A TARTALOMBÓL:

- Szteroidkémiai kutatások Szegeden
- Nem-hem-típusú oxidáz és oxigenáz enzimek
- Nehézfém-szennyezés környezeti mobilitásának becslése
- Híresek és Kémikusok: Kurt Vonnegut

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXXI. ÉVFOLYAM • 2016. ÁPRILIS • ÁRA: 850 FT

Szennyvíz-tisztítás

A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap támogatja

Nemzeti Kulturális Alap

A kiadvány a Magyar Tudományos Akadémia támogatásával készült

ELEMANALÍZIS FELSŐFOKON

C - H - N - O - S - Cl TIC - TOC - TN

A MIKRO ANALITIKÁTÓL ... ... A MAKRO ANALITIKÁIG

ELEMANALIZÁTOROK & TÖMEGSPEKTRÓMÉTEREK

Konformitás: CE, EMC, DIN, EN, AOAC, ASBC, AACC, FGIS, AOCS, CGC, ASTM, LUFA, MEBAK, LIMS, 21 CFR Part 11, ...

trace sorozat: nyomelemzés

vario sorozat: univerzálisan alkalmazható multi elemanalizátorok **MIKRO - FÉLMACRO - MACRO** beméréssel

rapid sorozat: Rutin kezelésű berendezések dedikáltan egyes felhasználói területekre optimalizálva analízis költség, mérési idő és érzékenység tekintetében

TOC analizátorok:

Stabil izotóp arány és elemösszetétel mérő analizátorok: Termékeredet vizsgálat, kriminológia, drog- és dopping felderítés, geológia

SZÉLESKÖRŰ ALKALMAZÁSI TERÜLET

AGRÁR MÉRÉSEK | KÉMIAI ÖSSZETÉTEL | ENERGIA IPAR | KÖRNYEZET-VÉDELEM | KRIMINOLÓGIA EREDET MÉRÉS | ANYAG-VIZSGÁLAT

elementar
Analysensysteme GmbH
EXCELLENCE IN ELEMENTS

AKTIVIT Kft.
1145 Budapest, Pétervárad u. 14.
Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865
Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web:www.aktivit.hu
Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA
HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXI. évf., 4. szám, 2016. április

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

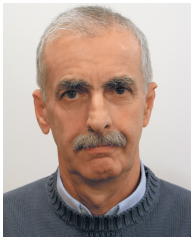
Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

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!



Legutóbb 2014 áprilisában, azaz pontosan két évvel ezelőtt ért az a megtiszteltetés, hogy beköszöntőt írhattam a Magyar Kémikusok Lapja aktuális számához. Mostani írásomat, az akkorihoz hasonlóan, az MKL Szerkesztőbizottságának legutóbbi, idén február elején tartott üléséről szóló rövid beszámolóval kezdem. Az SZB – Keglevich György és Körtvélyessy Gyula előterjesztései alapján, melyekért ez úton is köszönet jár – értékelte a lap elmúlt évi számait, és elismerését fejezte ki a szerkesztőség munkatársainak, kiemelten a felelős szerkesztőnek a lap érdekében 2015-ben végzett sikeres munkájáért. Az ülés egyik fontos témaköre volt annak az ajánlatnak megvitatása, amelyet az Arcanum Kft. tett az MKL (és a Magyar Kémiai Folyóirat) korábbi számainak digitalizálására és nyilvános hozzáférésének biztosítására. Az SZB egyhangúan támogatta a kezdeményezést, és felkérte Androsits Beátát, az MKE ügyvezető igazgatóját az ezzel kapcsolatos egyeztetésekre, mind az Egyesület vezető szerveivel, mind a két lap kiadásában érdekelt MTA kompetens képviselőivel. A terv megvalósulása esetén a korábbi lapszámok elektronikusan, kereshető formátumban lesznek elérhetők az MKE tagjai számára.

Nem tisztem a lap színvonalának minősítése, de az Olvasóinktól kapott pozitív visszajelzések arra utalnak, hogy a lapnak a tudományos magazin jelleg irányába néhány éve elkezdődött és azóta folyamatosan kiteljesedő átalakulása kedvező fogadtatásra talált az érintettek körében. A jövőben is e megjelenési formát kívánjuk fenntartani és tovább tökéletesíteni. Mindeközben kiemelt fontosságúnak tartjuk az iparban dolgozó kollegákat különösen érdeklő közlemények és hírek számának növelését.

Szent-Györgyi Albert egyik mondása szerint „A nőknek több a józan eszük, mint a férfiaknak." Jóllehet egy lapszám bevezetője nem a legjobb hely az ezzel kapcsolatos vélemények megvitatására, úgy gondolom, hogy az MKL mostani számában Hargittai Magdolna professzor asszonnyal és Gajdosné Szabó Márta tanárnővel készített két interjú nyomos érvekkel támasztja alá az idézett megállapítást. Csak gratulálni lehet mind az interjúalanyoknak, mind az interjúkat készítő kollegáknak ahhoz az intellektuális élményhez, amelyet ezen írások olvasása közben megtapasztalhatunk.

Folytatódik a hazai kutatóhelyek bemutatása; a Pannon Egyetem és a Szegedi Tudományegyetem egy-egy kiemelkedő jelentőségű és nagyon szép eredményekkel büszkélkedő kutatócsoportjának munkáiból kaphatunk szemelvényeket.

Két, környezetkémiai szempontból kiemelt jelentőségű problémakört tárgyaló, a 2015. novemberi, nagyon kedvezően fogadott, vízzel kapcsolatos tematikus lapszámhoz kapcsolható tudományos közleményre is szeretném felhívni az Olvasók figyelmét: az egyik a kommunális szennyvizek speciális kezelésével, a másik egyes nehézfém-szennyezések környezeti mobilitásával kapcsolatos újabb hazai kutatások eredményeit mutatja be.

Végezetül a Lente Gábor által jegyzett két gyöngyszemre, a Kurt Vonnegutról szóló írásra és a Vegyészleletekre utalnék; ezek elolvasását is őszintén tudom ajánlani mindenkinek.

Kérjük Olvasóinkat, hogy a továbbiakban is segítsék a lapot szerkesztő közösség munkáját akár kritikai megjegyzésekkel, akár téma- és szerkesztési javaslatokkal, akár a színvonallal kapcsolatos véleményeikkel és tanácsaikkal.

2016. április

Szépvölgyi János
professor emeritus
az MKL szerkesztőbizottságának elnöke

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY
Kiváló tanítványaim voltak. Beszélgetés **Hargittai Magdolna** professzor asszonnyal 110
Gombos Erzsébet, Barkács Katalin, Felföldi Tamás, Vértes Csaba, Záray Gyula: Ferrát-technológia alkalmazása biológiailag tisztított, kommunális szennyvizek utókezelésére 113
Heltai György, Flórián Károly, Győri Zoltán, Fekete Ilona, Halász Gábor, Kovács Katalin, Takács Anita, Horváth Márk: Nehézfém-szennyezés környezeti mobilitásának becslése a talaj/légkör/víz/üledék rendszerben 117
Bruckner-termi előadás
Lakk-Bogáth Dóra, Szávuly Miklós István, Speier Gábor, Kaizer József: Nem-hem-típusú oxidáz és oxigenáz enzimek szintetikus modelljei: szerkezet, reaktivitás, katalízis 122
HAZAI KUTATÓMŰHELYEK BEMUTATKOZÁSA
Frank Éva, Wölfling János, Schneider Gyula: Új vegyületek, új hatások. Szteroidkémiai kutatások Szegeden 124
OKTATÁS
Vele vagy nélküle? A nehézipar előnyei és hátrányai. Beszélgetés **Gajdosné Szabó Márta** kémiatanárral 127
KITEKINTÉS
Lente Gábor: Híresek és Kémikusok. Kurt Vonnegut 130
VEGYÉSZLELETEK
Lente Gábor rovata 132
A HÓNAP HÍREI 134

Címlap:
A Dél-pesti Szennyvíztisztító Telepen (wikimapia)

Kiváló tanítványaim voltak

Beszélgetés Hargittai Magdolna professzor asszonnyal, az MTA rendes tagjával

Egy kerek évforduló kapcsán szeretnék bemutatni egy sikeres, nemzetközi hírű magyar kutatót, Hargittai Magdolnát, a BME Vegyészmérnöki Karának professzor asszonyát.

– A beszélgetésre készülve megnéztem a Wikipédiát, és ott többek között azt olvastam, hogy négy területen is komoly publikációi/könyvei jelentek meg: molekulaszerkezeti kutatások, szimmetria, tudósinterjúk és főzés. Bár ez utóbbi nyilván a hobbi szülötte, ismerve Magát ez is színvonalas munkát takar. Szokatlanul széles spektrum. Hogyan alakult ez a sokrétű tevékenységi kör?

– A szakácskönyvet kivéve a többi érdeklődési kör természetesen következett egymásból. Kutatási területem a molekulák szerkezete volt, már a diplomamunkámat is ilyen témából készítettem. A molekulák egyik fontos jellemzője a szimmetria, és egy szerkezetkutató számára ennek meghatározó jelentősége van. A diffrakciós módszerek alkalmazása szempontjából szerencsés a nagyobb szimmetria, mert minél szimmetrikusabb egy molekula, annál könnyebb meghatározni a szerkezetét, hiszen akkor kevesebb paraméterrel írható le. A mikrohullámú szerkezetmeghatározást viszont gátolja a nagy szimmetria.

A szimmetria ugyanakkor általános tulajdonság a hópelyhektől és a virágszirmok elrendeződésétől kezdve az emberi arcig, és ugyancsak jelentkezik a legtöbb emberi alkotásban is. Amikor gyerekeink kicsik voltak, nekik is megmutattuk ezeket a példákat, s látva érdeklődésüket és fogékonyságukat, férjemmel elhatároztuk, hogy írunk egy könyvet gyerekeknek a szimmetriáról. Sok képpel illusztrált kis könyvecske volt (*Fedezzük föl a szimmetriát* címmel jelent meg a Tankönyvkiadónál), több óvodában is használták, és hamar elfogyott. Ezt követte a többi szimmetriakönyvünk, eddig összesen tucatnyi. Voltak köztük, amelyek angolul, oroszul, németül és svédül is megjelentek. A legfontosabb valószínűleg a *Symmetry through the Eyes of a Chemist* (Szimmetria egy kémikus szemével) volt, amely angolul eddig három kiadást ért meg. Ebben a könyvben azt mutattuk meg, hogy a kémia minden területén jelentkezik a szimmetria, a molekulák alakjától kezdve a kémiai reakciókig. Több egyetemen tankönyvként vagy segédkönyvként is használják.

A Hargittai család 2013-ban (Hargittai Magdolna szívességéből)

A tudósokkal készített interjúkba fokozatosan kapcsolódtam be, miután férjem, István kezdett interjúkat készíteni híres tudósokkal. Ezek az interjúk vezettek a *Candid Science* (Őszinte tudomány) könyvsorozatunkhoz, amely hat vaskos kötetben jelent meg az Imperial College Pressnél. A híres természettudós nők élete iránti érdeklődésem eközben alakult ki. Már talán a harmadik kötetnél tartottunk, amikor tudatosult bennem, hogy az egyes kötetekben szereplő 36 tudós között legfeljebb három nő volt. Ezt nagyon furcsának találtam. Az interjúalanyok kiválasztásában bennünket csak a kiválóság vezetett, ezért nyilvánvaló volt, hogy sokkal kevesebb a híres tudós nő, mint a férfi. Elhatároztam, hogy utánanézek, miért is van ez így. Több mint tíz évig gyűjtöttem ezeket az interjúkat, amelyekből tavaly könyvet jelentettem meg, először az Oxford University Pressnél angolul (*Women Scientists: Reflections, Challanges, and Breaking Boundaries*), majd az Akadémiai Kiadónál magyarul (*Nők a tudományban határok nélkül*).

– Tudományos munkája, amellyel beírta nevét a tudomány lapjaira, a molekulaszerkezeti, elektrondiffrakciós kutatások és a meghatározott szerkezetek elméleti számításokon alapuló jóslatokkal való összhangjának vizsgálata. Beszélne erről kicsit részletesebben olvasóinknak?

– A molekulaszerkezetek kísérleti meghatározása és számításokkal történő modellezése mellett megpróbáltam válaszolni a „miért” kérdésre, hogy megérthessük, miért alakulnak ki az adott szerkezetek,

és ennek révén hogyan jelezhetjük előre még nem tanulmányozott molekulák szerkezetét. Mind a kísérlet, mind az elmélet szempontjából nagy kihívást jelentő fémhalogenid-molekulák szerkezetével foglalkoztam a legtöbbet.

– A kutató számára mindig nagy öröm, amikor eredményei alapján valamilyen általánosítható összefüggésre mutathat rá, netán megjósolhat eddig nem ismert jelenségeket, ez esetben szerkezeti sajátságokat. Ez a kísérletre alapozott elméleti számítások alapján volt lehetséges.

– A legkorszerűbb módszerek és köztük saját módszertani újításaink alkalmazásával sikerült valóban új ismeretekre szert tennünk.

– Szorosan kötődnek ezek a munkák a szimmetria-kutatásokhoz. E területen ugyanakkor jelentős az ismertterjesztő munkássága is. Mennyiben érzi fontosnak, hogy a tudomány embere tudását, ismereteit a közember számára is megismerhetővé tegye?

– Nagyon fontosnak tartjuk mindketten a tudomány népszerűsítését. A tudományos munka természeténél fogva egy kutató általában csak bizonyos, sokszor apró részletek felderítésével foglalkozik, ami még a más, bár rokon témán dolgozó kutatók számára sem könnyen érthető, nemhogy a tudománnyal nem foglalkozó emberek számára. Ez nagy kár, mert a társadalom egésze így nehezebben rokonszenvezik a tudománnyal és ismeri el a fontosságát, pedig modern életünket sokban meghatározza a tudomány fejlődése. Gondoljunk csak arra, hogy a száz évvel ezelőttihez képest a ma születő gyerekek várható élettartama legalább a duplájára nőtt, az életminőség javulásáról nem is beszélve. Mindebben a tudomány eredményeinek meghatározó szerepük van. Ugyanakkor a társadalom támogatása nélkül nem lenne lehetőség a tudományos kutatások folytatására. Ezért az ismeretterjesztés a kutatói társadalomnak is létérdeke. Az is fontos szempont, hogy a tudomány közel hozása a társadalomhoz megnehezíti a tudománytalan és áltudományos nézetek térnyerését. Hozzáteszem azt, hogy az ismeretterjesztés mindkettőnk számára örömteli tevékenység, kifejezetten élvezzük.

– Nem véletlenül kapta férjével, Hargittai Istvánnal együtt 2010-ben az Év Ismeretterjesztő Tudósa díjat.

Amint említette, férjével, majd újabban fiukkal, Balázzsal most már hárman készítenek világhírű tudósokkal interjúkat életükről, felfedezésükről, gondolataikról. A Candid Science *című sorozat több száz interjúból áll, 2014-ben magyar nyelven is megjelent egy válogatás* Különleges elmék: Találkozás 111 híres tudóssal *címmel. Említene egy kedves élményt ezen interjúk sorából?*

– Nehéz választani, mert sok emlékezetes találkozásunk volt. Hadd említsem Reiko Kuroda japán kémikussal folytatott egyik beszélgetésünket. A történethez hozzátartozik, hogy Reiko a doktori fokozata megszerzése után (az 1970-es évek közepén) Japánban nem talált munkát, ezért Londonba ment, ahol a King's College-ban dolgozott. Hosszú, sikeres angliai kutatói évek után végül is visszatérhetett Japánba, ahol ő lett az első női professzor a tekintélyes Tokiói Egyetemen. Nagy projektekhez kapott támogatást, és a tudományos sikerek mellett első női professzorként vált ismertté egész Japánban, rengeteg közszerepléssel, bizottsági tagsággal, sok elismeréssel. Évekkel ezelőtt megkérdeztük tőle, hogy ha egy tündér teljesítené egyik kívánságát, mi lenne az. A kérdést komolyan vette, és sokáig habozott. Megkérdezte, hogy kérhet-e valami teljesen irreálisat. Végül elárulta, mit szeretne legjobban: ha lenne családja *és* a munkáját is folytathatná.

– Múlt év decemberében, önálló interjúkötete hazai bemutatóján, a női kutatók egyenjogúságát szemléltetve elmondott egy nagyon jó sztorit, jelezve, hogy ezen a téren még az egész világon van mit tenni. Megosztaná ezt olvasóinkkal?

– Gondolom, arra a történetre utal, amelyet a könyv borítóján szereplő Banga Ilona bemutatása során mondtam el. Banga Ilona 1952-ben táviratot kapott a Parlamentből, hogy Kossuth-díjjal tüntették ki. Amikor azonban kiderült, hogy csak egyedül ő kapta a díjat, és férje, akivel közösen végezte a hivatkozott munkát, nem kapta meg, Ilona nem fogadta el a díjat. Elképzelhető, hogy csak tévedésből hagyták ki a férjét a díjazottak közül, de a hatóságok nem akarták elismerni a hibát. Figyelmeztették Banga Ilonát, hogy cselekedetét ellenségesnek fogják minősíteni, ami megtorlást vonhat maga után. Ilona azt felelte, hogy együtt dolgoztak, és az eredményeik nem választhatók szét. Amikor enyhült a diktatúra, és korrigálták a tévedést, 1955-ben Banga Ilona férjével, Baló Józseffel együtt Kossuth-díjat kapott az elasztin és az elasztáz enzim felfedezéséért.

– Ez igazi happy end.

– Két hasonló esettel találkoztam az Egyesült Államokban. 1995-ben a neurobiológus Lily Jant beválasztották az Amerikai Tudományos Akadémia tagjai közé. Nem fogadta el az elismerést, mert férjének, akivel együtt dolgozott, nem ajánlották fel a tagságot. Az Akadémia szabályzata szerint a javasolt tudós egy évig gondolkozhat azon, hogy elfogadja-e a meg-

Előadás Japánban, 2006
(Hargittai Magdolna szívességéből)

Teller Edével Stanfordban, 1996
(Hargittai Magdolna szívességéből)

tiszteltetést. Egy éven belül Yuh Nung Jant, Lily férjét is felterjesztették az akadémiai tagságra: a házaspár most már boldogan elfogadta az akadémikusságot.

A másik eset alig tíz éve történt egy rákkutató házaspárral. Nancy Jenkins rákgenetikusnak is felkínálták az Amerikai Tudományos Akadémia tagságát. Ő azonban kijelentette, hogy lehetetlen szétválasztani, kettőjük közül ki mivel járult hozzá az eredményeikhez, ezért a férje nélkül nem fogadhatja el a megtiszteltetést. Megint csak az történt, hogy egy éven belül Nancy férjét, Neal Copelandot is beválasztották, és így mindketten elfogadták a tagságot.

Néhány éve érdeklődtem az Amerikai Tudományos Akadémián, volt-e olyan eset, amikor egy férfi jelölt nem fogadta el a felajánlott tagságot, mert a vele közösen dolgozó feleségének nem ajánlották fel. Megígérték, hogy utánanéznek, de a mai napig nem érkezett válasz.

– Három happy end után jöhet a valóság. A méltányosság terén van még mit tanulnia a férfitársadalomnak.

Evezzünk hazai pályákra. Nagyon sok statisztikai adat ismert, hogy a nők egyenlősége a vezetői szinteken ma szinte sehol nincs meg. A tudományban végképp nincs. Csak egyetlen adat, a kémikusok között az MTA-nak két női tagja van: Hargittai Magdolna rendes tag 2010 óta (levelező tag volt 2004 és 2010 között), és Kövér Katalin levelező tag 2013 óta. Többször felvetődött már, hogy e helyzet javítására pozitív diszkriminációt kellene alkalmazni. A legutóbbi idők történései is bizonyítják, hogy a magyar társadalom nem érett arra, hogy ezen önként változtatni akarjon vagy tudjon. Mi a véleménye erről a kérdésről?

– Ez nagyon nehéz kérdés. A „diszkrimináció” szó már eleve rosszul hangzik, negatív érzéseket vált ki, még akkor is, ha a „pozitív” jelzővel használjuk. Még napjainkban is nagy probléma a nők szerepének megítélése, a nők elfogadottsága a tudományban, a politikában és más „férfias” területeken. A kérdést nem lehet pusztán adminisztrációs eszközökkel megoldani, de ma még az sem látszik, hogy törekednének a helyzet javítására. Itt nem az akadémiai körökre gondolok, hanem mindenekelőtt a politikai életre, amely viszont modellül szolgál sok más terület számára is.

Ami a tudományos és egyetemi életet illeti, fontos, hogy a szakmai alkalmasság legyen az elsődleges szempont. Az olyan pozitív diszkriminációt kimondottan károsnak tartanám, amely egy kevésbé alkalmas nőt választana ki egy alkalmasabb férfi helyett, csak azért, hogy javítson az arányokon. Ugyanakkor egyenlő felkészültség és alkalmasság esetén helyénvalónak találom a női jelölt megválasztását. Nagy szükség van arra, hogy a tisztségekre történő jelöléseknél ne feledkezzenek meg a nőkről. Amikor húsz férfi ül egy asztal körül, és az a feladatuk, hogy válasszanak egy huszonegyedik személyt, szinte automatikusan egy huszonegyedik férfira gondolnak. Ezen a hozzáálláson kellene változtatni, amihez szükség van arra, hogy beszéljünk erről, felismerjük és elismerjük a problémát. A fiatal nők kutatói pályájának kezdeti szakaszaiban, az első tíz–tizenöt évben, az előléptetéseknél, kinevezéseknél, kutatási támogatások odaítélésénél segítő módon figyelembe kell venni a szülésekre és a csecsemőgondozásra fordított időket.

– Remélem férfitársaim értően olvassák e sorokat.

Pályája, hazai viszonyok között, a külső szemlélő számára töretlennek mondható. Nemzetközileg elismert kutató. 2011-ben, alapításának évében elnyerte az IUPAC által alapított Distinguished Women in Chemistry and Chemistry Engineering díjat. Azóta ezt további három magyar kémikus nyerte el. Ez a nemzetközi elismerés igen magas formája. Jó érzéssel töltötte el, amikor megkapta?

– Nagyon örültem az elismerésnek.

– Tavaly decemberben tudományos ülésszakot rendeztek barátai, tisztelői, munkatársai az Ön tiszteletére egy neves, kerek évforduló alkalmából. Az ülésnek nagy sikere volt, bár csak női tudományos előadói voltak.

– Igen, kizárólag neves női előadói voltak a tudományos ülésnek.

– Többeknek fel is tűnt. Ez is egyfajta diszkrimináció. Megbocsátható, de nem biztos, hogy követendő.

– Amikor azt mondta, hogy „*csak* női tudományos előadói voltak” az ülésnek, remélem, nem értékítéletet fogalmazott meg. Sok tudományos konferencián feltűnően dominálnak a férfi előadók, különösen a tekintélyes, felkért előadók között. A velem kapcsolatos konferencián megvalósított program azt hangsúlyozta, hogy bőven van érdemes női kutató is felkért előadás megtartására. Lehet ezt fricskának tekinteni vagy szellemes figyelemfelhívásnak, nekem tetszett, de semmiféle meszszemenő következtetést ebből nem kell levonni. Az ötlet nem tőlem származott, a konferencia fő szervezője férfi volt. A lényeg az, hogy szerintem magas színvonalú és jó hangulatú rendezvény volt, amely elismerést váltott ki a teljesen vegyes férfi–női hallgatóságból.

– A rendezvény sikeres és méltó volt az ünnepelt hírnevéhez.

Két gyermekük, Eszter és Balázs az Egyesült Államokban professzor. Eszternek bizonyára nem kell annyira megbirkóznia a női egyenjogúság problémáival, mint hazai professzortársainak. Ilyenkor, alig túl az egyik legfontosabb családi ünnepen, nem könnyű oly távol tudni a gyerekeket. Hogy töltötték a karácsonyt?

– Idén a lányunk itthon volt, vele együtt töltöttük az ünnepeket. Az elmúlt években mi voltunk az Egyesült Államokban, váltakozva a fiunknál vagy a lányunknál ebben az időben. Igyekszünk, amennyire lehetséges, hogy minél többet találkozzunk velük és családjukkal.

– Vissza a hivatáshoz. Munkánk talán legfontosabb része tudásunk átadása a felnövekvő generációknak. Az egyetemi tanári feladatkörök közül mennyire élvezi az oktatást?

– Itthon is, vendégprofesszori munkámban is a posztgraduális képzésben vettem részt. Kiváló tanítványaim voltak, akikkel mind a mai napig nagyon jó a kapcsolatom. Megemlítek három példát három különböző pályára. Amikor a különlegesen tehetséges Molnár Judit befejezte doktori tanulmányait, az Egyesült Államokba javasoltuk tanulmányútra. Ennek egyik eredménye lett egy cseh kutatóval való házassága. Judit ma nemzetközileg elismert kiváló kutató a Cseh Köztársaságban, feleség és családanya. Réffy Balázs a PhD-fokozat megszerzése után pályát módosított, de megmaradt a tudományos publikálás területén, amennyiben kiadói tevékenységbe kezdett. Ma az Akadémiai Kiadó vezérigazgatója, tele nagyszerű tervekkel és modernizálási elképzelésekkel. Könyörtelen világversenyben áll helyt, és nemrég hallottam arról beszélni, mennyire segíti a doktori munka során elsajátított szemlélet és hozzáállás jelenlegi tevékenységében. Varga Zoltán a PhD-fokozat megszerzése után a világ egyik vezető kvantumkémiai-számításos laboratóriumába került a Minessotai Egyetemen. Nemrég jött haza négyéves nagyon eredményes munka után, de már ismét hívják Amerikába. Büszke vagyok mindhármukra és a többiekre is.

– Örömömre szolgált, hogy bemutathattam egy sikeres magyar professzor asszonyt és megtudhattam gondolatát néhány, remélem, az olvasókat is foglalkoztató aktuális kérdésről. Köszönöm a beszélgetést.

Kiss Tamás

Gombos Erzsébet[1] – Barkács Katalin[2] – Felföldi Tamás[2] – Vértes Csaba[3] – Záray Gyula[2]

[1] Magyar Tudományos Akadémia, Természettudományi Kutatóközpont [2] Eötvös Loránd Tudományegyetem [3] Ferrate Treatment Technologies Közép-Európai Kft.

Ferrát-technológia alkalmazása biológiailag tisztított, kommunális szennyvizek utókezelésére

Bevezetés

A szennyvíztisztítás célja a szennyezőanyagok olyan mértékű eltávolítása különböző eljárások alkalmazásával, hogy a tisztított szennyvíznek a befogadó felszíni vízbe történő bejuttatását követően a fennmaradó szennyezettség a befogadó öntisztító képessége által lebontható legyen (Barótfi 2000). A kommunális szennyvizek leggyakrabban a csatornahálózaton keresztül egy központi szennyvíztisztító telepre kerülnek, ahol a szennyvíztisztító telep típusától függően adott tisztítófokozatokon való áthaladás során mentesítik a szennyezőanyagoktól, és a befogadó felszíni vízbe bocsátják. A kommunális szennyvizek nagy mennyiségben tartalmaznak szerves anyagokat, köztük fertőzőképes mikroorganizmusokat is. Éppen ezért fontos feladat a vizek fertőtlenítése olyan esetekben, amikor a szennyvíztelepről kibocsátott szennyvíz állóvízbe vagy üdülési övezetbe eső természetes vízbe kerül. Ezen cél elérése érdekében oxidálószereket alkalmaznak. A szennyvízkezelésben oxidálásra és fertőtlenítésre gyakran használt vegyszerek, illetve technológiák a klórozás (klórgáz, klórmész, nátrium-hipoklorit, klóros víz), az ózonizálás, a hidrogén-peroxid, a klór-dioxid, illetve ezek kombinációja. Ezeken kívül fertőtlenítésre alkalmaznak UV-sugárzást és úgynevezett nagy hatékonyságú oxidációs eljárásokat is (Tree és mtsai 1997; Takács és mtsai 2008). Ezen oxidáló- és fertőtlenítőszerek, illetve eljárások használatánál azonban számolni kell toxikus melléktermékek képződésével és azok kezelt vízben való megjelenésével. A szennyvízkezelések harmadik fokozataként az egyik leggyakrabban használt kémiai eljárás, a klórozás ugyan hatékony a fertőtlenítésben és a szerves anyagok egy részét is képes oxidálni, de klórrezisztens baktériumokkal szemben hatástalan. Azonban a ferrát-technológia a szennyvizek utótisztítására még e tekintetben is ígéretes megoldásnak látszik.

