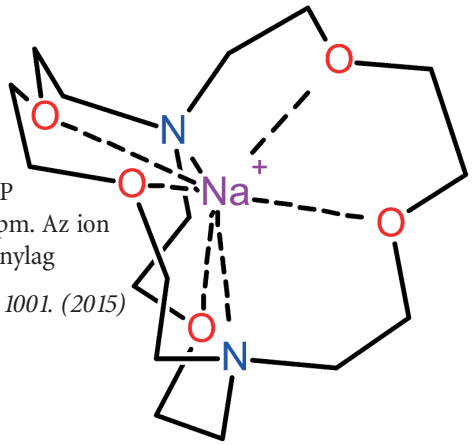
Nat. Nanotech. 10, 629. (2015)

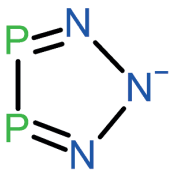
Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg.mkl@science.unideb.hu.

A HÓNAP MOLEKULÁJA

A nátrium-kriptofix-221-difoszfatriazolát só ($C_{16}H_{32}N_5NaO_5P_2$) a $P_2N_3^-$ összetételű heteroaromás ion első ismert előfordulása. Az előállításához a $(C_{14}H_{10})_2P_2$ molekulát reagáltatták azidionnal (N_3^-) tetrahidrofuránban, 70 °C-on. A sík szerkezetű ionban a P–P kötéstávolság 207 pm, a P–N 169 pm, az N–N távolság pedig 131 pm. Az ion a deprotonált pirrollal izoelektronos, benne a negatív töltés viszonylag egyenletesen oszlik el az öt atom között.

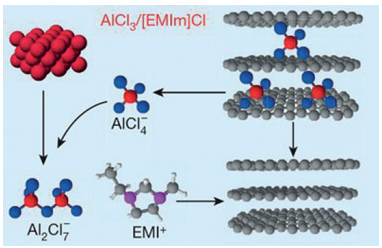
Science 348, 1001. (2015)





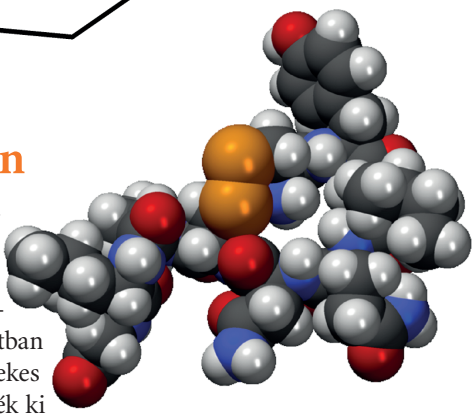
Szupergyorsan tölthető alumíniumakkumulátor

A közeljövőben jelentős kihívója akadhat a mára szinte egyeduralkodónak számító lítiumakkumulátoroknak. Az új elemben a lényegi töltéstárolást alumíniumatomok és alumínium(III)ionok közötti átmenet végzi. Már korábban is készítettek újratölthető alumíniumelemeket, de a belőlük nyerhető feszültség általában csekély volt (kb. 0,5 V), és élettartamuk sem haladta meg a száz töltési-kisütési ciklust. Az új elem kulcsa a speciális eljárással készített grafithab katód. Így a cellafeszültség 2,0 V közelébe növekedett, az elem első használatkor 98%-os Coulomb-hatékonysága pedig 7500 töltési-kisütési ciklus után sem változott lényegesen, ami még a jelenlegi lítiumakkumulátorokénál is hétszer jobb. Ráadásul az új elem mindössze egy perc alatt teljesen feltölthető.



Nature 520, 324. (2015)

Egéroxitocin

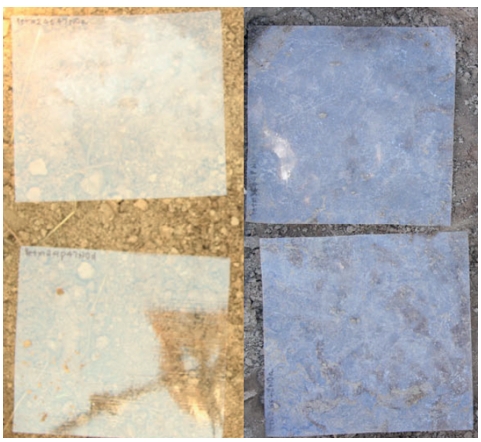


Az oxitocin peptidhormonnak a társas viselkedés kialakításában játszott szerepe már régóta ismert. A közelmúltban végzett kutatások érdekes új adalékkal egészítették ki az eddigi ismereteket. A magukat veszélyben érző kisegerek ultrahangot adnak ki, amely hatására az anya a keresésükre indul. Az ilyenkor kiadott ultrahang jelentését olyan nőstény egerek is megtanulják, amelyek még nem anyák – de ők csak viszonylag hosszú idő alatt. Ezeknél az egereknél azonban az oxitocin adagolása lényegesen lerövidíti a tanulási időt. Más, hasonló eredményű kísérletek is ismeretesek, s ezek alapján azt gondolják, hogy oxitocintartalmú orrspray-k segíthetik majd az autisták beilleszkedését a társadalomba.

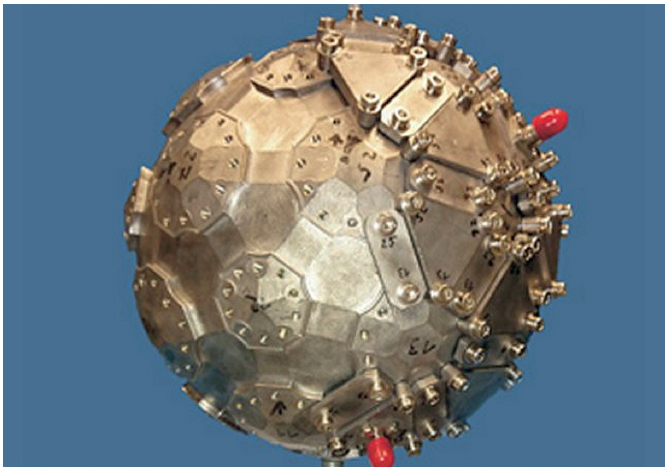
Nature 520, 499. (2015)

Biodegradábilis! Vagy mégsem?

