A TARTALOMBÓL:

- Enantioszelektív hidrogénezések módosított fémkatalizátorokon
- A sárkány és a spektrumok
- Áramlásos módszerekkel új kémiai terek irányába
- Az égésgátlás korszerű módszerei

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

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

Szupramolekuláris kapcsolatok

A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap támogatja

Nemzeti Kulturális Alap

A kiadvány a Magyar Tudományos Akadémia támogatásával készült

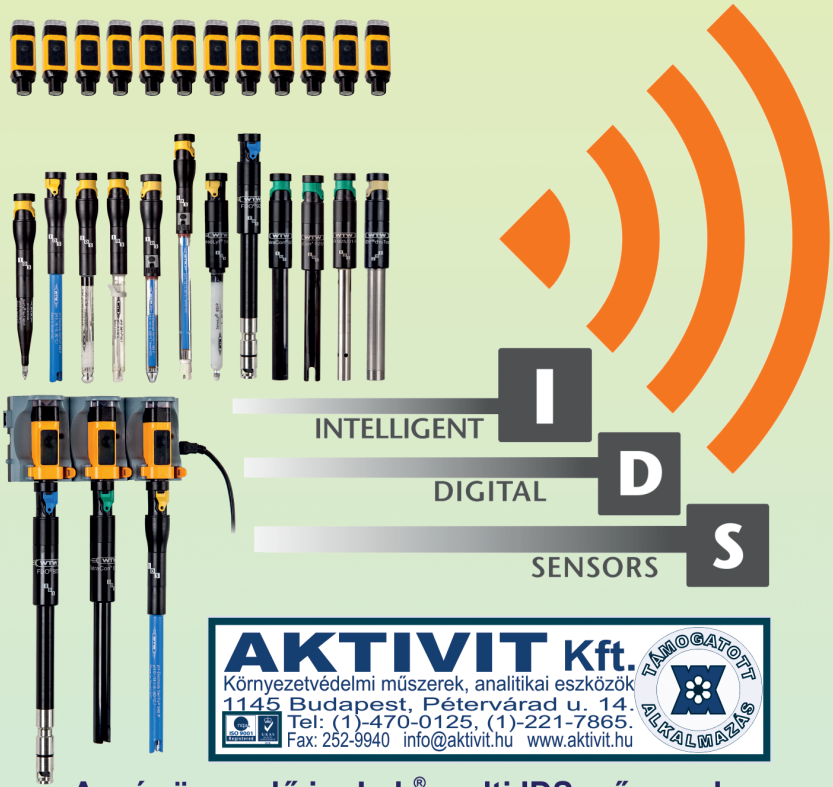
Mérőműszer készletek kábelmentes kapcsolattal

új!

Multiparaméteres műszerek
1, 2 és 3 univerzális szenzorcsatlakozóval

Mostantól a WTW valamennyi csatlakozófejes IDS elektródája (pH, redox, oldottoxigén, vezetőképesség és zavarosság) választhatóan csatlakoztatható kábellal vagy kábelmentesen az IDS mérőműszerekhez. A kábelmentes kapcsolatot a WTW új fejlesztésű wireless (WRL) modulja biztosítja. A mintegy 10 méter hatótávolság nagyfokú mozgásteret biztosít a kezelőnek, megszűnik a kábelek összeakadása, lehetővé válik az egykezes használat. Az elektródára egy mozdulattal illeszthető WRL modul automatikusan bekapcsolódik, a rajta lévő nyomógomb a mérési eredményt és a kiegészítő információkat a műszer memóriájába küldi. A modul akkumulátora 9-60 óra üzemidőt biztosít egy töltéssel (elektróda típustól függően).

Most már kábel sem kell!





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

TÁMOGATOTT ALKALMAZÁS

A már üzemelő inoLab® multi IDS műszerek egyszerű firmeware frissítéssel wireless-kompatibilitásúvá bővíthetők, külön költség nélkül! Kérje Ön is külön tájékoztatásunkat!

pH REDOX O_2 T κ NTU

új: IDS zavarosság-mérő elektróda



** pH * redox potenciál * oldott oxigén * vezetőképesség * hőmérséklet * zavarosság*

CE UL CUL EN ISO 9001 GLP 3 év garancia

PROFESSZIONÁLIS MÉRÉSTECHNIKA

MultiLine®
inoLab®

WTW

MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA
HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL
LXXI. évf., 6. szám, 2016. június

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!



Aki tudja, csinálja, aki nem tudja, tanítja – szól az ismert Murphy-törvény. Miként lehet, hogy e szakembereknek szóló folyóirat beköszöntőjét egy mezei középiskolai tanár írja? Az apropó a közelmúltban megrendezett Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny. A versenyről Pálinkó István, a versenybizottság elnöke írt beszámolót.

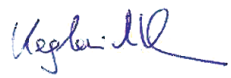
Tisztem az lenne, hogy jelen szám cikkeit ajánljam. Kellő szakmai erudíció híján ez nehéz feladat. Beszéljenek az alábbi tartalomjegyzék címei önmagukért! A mindig színes és aktuális Magyar Kémikusok Lapja most sem okoz csalódást: tudományos, népszerűsítő, elméleti, ipari, történeti témájú írások egyaránt megtalálhatóak benne.