A ferrát előállítása

A ferrát előállítása kémiai és elektrokémiai úton lehetséges. A kémiai módszerek alapja valamilyen Fe(III)vegyület (pl. ferri-klorid vagy -nitrát) reagáltatása oxidálószerrel. Ez megvalósítható nedves eljárással lúgos körülmények közt, vagy száraz, termikus eljárással ellenőrzött hőmérséklet és megfelelő atmoszféra biztosítása mellett (az utóbbi módon gyártott ferrátsó stabil, de előállítása költségigényes). Az elektrokémiai módszer esetén vasanódot, lúgos közeget és elektrokémiai oxidációt alkalmaznak (Alsheyab és mtsai 2009). A nedves eljárással történő ferrát-előállításnak számos előnye van, így például a helyszínen, általánosan alkalmazott vegyszerekből történő készítés, ami miatt nem kell a frissen gyártott vegyszer tárolási költségeivel számolni, illetve az oldat formában történő előállítás, amely az adagolás és eloszlatás egyszerűbb módját biztosítja (Sharma 2006).

Nedves eljárással az alábbi reakció szerint állítható elő:

$$2Fe^{3+} + 3OCl^- + 10OH^- = 2FeO_4^{2-} + 3Cl^- + 5H_2O$$

Az előállításhoz alkalmazott nyersanyagok:

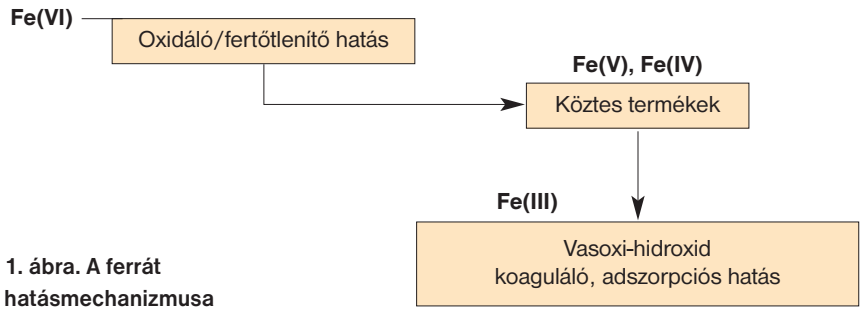
- OCl^-: NaOCl, $Ca(OCl)_2$
- Fe^{3+}: $FeCl_3$, $Fe(NO_3)_3$
- OH^-: NaOH, KOH.

Kísérleteinkhez nátrium-ferrátot (Na_2FeO_4) állítottunk elő nedves oxidációval a Ferrate Treatment Technologies Company (Orlando, Fl, USA) receptje alapján ajánlott lúgos közegben, illetve hőmérsékleten. A cikkben a ferrát koncentrációja minden esetben Fe(VI)-ban van kifejezve.

A ferrát jellemzői

A ferrátion (FeO_4^{2-}) igen erős, emellett azonban környezetbarát oxidálószer (deLuca és mtsai 1996; Tiwari és mtsai 2005). Redoxipotenciálja pH-tól függően változó, savas közegben +2,2 V, lúgos környezetben +0,7 V (Haag és Hoigne 1983; Sharma 2002; Alsheyab és mtsai 2009).

A ferrátion semleges és savas pH-n viszonylag gyorsan lebomlik, lúgos közegben viszont – a lúgosság mértékétől függően – hosszú ideig stabil marad. Előnyös sajátsága, hogy a ferráttal végzett oxidációs reakció termékként a vízközegből vas-oxi-hidroxid csapadék válik le, amely nagy fajlagos felülete révén megköti az oxidá-



1. ábra. A ferrát hatásmechanizmusa

ciós melléktermékeket, növelve a víztisztítás hatékonyságát (**1. ábra**).

A ferrát-technológia alkalmazásakor használt biológiailag tisztított, kommunális szennyvizek jellemzői

Kutatásainkhoz a biológiailag tisztított mintákat a Fővárosi Csatornázási Művek Zrt.-hez tartozó Dél-pesti és Észak-pesti Szennyvíztisztító Telepekről kaptuk.

A telepen a befolyó nyers szennyvíz először az elsődleges tisztítási fokozaton (mechanikai tisztítás) megy keresztül. Ezután a nagyobb méretű szilárd szennyezőktől már részben mentes szennyvíz a második tisztítási fokozatba kerül, ahol a diszperz részecskék közül a kolloidális mérettartományba (1–500 nm) eső szennyezőanyagok visszatartása és az oldott szerves anyagok eltávolítása történik eleveniszapos levegőztető medencékben mikroorganizmusok irányított tevékenysége révén. Ezt követően az utóülepítőben választják szét az eleveniszapot a tisztított víztől. A szennyvíztisztítás harmadik fokozatában vagy tisztán kémiai, vagy biológiai és kémiai tisztítási eljárások kombinálásával a szennyvízben még jelen levő növényi tápanyagok (N, P) mentesítése, illetve fertőtlenítés történik (Salma 2012). A Dél-pesti Szennyvíztisztító Telepen a biológiai fokozat után áprilistól októberig fertőtlenítik a vizet, hogy megfeleljenek az előírásoknak, mivel jogszabály határozza meg a megengedhető határértéket azon szennyvíz esetében, mely a Duna olyan szakaszába (Ráckevei Duna-ág) kerül, ami állóvíznek minősül, és ahol fürödni is lehet. A kísérleteink során a két különböző telepről származó, biológiailag kezelt szennyvizek fizikai kémiai és biológiai jellemzőit, a paraméterek minimum- és maximumértékeit az **1. táblázat** tartalmazza.

Kezelési módszerek

A szennyvizek kezelését derítési eljárással valósítottuk meg, mely során SW1 flokkulátort (Stuart Scientific, Redhill, UK) használtunk a minták különböző sebességű és idejű kevertetése, valamint a hozzájuk adott vegyszerek jobb eloszlatása érdekében. A kísérletek többségében a vízkezelések kontaktideje 30 perc volt, mely során 500–700 ml térfogatú mintákhoz adagoltuk a ferrátot különböző koncentrációkban. A derítéseknél általában először rövid idejű gyors, majd hosszabb ideig tartó lassú keverést alkalmaztunk a jobb derítőhatás eléréséhez. A ferrát hozzáadása után a szennyvizek pH-ja lúgos tartományba (dél-pesti szennyvizek esetén pH: 8,79–11,30, észak-pestieknél pH: 9,44–11,46) tolódott el. A kezelések során a megfelelő pH (7–8 közötti) beállítása érdekében savakat (HCl és H_2SO_4) használtunk. A pH-csökkentést az oxidációs folyamat sebességének növelése céljából alkalmaztuk.

Annak érdekében, hogy összehasonlíthassuk a ferrátkezelés és a klórozás hatékonyságát a szervesanyag-eltávolítás, valamint a fertőtlenítés tekintetében, vizsgáltuk a Dél-pesti Szennyvíztisztító Telepen 15 mg L^{-1} klórgázzal kezelt, biológiailag tisztított szennyvizeket és a laboratóriumunkban klórozott, a fenti telepről származó biológiailag kezelt vizeket is.

A Dél- és Észak-pesti Szennyvíztisztító Telepről származó biológiailag tisztított, kommunális szennyvizek szerves anyagának eltávolítás ferráttal

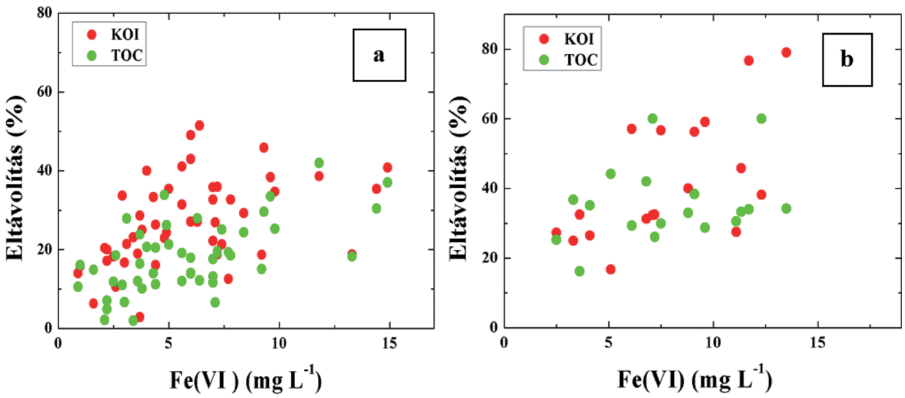
Mind a Dél-, mind az Észak-pesti Szennyvíztisztító Telepről származó vízminták esetén megvizsgáltuk a kémiai oxigénigény (KOI) és az összes szerves széntartalom (TOC) csökkenését ferrát-technológia alkalmazásakor. A kapott eredményeket a **2.a** és **2.b** ábrák szemléltetik.

Jól látható, hogy a Fe(VI) kis koncentrációban (1–3 mg L^{-1}) való alkalmazásánál is el lehetett érni szervesanyag-csökkentést a különböző összetételű szennyvizekben – dél-pesti szennyvizek esetén 6–20% KOI- és 2–16% TOC-, észak-pestieknél 20–30% KOI- , valamint ugyanekkora TOC-csökkentést –, de a ferrátkoncentráció növelésével a szervesanyag-eltávolítás is tovább növelhető volt. 5–10 mg L^{-1} Fe(VI)-koncentráció használatával a dél-pesti szennyvizek kezelésekor átlagosan több, mint 30% (néhány esetben 40% feletti) KOI-, valamint 19% TOC-csökkenést valósítottunk meg. Az észak-pesti szennyvizek tisztításakor ugyanezen Fe(VI)-koncentráció nagyobb mértékű, átlagosan 43% KOI- és 37% TOC-csökkentést eredményezett. Mindkét (eltérő összetételű) szennyvíz kezelése során megállapítást nyert, hogy a Fe(VI) adagjának további növelésével már nem lehe-

1. táblázat. A Dél-pesti és Észak-pesti Szennyvíztisztító Telepekről származó, biológiailag tisztított, kommunális szennyvizek jellemző adatai

Paraméterek	Dél-pesti szennyvíz N = 19	Észak-pesti szennyvíz N = 8
pH	7,14–8,14	7,31–7,81
fajlagos elektromos vezetőképesség (μS cm^{-1})	1110–1585	880–1130
teljes KOI (mg L^{-1})	26–204	12–48
oldott KOI (mg L^{-1})	21–172	6–37
TOC (mg L^{-1})	11,5–49,3	8,7–15,2
DOC (mg L^{-1})	11,1–38,4	8,2–11,1
AOX (μg L^{-1})	28–242	30–80
reaktív PO_4^{3-} (mg L^{-1})	<0,01–3,19	3,15–10,0
TNb (mg L^{-1})	4,4–59,2	3,6–13,8
Cl^--tartalom (mg L^{-1})	142,0–177,5	113,6–177,5
zavarosság (NTU)	0,702–4,197	2,113–6,488
lebegőanyag-tartalom (mg L^{-1})	5,0–15,3	2,0–9,0*
MPN (sejt mL^{-1})	$3,10\times10^4$–$8,00\times10^6$	$2,58\times10^4$–$1,67\times10^6$

* Lebegőanyag-tartalom mérés a Fővárosi Csatornázási Művek Zrt. laboratóriumában történt.



2. ábra. Ferráttal való KOI- és TOC-csökkentés a Dél- (a) és az Észak-pesti (b) Szennyvíztisztítóból származó, biológiailag tisztított szennyvizek utókezelése során

tett nagyobb mértékű szervesanyag-eltávolítást elérni az adott összetételű tisztított szennyvízben.

A ferrát és a klórozás szervesanyag-eltávolításának összehasonlítása

Megállapítottuk, hogy azoknál a szennyvízmintáknál, melyeknél a telepen történt a klórozás, majd műanyag kannában szállították be a kezelt mintákat a laboratóriumba, gyakorlatilag nem mutatható ki a klórozás hatására TOC-eltávolítás (a mért csökkenés átlagosan 1,7%). A laboratóriumunkban klórozott szennyvízminták esetében 3,7 ± 6,4% TOC-csökkenés volt elérhető a 15 mg L^{-1} körüli klórgáz adagolásával. Ezek alapján kijelenthető, hogy klórozással a dél-pesti szennyvízminták kezelésekor nem lehet számottevő és egyúttal reprodukálható szervesanyag-tartalom csökkentést elérni. Míg a megfelelő mértékű fertőtlenítéshez szükséges klórgáz használatával csak kb. átlagosan 2% TOC-csökkentés valósítható meg (aminek igen nagy a szórásértéke), addig Fe(VI)-tal sikerült 18% körüli TOC-eltávolítást elérni.

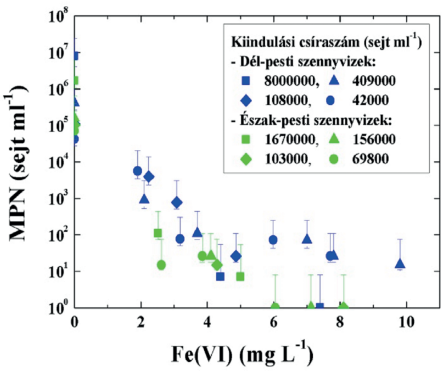
Fertőtlenítési vizsgálatok

Mind a Dél-, mind az Észak-pesti Szennyvíztelepekről, különböző időpontokból származó, biológiailag tisztított kommunális szennyvizek ferráttal való fertőtlenítésékor megállapítható, hogy bár különböző kiindulási csíraszámmal rendelkeztek a szennyvízminták, mégis – függetlenül a kezdeti baktériumszámtól – sikerült megfelelő mértékű inaktiválást elérni általában 2–8, átlagosan már 5 mg L^{-1} Fe(VI)-koncentrációval is **(3. ábra)**.

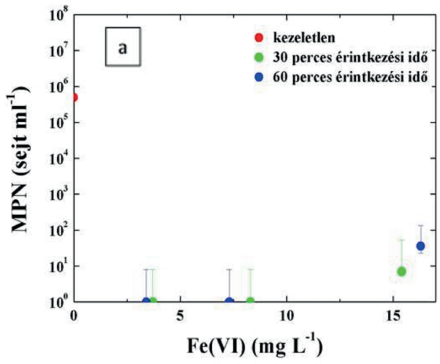
Az eredmények azt mutatják, hogy különböző összetételű, biológiailag tisztított kommunális szennyvizek ferráttal hatékonyan fertőtleníthetők.

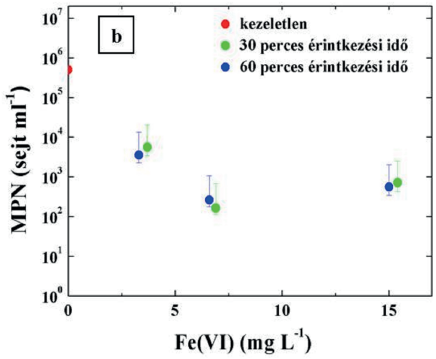
2. táblázat. A Dél-pesti Szennyvíztisztító Telepről származó, biológiailag tisztított kommunális szennyvizek fertőtlenítési célú kezelésének eredményei (MPN – most probable number)

Eredeti, klórozott és a 99,9% inaktiválást biztosító Fe(VI)-adagot tartalmazó minták fertőtlenítési adatai			
Minta	**MPN (sejt ml^{-1})**	**Eltávolítás nagyságrendje**	**eltávolítás (%)**
2010. 05. 19.			
Eredeti minta	8×10^6		
Telepen klórozott minta	$2{,}3\times10^1$	5	99,99
99,9%-os csíraszám-csökkentéshez tartozó ferrátadagot tartalmazó minta (4,3 mg L^{-1} Fe(VI))	$2{,}3\times10^1$	5	99,99
2010. 06. 17.			
Eredeti minta	$1{,}03\times10^5$		
Telepen klórozott minta	7×10^1	4	99,93
Laboratóriumban klórozott minta (0,12 mg L^{-1} maradék Cl_2-t tartalmazó) minta	$2{,}6\times10^2$	3	99,74
99,9%-os csíraszám-csökkentéshez tartozó ferrátadagot tartalmazó minta (6,4 mg L^{-1} Fe(VI))	$1{,}51\times10^2$	3	99,85
2010. 07. 08.			
Eredeti minta	$8{,}47\times10^6$		
Telepen klórozott minta	$4{,}09\times10^5$	1	87,22
Laboratóriumban klórozott minta (3 mg L^{-1} maradék Cl_2-t tartalmazó) minta	< 10	5	99,99
99,9%-os csíraszám-csökkentéshez tartozó ferrátadagot tartalmazó minta (3,7 mg L^{-1} Fe(VI))	$1{,}09\times10^2$	3	99,97
2011. 07. 13.			
Eredeti minta	$5{,}69\times10^4$		
Telepen klórozott minta	$7{,}18\times10^3$	1	87,38
99,9%-os csíraszám-csökkentéshez tartozó ferrátadagot tartalmazó minta (19,1 mg L^{-1} Fe(VI))	7	4	99,99
2011. 10. 12.			
Eredeti minta	$1{,}56\times10^5$		
Telepen klórozott minta	$2{,}3\times10^1$	4	99,99
99,9%-os csíraszám-csökkentéshez tartozó ferrátadagot tartalmazó minta (11,7 mg L^{-1} Fe(VI))	$1{,}5\times10^1$	4	99,99



3. ábra. Különböző ferrátkoncentrációkkal végzett fertőtlenítés eredményének összehasonlítása a dél- és észak-pesti biológiailag tisztított kommunális szennyvizek kezelésekor





4. ábra. Mycobacterium setense M9-4 baktériumtörzs (a) és Bacillus licheniformis RB1-1B baktériumtörzs (b) inaktiválása ferráttal

A ferrát és a klórozás fertőtlenítési hatékonyságának összehasonlítása

Összehasonlítottuk a ferrát és a klórgáz hatékonyságát fertőtlenítés szempontjából is. Ezen kísérletekhez a Dél-pesti Szennyvíztisztító Telepről származó, biológiailag tisztított, kommunális szennyvízmintákat használtuk fel. A **2. táblázat** adatai alapján látható, hogy laboratóriumi klórozáskor 3–5 nagyságrendű csíraszámcsökkenést értünk el, a telepi klórozott minták esetében ez a csökkenés a mintavételi időponttól függően 1–5 nagyságrend közt változónak adódott. Ferrát alkalmazásával hasonló eredményeket kaptunk, mint a laboratóriumi klórozás esetében, vagyis 3–5 nagyságrendnyi csökkenést sikerült elérni baktériumszám tekintetében. A különböző minták kezelésekor a hatékony fertőtlenítés elérése nem feltétlenül ugyanazt a nagyságrendnyi eltávolítást jelentette az egyes fertőtlenítőszerek alkalmazásánál.

A ferrát és a klór hatásának összehasonlításakor összességében az állapítható meg, hogy hatékony összcsíraszám-csökkentés érhető el mindkét oxidálószerrel.

Klór-rezisztens baktériumfajok inaktiválása ferrát-technológiával

Annak eldöntése céljából, hogy a ferrát alkalmas-e klór-rezisztens baktériumok elpusztítására, a Dél-pesti Szennyvíztisztító Telepen vett, biológiailag tisztított, kommunális szennyvizet használtuk modellvízként. Annak biztosítása érdekében, hogy csak klór-rezisztens baktériumokat tartalmazzon a vizsgált vízminta, a szennyvizet 15 percig 121 °C-on autoklávban sterilizáltunk, majd ezt oltottuk be tiszta baktériumkultúrákkal. Két, a szakirodalmi és egyéb kutatási adatok alapján klór-rezisztens baktériumnak tartott törzset választottunk a kísérletekhez, melyek a következők voltak: *Mycobacterium setense* M9-4 (Homonnay, Makk, Márialigeti és Tóth, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Mikrobiológiai Tanszék, nem publikált eredmények), és *Bacillus licheniformis* RB1-1B (Felföldi és mtsai 2010).

Az előzőleg sterilizált szennyvízben a baktériumsejt-koncentráció az egyes törzseknél 5×10^5 sejt ml^{-1} értékre lett beállítva. Két különböző érintkezési idő (30 és 60 perc) mellett vizsgáltuk meg a ferrát hatékonyságát ezen baktériumtörzsek inaktiválásában.

A *Mycobacterium setense,* valamint *Bacillus licheniformis* baktériumfajt tartalmazó szennyvíz ferráttal való kezelésének eredményeit a **4.a** és **4.b** ábrák szemléltetik, melyeken a Fe(VI)-koncentráció függvényében logaritmikusan ábrázoltuk a csíraszám változását. Három különböző ferrátkoncentrációt használtunk ezen kísérletek során.

Az ábrákon a mért csíraszám-adatok átlagát az adatok szórásintervallumával együtt tüntettük fel. A kapott adatok alapján elmondható, hogy már a rövidebb kontaktidő is elegendőnek bizonyult a vízkezelések során. A *Mycobacterium setense* baktériumfaj kezelésekor *(4.a ábra)* a legkisebb ferrátadaggal is hatékony fertőtlenítést (> 99,9%, ami 5 nagyságrendnyi csökkenést jelent) értünk el. A nagyobb ferrátadagok alkalmazásakor tapasztalt csíraszám-növekedés minden bizonnyal a kezelés utáni elszennyeződésre vezethető vissza. A *Bacillus licheniformis* baktériumfajt tartalmazó víz ferráttal való kezelése során is megfelelő csíraszámcsökkentést kaptunk *(4.b ábra)*. Mindkét kontaktidő esetén a 6–7 mg L^{-1} ferrátkoncentráció alkalmazása nagyobb, mint 99,9% hatékonyságú fertőtlenítést eredményezett. Ezen baktériumfaj kezelése során is bebizonyosodott, hogy elég 30 perces kontaktidőt alkalmazni a megfelelő mértékű fertőtlenítés elérése érdekében. A hatékony baktérium-inaktiváláshoz ebben az esetben nagyobb Fe(VI)-adagra volt szükség, mint például a *Mycobacterium setense*-ke-

3. táblázat. AOX-vegyületek koncentrációja a Dél-pesti Szennyvíztisztító Telepről származó klórgázzal, illetve ferráttal kezelt, biológiailag tisztított kommunális szennyvizekben

AOX-koncentráció (érték ± szórás) (µg L^{-1}) *(Fertőtlenítési hatásfok, %)*			
Biológiailag tisztított szennyvíz	Klórgázzal kezelt, biológiailag tisztított szennyvíz (15 mg L^{-1} Cl_2)	Ferráttal kezelt, biológiailag tisztított szennyvíz	
			mg L^{-1} Fe(VI)
25 ± 1	145 ± 8 *(87,4)*	95 ± 7 *(97,9)*	2,6
30 ± 1	290 ± 20 *(97,6)*	125 ± 3 *(96,3)*	2,2
110 ± 14	365 ± 17 *(99,9)*	210 ± 17 *(99,9)*	6,4
235 ± 7	350 ± 20 *(99,9)*	285 ± 18 *(99,9)*	2,3
240 ± 18	355 ± 20 *(98,1)*	285 ± 33 *(99,7)*	3,6

n (mintánkénti meghatározások száma) = 3

zelésekor, aminek az lehet az oka, hogy a *Bacillus licheniformis* esetében spórák alakulhattak ki, amelyek ellenállóbbak a különféle oxidálószerekkel szemben, mint a vegetatív sejtek.

Összességében megállapítható, hogy ferráttal az igen nagy számban jelen levő klórrezisztens baktériumok is jó hatásfokkal (> 99,9%) eltávolíthatók. Azonban fajonként eltérő oxidálószer-mennyiséggel érhető el ez a kedvező eredmény, a hatékony ferrátkoncentráció 4–8 mg L^{-1} Fe(VI)-érték közt változott a vizsgálataink során.

Toxikus melléktermékek (AOX-adszorbeálható szerves halogén vegyületek) képződésének vizsgálata ferráttal, illetve klórgázzal kezelt, biológiailag tisztított kommunális szennyvizek esetében

Meghatároztuk a Dél-pesti Szennyvíztisztító Telepről különböző időpontban vett tisztított szennyvízminták kezdeti AOX-koncentrációit, amelyek tág határok között (25–240 μg L^{-1}) változtak. Ezen vízminták klórozását és ferrátkezelését követően mértük az AOX alakulását. Az eredményeket a **3. táblázatban** tüntettük fel.

Az AOX-koncentrációk a biológiailag tisztított szennyvízre átlagosan 128 ± 105, a klórozottra 301 ± 92, míg a ferráttal kezeltre 200 ± 88 μg L^{-1}-nek adódtak. A vizsgált minták esetén klór használatakor 115 és 260 μg L^{-1}, ferrát alkalmazásakor pedig 45 és 100 μg L^{-1} közé tehető ez az AOX-növekedés. Átlag 173 ± 77 μg L^{-1}, illetve 72 ± 25 μg L^{-1} értékkel nőtt a tisztított szennyvízminták eredeti AOX-koncentrációja az adott, megfelelő baktériuminaktiválást eredményező mennyiségű fertőtlenítőszer hatására. A kapott értékek alapján elmondható, hogy mindkét vegyszer megnöveli a kezelt vízben az AOX-koncentrációt, de a megfelelő hatásfokú fertőtlenítéshez szükséges mennyiségű fertőtlenítőszerek hatását e téren összevetve, a ferráttal kezelt vizekben az AOX-koncentráció növekedésének mértéke kisebb, mint klórozás esetén.

Összességében a ferrát-technológia fertőtlenítést célzó alkalmazása előnyösebb a klórozásnál, mivel elpusztítja a klór-rezisztens baktériumokat is, nagyobb TOC-csökkentést biztosít, és kisebb mértékű AOX-növekedést eredményez.

IRODALOM

Alsheyab, M., Jiang, J. Q. and Stanford, C. (2009). On-line production of ferrate with an electrochemical method and its potential application for wastewater treatment – A review. Journal of Environmental Management 90:1350–1356.

Barótfi, I. (2000). Környezettechnológia. Mezőgazda Kiadó, Budapest.

deLuca, S. J., Idle, C. N. and Chao, A. C. (1996). Quality improvement of biosolids by ferrate(VI) oxidation of offensive odour compounds. Water Science and Technology 33:119–130.

Felföldi, T., Székely, A. J., Gorál, R., Barkács, K., Scheirich, G., András, J., Rácz, A. and Márialigeti, K. (2010). Polyphasic bacterial community analysis of an aerobic activated sludge removing phenols and thiocyanate from coke plant effluent. Bioresource Technology 101:3406–3414.

Haag, W. R. and Hoigne, J. (1983). Ozonation of bromide-containing waters – kinetics of formation of hypobromous acid and bromate. Environmental Science & Technology 17:261–267.

Salma, I. (szerk.) (2012). Környezetkémia, Barkács K. 4. Vízkémia fejezet, Typotex Kiadó, Budapest.

Sharma, V. K. (2002). Potassium ferrate(VI): an environmentally friendly oxidant. Advances in Environmental Research 6:143–156.

Sharma, V. K. (2006). Ferrate (FeO_4^{2-}): Environmentally-Friendly Oxidant, Coagulant and Disinfectant for Water and Wastewater Treatment, in Symposium – Ferrates: Synthesis, Properties, and Applications in Water and Wastewater, 332nd ACS National Fall Meeting, San Francisco.

Takács, E., Wojnárovits, L., Pálfi, T. and Emmi S. S. (2008). Irradiation treatment of textile dye containing wastewater. IAEA-TECDOC 1598, Vienna 59–75.

Tiwari, D., Yang, J.-K. and Lee, S.-M. (2005). Applications of ferrate(VI) in the treatment of wastewaters. Environmental Engineering Research 10:269–282.