A természetben lebomló, vagyis biodegradábilis anyagok gyártása nagyon nagy üzletté vált az utóbbi időben. A forgalmazók állításainak árnyalásához járul hozzá amerikai kutatók nemrégiben publikált munkája, amelyben öt különböző „lebomlássegítő” anyaggal adalékolt polietilén és polietilén-tereftalát mintákat vizsgáltak valós környezeti körülmények között. A tesztek során ezeket fél évig egy szemétlerakóban tartották, illetve három évig földben elásva. Az eredmények egyértelműen negatívaknak adódtak: az adalékolt minták bomlása nem volt kimutathatóan gyorsabb a referenciának használt szokásos műanyagokénál.



Environ. Sci. Technol. 49, 3769. (2015)



Fullerénszimulátor

Német tudósok 16 cm átmérőjű, ólommal bevont fullerénmodellt készítettek azért, hogy jobban megértsék a molekula alakja és elektromos tulajdonságai közötti összefüggéseket. A gömb az ólombevonat miatt 7 K hőmérséklet alatt szupravezetővé válik. A futball-labdára hasonlító eszközön a szénatomok helyére bemélyedéseket is készítettek, így a mikrohullámú tartományban rezonátorként viselkedik. A rezonanciafrekvenciák meghatározása jelentős előrelépést hozott a fullerének tulajdonságainak megértésében.

Phys. Rev. Lett. 115, 026801. (2015)

TUDOMÁNYOS ÉLET

5th Zing Bionanomaterials Conference

Carvoeiro, Portugália, 2015. április 25–28.

A *5th Zing Bionanomaterials* nemzetközi konferencia kiváló lehetőséget biztosított arra, hogy kutatásainkat széles körű, szakértő közönség előtt mutathassam be. A konferencia helyszíne a Portugália déli partján található festői kisváros, Carvoeiro volt. A szakmai rendezvényre a Tivoli Hotelben került sor, melynek teraszáról csodálatos kilátás nyílt az óceánra, így igen baráti hangulatú szakmai diszkussziókat folytathattunk a szekciók közötti kávészünetekben.

A konferencián 11 egymást követő szekcióban összesen 56 előadást tartottak meg, melyek széles körűen bemutatták a biológiai hatással rendelkező kolloid rendszereket. A bemutatásra kerülő nanorészecskék két nagy csoportot alkottak, a mágnesesek közé tartozott a magnetit, a maghemit és a kobalt-ferrit, a nem mágneses anyagok között pedig például az arany/ezüst/grafén-oxid nanorészecskék és a szénnanocső is szerepelt. Bár a második anyagcsoport távolabb áll az SZTE Vizes Kolloidok Kutatócsoportjában kutatott mágneses folyadékoktól, a bemutatott biológiai módszerek további új irányokat jelölhetnek ki a mintáink jellemzéséhez.

A konferencián 15 perces előadást tartottam *Potentials of chondroitin-sulfate-A-coated core-shell magnetite nanoparticles for biomedical uses* címmel. A prezentációmban a természetes eredetű kondroitin-szulfát-A-val fedett, mag-héj szerkezetű magnetit nanorészecskékre vonatkozó eredményeinket mutattam be. Fizikai kémiai vizsgálatokkal jellemeztük az adszorpció folyamatát, a részecskék kémiai és kolloidstabilitását. A mágneses folyadék citotoxicitására, hemokompatibilitására, diagnosztikai célú MRI kontrasztfokozó hatására és terápiás célú hipertermiás hatékonyságára vonatkozó eredményeinket is bemutattam. Az előadásomhoz kapcsolódó szakmai diszkusszió során felmerült a kereskedelmi forgalomban beszerezhető poliszacharidok tisztasága és a mágneses magok variálásában rejlő jövőbeli lehetőség is.

Az előadások magas szakmai színvonalat képviseltek; három előadót szeretnék kiemelni. *Nguyen T. K. Thanh* a mágneses részecskék előállításával kapcsolatban nagyon informatív, sokrétű előadást mutatott be *Synthesis of Au nanorods and magnetic nanoparticles for biomedical applications* címmel. *Quentin Pankhurst* prezentációja *(Translational R&D in healthcare biomagnetics)* igen gondolatébresztő volt, iránymutatással szolgálva a kutatólaboratóriumokban elért eredmények tényleges orvosbiológiai/kereskedelmi hasznosíthatóságáról. *Kevin O'Grady* pedig egy lehengerlő stílusú előadásban hívta fel a figyelmet a mágneses hipertermiás mérések során elkövetett tipikus kísérleti és kiértékelési hibákra.

A konferencia kiváló lehetőséget biztosított arra, hogy magas színvonalú szakmai közönség előtt mutathassam be tudományos munkámat, a konferencián elhangzott előadások és a résztvevőkkel folytatott szakmai diszkusszió pedig hozzájárult a tudományos ismereteim bővítéséhez és jövőbeli kooperáció kialakításához is. Az anyagi támogatásért ezúton szeretnék köszönetet mondani a Magyar Kémikusok Egyesületének.