Saját kaptafámnál maradva gondolataimat inkább az Irinyi-verseny szegedi helyszíne kapcsán szeretném továbbfűzni. Szegeden, a Dóm altemplomában van eltemetve Klebelsberg Kunó, aki 1922 és 1931 között Magyarország vallás- és közoktatásügyi minisztere volt, 1926 és 1932 között Szeged országgyűlési képviselőjeként ült a Parlamentben (ez indokolja szegedi sírhelyét). A művelődéspolitikus gróf a róla elnevezett KLIK tevékenysége miatt alighanem forog sírjában, hiszen a Klebelsberg Intézményfeltartó (sic!) Központ névadója elveivel homlokegyenest ellentétes szellemben irányítja a magyar közoktatást. A tanárok tavaszi tiltakozásának hatására kilátásba helyezték a KLIK megszüntetését. Ekkor mindannyian fölujjongtunk. A legújabb hírek szerint mégsem szűnik meg, csak átalakul. A tantervekkel együtt. Alighogy megszületett a 2012. évi alaptanterv, négy év sem telt el, a kormányzat máris újat írat. Ez első hallásra örömteli esemény, mivel a kémia óraszámokon és kerettanterveken volna mit javítani.

A jelenlegi kémia tantervek ugyanis igen gyatrák. Legnagyobb bánatom a nyolcadikos tananyag, a szervetlen kémia drámai átalakítása. A rendszerező szervetlen kémia helyett „életszagú” szervetlen és szerves kémia került a tankönyvekbe. A tananyag sorrendje: élelmiszerek, kémia a természetben, kémia az iparban, kémia a háztartásban („B” kerettanterv – és ez még jobb, mint az „A”). Kétkedő vagyok a tekintetben, vajon ettől a cseltől csakugyan diákkedvenc tantárggyá válik-e a kémia. Legjobb kollégáim próbálkoznak azzal, hogy a tantervet nagy energiaráfordítással tankönyvvé formálják – de várat nem lehet építeni akármiből. Ezt a konyhakémiát lehet éppolyan unalmasan tanítani, mint a régit. Természetesen érdekesen is lehet, amint a régit is lehetett. A konyhakémia, amelyből ki vannak irtva a megértést segítő és elmélyítő összefüggések, csak tiszavirág-életű tudást eredményezhet. Logikai rendszer híján az igazán gondolkodni vágyó diákokat fordítja el a kémiától. „Gyöngyszem” a nyolcadikos kémia „A” kerettantervből származó kérdésfölvetése: Miért áldott a méz? Ezt kellene tanítanunk kémiaórán… Őrület!

Van-e még lejjebb? Bizonyára van, tudniillik, amint említettem, új tantervek vannak készülőben, melyek mérséklik majd a diákok vállára nehezedő terheket. Ez önmagában jó hír. Azonban biztosak lehetünk abban, hogy nem a mindennapos testnevelésre szánt órakeret fog csökkenni, nem is az etika veszít majd súlyából, hanem például a természettudományok. A kémia a „tűrt” kategóriából lassanként a „tiltott” tantárgyak közé kerül át. Tisztelt egyetemen tanító tanárkollégák, készüljenek föl a legrosszabbakra, ahogy az újabb és újabb évfolyamok fölérnek magukhoz! Ugyanakkor pozitív élmény látni a tehetséges és motivált diákokat egy országos verseny döntőjén vagy a Mengyelejev Diákolimpián. (Lásd a hátsó borítót!) Az ő sikerük a tanárokat is lelkesíti, és reményt ad a jövőre nézve.

Most ünneplésre van okunk, hiszen igényes, új sajtóterméket tartunk a kezünkben. Mindig örömöt jelent a nyomdából újonnan érkezett, friss illatú könyvet vagy folyóiratot kinyitni. Jó olvasást kívánok!



Keglevich Kristóf

TARTALOM

HAZAI KUTATÓMŰHELYEK BEMUTATKOZÁSA
Szőllősi György, Bartók Mihály: Enantioszelektív hidrogénezések módosított fémkatalizátorokon 178
VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY
Bruckner-termi előadások
Gergely Szilveszter: A sárkány és a spektrumok – fejtörők az infravörös spektroszkópia világából 182
Ötvös Sándor Balázs: Áramlásos módszerekkel új kémiai terek irányába: szelektív és hatékony szintézisek 185
Bordácsné Bocz Katalin: Az égésgátlás korszerű módszerei 186
Braun Tibor: Aiszkhüloszi érzelmek nyomán a kémiában. Vendéglátó-vendég és börtön-rab szupramolekuláris kapcsolatok 189
Kápolnai Zsombor, Vidéki Imre: A gyógyszeripar kutatás-fejlesztésben vezető vállalatainak feldolgozóiparon belüli jelentősége 194
KITEKINTÉS
Silberer Vera: Ipari és kulturális örökség. A MOM Kulturális Központ 197
VEGYÉSZLELETEK
Lente Gábor rovata 200
A HÓNAP HÍREI 202



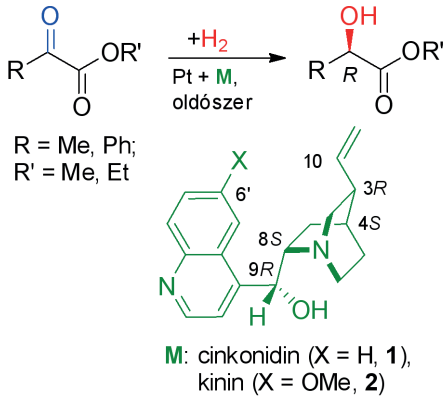
Címlap:
A *Hortensia hydrangea* színe a delfinidin-3-glükozid fémionokkal alkotott szupramolekuláris komplexétől származik
(fotó: Raul654, Wikipédia)