Tree, J. A., Adams, M. R., Lees D. N. (1997). Virus inactivation during disinfection of wastewater by chlorination and UV irradiation and the efficacy of F+ bacteriophage as a 'viral indicator'. Water Science and Technology 35:227–232.

http://www.ferrate.eu

Heltai György[1] – Flórián Károly[2] – Győri Zoltán[3] – Fekete Ilona[1] – Halász Gábor[1] – Kovács Katalin[1] – Takács Anita[1] – Horváth Márk[1,3]

[1] Szent István Egyetem, Környezettudományi Intézet, Kémia Tanszék ■ [2] Technical University of Košice, Department of Chemistry ■ [3] Szent István Egyetem, Regionális Tudásközpont

Nehézfém-szennyezés környezeti mobilitásának becslése a talaj/légkör/víz/üledék rendszerben

Bevezetés: A kémiai speciáció fogalma

A kémiai elemek szerepének felderítése a földi életet meghatározó biogeokémiai körfolyamatokban közel kétszáz éve fontos kutatási területe a természettudományoknak. Az élettani tudományokban régóta jól ismert tény, hogy az egyes kémiai elemek biológiai hozzáférhetőségét és szerepét, nutritív vagy toxikus hatását elsősorban az adott elem azonosítható kémiai megjelenési formája határozza meg az adott természeti közegben, amelyet összhangban az IUPAC bizottságainak 2000-ben megjelent aján-

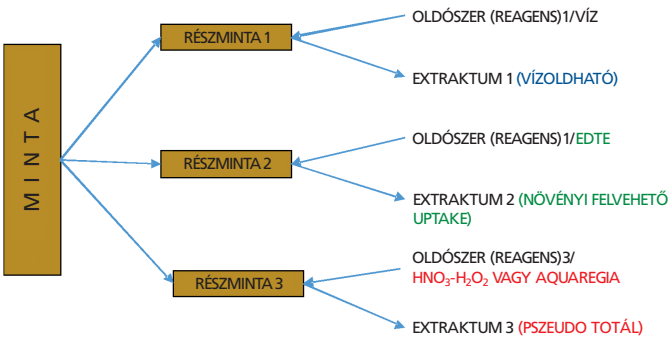
lásaival a továbbiakban elemi speciesznek nevezünk. Az elemi specieszek meghatározására irányuló tevékenységet ennek értelmében nevezzük speciációs analízisnek, a speciáció kifejezés alatt pedig az adott elem mennyiségi megoszlását értjük az adott rendszerben meghatározható összes speciesze között [1].

Speciációs elemzés és frakcionálás, toxikológiai kockázat értékelése

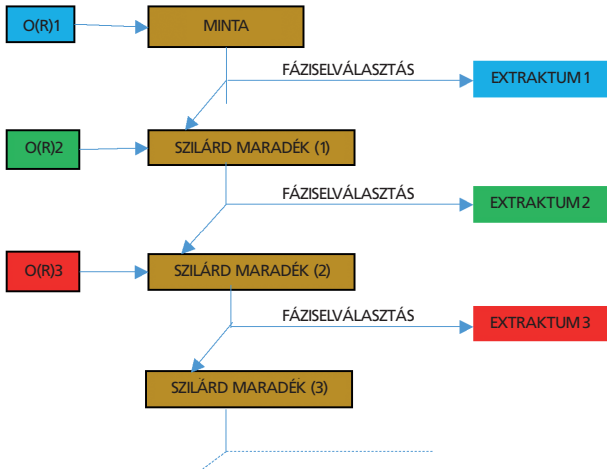
A potenciálisan toxikus elemek – amelyeket a környezetvédelmi szakirodalomban kémiai szempontból helytelenül neveznek nehézfémeknek – a legfontosabb csoportját képezik a perzisztens szervetlen környezetszennyező anyagoknak. A kémiai elemek beépülése a növény-állat-ember táplálékláncba már a 19. század közepe óta központi kérdése volt az agrokémiai kutatásnak, s a növényi tápanyagellátás megfelelő tervezéséhez számos módszert dolgoztak ki a tápelemek biológiailag hozzáférhető frakciójának meghatározására a talajban. Ezek a módszerek olyan kioldószerek alkalmazásán alapulnak, amelyek a gyökéren keresztüli tápanyag-felvételt modellezik [2]. A 20. század hetvenes éveitől a fokozódó környezetszennyezés ehhez hasonló kérdéseket indukált a környezetvédelmi kutatások területén, azzal a különbséggel, hogy ez esetben a fő probléma a szennyezőanyagok humán és ökotoxikológiai hatásának az értékelése volt. Ez az igény új követelményeket jelentett az analitikai módszerek számára, s elvezetett a speciációs analitikai kémia kifejlődéséhez, amely előfeltétele annak, hogy a környezeti rendszerekben megjelenő elemi specieszek toxikológiai hatását értékelni tudjuk [1,3]. Ezekben az eljárásokban a mintavétel és minta-előkészítés folyamán meg kell őrizni az elemek eredeti kémiai megjelenési formáját, majd megfelelő módszereket kell alkalmaznunk az egyes elemi specieszek elválasztására az analitikai detektálás előtt **(1. ábra)**.

A kilencvenes években egyre gyorsuló ütemben fejlődő speciációs analitika a környezettudományi kutatások széles körében elfogadtatta azt felismerést, hogy a nehézfémek környezeti mobilitását és biológiai hatását a jelen lévő kémiai megjelenési formák (specieszek) határozzák meg, s így szennyezett területeken a biológiai kockázat teljes értékelése megkövetelné a rendszerben jelen lévő összes kémiai elem teljes speciációját. 2002-ben az EU-ban megalapították az EVISA (European Virtual Institute for Speciation Analysis) intézményét a tagok közötti információcsere előmozdítására, tudásbázis létrehozására és az együttműködés szervezésére a speciációs kémiai elemzés területén [4]. A környezeti minták (kőzet, üledék, talaj, ülepedő por, bányászati hulladék, biológiai anyagok stb.) komplex szerkezete miatt azonban az is bebizonyosodott, hogy az összes kimutatható toxikus elem teljes speciációja gyakorlatilag megoldhatatlan feladat, s általában nem is célszerű. A környezeti kockázatelemzésben kompromisszumos megoldásként emiatt a szennyező nehézfémtartalom környezeti mobilitás szerinti frakcionálási módszereinek kidolgozása vált a kutatások fő irányává. Ezen a területen exponenciálisan növekedett a publikációk száma: 1975 és 2000 között 352, míg 2001 és 2015 között 2013 közlemény jelenik meg a Web of Science keresésben a „heavy metal fractionation in soils and sediments” témakörből. Az e célra alkalmazott analitikai eljárásokra az IUPAC 2000-ben javasolta a frakcionálás elnevezést, a korábban használt „műveletileg definiált speciáció” helyett [1]. Adott elem környezeti mobilitásának becslése a frakcionálási eljárások során a különböző kötésformáinak különböző oldhatóságán alapul, növekvő agresszivitású oldószerek szekvenciális alkalmazásával [5,6]. Míg az agrokémiai célú vizsgálatoknál az eredeti minta részleteihez adjuk hozzá a különböző oldószereket **(2. ábra)**, addig a környezeti kémiában egymást követő lépésekben

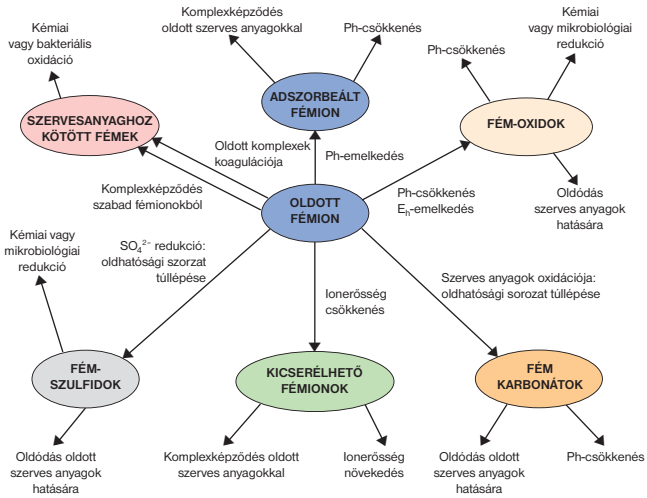
1. ábra. A speciációs analitikai eljárások sémája



2. ábra. Az agrokémiában alkalmazott sorozatos egylépéses kioldási stratégia



3. ábra. A szekvenciális extrakció stratégiája. Az ábrán az O(R) rövidítés az „oldószer (reagens)” kifejezést jelenti



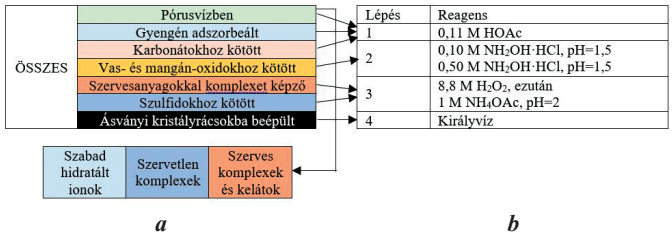
4. ábra. Az oldott fémionok és a szilárd környezeti fázis közötti lehetséges kölcsönhatások [3]

végezzük a kioldásokat ugyanazon mintával, az egyes lépések között fáziselválasztásokat végezve **(3. ábra)**.

A szekvenciális extrakciós eljárások gyakorlata

Az első szekvenciális extrakciós eljárást Tessier dolgozta ki vízi üledékek nehézfémtartalma mobilizálódásának jellemzésére [7], a vízben oldott fémionok és a szilárd környezeti fázis (kőzet, talaj, üledék) közötti lehetséges kölcsönhatásokra alapozva **(4. ábra)**.

Ennek alapján Tessier a különböző kötésformákban található fémes specieszeket az **5. ábra** sémája szerint csoportosította [7].



5. ábra. a) Vízi üledékek elemtartalmának frakcionálása Tessier szerint [5, 6, 7]. b) Az eredeti BCR-ajánlás szerinti szekvenciális extrakció sémája [8, 9, 10]

1. táblázat. A BCR-eljárás problémái és ez ezek megoldása

A BCR-eljárás hiányossága		**Fejlesztési irányok, eredmények**
Nem követi a természetes mobilizálódási folyamatok kémiáját.	→	A környezeti mobilizácó kémiájának jobb követése: a karbonizációs mobilizáció modellezése szuperkritikus extraktorban szuperkritikus CO_2, szubkritikus H_2O és H_2O/CO_2 oldószerek alkalmazásával [28].
	→	Nagyméretű (1–10 kg befogadó képességű) kőzet-, üledék-, talajoszlop felülről történő átmosása a természetes viszonyokat modellező oldószerekkel (víz, sóoldatok) és sebességgel (0,1–10 L/nap) elsősorban hidrogeológiai célokra [29].
Már az első lépésben reagáló oldószert (ecetsav) alkalmazunk, így nem őrízhető meg a specieszek eredeti formája, s ezért nem köthető össze speciációs elemzéssel és ökotoxikológiai tesztekkel.	→	Vizes extrakció alkalmazása ökotoxikológiai tesztek kidolgozásához. Nehézfémekkel szennyezett vízi üledékekből centrifugálással kinyert pórusvíz, a hideg vizes extrakció és a szuperkritikus extraktorban szubkritikus vízzel végzett extrakció alkalmasnak bizonyult ökotoxikológiai tesztek alkalmazására [30, 31].
Az áztatásos-rázatásos kioldási technika időigényes, a többlépéses extrakciók időszükséglete minimálisan 4–5 nap.	→	Az áztatásos kioldási technika gyorsítása ultrahang, illetve mikrohullámú besugárzás segítségével [32, 33].
Az egyes extrakciós lépések szelektívitását és teljességét nagymértékben befolyásolják az alkalmazott reagens-oldószerek és az alkalmazott eljárás technikai körülményei.	→	Folytonos áramlású extrakciós technikák kidolgozása: 1) 0,25–5 g szilárd minta vizsgálatához kialakított, membránszűrőkkel határolt átfolyós keverőkamra, mágneses keveréssel ellátva. Az oldószereket perisztaltikus pumpával folyamatosan vezetik át a kamrán [34]. Ehhez hasonló a kvarcszűrőkkel kialakított hengeres mikrooszlop-technika, amelyben azonban mindössze 5–25 mg minta vizsgálható [35]. 2) Szuperkritikus extraktorban szuperkritikus CO_2, szubkritikus H_2O és H_2O/CO_2 oldószerek egymást követő alkalmazásával vízoldható és hidrogén-karbonát formában oldódó frakciók különíthetők el az eredeti specieszek megőrzésével [36, 37]. 3) A 20 mL térfogatú, speciális planetáris centrifugán forgatott spirális oszloppal sikerült megvalósítani az extrahálószer folyamatos átáramlását az oszlopba töltött 0,5 g szilárd mintán keresztül anélkül, hogy az oszlop ki- és bemenetét membránszűrőkkel kellene lezárni. Ezzel a berendezéssel talajok, üledékek, hordalékok elemtartalmának frakcionálása különböző reagenseket alkalmazó szekvenciális extrakciós eljárásokkal is megvalósítható volt [38, 39].
A nagyszámú művelet és reagens alkalmazása során bekövetkező kontamináció veszélye.	→	A reagensek és műveletek számának csökkentése, ez leginkább a folyamatos áramlású rendszerekkel valósítható meg [34–45].
Csak üledékek elemtartalmának BCR-eljárás szerinti frakcionálásához áll rendelkezésre tanúsított anyagminta (CRM-701), amely mindössze hat elem (Cd, Cr, Cu, Ni, Pb, Zn) frakcionálására van validálva.	→	Az alkalmazási terület bővítése különböző minta-mátrixokra: talaj, szállópor, vörösiszap, komposzt, biofilm [32, 46–50].
Emiatt korlátozott az alkalmazási és validálási lehetőség más minta-mátrixokra és más potenciálisan toxikus elemek vizsgálatára.	→	A foszfor, az arzén, a szelén és más elemek frakcionálására más, a BCR-től eltérő frakcionálási eljárásokat (reagenseket) alkalmaznak [51–].
Az egyes extraktumokban az extraháló reagensek nagy koncentrációja miatt a spektrokémiai elemdetektálás erős mátrixhatásokkal terhelt, s különösen a multielemes technikák (ICP-OES, ICP-MS) alkalmazása esetén mátrixillesztéses kalibráció nélkül nem juthatunk megbízható elemzési eredményekhez.	→	Multielemes spektrokémiai elemanalizis kalibrálása és validálása különböző mintamátrixokban és extraháló oldatokban [46, 47, 55].

Az eredeti Tessier féle sémából számos 5–8 lépéses szekvens extrakciós módszert fejlesztettek ki, amelyek során a minta eredeti kémiai struktúráit (kémiai szerkezeti formáit) fokozatosan feloldják, illetve lebontják [11]. A teljes időszükséglete ezeknek az eljárásoknak 5–7 nap, amelyet az egyes lépésekben alkalmazott rázatással segített kioldási lépésekben a heterogén egyensúlyok beállási ideje megkövetel. 1993-ban az EU Community Bureau of Reference (BCR) ajánlott egy 3 (+1) lépéses egyszerűsített sémát [8], azonban még ez is meglehetősen idő- és munkaigényes. Ebben a vízoldható, a gyengén adszorbeált és kicserélhető, továbbá a karbonátokban kötött fémek frakcióját az első lépésben együttesen extrahálják ecetsav reagens alkalmazásával, ezt követően a redukálható vas- és mangán-oxidokhoz kötött frakciót határozzuk meg hidroxil-aminnal történt redukció után, majd harmadik lépésben hidrogén-peroxiddal történő oxidáció után a szerves anyagokhoz kötött és a szulfid formában jelenlévő fémfrakciókat oldjuk ki. A (+1) lépésben királyvízzel, vagy salétrosav/hidrogén-peroxidos mikrohullámú feltárással kaphatjuk meg az ún. reziduális frakciót. Analitikai szempontból hibát okozhat a kioldott ionok readszorpciója az extraktumok és a szilárd maradék elválasztása során, továbbá az alkalmazott reagensek által okozott erős mátrixhatások az elemek spektrokémiai meghatározása során. A BCR-ajánlás validálásához 1997-ben kiadott CRM-601 jelű üledék referenciamintát midössze öt elem (Cd, Cr, Ni, Pb, Zn) frakcionálására sikerült tanúsítani [9, 10]. A következő, 2001-ben kiadott CRM-701 jelű minta készítése során az eredeti BCR-ajánlást is módosították a második extrakciós lépés során fellépő pH-instabilitás miatti analitveszteségek elkerülése céljából [12–16]. Ez a változtatás azonban nehézségeket okoz a korábbi, illetve az újabb ajánlással kapott adatsorok konzisztens értelmezésében.

Az eredeti és a módosított BCR-ajánlást sikeresen alkalmazták nehézfémekkel szennyezett vízi üledékek és talajok vizsgálatára, azonban talajok nehézfémtartalmának frakcionáláshoz alkalmazható tanúsított anyagmintát mindeddig nem hoztak forgalomba [17–27]. A Tessier-féle csoportosításra alapozott frakcionálási adatok gyakorlati alkalmazása azonban egyre inkább megkövetelné a szekvenciális extrakciós módszerek szabványosítását, azonban ezt mindmáig hátráltatták az eljárással kapcsolatos metodikai problémák. A fontosabb ilyen problémák és ezek megoldására irányuló kutatások az **1. táblázatban** foglalhatók össze.

Értelmezés

A felszíni vízi környezetben előforduló nehézfém-szennyezések által okozott kockázatok értékelésében ma elsősorban a Tessier-féle csoportosításon alapuló frakcionálási technikákat használják, s ebben kitüntetett szerepet játszik a BCR által javasolt szekvenciális extrakciós technika a fentiekben részletezett metodikai problémák ellenére is. Talajszennyezések, továbbá bányászati eredetű szennyezések és a hidro-geokémiai elemmozgások értékelésére azonban számos olyan eljárás és technika került kifejlesztésre, amelyekkel a BCR-eljárás is javítható, s így alkalmazása ezeken a területeken is várhatóan tovább terjed. A BCR-eljárás alkalmazásával a környezeti mobilitás a könnyen oldható 1. frakció és az összes oldható frakciók arányával jellemezhető. Ez a hányados tehát a vizes közegben legkönnyebben terjedő, s biológiailag leginkább hozzáférhető vízoldható, a gyengén adszorbeált (kicserélhető) és az oldott CO_2 hatására hidrogén-karbonát-képződés közben oldódó frakciót viszonyítja az összes nehézfém-terheléshez [56]. Szennyezett területeken így a BCR-frakcionálás megfelelő időközönkénti megismétlésével a szennyezések immobilizációja vagy esetleges vertikális elmozdulása is követhető. Jelenleg két ilyen területen, a Felső-Tisza vidékén és a Gödöllő-Isaszeg térendszerben folytatunk ilyen jellegű kutatásokat [57–59].

Köszönetnyilvánítás. A kutatás az OTKA 108558 pályázat, valamint a Kutató Kari Kiválósági Támogatás-9878/2015/FEKUT keretében valósult meg.

IRODALOM

[1] Templeton D.M., Ariese F., Cornelis R., Danielsson L.G., Muntau H., Van Leeuwen H.P., Lobinski R., Guidelines for terms related to chemical speciation and fractionation of elements. Definitions, structural aspects, and methodological approaches. Pure Appl. Chem. (2000) 72, 1453–1470.
[2] Heltai Gy., Füleky Gy., Soil analysis and nutrition capacity. Microchemical Journal (1992) 46(1), 4–19.
[3] Gunn A. M., Winnard D. A. and Hunt D.T.E., Trace metal speciation in sediment and soils. In: Kramer J. R. and Allen H. E. (eds.), Metal speciation: Theory, analysis and application, Lewis Publications, Boca Raton, Florida. 1988.
[4] www.speciation.net
[5] Caroli, S.: Element speciation in bioorganic chemistry, Wiley, New York, 1996.
[6] Kersten M., Förstner M., Speciation of trace metals in sediments and combustion waste. In: Ure A. M., Davidson C. M. (eds.): Chemical speciation in the environment, Blackie Academic and Professional, London 1995, 237.
[7] Tessier A., Campbell P. G. C., Bisson M., Sequential extraction procedure for the speciation of particulate trace metals. Analytical Chemistry (1979) 51, 844-851.
[8] Ure A.M., Quevauviller Ph., Muntau H., Griepink B., Speciation of heavy-metals in soils and sediments — an account of the improvement and harmonization of extraction techniques undertaken under the auspices of the BCR of the Commission-of-the-European-Communities, Int. J. Envir. Anal. Chem. (1993) 51, 135–151.
[9] Quevauviller P., Rauret G., López-Sánchez J. F., Rubio R., Ure A., Muntau H., Certification of trace metal extractable contents in a sediment reference material (CRM 601) following a three-step sequential extraction procedure. Sci. Total Environ. (1997) 205, 223–234.
[10] López-Sánchez J.F., Sahuquillo A., Fiedler H.D., Rubio R., Rauret G., Muntau H., Quevauviller Ph., CRM 601, A stable material for its extractable content of heavy metals, Analyst (1998) 123, 1675–1677.
[11] Gleyzes C., Tellier S., Astruc M., Fractionation studies of trace elements in contaminated soils and sediments: a review of sequential extraction procedures. Trends Anal. Chem. (2002) 21, 451–467.
[12] Rauret G., López-Sánchez J.F., Sahuquillo A., Rubio R., Davidson C., Ure A., Quevauviller Ph., Improvement of the BCR three step sequential extraction procedure prior to the certification of new sediment and soil reference materials, J. Envir. Monit (1999), 1, 57–61.
[13] Sahuquillo A., López-Sánchez J. F., Rubio R., Rauret G., Thomas R. P., Davidson C. M., Ure A. M. Use of a certified reference material for extractable trace metals to assess sources of uncertainty in the BCR three-stage sequential extraction procedure. Anal. Chim. Acta (1999) 382, 317–327.
[14] Certification of the extractable contents of Cd, Cr, Cu, Ni, Pb and Zn in a freshwater sediment following a collaboratively tested and optimised three-step sequential extraction procedure, J. Envir. Monit. 3, 243–250.
[15] Rauret G., López-Sánchez J.F., Lück D., Yli-Halla M., Muntau H., Quevauviller Ph., European Commission BCR information reference materials (BCR 701), 2001, ISBN 92-894-0755-7.
[16] Commission BCR information reference materials (CRM 601), 1997. ISBN 92-828-0127-6.
[17] Sahuquillo A., Rigol A., Rauret G., Overview of the use of leaching/extraction tests for risk assessment of trace metals in contaminated soils and sediments. Trends Anal. Chem. (2003) 22, 152–159.
[18] Žemberyová M., Barteková J., Hagarová I., The utilization of modified BCR three-step sequential extraction procedure for the fractionation of Cd, Cr, Cu, Ni, Pb and Zn in soil reference materials of different origins. Talanta (2006) 70, 973–978.
[19] Kubová J., Matúš P., Hagarová I., Bujdoš M., Medveď J., Utilization of optimized BCR three-step sequential and dilute HCl single extraction procedures for soil–plant metal transfer predictions in contaminated lands. Talanta (2008) 75, 1110–1122.
[20] Kubová J., Streško V., Bujdoš M., Matúš P., Medveď J., Fractionation of various elements in CRMs and in polluted soils. Anal. Bioanal. Chem. (2004) 379, 108–114.
[21] Konradi E. A., Frentiu T., Ponta M. and Cordos E. 2005, Use of Sequential Extraction to Assess Metal Fractionation in Soils from Bozanta Mare, Romania. Acta Universitatis Cibiniensis Seria F Chemia 8 (2005-2), 5–12.
[22] Okoro H.K., Fatoki O.S., Adekola F.A., Ximba B.J., Snyman R.G., A Review of Sequential Extraction Procedures for Heavy Metals Speciation in Soil and Sediments. OMICS Publishing Group 1: 181. doi: 10.4172/scientificreports.181, 2012, ISSN 2249–9695.
[23] Jena V., Gupta S., Dhundhel R. S., Matic N., Frančišković Bilinski S. and Devic N., Determination of total heavy metal by sequential extraction from soil. Int. J. Res. Environ. Sci. Technol. (2013) 3(1), 35–38.
[24] Zimmerman A. J. and Weindorf D. C., HeavyMetal and TraceMetal Analysis in Soil by Sequential Extraction: A Review of Procedures. International Journal of Analytical Chemistry Volume 2010, Article ID 387803, 7 pages, 2010, doi:10.1155/2010/387803.