Tóth Ildikó

14. Magyar Magnézium Szimpózium

A rendezvényen 12 előadás hangzott el és 13, kivitelben és tartalomban magas színvonalú posztert mutattak be. Az MMT jelenlegi elnöke referátumában a mindennapi betegellátásban széles körben használt gyógyszerek rosszindulatú daganatokat megelőző, növekedést és az áttétképződést gátló, epidemiológiai tanulmányokon alapuló hatásait ismertette, kísérletet téve a szubcelluláris mechanizmusok megjelölésére. A trombocita-aggregációt gátló acetil-szalicilsav, ticagrelor, dipiridamol (adenozin-receptorgátló és antioxidáns is és gátolja az extracellulárisan szabályzott protein-kináz [ERK1/2] jelátviteli utat) esetében a kóros aggregáció okozta trombocita növekedési faktor felszaporodásának gátlása vezethet a daganatképzés gátlásához. A II-es típusú, nem inzulinhiányos cukorbetegségben a metformin antioxidáns és antimitogén hatásai jótékonyak, kivéve természetesen a hasnyálmirigyrákot, amelyben a daganatban magában igen fokozott antioxidáns-szint van. A metformin emellett az mTOR protein-kinázt is gátolja és így közvetve HER-2 receptor- és ERK jelátvitel-szabályozó. A D-vitaminhoz szerkezetileg hasonló sztatinok hatása érthető a Mg-felszívódás fokozása miatt. Elméleti lehetőség az életkorral az emberben csökkenő telomeráz-aktivitás növelése a daganat körüli normális sejtekben és a programozott sejthalált közvetítő pannexin-1 csatorna gátlása trovafloxacinnal. Utóbbinál a csatornán áramló kis molekulasúlyú vegyületek között a Mg^{++}ATP szubsztrát gátlása a daganatnövekedést gátolja. A lizoszóma szfingomielin-bontó enzimének kationos típusú antidepresszáns, vérnyomáscsökkentő, ill. antihisztamin szerekkel történő gátlása a daganatos sejtmembrán dezintegrációjához vezet. Valamennyi gyógyszerhatás közvetett is, mivel gátolják a daganatsejtek által termelt angiogén és az egészséges sejtek autofágiáját okozó, a daganatsejt táplálását biztosító fehérjéket.

Kiss István briliáns genetikai továbbképző referátumot tartott a kettős DNS-törésekről, endonukleáz-aktivitásról és a folyamatok magnézium-homeosztázissal való kapcsolatáról. A Mg-kofaktor szerepe emellett még fontos a neurotranszmisszióban, a transzmembrán ion-áramlásban és a karcinogén, kóros katekolamin-szintézis modulációjában (katekolamin-O-metil-transzferáz, COMT). Adatokat hallottunk a töviskorona elektrolittartalmáról

Carvoeirói csoportkép

és gyógyító hatásairól, a termőföld és a tápláléklánc elmúlt évtizedekben bekövetkezett, csökkenő Mg-tartalmáról és ennek súlyos, népbetegségek szaporodásában megnyilvánuló következményeiről. Beszámoltak a Mg-lombtrágyázás kedvező hatásáról paradicsom elektrolit-összetételében, a fejes saláta termésmennyiségre gyakorolt hatásról, vastagbél-végbélrák miatt operáltak kemoterápia utáni elemháztartásáról, az alternatív gyógyászatban használt gyógynövények, a fekete bodza Ca-, Mg- és egyéb elemösszetételéről. Ritkasága ellenére rendkívül érdekfeszítő volt a porphyria cutanea tardában végzett, hem-anyagcserére vonatkozó kutatómunka ismertetése. Az Egyesült Királyságban 3 magyar fehérborról megjelent, toxikus fémion-tartalomra vonatkozó közlemény szakszerű cáfolata hangzott el a magyar fehérborok valós toxikus és hasznos fémion-tartalmának elemzése kapcsán. Igen nagy hatást keltett a vörösbor resveratrol-tartalmának és hatásainak állatkísérletes taglalása, miután Szentmihályi Klára kutatócsoportja egészséges emberekben limitált vörösbor fogyasztást követően tumormarker-emelkedést észlelt. Élénk érdeklődés mellett vitattuk meg, hogy valóban jótékony hatású-e a szívgyógyászok által ajánlott 1-1 pohár vörösbor fogyasztása, miközben hazánkban a becslések szerint 800 000–1 000 000 nagyivó-alkoholista van, ami komoly népegészségügyi és financiális gondokat okoz. Számukra hasznos lehet ez a mennyiség.

A poszterszemle során a sör kedvező, valószínűleg a tubuláris reverzibilis Mg-veszteséget ellensúlyozó Mg-tartalmáról, a műtrágyázás klorofill-tartalomra gyakorolt változásáról, a csapvíz arzéntartalmának igen innovatív, magnézium-oxiddal történő csökkentéséről, a magnézium kísérletes antioxidáns, ill. a természetes antioxidánsok aktivitását fokozó effektusáról, a szeder elemösszetételéről, a *Ginkgo biloba* levelei elemösszetételének ivari különbségéről, a szőlőültetvények speciális károsodásának kationokkal történő megelőzéséről, a japán zöldségfélék magnéziumtartalmának térségünk adataival való összehasonlításáról, experimentális, a növények levelére gyakorolt citokin-befolyásról, a repceolaj antioxidáns-tartalmának lehetséges növeléséről, a levélzöldségek ásványielem-összetételéről, a petúniával kapcsolatos megfigyelésekről, a fejes saláta tápértékének növeléséről volt szó, ill. méltató-kiegészítő hozzászólás, vita.

A szimpóziumon a prezentációkban, a témakörökben („talajtól a lélekig"), illetve a vitákban az MMT alapelve, a holisztikus szemlélet érvényesült.