Szőllősi György–Bartók Mihály
■ MTA–SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport, SZTE Szerves Kémiai Tanszék | szollosi@chem.u-szeged.hu | bartok@chem.u-szeged.hu

Enantioszelektív hidrogénezések módosított fémkatalizátorokon

A heterogén katalitikus szerves kémiai reakciók vizsgálata a Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékén már több mint fél évszázados hagyományra tekint vissza [1]. A fémkatalizált felületi reakciók sztereokémiájának vizsgálatai teremtették meg azokat a gyakorlati és elméleti szempontból szükséges előzményeket [2], amelyeket követően a kutatások célkeresztjébe elsősorban az aszimmetrikus heterogén katalitikus átalakítások kerültek. A heterogén katalitikus hidrogénezések tanulmányozása terén szerzett tapasztalok alapján, valamint néhány rendkívül hatékonynak bizonyuló királis módosított katalizátor leírását követően, a múlt század végére a szerves vegyületek enantioszelektív hidrogénezése mind gazdasági, mind elméleti szempontból kiemelkedő kutatási iránynak ígérkezett. Elég csak a heterogén katalizátorok által biztosított jól ismert előnyöket és a finomvegyszer ipar megnövekedett optikailag tiszta anyag igényét figyelembe venni. A tanszéken a kilencvenes évekig történt kezdeti próbálkozások borkősavval módosított nikkellel katalizált enantioszelektív hidrogénezések vizsgálatára irányultak [3,4]. Fordulópontot az MTA–SZTE Organikus Katalízis Kutatócsoport létrehozása jelentett (1996), amely fő kutatási irányként az aszimmetrikus színtézisek, kiemelten a heterogén katalitikus hidrogénezések vizsgálatát tűzte ki célul. Az enantioszelektív hidrogénezések területén folytatott kutatások eredményeit a múlt század végétől tekintjük át.

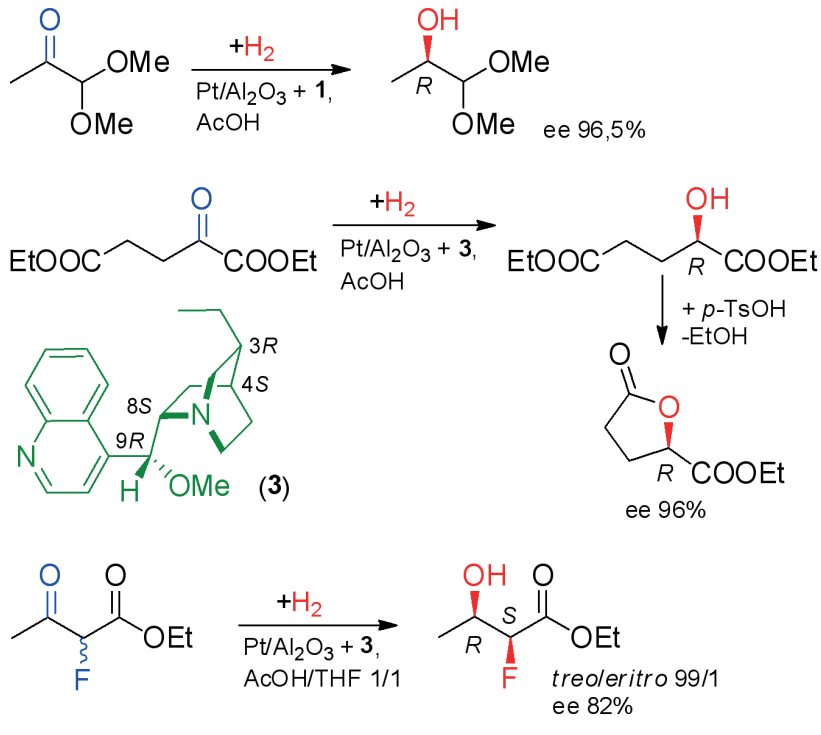
Az előzőekben említett kezdeti enantioszelektív reakciókat követően a figyelem az Orito és munkatársai által leírt cinkona alkaloidokkal módosított platinakatalizátorokra és az ezekkel végrehajtott aktivált ketonok enantioszelektív hidrogénezésére irányult **(1. ábra)** [5]. Több okból is szerencsés választásnak tűnt ennek a rendszernek a tanulmányozása. Akkoriban már

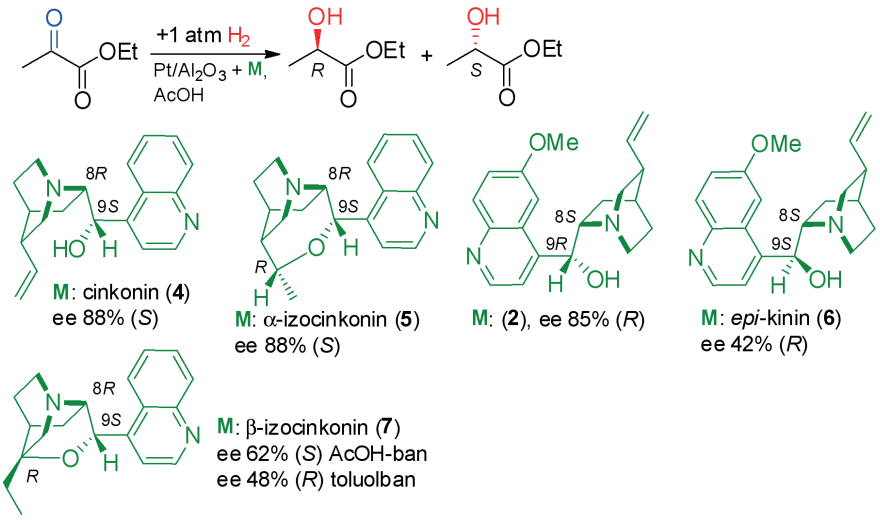


1. ábra. Enantioszelektív hidrogénezés cinkona alkaloidokkal módosított Pt-katalizátoron (M: királis módosító)