[25] Sepahvand H. and Forghani A., Comparison of two sequential extraction procedures for the fractionation of zinc in agricultural calcareous soils, Chemical Speciation and Bioavailability, (2012) 24(1), 13–22.
[26] Barajas-Aceves M., Camarillo-Ravelo D. and Rodriguez-Vazquez R., Mobility and Translocation of Heavy Metals from Mine Tailings in Three Plant Species after Amendment with Compost and Biosurfactant. Soil and Sediment Contamination (2015) 24(3), 223–249.
[27] Qasim B. and Motelica-Heino M., Potentially toxic element fractionation in technosoils using two sequential extraction schemes. Environmental Science and Pollution Research (2014) 21(7), 5054–5065.
[28] Heltai Gy., Fehér B., Percsich K., Barabás B., Fekete I., Application of sequential extraction with supercritical CO2, subcritical H2O, and an H2O/CO2 mixture for estimation of environmentally mobile heavy metal fractions in sediments, Anal. Bioanal. Chem. (2002) 373, 863–866.
[29] Wisotzky F. and Cremer N., Sequential extraction procedure in columns – Part 1: Development and description of a new method. Environ. Geol. (2003) 44, 799–804.
[30] Heltai Gy., Percsich K., Halász G., Jung K., Fekete I., Estimation of ecotoxicological potential of contaminated sediments based on a sequential extraction procedure with supercritical CO2 and subcritical H2O solvents. Microchem. J. (2005) 79, 231–237.
[31] Heltai G., Chemical interpretation of a new sequential extraction scheme based on supercritical CO2 and subcritical H2O solvents, Bulletin of the Szent István University (2005) 107–122.
[32] Rusnák R., Halász G., Horváth M., Remeteiová D., Preliminary results on the intensification of the BCR sequential extraction with sonication for sediments, soils, and gravitation dust sediment samples. Toxicological & Environmental Chemistry (2010) 92(3), 443–452.
[33] Nakazato T., Akasaka M., Tao H., A rapid fractionation method for heavy metals in soil by continuous-flow sequential extraction assisted by focused microwaves. Anal Bioanal Chem, (2006) 386, 1515–1523.
[34] Shiowatana J., Tantidanai N., Noobkaew S., Nacapricha D., A novel continuous-flow sequential extraction procedure for metal speciation in solids, J. Environ. Qual. (2001) 30, 1195–1205.
[35] Frenzel W., Jimoh M. and Miro M., Hyphenated microanalytical systems for online and in-situ Fractionation and leaching kinetics of heavy metals in solid environmental samples. Chem Anal-Warsaw (2005) 50, 279–299.
[36] Heltai Gy., Percsich K., Fekete I., Barabás B., Józsa T., Speciation of waste water sediments. Microchem. J., (2000) 67, 43–51.
[37] Heltai G., Remeteiová D., Horváth M., Széles É., Halász G., Fekete I. and Flórián K., Various fractionation procedures in study of heavy metals mobility in the environment. Ecological Chemistry and Engineering S (2011) 18, 55–65.
[38] Spivakov B.Y., Maryutina T.A., Fedotov P.S., Ignatova S.N., Katasonova O.N., Dahmen J., Wennrich R., Separation of substances in rotating coiled columns: From trace elements to microparticles. Journal of Analytical Chemistry (2002) 57, 928–934.
[39] Fedotov P.S., Rotating coiled columns in the speciation analysis of natural samples: Dynamic fractionation of element forms in soils, sludges, and bottom sediments. Journal of Analytical Chemistry (2012) 67, 399–413.
[40] Dabek-Zlotorzynska E., Kelly M., Chen H., Chakrabarti C.L., Application of capillary electrophoresis combined with a modified BCR sequential extraction for estimating of distribution of selected trace metals in PM2.5 fractions of urban airborne particulate matter, Chemosphere (2005) 58, 1365–1376.
[41] Chomchoe R., Shiowatana J., Pongsaku P., Continuous-flow system for reduction of metal readsorption during sequential extraction of soil. Anal Chim Acta (2002) 472, 147–159.
[42] Tongtavee N., Shiowatana J., McLaren R.G., Buanuam J., Evaluation of distribution and chemical associations between cobalt and manganese in soils by continuous-flow sequential extraction. Commun Soil Sci Plan (2005) 36, 2839–2855.
[43] Miro M., Jimoh M., Frenze W., A novel dynamic approach for automatic microsampling and continuous monitoring of metal ion release from soils exploiting a dedicated flow-through microdialyser. Anal Bioanal Chem (2005) 382, 396–404.
[44] Silva M., Kyser K., Beauchemin D., Enhanced flow injection leaching of rocks by focused microwave heating with in-line monitoring of released elements by inductively coupled plasma mass spectrometry. Anal Chim Acta (2007) 584, 447–454.
[45] Sangsawong S., Waiyawat W., Shiowatana J., Siripinyanond A., Field-flow fractionation: An efficient approach for matrix removal of soil extract for inductively coupled plasma optical emission spectrometry. Spectrochim Acta B (2011) 66, 476–482.
[46] Horváth M., Boková V., Heltai G., Flórián K., Fekete I., Study of application of BCR sequential extraction procedure for fractionation of heavy metal content of soils, sediments and gravitation dusts, Toxicol. Environ. Chem. (2010) 92(3), 429–441.
[47] Horváth M., Halász G., Kucanová E., Kuciková B., Fekete I., Remeteiová D., Heltai Gy., Flórián K., Sequential extraction studies on aquatic sediment and biofilm samples for the assessment of heavy metal mobility. Microchem. J. (2013) 107, 121–125.
[48] Flórián, K., Matherny, M., Nickel, H., Pliešovská, N., Uhrinová, K., Environmental characteristics of the atmosphere of residential agglomerations – I. Dustiness of the agglomerations, Chem. Pap. (2003) 57, 369–373.
[49] Flórián, K., Matherny, M., Nickel, H., Pliešovská, N., Uhrinová, K., Environmental characteristics of the atmosphere of residential agglomerations – II. Main, minor, and trace elements in the gravitation dust sediments, Chem. Pap. (2003) 57, 374–381.
[50] Remeteiová D., Smin□áková E., Flórián K., Study of the chemical properties of gravitation dust sediments. Microchim. Acta (2007) 156, 109–113.
[51] Shiowatana J., McLaren R.G., Chanmekha N., Samphao A., Fractionation of arsenic in soil by a continuous-flow sequential extraction method. J Environ Qual (2001) 30, 1940–1949.
[52] Fedotov P. S., Spivakov B. Y., Static and dynamic methods of fractionation of forms of the elements in soils, silts and bottom sediments. Usp Khim (2008) 77, 690–703.
[53] Larios R., Fernandez-Martinez R., Rucandio I., Comparison of three sequential extraction procedures for fractionation of arsenic from highly polluted mining sediments. Anal Bioanal Chem (2012) 402, 2909–2921.
[54] Savonina E.Z.,Wennrich R., Fractionation of Sb and As in soil and sludge samples using different continuous-flow extraction techniques. Anal Bioanal Chem (2012) 403, 1441–1449.
[55] Heltai Gy., Fekete I., Halász G., Kovács K., Horváth M., Takács A., Boros N., Győri Z., Mult-elemental inductively coupled plasma – optical emission spectroscopic calibration problems for sequential extraction procedure of fractionation of heavy metal content from aquatic sediments. Hungarian Journal of Industry and Chemistry (2015) 43(1), 7–12.
[56] Ogundiran M.B., Osibanjo O., Mobility and speciation of heavy metals in soils impacted by hazardous waste. Chemical Speciation and Bioavailability (2009) 21(2), 59–69.
[57] Győri Z., Alapi K., Sipos P., Zubor Á. Effects of heavy metal on floodplain soils and pastures of the River Tisza, Hungary II. In: Natural Attenuation of Metals Along the Tisza River–Floodplain–Wetlands Continuum, Debreceni Egyetem, Debrecen, 2003, 161–163.
[58] Győri Z., Alapi K., Szilágyi Sz., Effects of heavy metal on floodplain soils and pastures of the River Tisza, Hungary I. In: Natural Attenuation of Metals Along the Tisza River–Floodplain–Wetlands Continuum, Debreceni Egyetem, Debrecen, 2003, 146–160.
[59] Heltai Gy., Fekete I., Gémesi Z., Percsich K., Flórián K., Tarr Zs., Environmental evaluation of a local lake chain affected by wastewater by means of spectrochemical analytical methods. Microchem. J. (1998) 59, 125–135.

Átadták a 2015. évi Varga József-díjakat

Mátravölgyi Béla

Egedy Attila

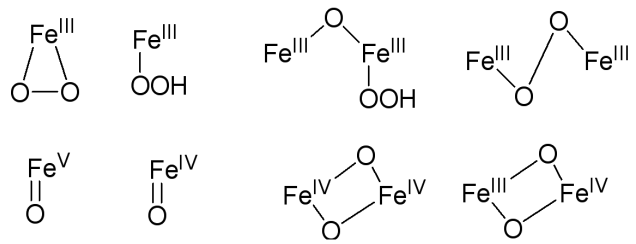
Az Akadémia Képes termében tartotta meg ünnepi ülését az MTA Műszaki Kémiai Tudományos Bizottsága, ahol sor került a Varga József-díjak átadására. Bélafiné Dr. Bakó Katalin elnök asszony nyitotta meg a rendezvényt, majd a 2015. évre kiírt két egyetemi díjat vették át a nyertesek Dr. Hancsók Jenőtől, a Varga József-kuratórium elnökétől. Először Dr. Mátravölgyi Béla (BME), aki „A poláris fémorganikus kémia és az optikai izomerek elválasztástechnológiájának kombinált alkalmazása az alapkutatástól az ipari célú hasznosításig” címmel tartott előadást. Ezt követően Dr. Egedy Attila (PE, Veszprém) vette át az oklevelet, aki „Numerikus áramlástani szimulátorok vegyészmérnöki feladatok megoldásában” címmel mutatta be kutatási eredményeit. Az ülés végén a bizottság a 2016. évre tervezett programjait tekintette át.

Bruckner-termi előadás

Lakk-Bogáth Dóra–Szávuly Miklós István–Speier Gábor–Kaizer József
PE Kémia Intézet, Bioszerves és Biokoordinációs Kémiai Kutatócsoport | kaizer@almos.vein.hu

Nem-hem-típusú oxidáz és oxigenáz enzimek szintetikus modelljei: szerkezet, reaktivitás, katalízis

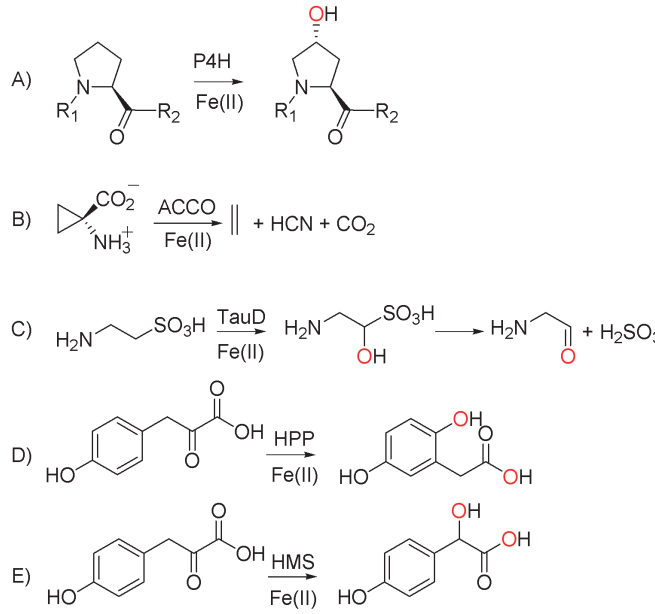
A dioxigént felhasználó metalloenzimek (oxidoreduktázok) és szintetikus modelljeik kapcsán az elsődleges kérdés, hogy a dioxigén aktiválása milyen módon, milyen lépéseken keresztül valósul meg. Ennek megértésében sokat segíthet az intermedier-kutatás, amelynek feladata, hogy az enzimfolyamatokban és az azokat modellező bioutánzó rendszerekben a reaktív intermedierek elkülönítésén és spektroszkópiai jellemzésén keresztül információt nyújtson a dioxigén- és rajta keresztül a szubsztrátaktiválás mechanizmusáról. A vastartalmú oxidoreduktázok csoportosítása az aktív centrumban lévő fémionok száma (egy-, illetve kétmagvú) és a fémeket körülvevő ligandumok (porfirin, aminosavak…) alapján történik. Utóbbiak szerint beszélhetünk hem-, illetve nem-hem-típusú enzimekről. A termodinamikailag inert dioxigén-molekula aktiválását reaktív vas-peroxo- és oxo-intermedierek képződésén keresztül képzelik el, amelyek reakciója a megfelelő szubsztrátum molekulával már könnyen értelmezhető (**1. ábra**).



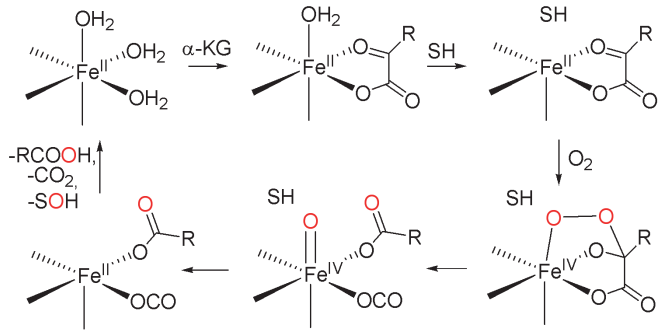
1. ábra. Vastartalmú enzimek reaktív intermedierjei

A nem-hem-típusú enzimek kitüntetett csoportját képezik az ún. α-ketosav-függő oxidázok és oxigenázok (**2. ábra**). Ide sorolható például a prolil 4-hidroxiláz (P4H) (**A**), az 1-aminociklopropán-1-karboxilsav-oxidáz (ACCO) (**B**), a taurin-dioxigenáz (TauD) (**C**), a 4-hidroxifenilpiruvát-dioxigenáz (HPP) (**D**) és a 4-hidroximandelát-szintáz (HMS) (**E**). Az α-ketoglutarát szerepe a magas vegyértékű vas-oxo-intermedierek kialakításában van, ami a **3. ábrán** feltüntetett lépéseken keresztül valósul meg. [1]

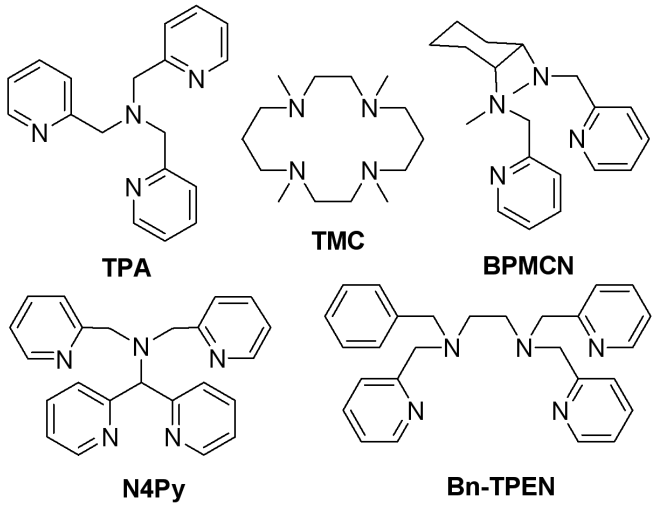
Az első szintetikus $Fe^{IV}O$ komplexek {$[Fe^{IV}(O)(TMC)(CH_3CN)]^{2+}$ (TMC: 1,4,8,11-tetrametil-ciklám) [2], $[Fe^{IV}(O)(TPA)(CH_3CN)]^{2+}$ (TPA: trisz(2-piridil-metil)-amin) [3, 4], $[Fe^{IV}(O)(BPMCN)]^{2+}$ (β-BPMCN: *N,N'*-dimetil-*N,N'*-bisz(2-piridil-metil)-*transz*-1,2-diamino-ciklohexán [5], $[Fe^{IV}(O)(N4Py)]^{2+}$ (N4Py: *N,N*-bisz(2-piridil-metil)-bisz(2-piridil)-metil-amin) és $[Fe^{IV}(O)(Bn\text{-}TPEN)]^{2+}$ (Bn-TPEN: *N*-benzil-*N,N',N'*-trisz(2-piridil-metil)-1,2-diamino-etán)} előállításához többnyire *N*-donoratomot tartalmazó, polipiridil-típusú ligandumokat használtak fel (**4. ábra**) [6, 7].



2. ábra. α-Ketosav-függő oxidoreduktázok

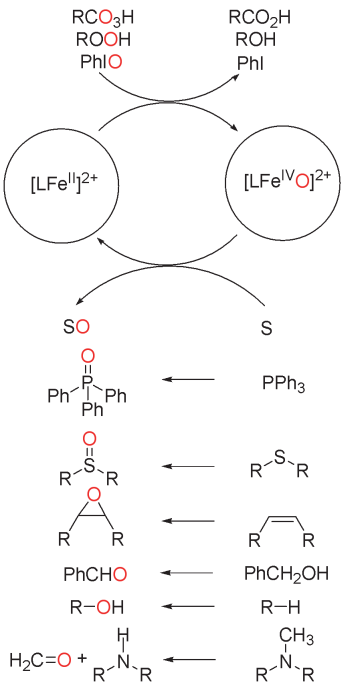


3. ábra. α-Ketosav-függő oxidoreduktázok feltételezett mechanizmusa



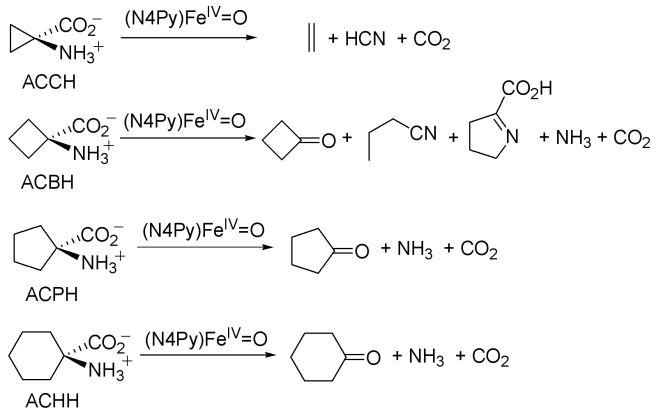
4. ábra. Néhány példa a $[LFe^{IV}O]^{2+}$ intermedierek előállításához használt ligandumokra

A fenti intermedierek a megfelelő $[LFe^{II}]^{2+}$ prekurzor komplex és oxidálószer (PhIO, RC(O)OOH, RCOOH) sztöchiometrikus mennyiségű reakciójával írható le (**5. ábra**). A komplexek szerkezetét UV–VIS, EXAFS és ^{57}Fe-Mössbauer-spektroszkópiával írták le [8, 9]. A képződő intermedierek spinállapotát, termikus stabilitását és reaktivitását nagymértékben meghatározza az alkalmazott ligandum szerkezete. Az ötfogú ligandumok (Bn-TPEN, N4Py) esetében szobahőmérsékleten is stabilis $Fe^{IV}O$ szerkezetekhez jutottak ($t_{1/2} = 6$ és 60 h), ami lehetővé tette a $[Fe^{IV}(O)(N4Py)]^{2+}$ komplex röntgendiffrakciós szerkezetének a meghatározását is [7]. A $[Fe^{IV}(O)(N4Py)]^{2+}$ komplex nagyfokú stabilitása mellett kiemelendő, hogy alkalmazásával igen változatos reakciók dolgozhatók ki (pl. oxigéntranszfer, CH-aktiválás…), amelyek a modellezni kívánt enzimfolyamatok elemi lépéseinek tekinthetők (**5. ábra**) [1, 6].



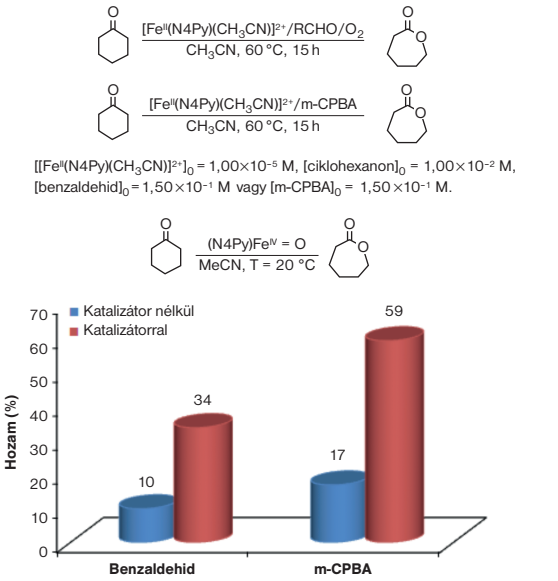
5. ábra. $Fe^{IV}O$ intermedierek előállítása és reaktivitása

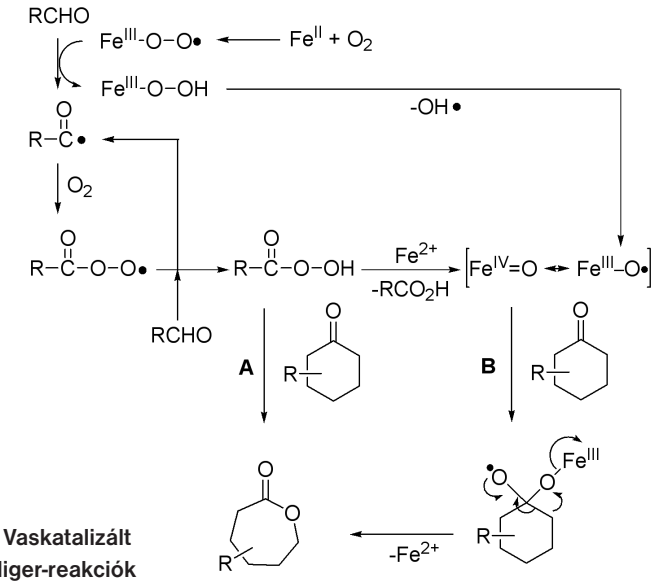
Az etilén az egyik legegyszerűbb növényi hormon, amely többek közt a növények növekedési, érési, csírázási és öregedési folyamataiért felelős. Bioszintézisének az utolsó lépése az 1-amino-ciklopropán-1-karbonsav átalakítása, melyet a vas(II)tartalmú ACCO enzim katalizál. Az enzimfolyamat mechanizmusának tisztázása céljából hem-, illetve nem-hem-típusú katalitikus rendszereket dolgoztunk ki az 1-amino-ciklopropán-1-karbonsav oxidációjára [10]. Katalizátorként a $[Fe^{III}(TPP)]^{+}$ és $[Fe^{II}(N4Py)(CH_3CN)]^{2+}$ komplexeket, oxidálószerként pedig a hidrogén-peroxidot választottuk. A reakciókat DMF/víz 3:1 arányú elegyében, 35 °C-on végeztük. Megállapítottuk, hogy mindkét esetben az enzimatikus útnak megfelelő terméket (etilént) eredményező, nagy hatékonyságú és nagy szelektivitású bioutánzó rendszerekhez jutottunk, amelyek *Michaelis–Menten*-típusú kinetikával írhatóak le. Eredményként a $[Fe^{III}(TPP)]^{+}$ és $[Fe^{II}(N4Py)(CH_3CN)]^{2+}$-tartalmú rendszerekre, sorrendben, a következő értékekhez jutottunk: $V_{max} = 27{,}9 \times 10^{-3}$ Ms^{-1}, $K_M = 2{,}41 \times 10^{-3}$, $k_{cat} = 0{,}28$ s^{-1}, $k_{cat}/K_M = 116$ M^{-1}s^{-1} és $V_{max} = 0{,}58 \times 10^{-3}$ Ms^{-1}, $K_M = 13{,}7 \times 10^{-3}$, $k_{cat} = 0{,}58$ s^{-1}, $k_{cat}/K_M = 42$ M^{-1}s^{-1}. Mivel a $[Fe^{II}(N4Py)(CH_3CN)]^{2+}$-tartalmú rendszerben a $Fe^{IV}O$ intermedier képződése is kimutatható volt, ezért reakciókinetikai vizsgálatainkat kiterjesztettük az indirekt módon előállított $[Fe^{IV}(O)(N4Py)]^{2+}$ és az 1-amino-ciklopropán-1-karbonsav, illetve további ciklikus aminosavak között lejátszódó reakciókra is, amelyek az enzimfolyamat elemi lépéseként is értelmezhetők (**6. ábra**). A kapott kísérleti eredmények alapján, amelyeket DFT számításokkal is kiegészítettünk, javaslatot tettünk a reakciók mechanizmusára, amely kulcslépése a képződő $Fe^{IV}O$ által lejátszódó N–H aktiválás. [11]



6. ábra. Ciklikus aminosavak sztöchiometrikus oxidációja

Mivel az irodalomban számos példa található vaskatalizált oxigéntranszferrel járó szulfoxidálásra, illetve epoxidálásra, ezért a $[Fe^{II}(N4Py)(CH_3CN)]^{2+}$ komplex katalitikus aktivitásának vizsgálatát további vegyületcsaládra is kiterjesztettük, nevezetesen a ciklikus ketonok *Baeyer–Villiger*-oxidációjára. A klasszikus eljárás szerint a laktonok ipari (polimer, gyógyszer…) előállítására oxidálószerként peroxisavakat vagy peroxidokat használnak. Munkánk célja az volt, hogy a sztöchiometrikus, vegyszeres oxidáción alapuló eljárást nagy hatékonyságú és nagy szelektivitású homogén katalitikus rendszerré alakítsuk át. Katalizátorként a $[Fe^{II}(N4Py)(CH_3CN)]^{2+}$ komplexet, oxidálószerként pedig az *m*-klór-perbenzoesavat (*m*-CPBA) és $RCHO/O_2$-ot használtuk. Megállapítottuk, hogy a komplex katalitikus mennyiségű használata mindkét oxidálószer esetében jelentős hozamnövekedést eredményezett (**7. ábra**). Mivel a reakcióelegyben a $Fe^{IV}O$ intermedier képződése is kimutatható volt, ezért reakciókinetikai vizsgálatainkat kiterjesztettük az indirekt módon előállított $[Fe^{IV}(O)(N4Py)]^{2+}$ és a ciklohexanon között lejátszódó reakcióra is, amely a katalitikus reakció elemi lépéseként is értelmezhető (**7. ábra**). A kapott kísérleti eredmények alapján javaslatot tettünk a reakció mechanizmusára (**8. ábra**). [12]





7–8. ábra. Vaskatalizált Baeyer–Villiger-reakciók

Köszönetnyilvánítás. A kutatás az Országos Tudományos Kutatási Alapprogram (OTKA K108489) finanszírozásával valósult meg.

IRODALOM
[1] M. Costas, M. P. Mehn, L. Que, Jr., Chem. Rev. (2004) 104, 939.
[2] J.-U. Rohde, J. H. In, M. H. Lim, W. W. Brennessel, M. R. Bukowski, A. Stubna, E. Münck, W. Nam, L. Que, Jr., Science (2003) 299, 1037.
[3] M. H. Lim, J.-U. Rohde, A. Stubna, M. R. Bukowski, M. Costas, R. Y. N. Ho, E. Münck, W. Nam, L. Que, Jr., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. (2003) 100, 3665.
[4] J. Kaizer, M. Costas, L. Que, Jr., Angew. Chem. Int. Ed. (2003) 42, 3671.
[5] M. P. Jensen, M. Costas, R. Y. N. Ho, J. Kaizer, A. Mairata y Payeras, E. Münck, L. Que, Jr., J.-U. Rohde, A. Stubna, J. Am. Chem. Soc. (2005) 127, 10512.
[6] J. Kaizer, E. J. Klinker, N. J. Oh, J. U. Rohde, W. J. Song, A. Stubna, E. Münck, W. Nam, L. Que, Jr., J. Am. Chem. Soc., Chem. Commun. (2004) 126, 472.
[7] E. J. Klinker, J. Kaizer, W. W. Brennessel, N. L. Woodrum, C. J. Cramer, L. Que, Jr., Angew. Chem. Int. Ed. (2005) 44, 3690.
[8] A. R. McDonald, L. Que, Jr., Coord. Chem. Rev. (2013) 257, 414-428.
[9] J.-U. Rohde, S. Torelli, X. P. Shan, M. H. Lim, E. J. Klinker, J. Kaizer, K. Chen, W. Nam, L. Que, Jr., J. Am. Chem. Soc. (2004) 126, 16750.
[10] G. Baráth, J. Kaizer, J. S. Pap, G. Speier, N. E. Bakkali-Taheri, A. J. Simaan, Chem. Commun. (2010) 46, 7391.
[11] D. Lakk Bogáth, G. Speier, M. Surducan, R. Silaghi-Dumitrescu, A. J. Simaan, B. Faure, J. Kaizer, R. S. C. Advances (2015) 5, 2075.
[12] D. Lakk-Bogáth, G. Speier, J. Kaizer, New J. Chem. (2015) 39, 8245.

Frank Éva–Wölfling János–Schneider Gyula
SZTE TTIK Szerves Kémiai Tanszék, Szteroidkémiai Kutatócsoport

Új vegyületek, új hatások

Szteroidkémiai kutatások Szegeden

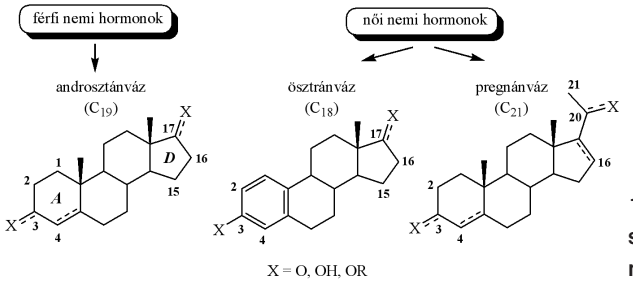
Az SZTE Szerves Kémiai Tanszékén a természetes eredetű szerves vegyületek kutatása több évtizedes múltra tekint vissza. A korábban folyó peptidkémiai, alkaloidkémiai és heterociklusos molekulákkal folytatott intenzív kutatások a múlt század hatvanas éveitől kezdve a szteránvázas vegyületekkel végzett kísérletes munkákkal egészültek ki. Ez utóbbi tématerület a mai napig is a Tanszék egyik fő kutatási profilját képezi. A Szteroidkémiai Kutatócsoport különböző alapvázú szteroidszármazékok (elsősorban természetes nemi hormonok és analogonjaik) szintetikus szerkezetmódosításával foglalkozik. A nemi hormon receptorok szerkezetére és az endogén ligandumok kötődésére vonatkozó információink mára jelentősen kibővültek és az is ismertté vált, hogy a termé-szetes szteroidok alapvázán végzett kémiai módosításokkal a hormonhatás háttérbe szorítása mellett egy merőben új főhatás léphet előtérbe. Közismert, hogy napjaink-ban a rákos megbetegedések gyakorisága igen magas, továbbá, hogy a nemi hormonok bizonyos ráktípusok (elsősorban emlő-, petefészek- és prosztatarák) kialakulásában, illetve progressziójában alapvető szerepet játszanak. Fő célként ezért olyan módosított nemi hormon származékok kutatására helyezzük a hangsúlyt, melyek valamilyen módon beavatkozhatnak ebbe a folyamatba. Az átalakítások az egyszerű funkciós csoportok beépítésén túlmenően gyűrűfelnyitási és gyűrűbővítési reakciókra, heterociklusos származékok szintézisére, valamint a szteroidok egyéb bioaktív molekulákkal képzett hibridjeinek előállítására terjednek ki. A természetes vegyületek és származékaik 3-as, 17-es és 20-as helyzetű funkciós csoportjai kézenfekvő lehetőséget biztosítanak a szintetikus átalakításra, valamint a szomszédos (C–2, C–4, C–16, C–21) helyzetű szubsztitúciók is viszonylag könnyen megvalósíthatók a

már meglevő csoportok kémiai reaktivitását kihasználva **(1. ábra)**. Éppen a könnyebb kivitelezhetőség miatt a legtöbb szintetikus módosítás ezekben a pozíciókban történik, vagyis a szteránváz A és D gyűrűjét érinti. A meglévő csoportoktól távolabb eső szénatomok (pl. C–1 vagy C–15) általában csak többlépéses reakciióúton funkcionalizálhatók, de így olyan származékokhoz juthatunk, melyek szerkezete jelentősen eltér a természetes vegyületekétől, és ez a bioaktivitásukban is jelentős változást okozhat.