Kiss Zoltán

HÍREK AZ IPARBÓL

Vegyipari mozaik

Nagyszerű eredmények a Richternél. Egy negyedév eredményéből nem érdemes messzemenő következtetéseket levonni – hangsúlyozta ismételten Bogsch Erik, a Richter vezérigazgatója a társaság eredményeivel kapcsolatban. Az idei évre adott előrejelzések többségükben javultak, ahogy a befektetők által kiemelten figyelt üzemi eredményhányadra vonatkozó éves prognózis is. A bevételek regionális megoszlása kapcsán a Richter vezérigazgatója kiemelte, az egyedüli lényeges változás egyelőre Ukrajnában látszik, melynek súlya az egy évvel ezelőtti 5 százalékról 2 százalékra esett vissza. Vagyis az ukrán piac mostanra elenyészővé vált. Az egyes piacok közül Lengyelországban az erős teljesítményt legnagyobb részben a tavaly elmaradt, idén viszont megjelent influenzajárvány magyarázta, ami fellendítette a Richter egyik készítményének eladásait. A román forgalomcsökkenés mögött főként a gyógyszerárak eróziója, valamint a kereskedői készletek leépítése állt. Az orosz forgalom kapcsán Bogsch Erik elmondta, a nagy növekedésben jelentős szerepet játszott az alacsony bázis. Míg tavaly a raktárkészletek jelentős leépítése, addig most egy jelentősebb visszaépülés volt megfigyelhető. Az első félévben látott tendenciákat egyszeri hatásként említette Bogsch Erik, melyek mögött mind ár-, mind volumennövekedés meghúzódott. Az orosz gazdasági kilátások nem fényesek, a vásárlóerő a jövőben tovább csökkenhet. Ukrajnában teljes a káosz, a belpolitikai helyzet bizonytalan, a gazdaság nagyon rosszul teljesít. Az ukrán piac még az előrejelzéseknél is gyengébben teljesít. Amerikában egy sürgősségi fogamzásgátló húzta a forgalmat, a partner, a Teva jó piaci munkát végzett, sikerült növelnie részesedését. Az új piacok közül Latin-Amerikában a Richternek sikerült stabilizálnia pozícióját, a forgalom nőtt, ahogy Kínában is, az utóbbinál azonban voltak előszállítások. A nőgyógyászati vonalat tekintve a Richter legnagyobb piaca már Nyugat-Európa, mely az USA-val együtt a teljes nőgyógyászati bevétel mintegy felét adja. A korábbi akvizícióknak köszönhetően a portfólióba került Grünenthal-termékek és az Esmya forgalma a nőgyógyászati bevétel mintegy 25 százalékát teszi ki. A pénzügyi eredményt nagyban segítette a devizás pénzeszközök átértékelése, a készpénznek ugyanis nagy része nem forintban van (jellemzően euróban). A pénzügyi eredmény kapcsán megjegyezte ugyanakkor Bogsch Erik, hogy a rubel árfolyamának alakulása nem éppen biztató.

Előrejelzések. A Richter ismertette szokásos módon az egyes piacokra vonatkozó bevételi előrejelzéseit is, melyek többségében javultak. A hazai, a kínai, az amerikai és az orosz forgalmi előrejelzés is jobb lett, míg az ukrán bevételi prognózis gyakorlatilag a földbe állt.

Konszolidált gyógyszerbevételi tervek a Richternél 2015-re

	2015. febr.	2015. máj.	2015. júl.	deviza
Belföld	0%	0%	**0–5%**	HUF
FÁK				
– Oroszország*	15 mrd RUB	15 mrd RUB	**15 mrd RUB**	RUB
– Ukrajna	–40%	–40%	**–73%**	USD
– Egyéb FÁK	–5%	–5%	**0%**	USD
EU				
– Lengyelország	3%	3%	**5%**	PLN
– Románia	–5%	–5%	–5%	RON
– EU10	–7%	–7%	**–10%**	EUR
–EU15	10%	10%	10%	EUR
USA	–30%	–30%	**–5–10%**	USD
Egyéb (Kína nélkül)	0%	0%	**5%**	EUR
Kína	10%	10%	**15%**	EUR
Latin-Amerika	5%	5%	5%	USD
Összesen	**–7–8%**	**–7–8%**	**–2–0%**	EUR

Forrás: Richter, Portfolio

A bruttó fedezeti hányadra és az üzemi eredményhányadra vonatkozó előrejelzések is javultak az idei évre vonatkozóan, ami egyébként várható volt az első féléves teljesítmény láttán. A költségeket ennek következtében igyekszik tovább szorítani a Richter, az árbevétel-arányos előrejelzések a főbb költségsorok esetében csökkentek.

A Richter előrejelzései a főbb költségsorokra vonatkozóan

(Az éves árbevétel %-ában)	2015. febr.	2015. máj.	2015. júl.	elemzői konszenzus**
Fedezeti hányad	59%	**60%**	**62%**	60,52%
Értékesítési költségek	29–30%	29–30%	**29%**	–
K+F költségek	13%	13%	**12,5%**	–
Üzemi eredményhányad	10%	**11%**	**13–14%**	11,8%

** Thomson Reuters Datastream
Forrás: Richter, Portfolio

A Grünenthal-portfólió és az Esmya esetében az éves forgalmi előrejelzések nem változtak, továbbra is 50, illetve 47 millió euró.

Egyéb. Mint ismeretes, az amerikai gyógyszerfelügyelet 3 hónappal meghosszabbította a Cariprazine kapcsán bekért adatok kiértékelésének határidejét, így a döntés most szeptemberre tolódik. Bogsch Erik megjegyezte, véglegesen nem szoktak termékeket visszautasítani, egy esetleges negatív döntésnél további követelményeket támaszthatnak, ami újabb költségeket emészthet fel. A mérföldkő-bevétel előtt természetesen pozitív döntés után nyílik meg az út. Ennek várható nagyságáról ezúttal sem nyilatkozott a Richter vezérigazgatója.

A Bayerrel kötött együttműködés keretében szeptembertől megindul egy nőgyógyászati tapasz forgalomba helyezése különböző országokban, amihez költségek is kapcsolódnak, a forgalomhatás azonban az idei évben még minimális lehet. *(A portfolio nyomán)*

Az Egis felvásárolta a Bayer lengyelországi Biovital® termékportfólióját. Az Egis vállalati stratégiájának egyik fontos eleme, hogy jelenlétét erősítse a vény nélkül kapható készítmények hazai és nemzetközi piacán. Ennek keretében került sor a Bayer lengyelországi Biovital® termékportfóliójának felvásárlására. A Biovital® termékcsalád egyike a legnépszerűbb vitaminkészítményeknek Lengyelországban.

A felvásárlási ügylet a Biovital® étrend-kiegészítő termékcsalád mind a hat készítményére kiterjed. Közülük kettő az 50 év felettiek számára nyújt támogatást a szív és az idegrendszer megfelelő működéséhez, valamint hozzájárul az általános jó közérzet, a normál szellemi működés fenntartásához. A Kinder Biovital® négy terméke a különböző életkorokban lévő gyermekek fizikai és mentális fejlődését támogatja gél, szirup, maci formájú gumivitamin és szopogatótabletta formájában.