ismert volt, hogy kereskedelmi katalizátorokkal és természetes cinkona alkaloidokkal is jó eredmények érhetők el. A katalizátor felületét nem szükséges a reakció előtt módosítani, mivel a reakcióelegyhez adagolt alkaloiddokkal is megfelelő hatás érhető el. A hidrogénezés sebessége a módosító jelenlétében megnő, így a reakció során meglepően rövid idő alatt teljes átalakulás és nagy enantioszelektivitás érhető el. A leggyakrabban használt kiindulási anyagok, vagyis az α-keto-észterek könnyen hozzáférhetőek és a keletkező termékek között sok gyakorlati jellentőségű királis vegyület is található. Mindezek döntő érveknek bizonyultak a katalitikus rendszer alapos tanulmányozása mellett. A közölt kutatások arra utaltak, hogy a felületmódosítóként használt cinkona alkaloid a kinolinvázzal rögzül a fémen, a kinuklidin bázis pedig a kiindulási anyagokkal lép kölcsönhatásba. A módosító C^8 és C^9 királis centrumai idéznek elő enantiodifferenciálást, vagyis irányítják a molekula adszorpcióját a katalitikusan aktív felületen.

2. ábra. A reakció alkalmazhatóságának bővítése





3. ábra. Néhány cinkona alkaloid módosítóval elért enantiomerfelesleg (ee)

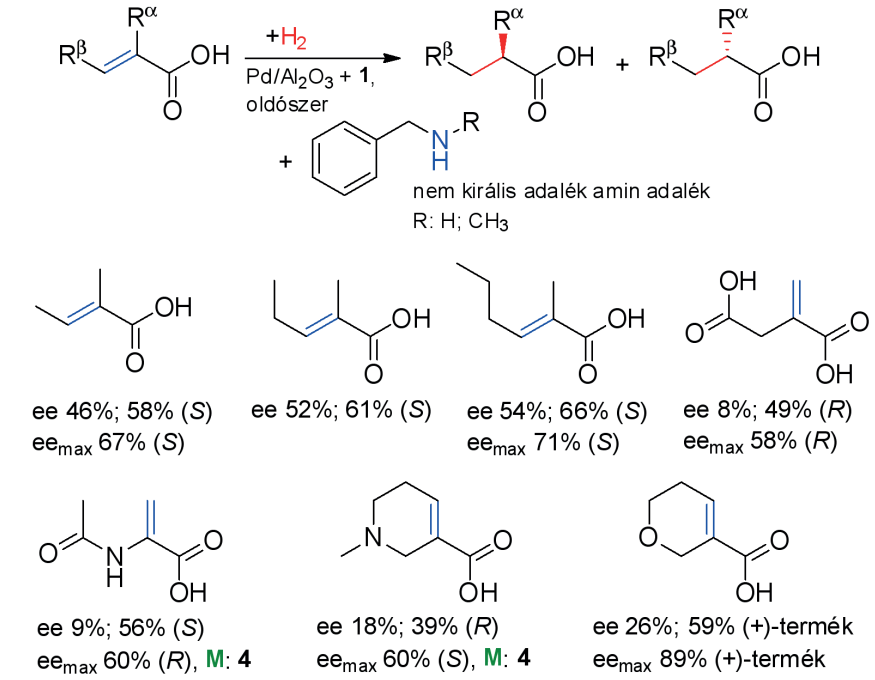
Az első jelentős eredményeket a katalitikus rendszer három fő alkotórészének, azaz a katalizátor, a módosító és az aktivált keton szerkezeti változtatásával értük el. A katalizátor kezelése ultrahanggal jelentős enantiomerfelesleg- (ee) növekedést (ee 97%) eredményezett etil-piruvát hidrogénezésében [6]. A magyarázatot az ultrahang kedvező hatására elsősorban a fémrészecskék méretének és morfológiájának változása, illetve a módosító jelenlétében kezelt felületen hatásosabb királis helyek kialakulása jelentette [7]. Már ekkor sikerült bővíteni a nagy enantioszelektivitással átalakított molekulák típusát az α-ketoacetálok [8] és 2-oxoglutársav-diészterek enantioszelektív hidrogénezésével [9]. Később ezt a katalitikus rendszert sikerült alkalmazni egy gyorsan racemizálodó α-fluorketon dinamikus kinetikus rezolválására is [10] **(2. ábra)**.