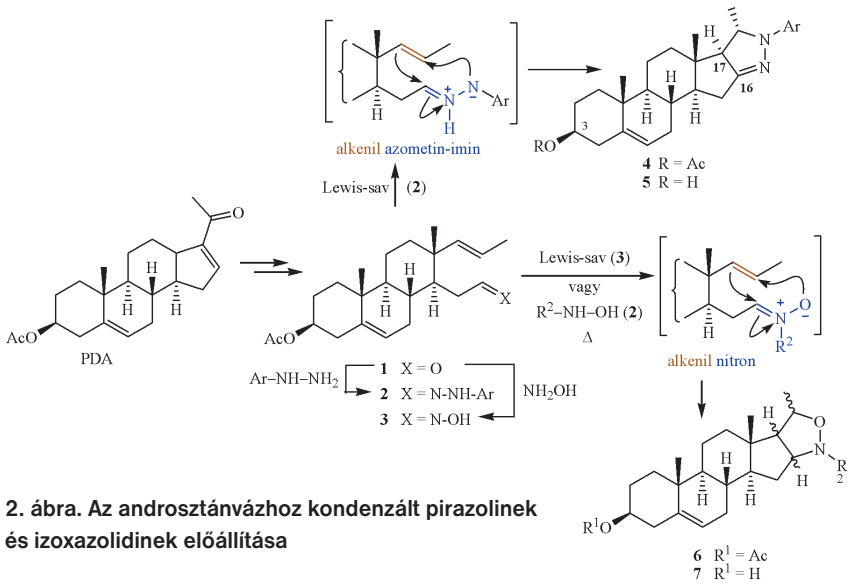
A kísérleti tapasztalatok azt mutatják, hogy a különböző heterociklusok szteránvázba építésével az eredeti molekula kémiai és biológiai tulajdonságai nagymértékben megváltozhatnak. A 17-es helyzetben heterociklust tartalmazó androsztánvázas vegyületek számos képviselője hatékonyan gátolja az androgén hormonok bioszintézisében kulcsszerepet játszó citokróm P450-függő 17α-hidroxiláz-$C_{17,20}$-liáz ($cP450_{17\alpha}$) enzim működését, ami az androgénfüggő betegségek (pl. prosztatarák) kezelésében nyújthat terápiás lehetőséget. Az utóbbi évek kutatási eredményei azt is igazolták, hogy számos szteránvázas heterociklusos vegyület összetett hatásmechanizmussal közvetlenül és szelektív módon képes a ráksejtekre hatni: ennek eredményeként azok burjánzása megakadályozható, ugyanakkor az egészséges sejtosztódás érintetlen marad [1]. Így a heterociklusos szteroidok alkalmazása a célzott rákterápia kiváló lehetőségét kínálja. A továbbiakban kutatócsoportunk néhány olyan módosítási kísérletéről számolunk be, melyek farmakológiai szempontból is figyelemre méltónak bizonyultak.

Az 1,3-dipoláris cikloaddíció (1,3-DC) kizárólag öttagú heterociklusok előállítására alkalmas módszer, melynek során egy 1,3-dipoláris sajátságú molekula vagy molekularész két- vagy háromszoros kötést tartalmazó, úgynevezett dipolarofillel történő gyűrűzárásával jön létre a két vagy több heteroatomot tartalmazó gyűrű. A szteránvázas vegyületeken végzett szintézisek történhetnek intramolekulárisan, amikor mindkét említett reakciópartner a szteránvázas vegyület részét képezi, valamint intermolekulárisan, amikor is szteránvázas dipólust vagy dipolarofilt reagáltatunk egy alkalmas reakciópartnerrel.

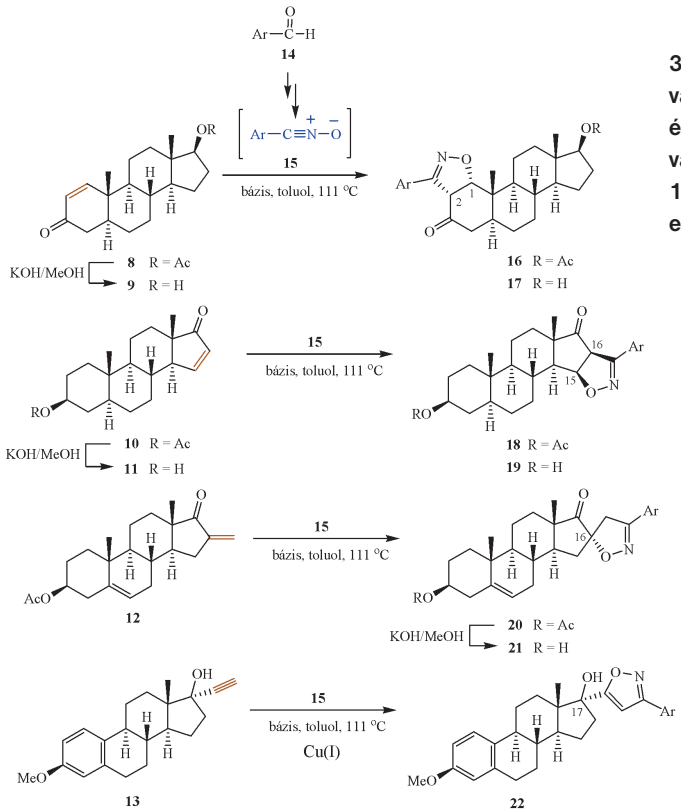
Az intramolekuláris reakciók kivitelezéséhez a **2. ábrán** szereplő pregnadienolon-acetátból (PDA) többlépéses szintézissel nyerhető D-szekoaldehid **(1)** kiváló lehetőséget kínált. A szekoaldehidből képzett fenilhidrazonok **(2)** Lewis-sav hatására azometin-imin 1,3-dipólusként reagáltak az oldallánc kettős kötésével, és androsztánváz D gyűrűjéhez kondenzált pirazolinek **(4)** keletkeztek [2, 3]. Ugyanígy az aldoximból **(3)** Lewis-sav jelenlétében, valamint a **2**-es aldehidből *N*-szubsztituált hidroxilaminokkal hő hatására képződő alkenil-nitronok gyűrűzárása szteránvázhoz kondenzált izoxazolidinekhez **(6)** vezetett [4]. A reakciók minden esetben sztereoszelektíven egyetlen termék jó hozamú keletkezését eredményezték, melyek közül



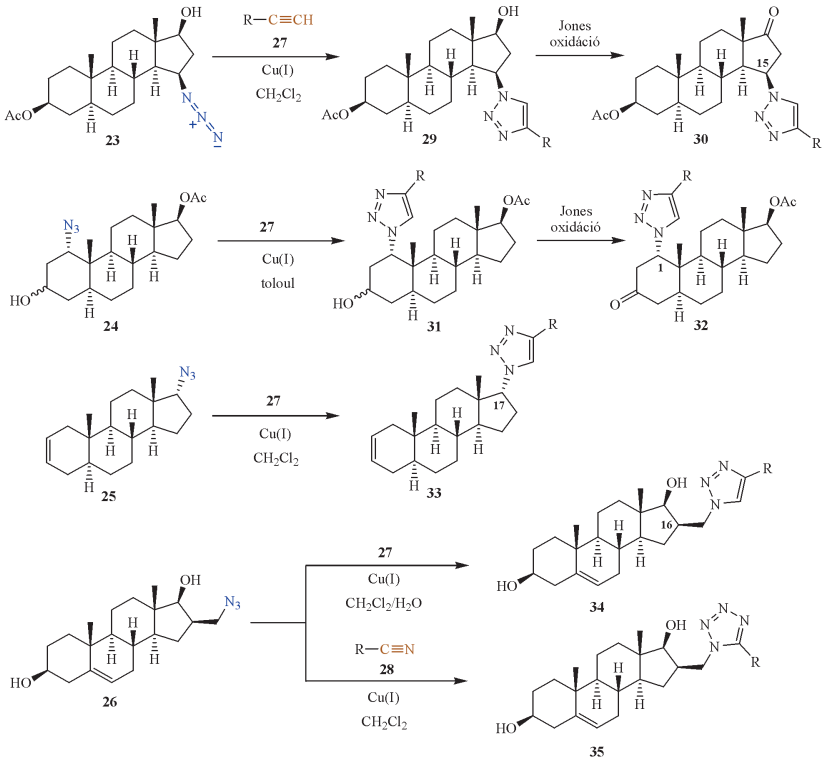
1. ábra. Nemi hormon származékok leggyakoribb módosítási helyei



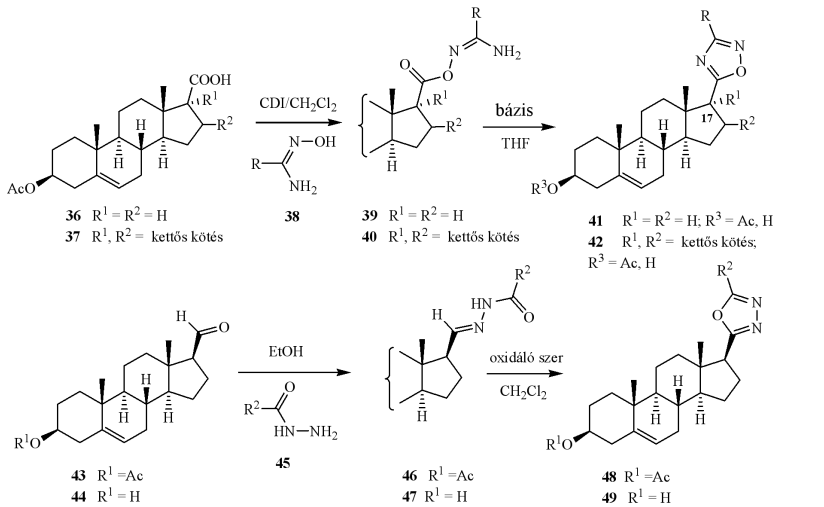
2. ábra. Az androsztánvázhoz kondenzált pirazolinek és izoxazolidinek előállítása



3. ábra. Az androsztánvázhoz kondenzált és spiro-izoxazolinok, valamint ösztránvázas 17-*exo*-izoxazolok előállítása



4. ábra. Az androsztánvázhoz kapcsolódó triazolok előállítása



5. ábra. Androsztánvázas 17-exo-heterociklusok előállítása karbonilvegyületekből

számos, 3-as helyzetben dezacetilezett származék (**5, 7**) jelentős sejtosztódás gátló hatást mutatott különböző humán ráksejtvonalakon [5, 6].

Elvégeztük különböző, kettős és hármas kötést tartalmazó szteránvázas dipolarofilek (**8–13**) és aromás aldehidekből (**14**) több lépésben előállítható nitril-oxid 1,3-dipólusok (**15**) intermolekuláris 1,3-DC-ját is, melynek során régió- és sztereoszelektíven az androsztánváz A és D gyűrűjéhez kondenzált (**16–19**) [7], illetve 16-spiroizoxazolinokat (**20, 21**) [8], valamint ösztránvázas 17-*exo*-izoxazolokat (**22**) nyertünk [9] (**3. ábra**). A vegyületek közül néhány szintén jelentős citosztatikus hatást mutatott az *in vitro* farmakológiai vizsgálatokban.

Androsztánvázas azid 1,3-dipólusok (**23–26**) és terminális acetilének (**27**), valamint nitrilek (**28**) intermolekuláris réz(I)-katalizált cikloaddíciójával régiószelektíven a váz különböző szénatomjaihoz kapcsolódó 1,4-diszubsztituált 1,2,3-triazolokat és 1,5-diszubsztituált tetrazolokat állítottunk elő [10–13] (**4. ábra**). Az 1- és 15-szubsztituált származékok egyes képviselői jelentős antiproliferatív hatást mutattak.

Az 1,3-DC mellett az öttagú heterociklusok előállításának egy másik módját a karbonilvegyületekből kiinduló olyan szintézisek képezik, melyek során egy szubsztitúciós vagy kondenzációs lépéssel kialakított intermedier megfelelő reagenssel végrehajtott gyűrűzárásával keletkezik a heteroatomokat tartalmazó gyűrű. Ezzel a módszerrel androsztánvázas 17-*exo*-heterociklusos származékokat szintetizáltunk a potenciális $cP450_{17\alpha}$ gátló hatásukat is figyelembe véve (**5. ábra**).

Szteránvázas karbonsavakat (**36, 37**) kapcsoló reagenssel (CDI) aktiváltunk, majd különböző amidoximokkal (**38**) reagáltatva *O*-acil-amidoximokat (**39, 40**) kaptunk. A vegyületek erős bázis hatására bekövetkező gyűrűzárása 1,2,4-oxadiazolokhoz (**41, 42**) vezetett [14]. Aldehidek (**43, 44**) savhidrazidokkal (**45**) való kondenzációs reakciójával ugyanakkor *N*-acil-hidrazonokhoz (**46, 47**) jutottunk, melyek oxidatív gyűrűzárása 1,3,4-oxadiazolokat (**48, 49**) eredményezett [15, 16]. A nyílt láncú köztitermékek és a gyűrűs vegyületek számos képviselője hatékonyan gátolta a vizsgált ráksejtek osztódását, míg néhány oxadiazol-származék a $cP450_{17\alpha}$ hatásos inhibitorának bizonyult.

A bemutatott példákból kitűnik, hogy a heterociklusos szteránvázas vegyületek kutatása mind sztereokémiai, mind farmakológiai szempontból érdekes feladat és hasznos szerkezet-hatás összefüggések felismeréséhez vezethet, ami támpontot nyújthat a további, hatékony vegyületek tervezéséhez.

IRODALOM

[1] É. Frank, Gy. Schneider, J. Steroid Biochem. Mol. Biol. (2013) 137, 301.
[2] É. Frank, Z. Mucsi, I. Zupkó, B. Réthy, G. Falkay, Gy. Schneider, J. Wölfling. J. Am. Chem. Soc. (2009) 131, 3894.
[3] É. Frank, Zs. Kardos, J. Wölfling, Gy. Schneider, Synlett (2007) 1311.
[4] É. Frank, Z. Mucsi, M. Szécsi, I. Zupkó, J. Wölfling, Gy. Schneider, New J. Chem. (2010) 34, 2671.
[5] R. Minorics, T. Szekeres, G. Krupitza, P. Saiko, B. Giessrigl, J. Wölfling, É. Frank, I. Zupkó, Steroids (2011) 76, 156.
[6] I. Zupkó, J. Molnár, B. Réthy, R. Minorics, É. Frank, J. Wölfling, J. Molnár, I. Ocsovszki, Z. Topcu, T. Bitó, L. G. Puskás, Molecules (2014) 19, 2061.
[7] G. Mótyán, Z. Kádár, D. Kovács, J. Wölfling, É. Frank, Steroids (2014) 87, 76.
[8] É. Frank, D. Kovács, Gy. Schneider, J. Wölfling, T. Bartók, I. Zupkó, Mol. Divers. (2014) 18, 521.
[9] D. Kovács, Z. Kádár, G. Mótyán, Gy. Schneider, J. Wölfling, I. Zupkó, É. Frank, Steroids (2012) 77, 1075.
[10] Z. Kádár, Á. Baji, I. Zupkó, T. Bartók, J. Wölfling, É. Frank, Org. Biomol. Chem. (2011) 9, 8051.
[11] Z. Kádár, J. Molnár, Gy. Schneider, I. Zupkó, É. Frank, Bioorg. Med. Chem. (2012) 20, 1396.
[12] É. Frank, J. Molnár, I. Zupkó, Z. Kádár, J. Wölfling, Steroids (2011) 76, 1141.
[13] Z. Kádár, D. Kovács, É. Frank, Gy. Schneider, J. Huber, I. Zupkó, T. Bartók, J. Wölfling, Molecules (2011) 16, 4786.
[14] D. Kovács, J. Wölfling, N. Szabó, M. Szécsi, I. Kovács, I. Zupkó, É. Frank, Eur. J. Med. Chem. (2013) 70, 649.
[15] D. Kovács, G. Mótyán, J. Wölfling, I. Kovács, I. Zupkó, É. Frank, Bioorg. Med. Chem. Lett. (2014) 24, 1265.
[16] D. Kovács, J. Wölfling, N. Szabó, M. Szécsi, R. Minorics, I. Zupkó, É. Frank, Eur. J. Med. Chem. (2015) 98, 13.

Vele vagy nélküle?

A nehézipar előnyei és hátrányai

Gajdosné Szabó Mártával, a Kempelen Farkas Gimnázium kémiatanárával, a 2015. évi londoni Science On Stage (Színpadon a természettudomány) Fesztivál „Joint project" kategóriájának magyar győztesével beszélgettünk.

A Science on Stage vezető testülete egyhangúlag Debrecen városának ítélte oda a 2017-es nemzetközi Science on Stage fesztivál megrendezésének jogát! A debreceni fesztivál ideje: 2017. június 29. – július 2.

– Kedves Márta! Szeretném megköszönni, hogy elfogadta a felkérésemet! Elsőként az érdekelne, hogy hol és mikor találkozott életében először a kémiával?

– Anyukám kutató-gyógyszerészként dolgozott. Kisiskolás koromban, amikor meglátogattam a munkahelyén, bemutatott néhány kémcsőkísérletet, és az nagyon elvarázsolt. Persze, a magyarázatra már nem emlékszem, csak a „csodára". Később sokat mesélt egyetemi élményeiről és kutatásairól, ez is felkeltette érdeklődésemet.

– Gyermekként mi volt a kedvenc kísérlete?

– A sav-bázis indikátorok színes világa.

– A középiskolában milyen véleménye volt a kémiáról? Meséljen kicsit erről az időszakról?

– Sajnálatosan akkor és ma is nagyon elvont tananyaggal, az atomszerkezet témájával indít az első gimnáziumi év. Nagyon kedves pályakezdő fiatalember volt a tanárom, aki teljesen összegabalyítva az ujjait próbálta szemléletessé tenni az atompályák, kötőelektronok világát. Igyekezete ellenére tisztán emlékszem, hogy mennyire nem lett az enyém ez a tananyag. Mind a mai napig ennek a megtanítása számomra a komoly kihívások egyike. Volt olyan osztálytársnőm, aki később bölcsész lett, és arra volt a legbüszkébb egy osztálytalálkozón, hogy ő korrepetált engem, a későbbi kémiatanárt, ebből a tananyagból.

Mindennek dacára mégis a tanári hivatás felé terelt Kecskés tanár úr embersége, természet iránti teljes odaadása, amilyen lelkesedéssel vitt minket terepi megfigyelésekre. Bár ott a botanikával foglalkoztunk főként, a tanári szakmát mégis közel hozta számomra, mint életcélt.

Az akkori tanterv szerint mi még három évig tanultuk a kémiát, sok érdekes kísérletet láthattunk, különösen az utolsó évben, hisz akkor volt a szervetlen kémia, ez még fokozta az érdeklődésemet.

– Mi motiválta, hogy az egyetem kémia szakára jelentkezzen?

– A természet iránti csodálatom miatt és az előbb említett tanári példaadás következtében fakultáltam biológiára és földrajzra, csak később döntöttem, hogy mégis kémiából érettségizem földrajz helyett. Ezzel sok nehézséget okoztam magamnak a felkészülési időszakban. Ezt ma is tapasztalom: bizony nehéz 16 évesen a fakultációválasztás, néhány tanulóm későn döbben rá, mennyi munka kell egy jó érettségi eléréséhez, és átváltani menetközben nagyon nehéz.

A kémiai számítások számomra varázslatos világa később nyílt meg előttem Róka András tanár úr előkészítőjén. Egyetemre az ELTE-re jártam, és visszanézve egyértelmű, hogy pedagógiai szempontból is sok kiváló tanár tanított. A követelmény igen magas volt, nem véletlen, hogy mind a mai napig nagyon kevesen választják ezt a szakpárt, de a kémia szakon min-dig teljesen egyértelműek voltak az elvárások, korrektek a tanárok. Így vált lassan a kémia tanítása hivatásommá.

– Jelenleg a Kempelen Farkas Gimnáziumban dolgozik kémiatanárként. Mit gondol a középiskolai kémiaoktatásról?

A londoni díjjal (balról jobbra): Gajdosné Szabó Márta (Kempelen Farkas Gimnázium, Budapest); Mazsu János egyetemi docens (igazgató, Debreceni Egyetem Tudományegyetemi Karok, Európai Tanulmányok Központja; a debreceni polgármester tanácsnoka, képviselő); Frank Walter (Christian von Dohm Gymnasium, Goslar); Ute Eckhof (Christian von Dohm Gymnasium, Goslar)

– Nagyon nagy kihívás a kémiát jól tanítani. Sok múlik rajtunk, tanárokon. A középiskolai (de az általános iskolai) tananyagot soknak, nehéznek, túl elvontnak tartom. Egy óra – egy olvasmány, ami őrületes tempót jelent, hisz annyi mindenről lehetne beszélni, annyi kiváló téma adja magát, hogy kibontsuk, feldolgozzuk együtt. Így lehetne közelebb hozni a kémiát a gyerekekhez, és talán szüleikhez is. Sajnos a jelenlegi óraszámok és tananyagmennyiség következtében csak néhány téma részletes feldolgozására van idő. Szerintem pedig ez lehetne jó irány: kevesebb elmélet, rengeteg kísérlet, egyéni kutatás, forráselemzés, projektmunka.

Külön nagy nehézség számomra, hogy egyedüli kémiatanár vagyok az iskolában, emiatt én tanítom a legtöbb diákot (240),

így bármi oknál fogva nem vagyok az iskolában, nincs szakhelyettesítés, ami még nagyobb felelősséget rak a vállamra.

Sajnálatosan az erősen lecsökkenő természettudományi óraszámok miatt lassan már csak előadó leszek a saját iskolámban, a valódi pedagógia alkalmazása nagyon nehéz…

Nagy pozitívum, hogy iskolám, a Kempelen Farkas Gimnázium felismerte, milyen fontosak a kísérletek, ezért 7. és 8. osztályban hetente tarthatok fél osztálynak kísérleti órát. Így értük el, hogy a kémia az egyik legjobban kedvelt tantárggyá vált hetedikben.

– Milyen egyedi módszereket alkalmaz a kémiaoktatás során? Mennyire tartja ezeket sikeresnek?

– Nagyon szeretem a képi kommunikációt, sok órámat kezdem érdekes képekkel, néha zenei aláfestéssel (oxigénes órámon ki nem hagynám Jean Michel Jarre *Oxygene* zenéjét). Ez a mai, digitális korban lényegesen fontosabb a gyerekek érdeklődésének fenntartásában, és az ő kommunikációs csatornáik használata egyszerűbbé és örömtelibbé teszi a befogadásukat is, egyértelműen ez a tapasztalatom. Emellett megtűzdelem a prezentációimat mókás, érdekes képekkel-ábrákkal, amelyek érzelmileg is bevonják a gyerekeket. Szeretek együtt nevetni a gyerekkel az elemek, vegyületek nyelvújítás kori nevein vagy a tréfás diákon. Esetleg nevetgélni azon a tudóson, aki saját vizeletében vélte megtalálni a bölcsek kövét… Sokkal több tudománytörténeti érdekességet szeretnék behozni az órára, szerintem nagyon tanulságos lenne akár a gyógyszerek fejlesztésének bemutatása, akár egy-egy felfedezés történetének ismertetése. Persze a kísérletek a csúcsok, sajnos, magasabb évfolyamokon a 35 fős osztálylétszámok ezt nagyon megnehezítik.

Záró évfolyamon (tizedikben) minden tanuló lehetőséget kap a *Száz kémiai mítosz* [2] című könyvből feldolgozni egy-egy témát, majd vitát indítani az osztályban erről.

Egyik legfontosabb eszközöm: nem kinyilatkoztatásokat tenni egy-egy témáról, hanem gondolkodást indítani. Csak feltenni egy kérdést, és így elültetni a kételyt a fejekbe: legyen a téma az atomenergia, a bányászat vagy egy mindenre jó, új csodabogyó. Fontos lenne, ha több idő jutna rá, de ez, sajnos, nem csak rajtam múlik…

Fontosnak tartom a stresszmentes tanítást, ami elősegíti a nehéz anyagok magas szintű elsajátítását (főleg a kicsiknél), így témazáróimat a munkafüzet vagy a gyerekeknek meglévő egyéb anyag feladataiból állítom össze, hisz aki tudja, annak a 20 oldalnak a válaszait, az megtanulta a tananyagot, és végül is ez a cél.

– Mi a véleménye a kémiatankönyvekről?

– Vannak olyan tananyagrészek (pl. szervetlen kémia), ahol sokféle könyvből el tudom képzelni a tanítást, de a nehéz, elvont tananyagokat (hetedikes, kilencedikes tananyag) csak nagyon jó könyvből tudom tanítani. Szerintem fontos a tankönyv, hisz kell otthon a gyerek vagy a kikérdező szülő kezébe valami, amiből ki tudja egészíteni, javítani órai jegyzeteit. Én magam sem szerettem a saját gyermekem macskakaparásos füzetéből megérteni, mi volt a tananyag. Sőt tovább megyek, szeretem az aktuális tankönyvből a képeket, ábrákat kivetíteni az órán, hogy otthon ismerős legyen. Én mindig kérek munkafüzetet, nem is értem, miért nincs minden könyvhöz. Gyakorolni kell még a kémiát is.

– Melyik a kedvenc témaköre a kémiában?

– A hetedikes tananyag nagyon a szívemhez nőtt, pedig nem régóta tanítok „kezdőket”.

– Melyik a kedvenc kísérlete, és miért?

– A vöröskáposzta-lé mint indikátor alkalmazása: veszélytelen, látványos, olcsó, nagyon sok tanulsággal kecsegtető, nemcsak a sav-bázis indikátorok színéről, hanem a hígítás és a pH kapcsolatáról, a közömbösítésről is sokat megtudhatunk. Emellett a hetedikes „hamupipőkés” kísérlet is nagyon jó (keverékek szétválasztása). Itt szinte instrukciók nélkül kell megoldani a gyerekeknek egy adott problémát. Számomra is nagyon tanulságos, évről évre tanulok a megoldásaikból.

– Mi a véleménye a kétszintű érettségi kémia részéről?

– Nekem nagy nehézséget okoz, hogy az átlag kémián túljutott diák tudása mennyire kevés, különösen az emelt érettségihez. Nem értem, hogyan szakadt el annyira a követelményrendszer a napi rutintól. Szóval jól kell fakultálni, vagy már eleve tagozatos iskolába kell menni, ha biztos az emelt érettségi terve.

– Sok diákja választja a kémiát továbbtanuláskor?

– A tanulók közel 10 százaléka. Az iskolám, a Kempelen Farkas Gimnázium nem reáltagozatos gimnázium. Innen sokfelé mennek a gyerekek tovább. Sokan nem a kémia szeretetéért jönnek fakultációra, hanem mert kell az orvosihoz. De saját példámon is tudom, sok minden változhat még az egyetemen is…

– Mi a véleménye a kémia tantárgy-pedagógiai kutatásokról? Szokott ezekkel kapcsolatban olvasni?

– Nagyon fontosak. Lássuk be, a tantárgyat tudni és tanítani tudni mást jelent. Persze, az embernek kell a tananyagot ismernie, de ez nagyon kevés. Az is nehézség, hogy magam vagyok kémiás az iskolában, így nem tudom magam képezni azzal, hogy kolléga óráit látogatom. Nyilvánvalóan a többi iskolában is akkor vannak órák, amikor nekem, így nem tudok elmenni. Ezért szinte űrt betöltőek a Magyar Kémikusok Egyesületének nyári továbbképzései. Nem egy kolléga saját fizetéséből is állja a költségeket, annyira fontos, hogy halljuk az újdonságokat, vagy csak egyszerűen beszélgessünk egymással. Az ebéd, a vacsoraidők, a megosztott szállások mind segítik a kommunikációt. A *Te hogy tanítod?* kezdetű kérdések és a válaszok a legpraktikusabb információkhoz juttatnak engem.

– Több nemzetközi kémiaoktatással kapcsolatos projektben vett már részt. Beszélne kicsit ezekről?