A felvásárlás révén az Egis a vény nélkül kapható készítmények piacán Magyarország és Oroszország mellett komoly szereplővé válik Lengyelországban is, ahol a közkedvelt Biovital® márka imidzsének és forgalmának további növelését kívánja elérni. *(Egis)*

Ötmilliárdos fejlesztés és új munkahelyek a TU-PLAST Kft.-nél. Új, 6600 m^2 területű gyártócsarnokot avatott fel a debreceni székhelyű TU-PLAST Tubusgyártó Kft., melynek köszönhetően 59 új munkahelyet teremt a térségben. A vállalat 2014-ben 110 alkalmazottal működött és évi 83 millió tubust gyártott. Az egyedi kormánydöntés keretében támogatott ötmilliárdos fejlesztésnek köszönhetően 2015-ben már évi 200 millió darabos termelési kapacitásra tesznek szert és 159 főnek biztosítanak munkát.

Az 1997-ben alapított TU-PLAST Tubusgyártó Kft. a Közép-Európai régióban vezető, polietilén tubusokat gyártó cég. Több mint 18 éves szakmai tapasztalattal, korszerű műszaki háttérrel és megbízható, nagy kapacitással rendelkező vállalkozás, mely 75%-ban a svájci Hoffmann Neopac AG anyavállalat tulajdona. 2012-ben a cég jelentős fejlesztésekbe kezdett, a gyártócsarnok területét megduplázta, a raktárkapacitását megötszörözte, és üzembe állította harmadik gyártósorát. 2014-ben uniós támogatással negyedik gépsorral bővült az üzem, ennek segítségével 25%-kal tudták kapacitásukat növelni, árbevételük 2014-ben már meghaladta a 4 milliárd forintot.

A legújabb magyarországi fejlesztésük egy 6600 m^2-es gyártócsarnok, melynek értéke meghaladja az ötmilliárd forintot. A fejlesztést a magyar állam egyedi kormánydöntés keretében támogatja.

Mark Aegler, a Hoffmann Neopac AG vezérigazgatója kiemelte Debrecen város jelentőségét a cég életében. Aegler úr hangsúlyozta, hogy a magas szinten automatizált világszínvonalú termelési technika kiszolgálásához magasan képzett, idegen nyelvet beszélő munkatársak szükségesek. A város felsőfokú oktatási intézményeiben folyó képzés pedig biztos alapot ad a társaság jövőbeni munkaerő-igényének kielégítésére.

A vállalatcsoport a jövőben újabb modern gyártósorok üzembe helyezését is tervezi, melynek eredményeként a magyar vállalat kapacitása évi 300 millió db tubusra bővül, amely a jelenleginek közel négyszerese. *(Tuplast)*

Erős negyedév jöhet a Molnál. A Mol gyorsjelentése az elemzői várakozások alapján igen kedvező képet mutathat. A főbb eredménysorokon jókora növekedést érhetett el a vállalat, amit most is a finomítás-kereskedelem erős teljesítménye húzhatott.

Az erős idei első negyedéves eredmények után újabb kiváló negyedévet tudhat maga mögött a Mol, legalábbis ez derül ki az eddig beérkezett elemzői várakozásokból. Az iparágban kiemelten figyelt profitmutató, az egyszeri tételek és készletátértékelés nélküli EBITDA 80 százalékkal emelkedhetett a bázisidőszaki értékhez képest, míg a hasonló alapon számolt üzemi eredmény több mint háromszorozódhatott. Mindemellett a tisztított nettó profitban is jelentős növekedés mutatkozhatott a negyedévben.

2015. második negyedéves becslések és tényszámok

milliárd forint	medián	db	r.szórás	min.	max.	2Q 14 tény	eltérés
MOL – konszolidált							
Tisztított EBITDA*	169,9	7	4,9%	159,5	179,9	95,1	79%
Tisztított üzemi eredmény*	94,9	7	12,1%	70,9	105,0	28,7	231%
Tisztított EPS (Ft)*	565,6	5	14,9%	499,6	703,0	233	143%
Divizionális EBITDA	**medián**	**db**	**r.szórás**	**min.**	**max.**	**2Q 14 tény**	**eltérés**
Tisztított Upstream**	55,0	7	5,8%	48,0	57,3	60,6	–9%
Tisztított Downstream*	112,7	7	9,2%	98,1	126,0	28,6	294%
Tisztított Gáz**	12,0	7	15,0%	9,4	14,0	16,2	–26%

* készletátértékelési hatástól és egyszeri tételektől tisztított adatok
** egyszeri tételektől tisztított adatok

Az egyes üzletágakat külön vizsgálva az látható, hogy a számokat ezúttal is a finomítás-kereskedelem húzhatta, az eredményeket a továbbra is kedvező finomítói, valamint petrolkémiai környezet segíthette a folyamatos költségcsökkentések és hatékonyságnövelő programok mellett. A többi szegmens közül a kutatás-termelés közel 10 százalékos profitvisszaeséssel szembesülhetett – részben az év/év alapon jelentősen visszaeső olajár következtében –, míg a gáz szegmens közel 30 százalékos eredményromlással.

Mik hatottak az eredményekre?
Kutatás-termelés

1. Olajár: a negyedév során az uráli olaj árfolyama emelkedni tudott, megtörve ezzel a több negyedév óta megfigyelt csökkenő trendet (a tavalyi hasonló időszakhoz képest persze így is jelentős visszaesés látszik). Egyelőre azonban a folyamat nem bizonyul tartósnak, a folyó negyedév eddig eltelt részében ismét csökkenés látszik. Az alacsonyabb olajár természetesen kedvezőtlen a Molnak.

2. Dollár: a forint negyedéves átlagban mind a korábbi negyedévhez, mind a tavalyi második negyedévhez képest gyengült a dollárral szemben (az év/év alapú változás igen jelentős volt, 24 százalékos). A trend ráadásul a folyó negyedév eddig eltelt részében is kitart, a forint tovább gyengül a dollárral szem-

ben. Az olaj dolláralapú üzlet, így a gyengébb forint kedvez a Molnak.