Ugyancsak előrelépést jelentett néhány addig nem használt cinkona alkaloidszármazékkal módosított katalizátorokkal végzett etil-piruvát hidrogénezése. Egyrészt ismert, hogy a cinkona alkaloidok két gyűrűrendszerét összekötő kötések körüli szabad rotációnak köszönhetően ezek a vegyületek rendkívül gazdag konformációs viselkedést mutatnak. Másrészt a nyílt konformációba rögzített gyűrűs éter típusú izocinkona alkaloidok használatával hatásos enantiodifferenciálást sikerült elérni, ami kizárta a zárt konformerek jelenlétének szükségességét az enantioszelektív hidrogénezésekben [11,12]. Néhány *epi*-cinkona alkaloidokkal elért enantioszelektivitás iránya kimutatta, hogy az addigi feltételezésektől eltérően nem a C^9 vagy C^8 királis centrumok konfigurációja, hanem a teljes molekula konformációja határozza meg a királis indukció irányát **(3. ábra)** [13].

A módosító szerkezetének további vizsgálata érdekes jelenségek felismeréséhez vezetett, ami a reakció mechanizmusának részleteit segített megfejteni. β-Izocinckonin királis módosítóval kapott enantioszelektivitás iránya eltért a két leggyakrabban használt oldószerben, toluolban és ecetsavban [14,15]. A jelenség, amely ketopantolakton hidrogénezésében is megfigyelhető [16], a módosító és a keton között kialakuló eltérő jellegű kötésekkel volt magyarázható, azaz protikus, savas közegben a protonált kinuklidin N és a keton között hidrogénkötés alakul ki, míg toluolban a nukleofil N támadja a karbonilszenet, úgynevezett „nukleofil átmeneti komplex" kialakulását eredményezve. A reakció mechanizmusának tanulmányozására a szokásos kinetikai és spektroszkópiai módszereken túlmenően olyan jelenségek vizsgálatát végeztük el, amelyek jellemzőek ezekre a heterogén katalitikus rendszerekre, mint például az enantioszelektivitás nem lineáris alakulása módosító elegyek jelenlétében [17], valamint az eltérő szerkezetű kiindulási anyagok kompetitív hidrogénezései [18]. Ez utóbbi, általunk először alkalmazott módszerrel kimutathatóvá vált, hogy a különböző szerkezetű ketonok egymáshoz viszonyított sebessége megváltozik a racém, illetve a királis reakciókban, ami az átmeneti komplexek adszorpciós erősségének rendkívüli jelentőségét bizonyította.

A homogén reakciókhoz képest a heterogén katalitikus rendszerek számos előnye közül kiemelendő a hidrogénezések állóágyas reaktorokban történő folyamatos rendszerű kivitelezése. Ezért vizsgáltuk egy kereskedelemi forgalomban elérhető átáramlásos állóágyas reaktort tartalmazó rendszerben (H-Cube®) aktivált ketonok enantioszelektív hidrogénezését, kihasználva a rendszer által biztosított előnyöket, mint a paraméterek hatásának gyors kimutatását, a H_2-gáz szükség szerinti helyben generálását vagy a termékek feldolgozásának egyszerűsödését [19]. Ezen túlmenően a rendszer alkalmasnak bizonyult a reakció mechanizmusának tanulmányozására, mi több, a szakaszos rendszerben észlelt jelenségek gyors vizsgálata mellett a felület dinamikájának tulajdoníthatóan olyan hatások is megjelentek, amelyek csak folyamatos áramlás esetében figyelhetők meg. Az ebben a rendszerben végzett kísérletek segítettek megérteni a királis reakciókban tapasztalható sebességnövekedés eredetét [20], a cinkonaelegyekkel elért nemlineáris hatást [21], illetve a kompetitív hidrogénezések eredményeit [22], ugyanakkor kimutathatóvá vált olyan enantioszelektivitás-irányváltozás, amely szakaszos rendszerben nem észlelhető, de megerősíti a „nukleofil átmeneti komplex" lehetséges szerepét is a reakcióban [23].

A kilencvenes évek elejétől biztató eredményeket közöltek cinkona alkaloidokkal módosított Pd-katalizátorok használatával is, amelyekkel prokirális olefineket enantioszelektíven hidrogéneztek. Ez a katalitikus rendszer telítetlen karbonsavak hidrogénezésére alkalmazható, de az alifás és az aromás vegyületek hidrogénezéséhez szükséges optimális reakciókörülmények között jelentős eltéréseket tapasztaltak. E reakciók tanulmányozásakor kimutattuk, hogy az aromás szubsztituenseket tartalmazó (*E*)-2,3-difenilpropénsav hidrogénezésekor enantioszelektivitás-növekedést kiváltó aminadalékok alifás telítetlen savak reakcióiban is jelentős ee-növekedést eredményeznek [24]. Ez a felismerés rendkívüli jelentőségűnek bizonyult, megnyitva az utat a reakció alkalmazhatóságának széles körű bővítésére, illetve az addig már vizsgált savak hidrogénezéseiben elért enantioszelektivitások jelentős növelésére. Néhány telítetlen karbonsav hidrogénezésében elért eredmény a **4. ábrán** látható [24–29]. A vizsgálatok során bebizonyosodott, hogy a kiindulási anyag szerkezete jelentősen befolyásolja egyrészt a legnagyobb enantioszelektivitás eléréséhez szükséges körülményeket, beleértve a cinkona alkaloid szerkezetét, az aminadalék szerkezetét, az oldószer minőségét, a H_2-nyomást, másrész az elérhető legjobb enantioszelektivitás értékeket. Alaposabb tanulmányok két alifás savval, (*E*)-2-metil-2-buténsavval és (*E*)-2-metil-2-hexénsavval [25], valamint itakonsavval készültek [26]. E ta-



4. ábra. Alifás és cikloalifás telítetlen karbonsavak hidrogénezésében elért enantiomerfeleslegek aminadalék nélkül, adalékkal és az elért legnagyobb értékek (ee_{max}) [24–29]

nulmányok alapján a felületi átmeneti termék szerkezetére is következtethettünk. Olyan felületi átmeneti termék kialakulását javasoltuk, amelyben a királis módosító és a telítetlen sav mellett az adalék nem királis amin is részt vesz, ami növeli a telítetlen molekula kedvezményezett oldalon történő adszorpcióját.