– Nehéz a pályán megmaradni épen, emberségesen, kreatívan. Sajnálatos, hogy azok a hangok, melyek régen arról beszéltek, hogy 7–10 évenként kaphatna egy tanár kutatóévet, teljesen eltűntek. Itt nincsenek nagy előrelépési lehetőségek, ezért tartom fontosnak, hogy mindenfajta projekttel, tanártalálkozóval töltsük fel magunkat. Erre egy nemzetközi találkozó kiváló terep. Mind tanárok vagyunk, kenyerünk a kommunikáció, és ebben jók vagyunk. Elképzelheti, milyen izgalmas angolul beszélgetve (ami nekem külön élmény) megtudni, mi a helyzet szerte Európában a kémiatanítás terén. Így barátságok alakulhatnak ki, és ebből még akár projekt is lehet. Engem így hívtak meg Németországba, a fapados repülőkkel nem elérhetetlenek a városok, ha ott segítenek a kollégák, még egy tanárnak is megfizethető. Nagy élmény volt két napot német kémiaórákon töltenem... Vannak szervezetek, melyek ezeknek a kapcsolatoknak a kiépítésében segítenek (például e-Twinning, Scientix, Science on Stage stb.). A legtöbb ilyen szervezetnek van internetes felülete az ismerkedéshez, ezeket lehet bátran használni. Az e-Twinnignek köszönhetem az első nemzetközi projektemet, ahol egy török csapattal dolgoztam. A Science on Stage-nek köszönhetem az első – a szerzővel közös – nemzetközi publikációmat [1], ami felemelő érzés volt, évekre adott energiát.

– Mit gondol, milyen a kapcsolat a tantárgy-pedagógiai kutatások és a hétköznapi gyakorlat között?

– Jó lenne, ha mi, „mezei” gimnáziumok tanárai is bevonódhatnánk, hisz sok minden más, már akkor is, ha az ember kutatóként óraadó egy gimnáziumban. A kötelező 26 óra/hét, a 10

perces szünetek, melyek egy részét folyosóügyeletben töltjük, az asszisztencia hiánya, a beszerzések nehézségei, a 240 tanuló problémái, dolgozatai, mindent más megvilágításba helyeznek.

– A Színpadon a Természettudomány (Science On Stage) 2014-ben megrendezett magyarországi fesztiválján, Debrecenben nyert fődíjat kémia kategóriában a „Vele vagy nélküle? A nehézipar előnyei és hátrányai" című német–magyar közös projektjével. 2015-ben Londonban, a Queen Mary Egyetemen rendezték meg a fesztivált, ahova Ön is kiutazhatott a Magyarországot képviselő csapat tagjaként, és ismét a nyertesek között volt. „Joint projects" kategóriában European Science Teacher Award díjat nyert egy német csoporttal közös munkájával! Pályázatuk a címe: „Worldwide Mountains – We move the Mountains to Europe" [w1]. Mit érdemes tudni erről a projektről?

Gajdosné Szabó Márta standja a fesztiválon

– Egy előző projektemmel hívtak meg a Frankfurt/Słubiczeben megrendezett előző Európai Science on Stage Fesztiválra, itt ismertem meg Ute Eckhofot és Frank Waltert. Ők Goslarban, Németországban gimnáziumi kémiatanárok. Ez a város 1000 éves bányászati kultúrával rendelkezik. Erre alapozva kollégáim egy a bányászat gyakorlati jelentőségét megismertető iskolai projektet indítottak el két éve, a helyben fellelhető ásványkincsek (réz és egyéb nehézfémek) témakörét feldolgozva. Hosszas beszélgetések után megállapodtunk, hogy csatlakozom a programhoz, és felhasználva a magyar adottságokat, új részekkel (alumínium kitermelése, felhasználása) egészítem ki a programot.

Így keveredtem el az Oroszlányi Bányászati Múzeumba, és ismerkedtem meg Mike Istvánnal, aki az ottani gyűjtemény elhívatott kezelője. Egyéni ötleteivel tette ő és néhány kollégája nagyon tematikussá, az oktatásban kiválóan használhatóvá a gyűjteményt. Külön dicséret illeti meg a Központi Bányászati Múzeumot Sopronban, hogy a legtöbb felirat angolul és németül is olvasható a múzeumban. Számomra egy új világ nyílt meg, egy kemény, de varázslatos világ, a maga hiedelmeivel, dalaival, történetével.

A múzeum dolgozóival és a német kollégákkal közösen dolgoztuk ki a látogatás tematikáját, a feladatlapokat, a workshop-tematikákat, én segítettem őket abban, mit tud és mennyit bír el egy 13 éves. Külön élmény volt számomra, hogy Ute és Frank el tudtak jönni Magyarországra kidolgozni a teljes programot, és a helyszíneket látva úgy döntöttek, hogy német–magyar diákcserével, a feladatok vegyes csoportokban történő helyszíni megoldásával és iskolalátogatásokkal is kibővítik a programot. Ez történt meg júniusban, amikor a goslari gimnázium egy osztálya látogatott a mi iskolánkba, amit szeptemberben követett a viszontlátogatás.

Ezzel a kész projekttel pályáztunk együtt az idei, Londonban rendezett fesztiválra [w2]. A megtisztelő lehetőséget mind német, mind magyar oldalról elnyertük, én a debreceni projektvetélkedőn kaptam meg ezt az elismerést, hogy Magyarországot képviselhettem.

A londoni fesztivál még sokkal nagyobb volt, mint az előző németországi, majdnem 500 természettudománnyal foglalkozó tanár gyűlt össze, nem is beszélve a több száz látogatóról, akik a pedagógiai ötleteket jöttek ellesni a nyílt napokon. Rengeteg jó ötletet sikerült összegyűjtenem, amit megpróbálok apródonként beépíteni a mindennapi pedagógiai munkámba, igazából ezért is örültem, hogy kimehetek, semmi egyéb várakozás nem volt bennem. Hihetetlen élmény és feltöltődés találkozni ennyi lelkes tanárral, ötleteket cserélni, megvitatni a problémákat, amelyek, nem túl nagy meglepetésemre, teljesen egyformák országtól függetlenül.

A nagy forgatagban nem is gondoltunk arra, hogy milyen helyezést érhetünk el, hiszen mi „mezítlábas kémiatanárok" vagyunk. A projektünk nem volt színes-szagos-látványos, mint sok más résztvevő bemutatója. Ezért nagy meglepetésként ért, amikor kihirdették az eredményt, miszerint az egyik kategóriát mi nyertük meg! Mindannyian (a német kollégák is) HUNGARY–Debrecen feliratú pólóban voltunk, hogy jelezzük, a következő fesztivált mi rendezzük 2017-ben [w3]. Gratulált mindenki, többek között a londoni magyar nagykövet, a debreceni alpolgármester. Nagy érdeklődéssel hallgatták a projekt összefoglalóját. Sokan jelezték, hogy bekapcsolódnának a projektbe, ami szintén nagy öröm volt. Hihetetlen élmény volt, ami mind a mai napig nagyon jó érzéssel tölt el.

– Milyen tervei vannak a jövőre?

– Szeretném, ha több időt tudnék tananyagfejlesztéssel és projektek megvalósításával tölteni, hogy azok még átgondoltabbak legyenek, és kapcsolódjanak az élethez. Célom olyan generáció kinevelése, amely a kémiát és a vegyipart megérti, elfogadja a mindennapi élet részének, és valóságosan látja a problémáit. Ez mindenkire, nemcsak a természettudományok iránt érdeklődőkre vonatkozik. Meggyőződésem, hogy egy bölcsésznek is szüksége van komoly kémiai alapismeretekre a világ megértéséhez.

– Köszönöm szépen, hogy válaszolt a kérdéseimre! További sok sikert kívánok Önnek!

Kapitány János Sándor

HIVATKOZÁSOK

[1] Kapitány János, Gajdosné Szabó Márta: Life Managment, Teaching Science in Europe 4. Developing Teaching Materials for ICT (Information and Communications Technologies) in Natural, Sciences Science on Stage Deutschland e.V, 2012, 18–22.

[2] Kovács Lajos, Csupor Dezső, Lente Gábor, Gunda Tamás (2011): Száz kémiai mítosz. Tévhitek, félreértések, magyarázatok, Akadémiai Kiadó, 2011.

LINKEK

[w1] http://www.szinpadon-a-tudomany.hu/

[w2] http://www.scienceonstage.org.uk/2015-festival/index.html

[w3] http://moderniskola.hu/cikk/termeszettudomany-fovarosa-lesz-debrecen

Híresek és Kémikusok

Kurt Vonnegut

Kurt Vonnegut Jr. (1922–2007) a 20. század legjelentősebb amerikai írói közé tartozik. Habár gyakran a tudományos-fantasztikus írók közé sorolják, valójában ez csak pályája első szakaszára jellemző, és ilyen írásait akkor is inkább megélhetési problémák és nem irodalmi szándékok inspirálták.

Nevének nyilvánvaló német eredete sok félreértést okozott életében, holott már nagyszülei is mind az Amerikai Egyesült Államokban születtek. Nevének szokásos amerikai kiejtése „kört vonegat" szemben a Magyarországon elterjedt, német kiejtési szabályokat követő „kurt fonegut" változattal. Bátyja, Bernard Vonnegut az Albany-i Egyetemen dolgozott légkörkémikusként, a SciFinder adatbázis szerint 1936 és 1995 között összesen 65 tudományos cikk szerzője volt, ebből 18 a nagy nevű *Science* folyóiratban jelent meg. Kurt is kémia szakon kezdett a Cornell Egyetemen, de ott nem bizonyult kellőképpen tehetségesnek, s tanulmányai befejezése helyett inkább önkéntesnek jelentkezett a második világháborús amerikai hadseregbe. Hadifogolyként közvetlen közelről látta Drezda bombázását, ez későbbi humanista nézeteire és írói tevékenységére is nagy hatással volt. Leghíresebb regényei *A Titán szirénjei*, az *Éj anyánk*, a *Macskabölcső*[1] és a *Bajnokok reggelije*. Érdekes egybeesés, hogy az Amerikai Humanisták Egyesületének tiszteletbeli elnöki címét a kémiával ugyancsak szoros kapcsolatban álló Isaac Asimov[2] utódjaként kapta meg.

Vonnegutot a legfeketébb fekete humor, illetve az akasztófahumor nagymesterének tartják. 2007-ben elhunyt, de utána örökösei még számos, korábban kiadatlan írásának megjelenéséről gondoskodtak. Maga Vonnegut minden bizonnyal így kommentálta volna: az író halála megjelenő új köteteinek számában az olvasók számára örvendetes növekedést hozott.

Műveiben visszatérő motívum a természettudományokkal való kapcsolat. Talán nem is lenne illő, hogy az általa már olyan elegánsan leírtakat újrafogalmazzuk a jelen cikk kedvéért, ezért inkább kémiával, humanizmussal és akasztófahumorral kapcsolatos véleményét három rövidebb és egy hosszabb idézetben elevenítjük fel…

„Nem a Cornell tehet róla, hogy nemigen kedvelem ezt a helyet, ha netán valamelyik öregdiák titkár vagy káplán könnyekben akarna kitörni. Az apám tehet róla. Azt mondta, legyek én is vegyész, mint a bátyám, és ne fecséreljem az időmet meg az ő pénzét olyan tantárgyakra, amiket ő merőben hamis ékszereknek tart – irodalomra, történelemre, filozófiára. Nem volt tehetségem a természettudományhoz. És ami még ennél is sokkal rosszabb: diákegyesületemben valamennyi fiú mérnökhallgató volt." (*Hogyan veszítettem el ártatlanságomat*, Borbás Mária fordítása)

„Csakhogy már Freud írt az akasztófahumorról, amely jellegzetesen közép-európai humor. Az emberek a politikai tehetetlenségükön nevettek. Az akasztófahumor az Osztrák-Magyar Monarchia népeihez kapcsolódik. Éltek ott zsidók, szerbek, horvátok – sok kis embercsoport, összeszorítva egy valószerűtlen birodalomban. És rettenetes dolgok történtek velük. Kiszolgáltatott, gyámoltalan népek voltak, ezért gyártottak vicceket. A frusztrációjukkal szemben nem volt más eszközük. Itt és ma a Freud által meghatározott akasztófahumort zsidó humornak nevezzük: ez a humor reménytelen helyzetben élő, gyenge és intelligens emberekről szól." (*Playboy-interjú*, Révbíró Tamás fordítása)

„Tiszteletbeli elnöke vagyok az amerikai humanisták AHA néven ismert szövetségének. E lényegében funkciótlan minőségben a nemrég elhunyt, lenyűgözően termékeny író és tudós, a nagy Dr. Isaac Asimov megüresedett székét foglaltam el. Az AHA elődöm tiszteletére tartott emlékmiséje során többek között a következő mondat hagyta el a számat: »Isaac már a mennyben jár.« Az egybegyűlt humanistáknak mulatságosabbat nem is mondhattam volna. Csak úgy gurultak a nevetéstől. Egek! Percekbe tellett, mire legalább az ünnepélyesség látszata helyreállt." (*Áldja meg az Isten, Dr. Kevorkian*, Hideg János fordítása)

„RIPORTER: Diplomát szerzett kémiából?

VONNEGUT: Már az első félévben sikerült mindenből elhasalnom. Boldogan vonultam be és mentem el háborúzni. A háború után beiratkoztam a Chicagói Egyetemre, ahol nagy kedvvel tanultam antropológiát. Ez a tudomány jobbára költészet, és jóformán semmi matek nincs benne. Akkor már házas voltam, és hamarosan gyerekünk is született, Mark. Később persze bedilizett és írt erről egy kitűnő könyvet, *The Eden Express* (Éden expresszsz) címmel. Épp most lett ő is apa, az első unokámé, egy Zachary nevű fiúé. Mark most végzi második évét a Harvard orvoskarán, és körülbelül egyetlen lesz az évfolyamon, aki nem adósodik el, mire lediplomázik – hála a könyvnek. Ez elég tisztes gyógyulás egy összeroppanásból, szerintem.

RIPORTER: Antropológiai tanulmányai később színezték írásait?

VONNEGUT: Megerősítettek ateizmusomban, ami egyébként is atyáim vallása volt. A vallásokat úgy mutatták be és tanították, mintha Rube Goldberg tök felesleges találmányai volnának – aminek mindig is gondoltam őket. Nem engedték, hogy egyetlen kultúrát is magasabb rendűnek találjunk bármelyik másiknál. Elfenekeltek, ha túlságosan sokat emlegettük a fajtákat. Roppant idealisztikus volt.

RIPORTER: Szinte már vallás?

VONNEGUT: Pontosan. És számomra az egyetlen. Mindeddig.

RIPORTER: Mi volt a disszertációja?

[1] Lásd *Természet Világa*, **2011**/II különszám, *142*, 93–96.
[2] Lásd *Magy. Kém. Lapja*, **2013**, *68*, 51.

VONNEGU: A *Macskabölcső*.

RIPORTER: De hát azt évekkel azután írta, hogy otthagyta Chicagót, nem?

VONNEGUT: Chicagót úgy hagytam ott, hogy nem írtam disszertációt. És nem kaptam diplomát. Valamennyi disszertációs témajavaslatomat elvetették, és nem volt egy vasam se, hát állásba mentem Schenectadybe, a General Electrichez mint PR ember. Húsz év múlva levelet kaptam a chicagói új dékántól, aki átlapozta a dossziémat. Az egyetemi szabályzat szerint, írta, egy nyomtatásban megjelent, magas nívójú mű helyettesítheti a disszertációt, én tehát jogosult vagyok az oklevélre. Bemutatta a Macskabölcsőt az antropológia szakon, és azt mondták, hogy félig-meddig tisztességes antropológia, hát postán elküldték a diplomámat. Tehát 1972-ben végeztem, vagy valahogy úgy.

RIPORTER: Gratulálok.

VONNEGUT: Semmiség volt. Gyerekjáték.

RIPORTER: Igaz-e, hogy a *Macskabölcső* némelyik szereplőjét olyan emberekről formázta, akiket a G. E.-nél megismert?

VONNEGUT: Dr. Felix Hoenikker, a szórakozott tudós, Mr. Irving Langmuirnak, a G. E. Kutatólaboratóriuma sztárjának a karikatúrája. Ismertem valamelyest. A bátyám együtt dolgozott vele. Langmuir csodálatosan szórakozott volt. Egy alkalommal fennhangon tűnődött: vajon amikor a teknősbéka behúzza a fejét, akkor meghajlik vagy összehúzódik-e a gerince. Ezt beleírtam a könyvbe. Egy alkalommal borravalót hagyott a tányérja alatt, miután a felesége felszolgálta a reggelijét odahaza. Ezt is beleírtam. Legfontosabb hozzájárulása azonban annak a gondolata, amit én »Szuperjég«-nek neveztem: megfagyott víz, ami szobahőmérsékleten sem enged fel. Nem közvetlenül nekem mondta el. Legenda volt ez laborszerte – körülbelül azóta, hogy H. G. Wells Schenectadyben járt. Ez jóval az én időm előtt történt. Kisfiú voltam akkor – hallgattam a rádiót, repülőgép-modelleket fabrikáltam.

RIPORTER: Utána meg?

VONNEGUT: Wells eljött Schenectadybe, és Langmuirt nevezték ki a házigazdájának. Langmuir úgy gondolta, elszórakoztathatja Wellst egy sci-fi történetbe illő ötlettel. Beszélt neki a jégről, ami szobahőmérsékleten is szilárd marad. Wellst nem érdekelte az ötlet, legalábbis sohasem használta fel. Aztán Wells meghalt, és végül meghalt Langmuir is. Gondoltam: Azé, aki megtalálta – enyém az ötlet. – Langmuir egyébként az első tudós volt a magániparban, aki elnyerte a Nobel-díjat.

RIPORTER: Hogyan viszonyul ahhoz, hogy Bellow megkapta az irodalmi Nobel-díjat?

VONNEGUT: Ez volt a lehető legjobb módja egész irodalmunk megtisztelésének.

RIPORTER: Könnyen tud vele szót érteni?

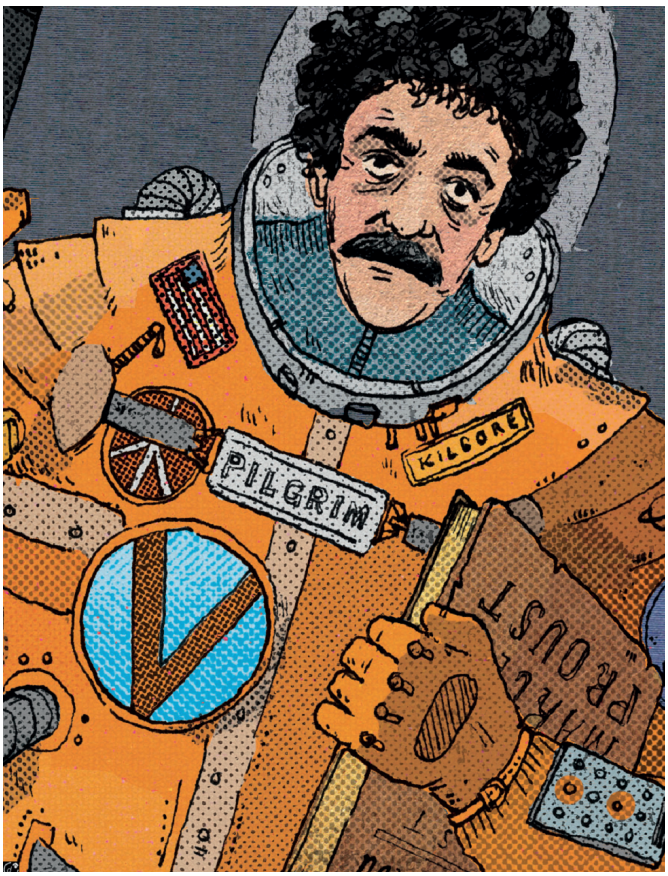
VONNEGUT: Igen. Körülbelül háromszor adódott rá alkalmam. Egy ízben én voltam a házigazdája az Iowai Egyetemen, ahol én tanítottam, ő pedig előadást tartott. Nagyon jól ment. Mindenesetre volt egy közös tulajdonságunk...

RIPORTER: Mégpedig?

VONNEGUT: Mindketten a Chicagói Egyetem antropológia szakjának a termékei vagyunk. Tudomásom szerint Bellow sohasem vett részt néprajzi tanulmányúton, és én sem. Ehelyett iparosodás előtti népeket találtunk ki – én a *Macskabölcsőben*, ő a *Henderson, az esőkirály*ban.

RIPORTER: Tehát tudóskollégák.

VONNEGUT: Én egyáltalán nem vagyok tudós. De annak örülök, hogy apám és bátyám természettudományos pályára kényszerítenek. Megértem, hogyan működik a tudományos logika és



játékosság, még ha nincs is tehetségem, hogy magam is részt vegyek benne. Élvezem a tudósok társaságát, könnyen jövök izgalomba, és szórakoztat, amikor elmesélik, mit csinálnak. Sokkal többet időztem tudósok társaságában, jobbára bátyám barátaival, mint irodalmárokéban. Élvezem a vízvezeték-szerelők és asztalosok és autószerelők társaságát is. Csak az utóbbi tíz évben ismerkedtem meg irodalmárokkal, kezdve azzal a két évvel, amit tanítással töltöttem Iowában. Ott, Iowában, egyszerre olyanokkal kerültem barátságba, mint Nelson Algren és José Donoso és Vance Bourjaily és Donald Justice és George Starbuck és Marvin Bell és így tovább. Elképedtem. Most, legutóbbi könyvem, a *Börleszk* kritikáiból ítélve, az emberek legszívesebben kipöccintenének az irodalmi létesítményből, visszaküldenének oda, ahonnan jöttem."

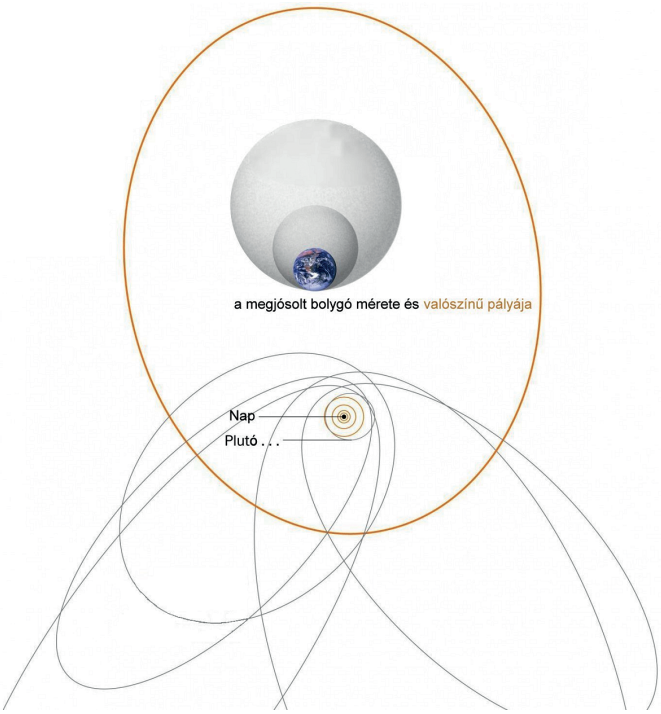
(*Öninterjú*, Borbás Mária fordítása) **Lente Gábor**

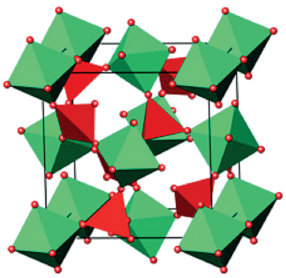
TÚL A KÉMIÁN

Új bolygó a Naprendszerben?

Miután az utóbbi két évtizedben több ezer exobolygót fedeztek fel a csillagászok, egy kis figyelmet a saját Naprendszerünk is kiérdemelt. A Neptunusz pályáján túl, a Kuiper-övben már eddig is ismeretesek voltak a Plútóhoz hasonló méretű törpebolygók, ilyenek például a Sedna, az Eris és a Makemake. Pályáik részletes analízise arra derített fényt, hogy az ezeket meghatározó paraméterekben igen valószínűtlen egybeesések sorozata van. Egy nemrégiben megjelent és máris nagy visszhangot kiváltó cikk arra mutatott rá, hogy az egybeeséseket jól értelmezheti az, ha a Naprendszerben van egy kilencedik bolygó (a Plútó már nem számít bolygónak egy ideje!), amelynek mérete a Neptunuszéhoz lehet hasonló, Naptól való távolsága pedig a Nap-Föld távolság 200-szorosa és 1200-szorosa között változik. Az így megjósolt bolygó becsült Nap körüli keringési idejének 10 és 20 ezer év között kell lennie. A Földön lévő legnagyobb távcsövek képesek lehetnek egy ilyen objektum közvetlen észlelésére, de bolygóként való azonosítása igen nehéz lehet, mert nagyon lassan mozog az állócsillagokhoz képest. Ha mégis sikerül megtalálni, akkor a kémikusok figyelmét is kiérdemelheti: az urán, a neptúnium és a plutónium mellett esetleg egy újabb elemet is el lehet majd nevezni újonnan felfedezett bolygóról.

Astron. J. 151, 22. (2016)





APRÓSÁG

A cirkónium-volframát (ZrW_2O_8) kivételes szilárd anyag: 2 és 1400 K között a hőmérséklet növelésének hatására csökken a térfogata.

CENTENÁRIUM

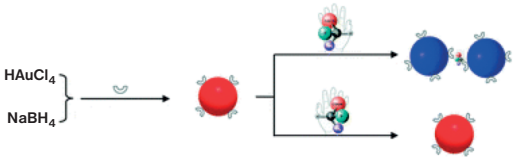
Merle Randall: The Extrapolation of Conductance Values
Journal of the American Chemical Society, Vol. 38, pp. 788–792 (1916. április)

Merle Randall (1888–1950) amerikai fizikai kémikus volt. Gilbert N. Lewis-zal dolgozva mintegy 25 éven át változatos vegyületek szabadentalpiájának meghatározása volt a fő elfoglaltsága. 1923-ban jelent meg kettőjük könyve, amely azóta a kémiai termodinamika egyik alapművévé vált.

Színes enantiomeranalízis

A természetes aminosavak enantiomerjeinek megkülönböztetése fontos feladat. Ezt teheti könnyebbé egy, a közelmúltban kidolgozott módszer. Az elv az, hogy az α-aminosavak L-enantiomerjei a felszínükön L-borkősavat tartalmazó, átlagosan kb. 13 nm átmérőjű arany nanorészecskékkel olyan reakcióba lépnek, amely révén az eredetileg vörös szín kékre változik. A D-aminosavak ugyanakkor nem okoznak színváltozást. Ezt felhasználva lehet majd készíteni általános és enantioszelektív aminosavdetektorokat.

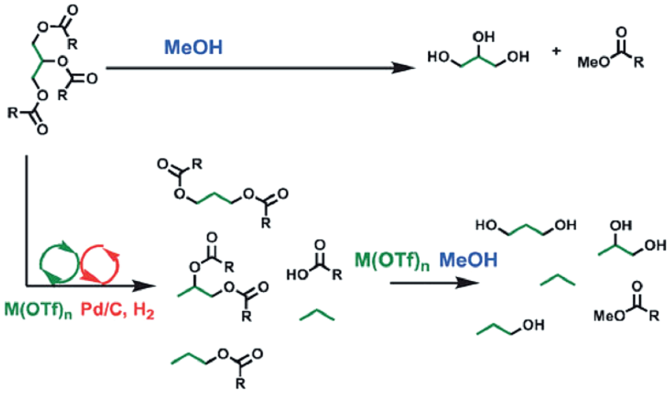
Analyst 141, 1257. (2016)



Glicerinmentes biodízel

A biodízel jelenlegi előállításának egyik nagy hátránya az, hogy melléktermékként olyan hatalmas – a világon éves szinten kétmillió tonnát is meghaladó – mennyiségű glicerin keletkezik, amelyre sehol nincsen piaci igény, így igazából hulladéknak számít. Amerikai tudósok egy tandem katalizátorrendszer segítségével olyan biodízelszintézist valósítottak meg, amely elkerüli ezt a problémát. Az egyik katalizátor egy fém trifluor-metánszulfonsavas sója, míg a másik megfelelő hordozóra felvitt palládium. A folyamatban így összességében glicerin helyett propilén és más, oxigént is tartalmazó három szénatomos szerves vegyületek keletkeznek, amelyek a glicerinnél sokkal szélesebb körben használhatók fel.