Finomítás-kereskedelem

1. Készlet-átértékelődés: az olajár korábbi negyedévhez képest látott emelkedése nyomán a készletek átértékelése a negyedévben pozitív hatást gyakorolhatott a Molnál. A készlet-átértékelődés lényege, hogy az olajárak emelkedése révén a finomítói feldolgozásban részt vevő olajat alacsonyabb áron szerzi be a Mol, mint amilyen áron a termékeket értékesíteni tudja.

2. Termék-árrések: a Mol számára releváns termék-árrések a negyedévben tovább emelkedtek, mind a benzin, mind a gázolaj crack spread tágult. A folyó negyedév eddig eltelt részében felemás kép rajzolódik ki: a benzin-árrés tovább emelkedett, míg a gázolaj-árrés már csökkent. A Molnak természetesen az a jó, ha a termék-árrések minél nagyobbak.

3. Brent-Ural különbözet: a két olajfajta ára közti különbség a negyedévben csökkent, a folyó negyedév eddig eltelt részében pedig tovább szűkült. A Mol számára a különbözet alakulása azért lényeges, mert finomítóiban jellemzően az orosz olajat dolgozza fel, míg termékeinek árát a Brenthez igazítja. Vagyis a Molnak az a jó, ha a Brent-Ural különbözet minél tágabb.

4. Dollár: a dollár és a forint árfolyamának alakulása a finomítás-kereskedelem divízióra is hasonló hatást gyakorolt, mint a kutatás-termelés üzletág esetében.

5. Vegyipar: a csökkenő olajárak alapvetően kedvező hatást gyakorolhattak a Mol vegyipari tevékenységére, hiszen mint tudjuk, a TVK egyik fontos alapanyagának, a vegyipari benzinnek az ára szorosan leköveti az olajárak alakulását.

6. Üzemanyag-fogyasztás: a MÁSZ legfrissebb statisztikái szerint Magyarországon mind a benzin-, mind a gázolajfogyasztás emelkedett az idei második negyedévben, és ugyanez látszik az egy évvel korábbi hasonló időszakhoz képest is. A finomított termékek növekvő felhasználása kedvező a Mol kiskereskedelmi tevékenységére nézve. *(A portfolio nyomán)*

50 éves az algyői szénhidrogén-bányászat. Az első algyői kútfúrások óta félévszázad telt el, ez idő alatt pedig a régió a hazai energiabiztonság egyik legfontosabb szimbólumává és pillérévé vált. A Mol az algyői olajmezőn termeli ki a hazai kőolajmennyiség harmadát. A jubileum alkalmából Dr. Botka László, Szeged polgármestere a Mol vezetőivel együtt koszorúzta meg a bányászat védőszentjének, Szent Borbálának szobrát.

Az algyői kőolaj- és földgázmező felfedezése az 1965-ös év szenzációja volt. Algyő és környéke az ország legnagyobb kőolajlelőhelye, nemzetközi mércével mérve is jelentős. A régió jelenleg a hazai gáz- és kőolajtermelés közel harmadát adja. Az ország teljes földgázigényének tizedét, kőolajigényének öt százalékát biztosítja. Nem messze fekszik innen az a 350 négyzetkilométeres koncessziós terület, amelyen jelenleg is kutatások folynak, és amelytől előzetes becslések alapján 25 millió hordó kőolaj felszínre hozását várja a vállalat.

Az algyői telephely az elmúlt fél évszázad alatt több ezer embernek adott munkát. Sok munkavállalónak ez volt az első és egyben utolsó munkahelye. A vállalat az évforduló alkalmából huszonöt munkavállalójának kiemelkedő munkáját és hűségét bronzplakettel, valamint egy különleges portrésorozattal köszönte meg. *(Mol)*

BOSCH

A benzines és a dízeltechnológia jövője. Egy Bosch-tanulmány szerint a benzines és a dízeltechnológia a 2020 utáni időszakban is megőrzi vezető szerepét a járművek meghajtása terén, bár lényeges átalakítások várhatóak.

A megoldásra váró feladat természetesen a károsanyag-kibocsátás mértéke, melyet a szabályozás tízéves távlatban az Európai Unió területén, az Egyesült Államokban és Kínában is jelentősen korlátozni fog. Például az EU országaiban 2021-től egy átlagos új autó által kilométerenként kibocsátott szén-dioxid maximumát 95 grammban határozzák meg, ami a jelenlegi benzines és dízelmotorok átlagos fejlettségi szintjét figyelembe véve szinte

teljesíthetetlenül alacsony értéknek tűnik. A Bosch azonban hatalmas energiákkal, a legnagyobb autógyártókkal közös erőfeszítéssel dolgozik a probléma megoldásán, és a 62. Bosch Nemzetközi Gépjármű-technikai Sajtótájékoztatón máris szép eredményeket mutatott be.

A közvetlen benzinbefecskendezéses motoroknál a részecskekibocsátás csökkentése áll a középpontban. Ennek megoldására egy példa a nagy pontosságú lézerrel vágott furatokkal készülő, innovatív közvetlen benzinbefecskendezés, amely a lézer által vágott élekkel kimagaslóan hatékony égésű üzemanyag-levegő keveréket képez az égéstérben. Emellett a benzines rendszerek befecskendezési nyomásának 200-ról 350 barra emelésével a részecskék kibocsátása jelentősen tovább csökkenthető – különösen a magas terhelési tartományok környékén és dinamikus motorműködés mellett.