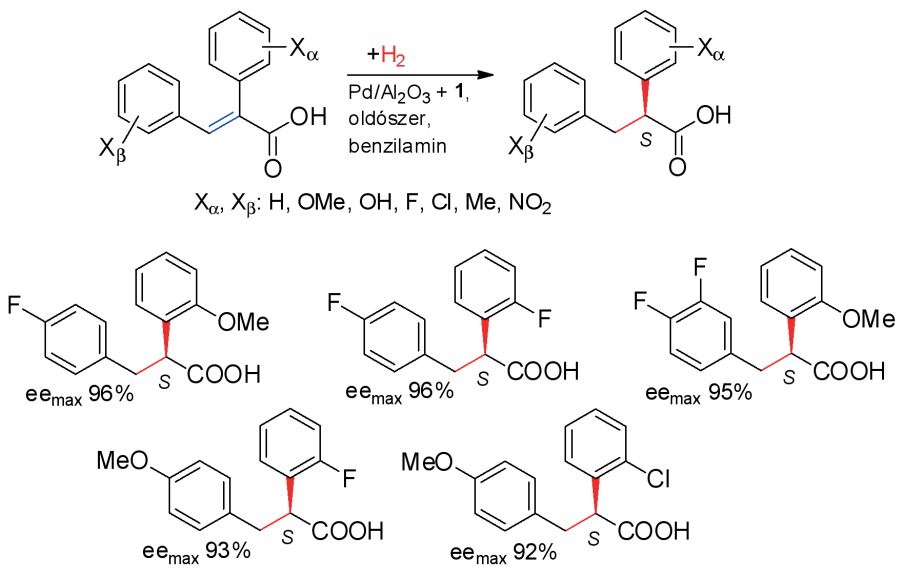
Cinkona alkaloidokkal módosított Pd-katalizátorokon vizsgáltuk (*E*)-2,3-difenilpropénsav és szubsztituált származékainak hidrogénezését is. Kutatásaink kezdetekor ugyan ismert volt, hogy a *para*-metoxi-szubsztituenseknek enantioszelektivitást növelő hatásuk van, azonban más helyzetű és természetű csoportok hatása ismeretlen volt. Ezért vizsgáltuk a metoxi szubsztituens helyzetének [30], majd más szubsztituensek [31-34] hatását is mono- és diszubsztituált származékok cinkonidinnel módosított Pd-katalizátoron végzett hidrogénezésére **(5. ábra)**. A több mint 60 sav vizsgálata meglepetésre azt mutatta, hogy mind az α-, mind a β-fenilgyűrűn található *orto*-szubsztituenseknek különleges, jelentős enantioszelektivitást növelő, illetve csökkentő hatása van. Néhány nagy optikai tisztaságban előállítható sav szerkezete, az elért legjobb eredménnyel az **5. ábrán** látható. A reakció alkalmazhatóságának bővítése és az enantioszelektivitás növelése mellett a sav adszorpciójának módját a felületi reakcióban részt vevő szubsztituensek átalakulásával mutattuk ki [32]. A cinkona alkaloid szerkezetét változtatva sikerült feltárni a módosító és a sav közötti kölcsönhatásokat, a benzilamin részvételét és az összetevők felületi elrendeződésének lehetőségeit [35,36].

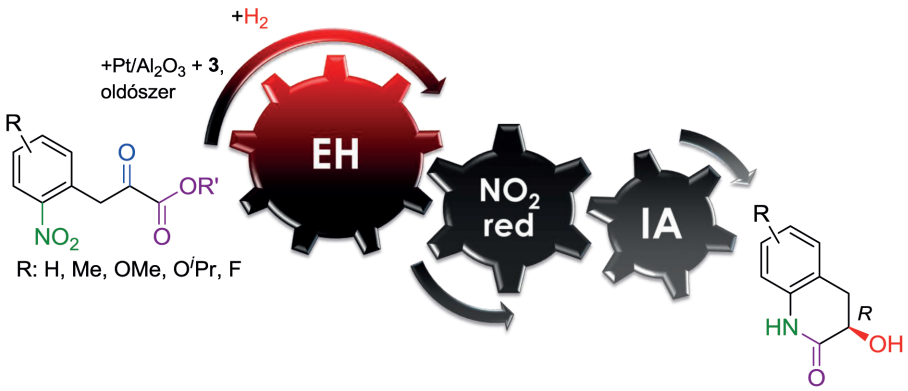
A közelmúltban előállítottunk titán-dioxiddal bevont szénnanocső és grafénhordozó használatával új Pd-katalizátorokat, amelyeken enantioszelektíven hidrogénezünk alifás és aromás szubsztituenseket tartalmazó propénsavakat [37,38].