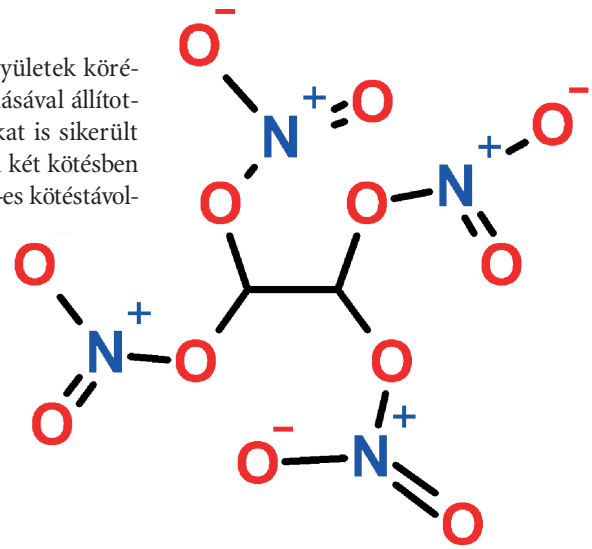
Energy Environ. Sci. 9, 550. (2016)



A HÓNAP MOLEKULÁJA

A tetranitrátoetánt ($C_2H_2N_4O_{12}$) – amelynek oxigéntartalma a szerves vegyületek körében kivételesen nagy (70,1 tömeg%) – a glioxál nitrogén-pentoxidos nitrálásával állították elő. Pentán és diklórmetán oldószerek felhasználásával egykristályokat is sikerült nyerni a vegyületből, így érdekes kötéstávolságokat tudtak meghatározni. A két kötésben részt vevő oxigénatomok mind a nitrogén, mind a szén irányába 141-144 pm-es kötéstávolsággal kapcsolódnak, míg a többi oxigén távolsága a legközelebbi nitrogénatommagtól 119 pm.

Chem. Commun. 52, 916. (2016)

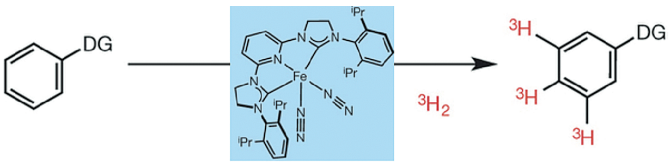


Klórozott tea

A klórozás az egyik leggyakoribb vízfertőtlenítési eljárás, így klórnyomok az ivóvízben is lehetnek. Egy új tanulmány szerzői arra voltak kíváncsiak, milyen hatással lehetnek ezek a klórnyomok a teakészítésre. Fekete és zöld teafajtákat használva minden esetben klórozott melléktermékek, leggyakrabban kloroform keletkezését tapasztalták, míg az összehasonlításként megvizsgált kávéféleségekben ez sokkal kevésbé jelentett problémát. A teszteredmények egészségügyi szempontból nem adtak okot semmiféle aggodalomra, viszont érthetővé teszik azt, hogy miért is javasolják a legjobb minőségű teák elkészítésénél a csapvíz közvetlen használatának mellőzését.

Environ. Sci.: Water Res. Technol. 2, 196. (2016)

Tríciumos nyomjelzés vaskatalizátorral



A szerves vegyületek tríciumos nyomjelzését igen széles körben használják a gyógyszerekkel kapcsolatos biológiai vizsgálatoknál. Ilyen származékok előállításához korábban általában tríciummal dúsított elemi hidrogént és irídium- vagy ródiumtartalmú katalizátorokat használnak. A legújabb fejlesztésekben jóval költséghatékonyabb és környezetbarátabb, vastartalmú komplexet alkalmaztak ugyanerre a célra. Az új módszer sokkal szélesebb körben, oldószerek széles választékában és kisebb hidrogénnyomás mellett használható, így a keletkező radioaktív hulladék mennyiségét is csökkenti.

Nature 529, 195 (2016)

Teázó kutyák

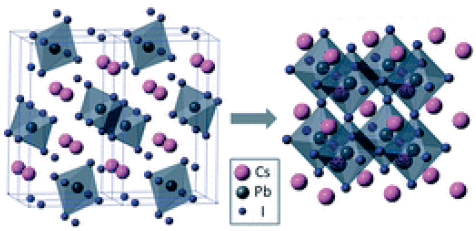
Akár csapból, akár más helyről vett vízzel készül a tea, a benne lévő polifenolok a kutyák egészségére igen előnyös hatással vannak. Ezen vegyületek antioxidáns- és mikrobaellenes hatását az emberi gyógyá-szatban már leírták, s kínai kutatók a közelmúltban hasonló következtetésre jutottak kutyák esetén is. A kísérletben részt vevő négylábúaknak ízlettek a teában lévő polifenolok: ha volt választási lehetőségük, az esetek több mint kétharmadában polifenoltartalmú táplálékot választottak maguknak. Egy kéthetes kísérlet végén a polifenolokat is fogyasztó kutyák vérében több antioxidáns és kevesebb baktérium volt kimutatható, mint a hasonló körülmények között tartott kontrollcsoportban.

RSC Adv. 6, 16802. (2016)

Céziumperovszkit

A perovszkitrácsú szilárd anyagokból készített napelemek egyre ígéretesebbeknek tűnnek a napenergia felhasználásában. A leggyakoribb változatokban formamidínium-, ólom-, bromid- és jodidionok vannak. A felhasználás közbeni csekély stabilitás viszont mindeddig komoly probléma volt az ilyen fotocelláknál. A közelmúltban angol és német kutatóknak ezen sikerült javítaniuk úgy, hogy a formamidíniumionok egy csekély részét céziumionokkal helyettesítették. A kristályszerkezet változatlan maradt, s a legjobb ilyen eszköz a napfény energiájának kb. 15%-át alakította elektromos árammá. Az új perovszkit hagyományos, szilíciumalapú napelemeken külső rétegként alkalmazva is jelentősen növelte azok hatékonyságát.

Science 351, 151. (2016)



Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg.mkl@science.unideb.hu.
A rovatszerkesztő korábbi írásait is tartalmazó blog elérhető a következő Internet-oldalon: http://www.inorg.unideb.hu/LenteBlog/index_magyar.html

TUDOMÁNYOS ÉLET

Stabil lábakon az SZBK

Az MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpontjának (SZBK) főigazgatója, Ormos Pál akadémikus, a hagyományoknak megfelelően az intézmény összes dolgozója előtt beszámolt a tavalyi évben elért sikerekről, a fontos eseményekről, fejlesztésekről, a központ anyagi helyzetéről.

A tudományos teljesítményről szólva elmondta: a publikációk számának a kimagasló, 2011-es csúcsa után négy esztendeje általában 208–212 dolgozat jelent meg szaklapokban a szegedi biológusok munkáiból. A folyóiratok idézettségét, így az ott közölt publikációk minőségét is jelző impaktfaktorokkal is elégedettek lehetnek a kutatók: a 2014-es összes impaktfaktornál tavaly valamivel ugyan kisebb ez a szám, 708, ám az utóbbi évek átlagában ez is kis ingadozással stabilnak mondható. Az intézetek versenyében magasan vezetnek a biokémikusok, őket követik mintegy 150 mínusszal a növénybiológusok, kevesebb impaktfaktorral a genetikusok és biofizikusok. Ezt a rangsort némiképp módosítják a kollaborációban készült közlemények, hiszen a „dicsőség” megoszlik idegen intézmények kutatóinak teljesítményével. Ha a pusztán SZBK-szerzős cikkek impaktfaktorait nézzük, mindenkit előz a 111 fővel dolgozó biokémiai intézet, második a növénybiológia, harmadik a genetika, mindhárom intézet a korábbiakhoz képest némiképp emelkedő impaktfaktorral.

Az eddigi életmű értékét tükröző Hirsch-listát külföldi intézetekhez is kötődő kutatók vezetik: változatlanul Nagy Ferenc István (58), Koncz Csaba (56) és Kondorosi Éva (50) áll az élen. A főigazgató örvendetes tényként említette, hogy egyre inkább „jönnek fel” a fiatalok, köztük a Lendület-program nyertesei.

A kutatói előmenetel terén csak a PhD-sek számának gyarapodásáról lehet beszámolni: tavaly összesen 19-en szerezték meg ezt a tudományos fokozatot. Miként az előző évben, 2015-ben sem védte meg senki a nagydoktoriját az SZBK-ban. Jelenleg – a nyugdíjasokat nem számítva – négy akadémikus, 29 tudományok doktora és 133 kandidátus, illetve PhD-s kutató dolgozik az ország egyik legnagyobb tudományos intézetében. A zömmel alapkutatással foglalkozó SZBK kiveszi részét az utánpótlás neveléséből, képzéséből is: a tudományegyetem 86 doktorandusza és 97 diákköröse készül itt is jövő hivatására. Élénk hazai és külföldi közéleti aktivitást is kifejtenek az SZBK kutatói: Kondorosi Éva az ERC (Európai Kutatási Tanács) tagja, az ENSZ-főtitkár tudományos tanácsadója, Nagy Ferenc EMBL Council- (Európai Molekuláris Biológiai Labor), valamint AKT-tag, Ormos Pál AKVT-társelnök, az MTA elnökségi tagja, Pósfai György választott elnökségi tag. Intézetenként több mint 10-en különböző grémiumiok tagsági feladatait látják el.

Az intézmény fennállása óta elkötelezett a külföldi diákok továbbképzéséért, az évek alatt azonban számos esetben anyagiak hiányában veszélybe került az ITC, a nemzetközi tréningek megszervezésének folyamatossága. Tavaly az SZBK-nak a TÁMOP-pályázat jóvoltából 296 millió forinttal sikerült támogatni a tanfolyamot, a rendezvényeket. A 2015/2016-os évfolyamra 16 jelentkezőből 5 hallgatót vettek föl, 3 indiait, 1 pakisztánit és 1 romániai diákot. A mozgalmas tudományos életre vall, hogy tavaly 6 hazai és 6 nemzetközi konferenciát szerveztek az SZBK falai között, ami elmélyítette a régi szakmai kapcsolatokat és újabbak előtt nyitotta meg az utat.

Kiemelkedő pályázati sikerekről is beszámolt a főigazgató: az EU által a kelet-európai régió számára a Kiválósági Központ címért, molekuláris medicina témakörben meghirdetett pályázatra jelentkezett az SZBK közösen a Semmelweis, a debreceni, a szegedi egyetemmel, s csatlakozott az EMBL, a 12 milliárd forint támogatásért. Az első fordulón szerencsésen túljutottak, jelenleg már a részletes pályázat kidolgozása folyik. Új győztese van a Lendület-pályázatnak is Mátés Lajosnak, a genetikai intézet munkatársának személyében. A hagyományos, házi Qualitas Biologica pályázat első helyezését közleményével Kalapis Dorottya, a másodikat Györfy Zsuzsanna és Sipos Orsolya nyerte el tavaly. PhD-dolgozatával Nagy Valéria érdemelte ki az elismerést.

Az intézmény anyagi helyzetéről általánosságban elmondható, hogy az is stabil, a bevétel talán enyhén emelkedő – mondta Ormos Pál. A költségvetési támogatást ábrázoló grafikon szerint azonban a 2014-es évhez képes alaposan apadt tavaly ez az összeg: a hiányzó milliókat extrakiadásként az épületfelújítás vitte el, amely az idén lezajlik. A gond az, hogy az alap kevés, az extrapénzzel nem maguk gazdálkodnak, Pesten döntik el, mire kell költeniük. A hiányzó összegeket külföldi és haza pályázatok útján igyekeztek pótolni. Miközben remélik, hogy sikerül nagy tételű pályázatokat megnyerniük a jövőben, a TÁMOP például megszűnik, a hazai OTKA, melyből 500 milliót nyertek tavaly, marad némi forrásként. Az MTA infrapályázata révén sikerült értékes, drága berendezéseket beszereznie az intézménynek: a spinning-disk konfokális mikroszkóp, a femtoszekundumos lézer, a nukleotid-szintetizátor nagyban hozzájárul majd új, jelentős eredmények eléréséhez. Nagy reményeket fűz az SZBK az új, fontos pályázatokhoz. Az NKFIH (Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal) GINOP kétfordulós nagy pályázatai közül az első forduló nemrégiben zajlott le, ezzel 4 milliárdos általános tematikus kutatási támogatás nyerhető 4 évre. Az eddigi 6 sikeres pályázatból csak egy kétmilliárd forint értékű kizárólag az SZBK-é, a továbbiakat konzorciumban nyerték meg. A kutatási infrastruktúra megerősítését szolgáló 1,3 milliárdból elektronmikroszkópot, AFM+Raman mikroszkópot, ESR-spektrométert és tömegspektrométert tudnak vásárolni.

A mindenkit érdeklő béremelésről szólva a főigazgató kivetítette az Akadémia elnökének, Lovász Lászlónak február 8-án tett nyilatkozatát: „Célunk az, hogy tartsuk a paritást az egyetemi és az akadémiai bérek között. A jövő évi emelést azonban többletforrás nélkül nem tudjuk megvalósítani – az hiszem, az egyetemek sem –, és az ideit is csak részben, szeptembertől, de azt is csak akkor, ha a jövő évi fedezet biztosnak tekinthető.”

Chikán Ágnes

Genetikai ismeretek Szegedről Kolozsvárra

A szegedi egyetem hajdani elődje, a kolozsvári, mai nevén Babeş-Bolyai Egyetem és az MTA Szegedi Biológiai Központja tíz éve együttműködési megállapodást kötött a kölcsönös előnyök reményében. A kolozsvári egyetem biológiai és geológiai fakultásának, valamint az SZBK genetikai intézetének kutatói – élükön Octavian Popescuval és Raskó Istvánnal – megállapodtak abban, hogy a szegedi szakemberek segítséget nyújtanak a határon túli hallgatók modern biológiai képzésében. Később, a 2012 óta működő magyar tagozaton is főként ökológiai, geológiai képzés folyt magyar nyelven. A román kormány anyagi segítsége híján és a szakemberhiány miatt fordultak a kolozsváriak a szegediekhez, és kérték támogatásukat. Az SZBK és az egyetem tíz biológusa és genetikusa önként vállalta – eleinte a Sapientia Alapítvány hozzájárulásával, később anyagi támogatás nélkül, szabadidejük feláldozásával –, hogy péntek-szombat-vasárnaponként kocsiba ülnek, bepakolják az ott hiányzó műszereket, segédanyagokat, és előadásokat tartanak a kolozsvári diákoknak. A határ túloldalán élő egyetemistákat eddig haza- és szakmaszeretetből oktató biológusok az idén fellélegezhetnek, ugyanis az Emberi Erőforrás Minisztériumához tavaly benyújtott közös pályázatukat elfogadták, és a Felsőoktatásért Felelős Államtitkárság 1 millió 794 ezer forint támogatást nyújt az óraadói díjak és a gyakorlatokhoz szükséges anyagok biztosítására. Ez lehetővé teszi, hogy a romániai magyar diákok továbbra is európai szinten tanulják a genetikát, a molekuláris biológiát; az SZBK, a szegedi egyetem pedig fogadhatja a legtehetségesebb, Kolozsváron végzett, posztgraduális, PhD-képzésre Szegedre érkező biológusokat. Deák Péter, az egyetem genetikai tanszékének vezetője, az SZBK tudományos főmunkatársa szerint ezek a hallgatók rendkívül lelkesek, motiváltak, szorgalmas résztvevői a Biológiai Kutatóközpont hagyományos továbbképző kurzusainak (ITC). Jó forrása ez az együttműködés a kutatói utánpótlásnak is. Az egyik volt kolozsvári tanítvány, Kovács Levente például ITC-s hallgatóként Szegeden megszerezte a PhD-fokozatot, cambridge-i tanulmányútja után tervezi, hogy visszatér Kolozsvárra.

A tíz szegedi egyetemi tanár és kutató tíz év alatt 450–500, Romániában élő hallgatót tanított a legmodernebb biológia tudományára, közülük csaknem 40-en a Tisza-parti városban, az egyetemen és az SZBK-ban képezték tovább magukat. Az oktatók távlati célja az, hogy olyan szakembereket képezzenek, akik majd átveszik tőlük a stafétabotot, s ők adják tovább a modern biológiáról szóló ismereteket a következő generációnak. A Babeş-Bolyai Tudományegyetem magyar tagozatának második félévében 12 témáról hallgathatnak előadást a diákok a szegedi szakemberek jóvoltából: szó lesz egyebek között a DNS hibajavításáról, az őssejtkutatásról, az immunrendszer genetikájáról, a rák genetikai alapjairól. S hogy ez az együttműködés továbbra is gyümölcsöző legyen, ahhoz a közös elszántságon kívül jövőre szükség lesz egy újabb sikeres pályázatra is. **ChÁ**

115 éve született Csűrös Zoltán

A Kossuth-díjas vegyészmérnök, akadémikus, az ipari szerves kémia, a makromolekuláris vegyészet jeles magyarországi alakja, a textil- és polimerkémiai kutatások tudósa, a katalitikus vizsgálatok megalapozója, a műegyetemi textiltanszék alapító vezetője 1901. február 6-án született Budapesten.

Csűrös Zoltán édesanyja szülőhelyén, Hátszegen járt az elemi iskolába, Brassóban végezte gimnáziumi tanulmányait. 1920-tól a budapesti József Műegyetemen tanult, vegyészmérnöki oklevelét 1924-ben szerezte. Zemplén Géza marasztalására az egyetem szerves kémiai tanszékén kezdett dolgozni. 1925-től tanársegédként, 1928-tól 1938-ig adjunktusként oktatott. 1929-ben műszaki doktori oklevelet szerezett. Egyetemi állása mellett 1930 és 1935 között a Budapesti Középiskolai Tanárképző Intézetben tanított. 1936-ban a műanyag- és lakk-kémia témaköréből magántanári képesítést ért el. 1938-ban szervezőmunkájának köszönhetően – Goldberger Leó támogatásával – jött létre a Budapesti Műszaki Egyetemen a textilkémiai tanszék, amelynek első vezetője volt. Az oktatási és kutatási szakterületet bővítve, 1947-ben szerves kémiai és technológiai tanszékké szervezte át, amelynek élén 1971-ig alapító tanszékvezetőként tevékenykedett. További egyetemi feladatait tekintve, 1943–44-ben a gépész- és vegyészmérnöki kar dékánja, 1946-tól 1949-ig, majd 1958 és 1961 között a műegyetem rektora volt. Egyetemi pályafutásával párhuzamosan 1961-ben kinevezték az MTA–BME Szerves Kémiai Technológiai Kutatócsoportjának vezetőjévé, ezt a feladatát 1973. évi nyugdíjba vonulásáig látta el.

A textil- és polimerkémia úttörő jelentőségű elméleti alapkutatásait a hazai iparfejlesztés szolgálatába állította. Pályája első szakaszában a szénhidrátok és aminosavak szerkezetvizsgálatával foglalkozott. Többek között nevéhez fűződik a cellulóz szerkezetének pontos tisztázása, a glükozidok előállítására alkalmas titán-kloridos szintézis kidolgozása. Az 1940-es évektől érdeklődése a szerves szintetikus nagyipar szolgálatába állítható katalitikus eljárások vizsgálata felé fordult, nevéhez fűződik a szerves kémiai reakciók, heterogén katalízisek kutatásának hazai elindítása. Foglalkozott a szálas és rostos anyagok kémiájával és vegyipari technológiájával is. További kutatásaival, szabadalmaival jelentősen hozzájárult a vegyipari termelés különféle ágaiban lényeges köztitermékek gyártási technológiáinak fejlesztéséhez.

Nagyszámú szakkönyve és egyetemi jegyzete mellett mintegy 250 tanulmánya jelent meg, nevéhez fűződik az első magyar nyelvű műanyagkémiai összefoglaló megírása 1942-ben. 1946 és 1964 között a Hungarica Acta Chimica (1951 után Acta Chimica) alapító főszerkesztője, illetve a Periodica Polytechnica főszerkesztője volt. Cavallier Józseffel együtt 1932 és 1936 között szerkesztette a Búvár című lapot, 1946-tól az akkor induló Élet és Tudomány szerkesztőbizottsági elnöki teendőit is ellátta.

A heterogén katalízisekkel kapcsolatos tudományos eredményeiért 1953-ban Kossuth-díjban részesült. Tudományos munkásságát 1963-ban Bugát Pál-emlékéremmel, 1976-ban a Budapesti Műszaki Egyetem emlékérmével, 1978-ban a Veszprémi Vegyipari Egyetem arany emlékérmével ismerték el. 1975-ben a Budapesti Műszaki Egyetem díszdoktorává avatta.

Textilvegyész nemzedékek tanultak a „Csűrös–Rusznák” szerzőpáros által szerkesztett Textilkémia jegyzetből és szakkönyvből, amely 1964-ben jelent meg.

Csűrös Zoltán 1979. október 28-án, Budapesten hunyt el.

Tisztelettel emlékezünk a kiváló tudósra és tanszékvezető egyetemi tanárra.

Kutasi Csaba

HÍREK AZ IPARBÓL

Tervszerűen halad a Richter

A Richter folyamatait, a korábbi jelzéseiket ismerők számára aligha lehet újdonság az előző évinél gyengébb idei prognózisuk – nyilatkozta a Világgazdaságnak Bogsch Erik vezérigazgató.

– Meglepte, hogy a Richter-részvények árfolyama tíz százalékot zuhant arra, hogy bejelentette, az euróban kimutatott idei eredményük 5 százalékkal elmaradhat a tavalyitól?

– Az árfolyammozgást soha nem kommentáljuk. Ám egyetlen olyan információt sem közöltem, amelyet korábban ne jeleztünk volna előre, és amelyre ne lehetett volna következtetni az előző gyorsjelentéseinkből. Számunkra most az volt a fontos, hogy elmagyarázzuk a sajtónak, aztán a telekonferencián az elemzőknek, részvényeseinknek, majd az azt követő két napon Londonban a számunkra legfontosabb befektetőinknek, miért lett jobb a 2015-ös eredmény, és miért lehet rosszabb a 2016-os.

– És sikerült?

– Úgy érzem, igen. Erre utal az is, hogy a hosszú távú befektetőink megértették a helyzetet. Ők ugyanis nagyon felkészültek, értik a folyamatokat, nekik már nem kell bemutatni a céget, van, aki már 1994 óta a részvényesünk.

– Akkor mi érdekelte őket?

– Az, hogy hogyan haladunk az Esmyával, a Cariprazine-nal, mi várható Oroszországban, és mire költünk a jelentősnek tekinthető készpénzállományunkból.

– Menjünk sorban. Hogy állnak az Esmyával?

– Minden esély megvan arra, hogy 2018–2019-re teljesüljön a 80–100 millió eurós értékesítési tervünk. A hitelességünk szempontjából volt fontos, hogy sikerült kiterjeszteni a terápiát a többszöri kezelésekre, aminek következtében nagy valószínűséggel elkerülhető a műtét. Ez azért lenne áttörés, mert eddig a méh jóindulatú daganatára, a miómára nem volt gyógyszeres kezelés. Az EU meghatározó piacai mellett már Kanadában is adunk el az Esmyából, s hamarosan Latin-Amerikában is elindulhatunk az értékesítéssel, mivel több ottani országban is már bejegyeztettük a törzskönyvet. Az USA-ban partnerünk, az Allergan folytatja a klinikai vizsgálatokat, mert ott másfajta klinikai protokoll szükséges, mint Európában.

– Mi a helyzet a Cariprazine-nal?

– Az amerikai élelmiszer- és gyógyszerügyi hatóság engedélye alapján az Allergan március végéig forgalomba hozza a készítményt az USA-ban. Azt, hogy az eladások mikorra futhatnak fel, nem tudjuk megmondani, ez egyébként is az Allergan hatásköre. Számunkra az a lényeges, hogy a skizofrénia és a bipoláris mánia mellett a terápiarezisztens skizofréniára és a bipoláris depresszióra is sikerüljön engedélyt kapni. Itt még folynak a klinikai vizsgálatok. Ha ezek is sikeresek lesznek, akkor a Cariprazine unikális lenne, mert jelenleg egyetlen olyan molekula sincs, amely mind a négy indikációban használható. Európában márciusban kívánjuk elindítani a törzskönyvezést a skizofréniában, amely jó egy évig is eltarthat. Vagyis optimális esetben 2017 közepére megkapjuk az engedélyt. Ezt követően kerülhet sor a termék bevezetésére, valamint az egyes piacokon a gyógyszerár-támogatási döntésekre. Márpedig a támogatási rendszerek és mértékek uniós országonként eltérőek.

– Éppen a támogatások megszerzésének várható elhúzódásával indokolta a globális gyógyszerszektort elemző Jefferies befektetési bank, hogy 5790 forintról 5255-re rontotta a jelenleg 5000 alatt forgó Richter-részvények egy év múlva várható árfolyamát.

– Pedig ez sem újdonság. Az Esmyával kapcsolatban például folyamatosan közöltük, országonként hogyan állunk a támogatotti státus megszerzésében, mindig kitérve arra, hogy ez az eljárás uniós országonként eltérő, Spanyolországban például a központi jóváhagyás után tartományonként külön kell megszerezni a támogatást.

– Ennél kétségtelenül nagyobb aggodalommal figyelik a befektetők, mi várható Oroszországban.

– Az oroszországi helyzettel is mindenki tisztában van. A fő probléma, hogy az alapellátásban használt gyógyszerek ára rubelben van befagyasztva, s mivel ezeknek az értékesítéséből származik az ottani árbevételünk több mint fele, a rubel leértékelődése nagyon rosszul jött nekünk, hiszen mi is kénytelenek vagyunk rubelben számlázni.

– A befektetők szerencséje, hogy a 2015-ös eredmény után fizetnek osztalékot. S mivel a gyorsjelentés ismertetésekor azt mondta, az adózás előtti eredményük 25 százalékát továbbra is kifizetik, ez számításaink szerint részvényenként 72 forintot jelenthet, a tavalyi 33-mal szemben. Ám még e jelentős osztaléknövekedés után is magas marad a készpénzállományuk. Mire költik ezt?

– Szinte kizárólag nőgyógyászati termékek vásárlására. Vagy licencet veszünk át, vagy olyan projektet, amely már a törzskönyvezéshez közeli szakaszban tart, amelyből így két-három éven belül már árbevétel és nyereség realizálható. Az a kérdés, hogy mivel kompenzáljuk az oroszországi, ukrajnai kiesést. Egyrészt tudunk-e Nyugat-Európában növekedni, nemcsak az Esmyával, hanem a teljes nőgyógyászati portfólióval, másrészt tudunk-e megfelelő mértékben előrelépni Latin-Amerikában és Kínában.

– Mi a helyzet Magyarországgal?

– Ma ez a legstabilabb piacunk, tavaly növekedtünk, s ezt a szintet valószínűleg az idén is tudjuk tartani.

– Ezek szerint a hazai gyógyszerpiaci szabályozást megfelelőnek tartja?

– Vannak olyan területek, ahol lehetne javítani, a vaklicit rendszert például nem tartjuk megfelelőnek. De a más országokban végbement negatív piaci változásokhoz viszonyítva nálunk stabil a helyzet. A kormány figyelembe vette, mennyire fontos, hogy a kutatás-fejlesztés megmaradjon, ami azért is lényeges, mert a velünk versenyző cégek K+F-költései csökkentek.

– Ez az eredménye a 2012 novemberében a kormánnyal megkötött stratégiai megállapodásnak?

– A szabályozói környezet, köztük a minket terhelő adók, valamint a K+F-kedvezmények rendszere kétségtelenül stabil, ez mind része volt a megállapodásnak. Mint ahogy az is, hogy az állam a Richter-részvényre cserélhető kötvényét 2019-ig meghosszabbította. A 25 százalék feletti állami részesedés számunkra azért fontos, mert megvéd egy esetleges ellenséges felvásárlástól.

(A Világgazdaság nyomán) **Zékány András**

Vegyipari mozaik

Bejelentették az új magyar iparstratégiát. Át kell állni az innovációvezérelt gazdaságra a következő években, az iparnak a tudásra, a kutatás-fejlesztésre, a felsőoktatásra és a szakoktatásra kell támaszkodnia – hangsúlyozta a Nemzetgazdasági Minisztérium gazdaságfejlesztésért és -szabályozásért felelős államtitkára az Irinyi-terv budapesti bemutatásán.