A dízelmotorok terén a Boschnál jó esélyt látnak a szakértők arra, hogy a kipufogórendszerek további fejlesztése – ezen belül is többek között a kipufogógáz utókezelése –, és a szennyező anyagot eltároló katalizátorok széles körű alkalmazása az egyik legkritikusabb nitrogén-oxid kibocsátás akár 80 százalékos csökkentését eredményezheti. Ezt erősíti az elektromos kiegészítő meghajtások bevetése, amely a töltés célzott felhasználásával, főleg gyorsításkor és nagy terhelésnél csökkenti a nem kívánt nitrogén-oxid kibocsátást, azaz már a belső égés folyamatainál tovább korlátozza a dízelmotorok környezetszennyezését. Az Európai Unió tárgyalásokat folytat a valós kibocsátás (Real Driving Emissions) teszt 2017-es bevezetéséről. Ez a mérési módszer a dízeljárművek nitrogén-oxid és a szén-monoxid kibocsátását reális

vezetési helyzetekben méri, így a járműipar környezetvédelmi és fenntarthatósági fejlesztései a globális ökológiai kihívások tényleges megoldását szolgálja. Mindezeken felül a Bosch meggyőződése szerint hatalmas lehetőség rejlik az elektromosítás, az automatizálás és a hálózatba kapcsolás összekapcsolásában, mert az ilyen integrált rendszerek képesek a járművek és az azokat meghajtó motorok maximálisan környezetkímélő üzemmódjának biztosítására. *(http://boschblog.hu/)*

Banai Endre összeállítása

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

Rendezvénynaptár

2015. április 10–12.	9. Kémikus Diákszimpózium	Bonyhád
2015. április 16.	Magnézium Szimpózium	Budapest
2015. április 24–26.	XLVII. Irinyi János Kémiaverseny	Szeged
2015. május 27–29.	Biztonságtechnika Szeminárium	Balatonalmádi
2015. június 14–17.	16th Blue Danube Symposium on Heterocyclic Chemistry	Balatonalmádi
2015. augusztus 31. – szeptember 2.	MKE 2. Nemzeti Konferencia	Hajdúszoboszló
2015. szeptember 26.	Innováció a Természettudományban – Doktorandusz Konferencia	Szeged
2015. október 7–9.	XII. Környezetvédelmi Analitikai és Technológiai Napok	Balatonszárszó
2015. október	Őszi Radiokémiai Napok	
2015. október 21–23.	5th European Drying Conference	Budapest
2015. november	Kozmetikai Szimpózium	Budapest

Innováció a Természettudományban – Doktorandusz Konferencia

Szeged, 2015. szeptember 26.
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.
Online regisztráció: https://www.mke.org.hu/conferences/biochem15/registration/
További információk: Schenker Beatrix, biochem@mke.org.hu

XII. Környezetvédelmi Analitikai és Technológiai Napok

2015. október 7–9.
SDG Családi és Konferencia Központ
Balatonszárszó, Csárda utca 39–41.
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.
Online jelentkezés: http://www.kat2015.mke.org.hu/
További információk: Körispataky Panna, korispataky@mke.org.hu

Őszi Radiokémiai Napok

2015. október 19–21.
SDG Családi és Konferencia Központ
Balatonszárszó, Csárda utca 39–41.
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.
Online jelentkezés: www.radiokemia.mke.org.hu
További információk: Schenker Beatrix, beatrix.schenker@mke.org.hu

5th European Drying Conference

2015. október 21–23.
Hotel Flamenco, Budapest, Tas vezér u. 1–3.
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.
Online jelentkezés: http://www.eurodrying2015.mke.org.hu
További információk: Kőrispataky Panna, eurodrying2015@mke.org.hu

Kozmetika szimpózium – 2015

2015. november 19.
Hotel Bara, Budapest, Hegyalja u. 34.
További információk: Schenker Beatrix, beatrix.schenker@mke.org.hu

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXX. No. 9. September 2015

CONTENTS

Introducing General Secretary ***István Pálinkó*** *and Board Members* ***Nóra Adányi-Kisbocskói, Ádám Demeter, István Fábián, György Keglevich, Zoltán Murányi,*** *and* ***Csaba Szántay*** 266
TAMÁS KISS
Symmetry – through a mathematician's eyes. Nobel Prize winner Sir John Anthony Pople was born 90 years ago 271
LÁSZLÓ GYEVI-NAGY, DOMONKOS A. TASI, ATTILA M. REMETE, AND **GYULA TASI**
Bruckner Room Lectures
Glucopyranosyl oxadiazole and triazole carboxamides as GP inhibitors: synthesis, enzyme kinetics and structure-activity relationships 278
LÁSZLÓ JUHÁSZ
Modern motor and jet engine propellants. I. Motor gasolines by Jenő Hancsók, Zoltán Eller, and Eszter Kriván (book review) 280
LÁSZLÓ RÁCZ
Seducing words on the awful GMO 281
PÁL VENETIANER
Chemical-free food fans disguised as polar bears 283
GÁBOR LENTE
Master and student: Sir Lawrence Bragg (1890–1971) and István Náray-Szabó (1899–1972) 284
ALAJOS KÁLMÁN
Renewed exhibitions in the 50 years old Chemistry Museum. Part IV 287
ISTVÁN PRÓDER
EuCheMS Newsletter, September, 2015 291
Chemistry calendar (Edited by **JÓZSEF SÁNDOR PAP***)* 295
Prof. Dr. Tamás Patonay (obituary) 296
ATTILA KISS, KRISZTINA KÓNYA, AND **LÁSZLÓ SOMSÁK**
Prof. Ing. Mikuláš Matherny DSc. (obituary) 297
KÁROLY FLÓRIÁN AND **GYÖRGY HELTAI**
Chembits (Edited by **GÁBOR LENTE***)* 298
The Society's Life 300
News of the Month 301

IX. Nemzetközi Kémikus Diákszimpózium

Szervezők: *Bonyhádi Petőfi Sándor Evangélikus Gimnázium és Kollégium*, a *Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kara Kémia Intézete* és a *Magyar Kémikusok Egyesülete*

2015. április 10. és 12. között került megrendezésre a IX. Nemzetközi Kémikus Diákszimpózium. A rendezvénynek ezúttal a Bonyhádi Petőfi Sándor Evangélikus Gimnázium és Kollégium adott otthont.