Mivel napjainkban különös hangsúlyt helyeznek fenntartható eljárások fejlesztésére és alkalmazására, kutatásainkat kiterjesztettük új aszimmetrikus heterogén katalitikus kaszkádreakciók vizsgálatára. A heterogén katalitikus folyamatok eleve gazdaságos, környezetkímélő megközelítést jelentenek, további előnyök származnak azonban két vagy több egymást követő reakció egyidejű és helyű kivitelezéséből, mivel ez esetben elkerülhetők a közbeeső tisztítási és anyagkezelési lépések költségei. A számunkra ismert cinkona alkaloidokkal katalizált enantioszelektív hidrogénezéseket felhasználva sikerült számos 2-nitrofenilpiroszőlősav-észter átalakításával optikailag dúsított 3-hidroxi-3,4-dihidrokinolin-2(1*H*)-on-származékot előállítani **(6. ábra)** [39,40]. A folyamatban a felületmódosítónak többszörös szerepe van, ugyanis a királis információ átadása mellett növeli a ketocsoport hidrogénezésének és csökkenti a nitrocsoport redukciójának sebességét. E hatások együttese biztosítja az enantioszelektív hidrogénezés, a nitrocsoport-redukció és a gyűrűzárás-kaszkád során keletkező királis kinolonszármazékok nagyarányú képződését a megszokott indolszármazékok helyett.

E rövid áttekintés az eddigi egyik és talán legjelentősebb kutatási terület vizsgálataiban elért fontosabbnak vélt eredmények számbavételezésének tekinthető. E terület mellett csoportunkban ugyancsak kiemelt figyelmet kaptak az enantioszelektív organokatalitikus reakciók is, amelyek kutatását még ezek „aranykorának" hajnalán elkezdtük [41,42], és a heterogén katalitikus kivitelezésére irányuló erőfeszítéseink mára újra előtérbe kerültek [43, 44]. Visszatérve az enantioszelektív hidrogénezésekben elért eredményekre, a több

5. ábra. (E)-2,3-Difenilpropénsavak enantioszelektív hidrogénezése és néhány nagy enantiomerfeleslegben elállított sav [31,32]





6. ábra. Cinkona alkaloidokkal módosított Pt-katalizátoron lejátszódó aszimmetrikus kaszkádreakció (EH: enantioszelektív hidrogénezés, NO_2 red: nitrocsoport-redukció, IA: intramolekuláris amidképzés)

mint száz nemzetközi folyóiratban megjelent cikk mellett folyamatosan összegeztük e reakciók területén szerzett tapasztalatokat [45–48], és több PhD-értekezés is készült az elért eredményekből (Balázsik Katalin, Sutyinszki Mária, Szőri Kornél, Hermán Beáta, Cserényi Szabolcs, Makra Zsolt és Kovács Lenke). A kutatásokat az OTKA számos pályázat odaítélésével támogatta (TS 044690, T 048764, K 72065, K 109278), amit ezúton is szeretnénk megköszönni. Az enantioszelektív heterogén katalitikus hidrogénezések kutatása királisan módosított katalizátorokon mára már, úgy tűnik, vesztett lendületéből, de újból felélénkülhet, amennyiben egy új, gyakorlatban is alkalmazható katalitikus rendszert sikerül felfedni, hiszen ezek a kutatások még mindig kiemelt helyet foglalnak el a szerves katalitikus reakciók tanulmányozásában.