Lepsényi István hozzátette: az Irinyi-terv kijelöli a gazdaságfejlesztés legfontosabb irányait a 2016–2020-as időszakra. A stratégia egyik célja, hogy az ipar aránya a bruttó hazai termékben (GDP) a jelenlegi 23,5 százalékról 30 százalékra emelkedjen 2020-ig. Emellett csökkenteni kell az ipar egyoldalú függését a járműgyártástól és a hozzá kapcsolódó beszállítói iparágaktól és meg kell erősíteni a többi ágazatot is a kiegyensúlyozott gazdasági fejlődés biztosítása érdekében. *(portfolio)*

A MOL-csoport 2015. évi eredményei. A MOL-csoport a Feldolgozás és kereskedelem üzletág történetének legjobb eredményét érte el 2015-ben, több mint duplájára növelte hozzájárulását az előző évhez képest. A Kutatás-termelés üzletág 7%-kal növelte átlagos napi kitermelését, 104 ezer kőolaj-egyenérték/napra (boe/nap), amely részben a kelet-közép-európai régió termelésnövelését megcélzó programnak volt köszönhető. A MOL jelentősen felülmúlta a 2,2 Mrd dolláros éves célját: 2,5 Mrd dolláros tiszta EBITDA-t ért el 2015-ben. Mindezt annak ellenére, hogy az olajárak mintegy felére csökkentek egy év alatt. A nettó működési cash flow (2,1 Mrd dollár) jelentősen meghaladta az organikus beruházások szintjét (1,3 Mrd dollár), ami erős mérleget eredményezett alacsony eladósodottsági szint mellett.

A Feldolgozás és kereskedelem üzletág történetének legmagasabb eredményét érte el 2015-ben. A „tiszta" újrabeszerzési árakkal becsült EBITDA 2014-hez képest több mint kétszeresére, 463 Mrd forintra nőtt. A Downstream képes volt kihasználni a külső környezet változásából adódó lehetőségeket, és az EBITDA 50%-a a 2011-ben kezdett belső hatékonyságnövelő programokból eredt.

A Kutatás és termelés szegmens speciális tételek nélküli EBITDA-ja 201 Mrd forintot ért el (719 millió USD), ami 26 százalékos csökkenést jelent az egy évvel korábbihoz képest. A szénhidrogén-termelés 7%-kal nőtt, 104 ezer boe/napot ért el.

A horvátországi termelés 7%-kal nőtt, míg Magyarországon a termelés alig változott a bázis időszakhoz képest, ami jelentős teljesítmény a korábbi előrejelzésekkel szemben, amelyek akár 5%-ot elérő csökkenésről szóltak. Ezen belül a kőolajtermelés Magyarországon 5%-kal, Horvátországban 20%-kal emelkedett.

A korábbi bejelentéssel összhangban a MOL 131 Mrd Ft eszközleírást hajtott végre az Akri Bijell blokk felhagyásához kapcsolódóan a negyedik negyedévében. A MOL további értékleírásokat könyvelt el 2015 negyedik negyedévében, amelyeket elsősorban a csökkenő olajárakról szóló várakozások indokoltak. A legjelentősebb tétel az egyesült királyságbeli eszközökön történt leírás volt. A Gáz Midstream 2015-ben 60 Mrd forint (213 millió dollár) EBITDA-t ért el, amely kismértékben meghaladja az előző évi eredményt.

Hernádi Zsolt, a MOL-csoport elnök-vezérigazgatója elmondta: „A 2015-ös év komoly változásokat és kihívásokat hozott az olajipar és így a MOL számára is. Az olajár több mint 70%-ot esett a 2014-es nyári csúcshoz képest, ami az utóbbi két évtized egyik legnehezebb működési környezetét eredményezte. Ezen kihívások közepette is 13%-kal növeltük tisztított eredményünket 2014-hez képest, túlszárnyalva ezzel céljainkat, nagymértékben növelve készpénztermelő képességünket így még erősebb mérleggel zárva az évet. Ezekkel az eredményekkel a MOL jobban teljesített az integrált olajipari vállalatok többségénél. A drámai mértékben változó külső környezet hatására azonban – más olajipari cégekhez hasonlóan – nekünk is meg kellett hoznunk néhány fájdalmas, de szükséges lépést, többek között az Upstream eszközeink könyvekben nyilvántartott értékének felülvizsgálatát, ami készpénzkiáramlással nem járó leírásokat eredményezett 2015-ben. A MOL 2015-ben bebizonyította, hogy Downstream üzletága hatékony és jelentős készpénztermelő képességgel rendelkezik, és képes megragadni a külső környezet változásából adódó lehetőségeket. Ennek megfelelően további befektetéseket hajtunk végre annak érdekében, hogy a hosszú távú növekedés biztosított legyen. Ezen túlmenően a Next Downstream Program már első évében komoly, várakozásainkat meghaladó eredményeket ért el. Ezzel egy időben zajlik Upstream divíziónk átalakítása azért, hogy a 35 dollár/hordós olajár környezetben is profitábilisan működhessünk nemcsak a kelet-közép-európai, hanem a nemzetközi operációban is. A legfőbb célunk 2016-ban is 2 milliárd dollár körüli EBITDA elérése olyan készpénztermelés mellett, amely nemcsak saját befektetéseinket, hanem a tulajdonosainknak fizetett osztalékot is fedezi akár kedvezőtlen körülmények közepette." *(MOL)*

Mi nem hitelből fizetünk osztalékot! Összességében véve fáj a MOL-nak az alacsony olajár, hiába remekel a finomítás, a kutatás-termelésben költséglefaragások jönnek, a hangsúly azonban nem a létszámcsökkentésen van – mondta el a Portfoliónak adott interjújában Simola József, a társaság pénzügyi igazgatója. Ebből a beszélgetésből közlünk néhány részletet.

– A MOL az ágazat többi szereplőjéhez hasonlóan visszavágja beruházásait. Mégis, amit beruháznak, hol fogják elkölteni?

– Tavaly 1,3 milliárd dollár volt a beruházási volumen, nagyjából ezzel számolunk az idei évre is, pár százmillió dolláros bizonytalansági sávban. Folytatjuk a kutatás-termelési beruházásainkat, ahogy tavaly, úgy az idén is Magyarország, Horvátország és az Egyesült Királyság lehet ennek a fő célterülete. Itthon több mint 100 milliárd forintos beruházási tervünk van. Kurdisztán korábban szintén fontos piac volt, de a kurdisztáni makrogazdasági helyzet stabilizálódásáig – ami alapvetően az olajárak függvénye – nem számolunk jelentősebb beruházással. A beruházások volumene ezen a területen alacsonyabb lehet, mint a tavalyi évben.

– Arra is utaltak, hogy a MOL célja a részvényesek irányába történő kifizetések növelése. Mit értsünk ez alatt? A teljes osztalék fog emelkedni, vagy az egy részvényre jutó osztalék?

– A MOL elsődleges célja, hogy meglegyen a pénzügyi stabilitása az osztalékfizetéshez, továbbá az, hogy a hosszú távú növekedés és az osztalékfizetés között megfelelő egyensúlyt tudjon találni. Úgy gondolom, a 2015 végi pénzügyi pozíciónk erősebb, mint egy évvel korábban, a MOL-nak megvan a pénzügyi alapja ahhoz, hogy folytassa az elmúlt évek gyakorlatát, ami abszolút forintkifizetésben növekvő tendenciát jelentett. Az osztalékfizetésig ráadásul a Magnolia-bevonás is megtörténhet, ami önmagában mintegy 6 százalékkal növeli az egy részvényre jutó osztalékot. A MOL osztalékfizetés tekintetében egy dologban különbözik a nagy olajcégek többségétől: mi a készpénztermelésből fizetünk osztalékot, nem hitelből. De ez a közgyűlés döntése lesz majd áprilisban, az Igazgatóság márciusban teszi le javaslatát.

– Orbán Viktor moszkvai látogatása után Szijjártó Péter jelezte, megállapodás született arról, hogy újabb orosz eszközök után néznek Nyugat-Szibériában és a volga-uráli területeken. Mit lehet erről tudni?

– Oroszország általánosságban véve érdekes a MOL számára, részben az adó és az egyéb elvonási rendszer miatt. Oroszországban a kitermelőkre magas olajárak mellett extra adót vetnek ki, így az itteni eszközök ára kevésbé érzékeny az olajárak változására. Oroszországgal megvannak a kulturális kapcsolatok, sok kollégánk ott diplomázott, emiatt Oroszországot alapvető piacnak tekintjük. Igaz ugyanakkor itt is, mint a legtöbb más kutatás-termelési régióban, hogy az egyes eszközöknél az eladók és a vevők árvárakozásai nem igazán ugyanabban a sávban vannak. Nézünk aktívan orosz eszközöket, azt, hogy ebből mikor lesz tranzakció, egyelőre nem lehet látni.

– Kurdisztánban nem akarnak vásárolni?

– 10 évre előretekintve érdekes területnek látjuk Kurdisztánt, itt az a kérdés, hogy 30 dolláros árak mellett hogyan tudja a régió teljesíteni a korábban vállalt fizetési kötelezettségeit az olajtermelő cégek felé. Krízishelyzetről van szó náluk is, amíg pedig a kérdésre nincs világos válasz, addig érdemes kivárni.

– Iránra sokan ígéretes területként tekintenek. Mit gondol a MOL?

– Túl korai még erre igent vagy nemet mondani. A politikai rendeződés jó úton halad ahhoz, hogy Irán szabad piac legyen. Politikai szempontból lényeges kérdés az embargó, bár a hír igaz, hogy megérkezett az első iráni olajszállítmány Európába, nem szabad elfelejteni, hogy a vevő a francia Total volt, melynek az állam kivételes felmentést adott a szankciók alól, átvállalva ezek potenciális következményeit. A terület geológiailag mindenképpen érdekes, az más kérdés, hogy milyen feltételekkel lehet ide külföldi partnerként bemenni. A jelenlegi szabályozás nem tesz lehetővé készletkimutatást a külföldi partnereknek, hanem egyfajta szolgáltatásnyújtásra van lehetőség. Azt, hogy ez mennyire lehet érdekes a MOL-nak, szerintem még vizsgálnunk kell.

– Mit gondol az olajipar jövőjéről? Lesz valaha még 100 dollár az olajár? Mi jelenti a legnagyobb fenyegetést az ágazatnak? Elektromos autók? Megújuló energia?

– A mostani olajár is mutatja, hogy minden lehetséges. Annak az esélye azonban, hogy egyéves időtávon ismét 100 dollár legyen az olajár, meglehetősen kicsi, persze elképzelhető olyan geopolitikai helyzet, ami ezt kiválthatná, például ha Venezuela beomlik, és az iráni helyzet is elmérgesedik. 5–10 éves átlagban is nagyon kicsi az esélye a 100 dollár körüli áraknak, ahogy a 30 dolláros áraknak is. A legnagyobb valószínűséggel most azt lehet mondani, hogy hosszabb távon a mostaninál magasabb szinteken stabilizálódik majd az olajár, ez lehet 50–60–70 dollár is. Ami az iparágat illeti, valóban vannak kihívások, van elektromos autó, sokszor felmerül a kérdés, hogy a kőolaj-finomításnak van-e egyáltalán jövője. Abban a tekintetben, hogy közlekedési, logisztikai célból hol van az ágazat jövője, valóban vannak változások. Ha csak ez a terület lenne, baj lenne. Van azonban két terület, ami a történetet azért más megvilágításba helyezi. Az egyik a földgáz, aminek szerepe továbbra is jelentős, és egyre jelentősebb szerepe lehet az energiatermelésben. A gáznak 50 éves kitekintésben indokoltan ott van a helye az energiatermelésben, ezáltal pedig azoknak a cégeknek is ott van a helyük a piacon, akik gázt termelnek ki. A másik fontos terület leegyszerűsítve a műanyagok, a petrolkémiai iparág. A finomítás fő fókusza hosszabb távon feltehetően nem az lesz, hogy benzint vagy dízelt állítsunk elő, hanem az, hogy műanyagokat. A műanyag-felhasználás várakozásaink szerint a GDP-vel arányosan fog növekedni a világban. És ezen a területen a MOL jelentős fejlesztéseket valósított meg és tervez is megvalósítani a jövőben. *(A portfolio nyomán)*

Átütő erejű szerves kémiai újítás. Szerves molekulák hatékony átalakítására dolgozott ki új katalitikus eljárást az ELTE-n működő Lendület-kutatócsoport. Az *Angewandte Chemie International Edition* 2016. február 5-i számában kiemelt, „frontispiece” cikknek választották Novák Zoltán és kutatótársai legfrissebb publikációját.

A csoport 2012 óta foglalkozik olyan katalitikus eljárások kidolgozásával és vizsgálatával, amelyek segítségével a szerves molekulák szén–hidrogén kötései hatékonyan és szelektíven alakíthatóak át. A C–H kötések közvetlen funkcionalizálásával egy-egy összetett, több lépésből álló szintézissor jelentős mértékben leegyszerűsíthető. A C–H aktiváláson keresztül lejátszódó reakciók átmenetifém-katalizátorok segítségével valósíthatók meg, azonban ezek az átalakítások az esetek döntő többségében erélyes körülményeket igényelnek.

A gyógyászatban számos fluortartalmú hatóanyag ismert. Az egyik gyakran használt funkciós csoport a trifluormetil-csoport. Beépítésére számos szerves kémiai átalakítás létezik, azonban napjainkban is intenzív kutatások folynak új eljárások kifejlesztésére.

Tóth Balázs PhD-hallgató, Kovács Szabolcs posztdoktor kutató, Sályi Gergő BSc-hallgató és Novák Zoltán olyan átalakítást dolgoztak ki, amelynek segítségével egy trifluoretil-csoport szén–hidrogén kötés hasításán keresztül építhető be egy aromás rendszer adott pozíciójába. Eddig erre csak erélyes körülmények között, összetett reakcióutakon keresztül nyílt lehetőség. A kutatócsoport által kifejlesztett új szintetikus megoldás segítségével szobahőmérsékleten, gyorsan és akár 95%-os termelési hatékonysággal építhető be a kívánt trifluoretil-csoport változatos szerkezetű szubsztrátumokba. Az átalakítás megvalósításának kulcsát egy új típusú hipervalens jodóniumsó-alapú trifluoretilező reagens előállítása és az alkalmazására épülő palládiumkatalizált folyamat megtervezése képezte.

A szakma szerint átütő erejű eljárás kidolgozását követően a kutatócsoport tovább vizsgálja a katalitikus folyamatban és a reagens alkalmazásában rejlő szintetikus lehetőségeket, illetve fel kívánja deríteni az újonnan felfedezett kémiai reakció mechanizmusát. *(mta.hu)*

Banai Endre összeállítása

HIRDETÉS

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

MKE vezetői értekezlet

Időpont: 2016. április 8. 10 óra
Helyszín: Magyar Kémikusok Egyesülete
1015 Budapest, Hattyú u. 16. II. emelet 8.

Szeretettel várjuk a szakosztályok, társaságok, szakcsoportok, területi szervezetek és munkahelyi csoportok elnökeit, titkárait. Megjelenésükre feltétlenül számítunk!

Sarkadi Livia
elnök

XVI. Országos Diákvegyész Napok

2016. április 15–16.
Fényi Gyula Jezsuita Gimnázium és Kollégium
(Miskolc, Fényi tér 2–12.)
Meghirdetés és jelentkezési lapok:
www.mke.org.hu, hírek, aktualitások rovat

Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny

2016. április 22–24.
Versenykiírás: www.irinyiverseny.mke.org.hu

33th European Congress on Molecular Spectrochemistry

2016. július 30. – 2016. augusztus 4.
Szegedi Tudományegyetem (Szeged, Dóm tér 7–8.)
Honlap és online regisztráció: http://eucmos2016.mke.org.hu/
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK:
Körispataky Panna, eucmos2016@mke.org.hu

13th European Biological Inorganic Chemistry Conference

2016. augusztus 28. – 2016. szeptember 1.
Eötvös Loránd Tudományegyetem
(Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A)
Honlap és online regisztráció: http://www.eurobic13.mke.org.hu/
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, eurobic13@mke.org.hu

13th Pannonian International Symposium on Catalysis

2016. szeptember 20–23.
Hotel Magistern (Siófok, Beszédes József stny. 72.)
Honlap és online jelentkezés:
http://www.pannon2016.mke.org.hu/
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK:
Körispataky Panna, pannon2016@mke.org.hu

4th Rubber Symposium of the Countries on the Danube

2016. október 24–26.
Hunguest Hotel Forrás
(Szeged, Szent-Györgyi Albert u. 16–24.)

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.
Honlap és online regisztráció:
http://www.rubber2016.mke.org.hu/
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK:
Schenker Beatrix, rubber2016@mke.org.hu

Kozmetikai Szimpózium – 2016

2016. november 17.
Hotel Bara, Budapest, Hegyalja út 34.
2016. április 10-től lehet online jelentkezni a szimpóziumra az alábbi linken:
https//www.mke.org.hu/conferences/kozmetika2016/registration
TOVÁBBI INFORMÁCIÓK:
Schenker Beatrix, beatrix.schenker@mke.org.hu

Tájékoztatjuk tisztelt tagtársainkat, hogy

személyi jövedelemadójuk 1 százalékának felajánlásából idén 710 351 forintot

utal át az APEH Egyesületünknek.

Köszönjük felajánlásaikat, köszönjük, hogy egyetértenek a kémia oktatásáért és népszerűsítéséért kifejtett munkánkkal. A felajánlott összeget ismételten a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, a 9. Kémikus Diákszimpózium, valamint a 2015-ben hetedszer megrendezett Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használtuk fel, valamint arra a célra, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő, határon túli honfitársunkhoz.

Ezúton is kérjük, hogy a 2015. évi SZJA bevallásakor – értékelve törekvéseinket – éljenek a lehetőséggel, és személyi jövedelemadójuk 1%-át ajánlják fel az erre vonatkozó Rendelkező nyilatkozat kitöltésével

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

Az MKE adószáma: **19815819-2-41**.

Terveink szerint 2016-ban az így befolyt összeget ismételten a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, a XVI. Országos Diákvegyész Napok, valamint a 2016-ban nyolcadszor szervezendő Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használjuk fel.

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

VARÁZSLATOS KÉMIATÁBOR, 2015

Rendezvénynaptár

2016. április 15–16.	XVI. Országos Diákvegyész Napok	Miskolc
2016. április 22–24.	Irinyi János Kémia-verseny	Szeged
2016. május	Biztonságtechnika Szeminárium	Balatonalmádi
2016. június, július	Varázslatos Kémiatábor, 2016	
2016. július 31. – augusztus 4.	33th European Congress on Molecular Spectroscopy	Szeged
2016. augusztus 28. – szept. 1.	13th European Biological Inorganic Chemistry Conference	Budapest
2016. szeptember 20–23.	Pannon Catalysis Symposium	Siófok
2016. október	Őszi Radiokémiai Napok	
2016. október 24–26.	4th Rubber Symposium of Countries on Danube	Szeged
2016. november 17.	Kozmetika Szimpózium	Budapest
2016. november 29–30.	Hungarocoat, 2016	Budapest

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXI. No. 4. April 2016

CONTENTS

I have had brilliant students. An interview with Professor ***Magdolna Hargittai*** 110
TAMÁS KISS
Applying ferrate technology in the post-treatment of biologically purified communal wastewaters 113
ERZSÉBET GOMBOS, KATALIN BARKÁCS, TAMÁS FELFÖLDI, CSABA VÉRTES, and GYULA ZÁRAY
Assessment of heavy metal mobility in the soil/atmosphere/water/sediment system 117
GYÖRGY HELTAI, KÁROLY FLÓRIÁN, ZOLTÁN GYŐRI, ILONA FEKETE, GÁBOR HALÁSZ, KATALIN KOVÁCS, ANITA TAKÁCS, and MÁRK HORVÁTH
Bruckner Room Lectures
Synthetic models of non-heme-type oxidase and oxygenase enzymes: structure, reactivy, and catalysis 122
DÓRA LAKK-BOGÁTH, MIKLÓS I. SZÁVULY, GÁBOR SPEIER, and JÓZSEF KAIZER
New compounds, new effects. Steroid chemistry research at Szeged 124
ÉVA FRANK, JÁNOS WÖLFLING, and GYULA SCHNEIDER
With or without it? Advantages and disadvantages of heavy industry. An interview with ***Márta Gajdos Szabó,*** *a prize winner of the Science on Stage festival* 127
JÁNOS S. KAPITÁNY
Noted and Chemist. Kurt Vonnegut 130
GÁBOR LENTE
Chembits 132
GÁBOR LENTE
News of the Month 134

Gyógyszerkísérlet: még nem tudjuk, ki hibázott

Egyelőre nem derült még ki, melyik volt az a magyar cég, amelyik a tragikusan végződő franciaországi gyógyszerkísérlethez gyártott hatóanyagot. Gyógyszertesztek Magyarországon is folyamatosan zajlanak, de ezek idáig semmilyen egészségügyi problémát nem okoztak. Az Országos Gyógyszerészeti és Élelmezés-egészségügyi Intézet (OGYÉI) tájékoztatása szerint hazánkban évente 320–350 klinikai vizsgálatot engedélyeznek, 3–5 ezer önkéntes bevonásával. A leggyakoribbak az onkológiai vizsgálatok, majd az immunrendszert befolyásoló szerek. Az engedélyezett kísérletekről nyilvántartást vezet az Európai Gyógyszerügynökség, amely mintegy 27 200 klinikai vizsgálatról tárol adatokat, ebből Magyarországon több mint kétezer teszt van folyamatban. A sajnálatos esetről az MKL márciusi számában adott hírt.

Az OGYÉI főigazgatója, Pozsgay Csilla azt mondta: Magyarországon ehhez hasonló eset soha nem fordult elő, a szóban forgó hatóanyagot pedig egyetlen forgalomban lévő gyógyszer sem tartalmazza hazánkban.

– Hány cég foglalkozik nálunk gyógyszerhatóanyagok előállításával?

– A gyógyszerhatóanyagok Magyarországon székhellyel vagy telephellyel rendelkező importőreinek, gyártóinak és forgalmazóinak a tevékenységükre vonatkozó adatokat legkésőbb a tevékenységük tervezett megkezdése előtt 60 nappal be kell jelenteniük. Az Európai Gyógyszerügynökség által működtetett uniós adatbázisban nemcsak az engedélyezett gyógyszergyártók, hanem a regisztrált hatóanyaggyártók is elérhetők a nyilvánosság számára. Ám a regisztrációs kötelezettség nem vonatkozik a klinikai vizsgálati készítményekhez, illetve állatgyógyászati készítményekhez felhasználandó gyógyszer-hatóanyagokra. Magyarországon ma 69 telephely rendelkezik hatóanyag-regisztrációval (hatóanyaggyártás, import, forgalmazás). Ezek közül azonban nem mindegyik telephelyen folyik hatóanyaggyártás.

– Nyilvánosságra hozzák, ha kiderül, hogy melyik az érintett cég?

– Az ügy részleteit a franciaországi gyógyszerügyi hatóság ismerteti majd. Az OGYÉI kizárólag a hazai klinikai vizsgálatok ügyében jogosult nyilatkozni.

– Megtalálható hazánkban bármilyen engedélyezett, forgalomban lévő gyógyszerben ez a hatóanyag?

– Nem, sőt, kizárólag ezen a klinikai vizsgálaton alkalmazták először.

– Milyen következménnyel jár, ha kiderül, valóban a hatóanyaggal volt a probléma?

– Egy klinikai vizsgálat engedélyezésekor a szponzor cégnek kötelező biztosítást kötni az esetlegesen bekövetkező káreseményekre. Ez a biztosítás elsősorban a vizsgálatban részt vevő önkéntesek, betegek kártalanítására szolgál. Hogy az előállító milyen módon büntethető, nyilván attól is függ, hogy milyen hibát követett el, ha egyáltalán elkövetett. Várjuk meg a vizsgálat részleteit.

– A jelenlegi ismereteik alapján akad olyan momentum, ami arra utalhat, hogy valaki hibázott Franciaországban?

– Ebből a példából is látszik, hogy a preklinikai fázisban, illetve állatkísérletekkel nem lehet mindent modellezni. Éppen ezért fontosak a humán klinikai vizsgálatok, mert azok keretei között, megfelelő biztonsági intézkedések mellett, előkerülnek azok a nem várt hatások, amelyek egyébként jóval nagyobb számban jelentkeznének a terápia bevezetésekor. Amikor egy vizsgálati készítményt először adnak embernek, növekedő dózisban kis csoportokon próbálják ki. Az első dózisokat még úgy, hogy egyszerre csak egy önkéntes kapja, aztán a következő, de minden dózisszinten több önkéntes. Amikor a csoport minden tagja megkapta a kezelést, következik a magasabb dózis. Az ismételt adagolású vizsgálatra az egyszeri dózisú kezelések adatainak értékelése után kerülhet sor. Tudomásunk szerint ebbe a vizsgálatba már sok önkéntest bevontak, és az eredmények birtokában indult volna az ismételt dózisú szakasz.

– Milyen lépései vannak egy gyógyszerkísérletnek? Milyen előzetes vizsgálatok szükségesek ahhoz, hogy embereken teszteljék az új készítményeket?

– A kémiai és gyártási feltételek meglétét követően kerülhet sor a hatásosság bizonyítására élő szervezetekben. Amennyiben a preklinikai vizsgálatok – legtöbb esetben állatkísérletek – alátámasztják a várt hatásosság és a relatív ártalmatlanság tényét, csak ez után kezdődhetnek meg – nálunk az OGYÉI és az etikai bizottságok által előzetesen jóváhagyott terv alapján – a humán klinikai vizsgálatok.

– Egy sikerrel záruló klinikai vizsgálat után mennyi idő és milyen lépések szükségesek, amire a patikákba kerülhet egy gyógyszer?

– Amennyiben a klinikai vizsgálatok során bizonyítást nyer, hogy a készítmény a humán fázisban is a várt hatásosságot és biztonságosságot mutatja, illetve az alkalmazásából származó előnyök meghaladják a szer alkalmazásával összefüggésben felmerült kockázatokat, a gyártó kérelmezheti a készítmény gyógyszerként való forgalomba hozatalának engedélyezését. A forgalomba hozatali engedélyezés menete egységes az Európai Unió tagállamaiban. Az engedélyeztetésnek négyféle eljárási módja van, alapvetően attól függően, hogy a készítményt az összes tagállamban, egy-egy tagállamban, vagy csak Magyarországon kívánják forgalomba hozni. Vannak azonban olyan indikációjú készítmények – ilyenek a HIV elleni szerek, daganatellenes készítmények, cukorbetegség, autoimmun- más immun-állapotok, illetve vírusos betegségek (pl. ebola) kezelésre javallott gyógyszerek –, amelyeket kizárólag az Európai Unió központi gyógyszerértékelő hatósága, a European Medicines Agency (EMA) engedélyezhet. Amennyiben a klinikai vizsgálatok eredményesek – eljárástól függően – egy-két év, mire a betegek számára elérhető gyógyszer lesz a szerből.

– Mit gondol, a franciaországi eset eredményezhet szigorításokat a szabályozásban?

– Mindenki azon dolgozik, hogy kiderüljenek az okok, hol történhetett hiba. Az elemzések után le kell vonni a következtetéseket, és ha kell változtatni, meg fogjuk tenni. *(A Vg.online.hu nyomán)*

Zékány András

Egy új fejezet a GC/MS-ben:

Thermo SCIENTIFIC
A Thermo Fisher Scientific Brand

A **Q Exactive™ GC Orbitrap GC/MS/MS** az érzékenység, a nagyfelbontás és tömegpontosság eddig elérhetetlen kombinációját nyújtja a legnagyobb kihívást jelentő analitikai feladatok megoldásához. Mivel egyedülálló teljesítménye a legkomplexebb minták teljes körű kvantitatív és kvalitatív jellemzését is lehetővé teszi, segítségével egy új fejezet nyílhat az élelmiszeranalitikai, bűnügyi, metabolomikai, klinikai és gyógyszeripari vizsgálatokban.

a Q Exactive™ GC Orbitrap GC/MS/MS

• további információ: thermoscientific.com/QExactiveGC

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

UNICAM
Magyarország Kft.