A konferenciára érkező tanulók öt szekcióban mutathatták be előadásaikat. A szekciók élén három-három fős szakmai zsűri állt. A szimpóziumot megtisztelte jelenlétével és zsűrielnöki munkájával *prof. dr. Kilár Ferenc,* a PTE Analitikai és Környezeti Kémia Tanszékének tanára, *Androsits Beáta,* a Magyar Kémikusok Egyesületének ügyvezető igazgatója, *dr. Siposné Musza Katalin*, az ATI–KTF osztályvezetője, *dr. Sipos Pál,* az SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének tanára, valamint *dr. Riedel Miklós,* az ELTE Kémiai Intézet tudományos főmunkatársa.

A diákok nemcsak a zsűrivel, hanem egymás között is megvitathatták tudományos kutatásaik eredményét. Habár a szimpózium célja nem a versengés, sokkal inkább a diákok ismeretének bővítése volt, az egyes szekciók legsikeresebb előadásai a szombati napon ismét elhangzottak a rendezvénynek helyt adó intézmény dísztermében. A legkiemelkedőbb diákok és felkészítő tanáraik értékes jutalmakban részesültek. Mindemellett külön kitüntetést kapott a *Budapest VI. Kerületi Szinyei Merse Pál Gimnázium,* valamint *Kiss Szilvia* dunaszerdahelyi tanárnő kimagasló tehetséggondozó munkájáért.

A diákok a szimpózium ideje alatt látogatást tettek a Paksi Atomerőműben, ahol betekintést nyerhettek Magyarország egyetlen atomerőművének mindennapjaiba. A szombati délután során pedig megtekinthették *dr. Róka András*, az ELTE Kémiai Intézet főiskolai docensének *Az elektronok színháza* című előadását.

Mindez nem jöhetett volna létre a Magyar Kémikusok Egyesülete és Nagy István, a Bonyhádi Petőfi Sándor Evangélikus Gimnázium és Kollégium kémiatanárának áldozatos szervezői munkája nélkül.

Hús Luca

Bonyhádi Petőfi Sándor Evangélikus Gimnázium és Kollégium

KÖSZÖNETET MONDUNK A RENDEZVÉNY TÁMOGATÓINAK

A rendezvény főtámogatója: *Potápi Árpád – nemzetpolitikáért felelős államtitkár*

Támogatók: *TARR Kft., Magyarországi Evangélikus Egyház, Pécsi Tudományegyetem, Mol Nyrt., Egis Gyógyszergyár Zrt., Richter Gedeon Nyrt., Rotary Club Szekszárd, Aktivit Kft., Völgységi Múzeum, Eszterbauer Borház, Vesztergombi Pince, Heimann Pincészet, Fritz Pincészet, Ezer és Társa Bt., SMS Pipe – Fitter Épületgépészeti Kft., Mezőföldi Regionális Víziközmű Kft., Bonyhád Város Önkormányzata, Illatos Virág Kft., György Kft., Szignó Bt., Lovasi Festékbolt, Ágnes Kft.*

A Szegedi Ifjú Szerves Kémikusok Támogatásáért Alapítvány tudományos előadóülése *Szeged, 2015. április 29.*

A Szegedi Ifjú Szerves Kémikusok Támogatásáért Alapítvány, az MKE Csongrád Megyei Csoportja és a SZAB Szerves és Gyógyszerkémiai Munkabizottság közös rendezésében 14. alkalommal került sor az Alapítvány tudományos előadóülésére. Az előadóülés plenáris előadását *Dr. Mátyus Péter* egyetemi tanár (Semmelweis Egyetem, Bionikai Innovációs Központ) tartotta „Új irányzatok és szempontok a központi idegrendszeri gyógyszerek kutatásában” címmel, majd BSc-, MSc- és PhD-hallgatók tizenhárom előadásban mutatták be eredményeiket.

A szakmai zsűri értékelése alapján a „Dr. Hermecz István díj”-at (a Molar Chemicals Kft. konferencia-részvétel támogatására felajánlott díja és az Alapítvány díja) *Németh Dorottya* II. éves MSc-biológushallgató (MTA Szegedi Biológiai Központ, Biokémiai Intézet, Kémiai Biológia Kutatócsoport) nyerte el „Membrán-asszociált fehérjék módosítása élő sejtes vizsgálatokhoz” c. előadásával (témavezető: *Dr. Tömböly Csaba*); a Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportja díját *Kardos Márton* PhD-hallgató (SZTE, Gyógyszerkémiai Intézet) kapta „Funkcionalizált $\beta^{2,3}$-aminosav-származékok sztereokontrollált szintézisei gyűrűnyitó/keresztmetatézissel” c. előadásáért (témavezető: *Dr. Fülöp Ferenc, Dr. Kiss Lóránd*). Harmadik díjas: *Pálházi Balázs* III. éves MSc-biomérnökhallgató (SZTE, TTIK, Szerves Kémiai Tanszék): Ösztron-heterodimerek szintézise triazol-linker alkalmazásával (témavezető*: Dr. Mernyák Erzsébet*).

Az Alapítvány működését 2014–2015-ben a Nemzeti Együttműködési Alap támogatta.

Molnár Árpád

Egyszerű működtetés

Alacsonyabb kimutatási határok kevesebb mintaelőkészítéssel. A **Thermo Scientific TSQ 8000 hármas kvadrupol GC-MS/MS** kiemelkedő, jövőbiztos analitikai teljesítményt biztosít a lehető legnagyobb termelékenység mellett. A kifejezetten robusztus, rutin elemzésekre tervezett TSQ 8000 rendszer a Thermo Scientific évtizedek óta bevált hármas kvadrupol technológiájának legkorszerűbb változatát ötvözi a kicsiszolt szoftverkörnyezettel, amely egyszerűvé teszi az MS/MS technika használatát a módszerfejlesztéstől a jelentés elkészítéséig.

Brilliáns eredmények

• www.thermoscientific.com/tsq8000

Thermo SCIENTIFIC

Kizárólagos képviselet:

UNICAM Magyarország Kft., 1144 Budapest, Kőszeg utca 27.

Telefon: +36 1 221 5536 • Fax: +36 1 221 5543

E-mail: unicam@unicam.hu • Web: www.unicam.hu

20 éves

UNICAM Magyarország Kft.