IRODALOM

[1] M. Bartók, Magyar Kémikusok Lapja (1982) 36, 193; M. Bartók, Magyar Kémikusok Lapja (1985) 40, 458; Á. Molnár, Magyar Kémikusok Lapja (2000) 55, 24.
[2] M. Bartók, J. Czombos, K. Felföldi, L. Gera, Gy. Göndös, Á. Molnár, F. Notheisz, I. Pálinkó, Gy. Wittmann, Á. G. Zsigmond, Stereochemistry of Heterogeneous Metal Catalysis, John Wiley & Sons, Chichester, 1985.
[3] M. Bartók, Gy. Wittmann, Gy. Göndös, G. V. Smith, J. Org. Chem. (1987) 52, 1139.
[4] Gy. Wittmann, Gy. Göndös, M. Bartók, Helv. Chim. Acta (1990) 73, 635.
[5] Y. Orito, S. Imai, S. Niwa, Nippon Kagaku Kaishi (1979) 1118.
[6] B. Török, K. Felföldi, G. Szakonyi, K. Balázsik, M. Bartók, Catal. Lett. (1998) 52, 81.
[7] B. Török, K. Balázsik, M. Török, Gy. Szőllősi, M. Bartók, Ultrasonics Sonochem. (2000) 7, 151.
[8] B. Török, K. Felföldi, K. Balázsik, M. Bartók, Chem. Commun. (1999) 1725.
[9] K. Balázsik, K. Szöri, K. Felföldi, B. Török, M. Bartók, Chem. Commun. (2000) 555.
[10] K. Szőri, Gy. Szőllősi, M. Bartók, Adv. Synth. Catal. (2006) 348, 515.
[11] M. Bartók, K. Felföldi, B. Török, T. Bartók, Chem. Commun. (1998) 2605.
[12] M. Bartók, K. Felföldi, Gy. Szőllősi, T. Bartók, Catal. Lett. (1999) 61, 1.
[13] M. Bartók, K. Felföldi, Gy. Szőllősi, T. Bartók, React. Kinet. Catal. Lett. (1999) 68, 371.
[14] M. Bartók, M. Sutyinszki, K. Felföldi, Gy. Szőllősi, Chem. Commun. (2002) 1130.
[15] M. Bartók, M. Sutyinszki, I. Bucsi, K. Felföldi, Gy. Szőllősi, F. Bartha, T. Bartók, J. Catal. (2005) 231, 33.
[16] M. Bartók, K. Balázsik, I. Bucsi, Gy. Szőllősi, J. Catal. (2006) 239, 74.
[17] K. Balázsik, Gy. Szőllősi, M. Bartók, Catal. Lett. (2008) 124, 46.
[18] K. Balázsik, K. Szőri, Gy. Szőllősi, M. Bartók, Chem. Commun. (2011) 47, 1551.
[19] Gy. Szőllősi, B. Hermán, F. Fülöp, M. Bartók, React. Kinet. Catal. Lett. (2006) 88, 391.
[20] Gy. Szőllősi, Sz. Cserényi, F. Fülöp, M. Bartók, J. Catal. (2008) 260, 245.
[21] K. Balázsik, Sz. Cserényi, Gy. Szőllősi, F. Fülöp, M. Bartók, Catal. Lett. (2008) 125, 401.
[22] Gy. Szőllősi, Zs. Makra, F. Fülöp, M. Bartók, Catal. Lett. (2011) 141, 1616.
[23] Gy. Szőllősi, Sz. Cserényi, M. Bartók, Catal. Lett. (2010) 134, 264.
[24] Gy. Szőllősi, T. Hanaoka, S. Niwa, F. Mizukami, M. Bartók, J. Catal. (2005) 231, 480.
[25] Zs. Makra, Gy. Szőllősi, M. Bartók, Catal. Today (2012) 181, 56.
[26] Gy. Szőllősi, K. Balázsik, M. Bartók, Appl. Catal. A: Gen. (2007) 319, 193.
[27] Gy. Szőllősi, E. Szabó, M. Bartók, Adv. Synth. Catal. (2007) 349, 405.
[28] Gy. Szőllősi, K. Szőri, M. Bartók, J. Catal. (2008) 256, 349.
[29] K. Szőri, Gy. Szőllősi, M. Bartók, New J. Chem. (2008) 32, 1354.
[30] Gy. Szőllősi, B. Hermán, K. Felföldi, F. Fülöp, M. Bartók, J. Mol. Catal. A: Chem. (2008) 290, 54.
[31] Gy. Szőllősi, B. Hermán, K. Felföldi, F. Fülöp, M. Bartók, Adv. Synth. Catal. (2008) 350, 2804.
[32] Gy. Szőllősi, B. Hermán, E. Szabados, F. Fülöp, M. Bartók, J. Mol. Catal. A: Chem. (2010) 333, 28.
[33] Gy. Szőllősi, M. Bartók, Arkivoc (2012), (v), 16.
[34] Gy. Szőllősi, Catal. Lett. (2012), 142, 345.
[35] Gy. Szőllősi, B. Hermán, F. Fülöp, M. Bartók, J. Catal. (2010) 276, 259.
[36] Gy. Szőllősi, I. Busygin, B. Hermán, R. Leino, I. Bucsi, D. Yu. Bucsi, F. Fülöp, M. Bartók, ACS Catal. (2011) 1, 1316.
[37] Gy. Szőllősi, Z. Németh, K. Hernádi, M. Bartók, Catal. Lett. (2009) 132, 370.
[38] K. Szőri, R. Puskás, Gy. Szőllősi, I. Bertóti, J. Szépvölgyi, M. Bartók, Catal. Lett. (2013) 143, 539.
[39] Gy. Szőllősi, Zs. Makra, L. Kovács, M. Bartók, Adv. Synth. Catal. (2013) 355, 1623.
[40] Gy. Szőllősi, L. Kovács, Zs. Makra, Catal. Sci. Technol. (2015) 5, 697.
[41] Gy. Szőllősi, M. Bartók, Chirality (2001) 13, 614.
[42] Gy. Szőllősi, G. London, L. Baláspiri, Cs. Somlai, M. Bartók, Chirality (2003) 15, S90.
[43] Gy. Szőllősi, M. Fekete, A. A. Gurka, M. Bartók, Catal. Lett. (2014) 144, 478.
[44] Gy. Szőllősi, A. Csámpai, Cs. Somlai, M. Fekete, M. Bartók, J. Mol. Catal. A: Chem. (2014) 382, 86.
[45] M. Bartók, Curr. Org. Chem. (2006) 10, 1533.
[46] M. Bartók, Chem. Rev. (2010) 110, 1663.
[47] Gy. Szőllősi, Magyar Kém. Foly. (2007) 113, 145.
[48] Gy. Szőllősi, Magyar Kém. Foly. (2014) 120, 77.

ÖSSZEFOGLALÁS

Szőllősi György–Bartók Mihály: **Enantioszelektív hidrogénezések módosított fémkatalizátorokon**

Röviden áttekintettük a Szegedi Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszékén és az ott működő akadémiai kutatócsoportban végzett heterogén katalitikus enantioszelektív hidrogénezések területén elért lényegesebb eredményeket az ezredfordulótól napjainkig. Aktivált ketonok és telítetlen karbonsavak hidrogénezéseit vizsgáltuk cinkona alkaloidokkal királisan módosított hordozós Pt- és Pd-katalizátorokon. Alapos tanulmányok vezettek a katalizátorok alkalmazási területének bővítéséhez, a reakciók mechanizmusának és a királis információ átadásának tisztázásához, kiemelkedő enantioszelektivitások eléréséhez, új típusú katalizátorok előállításához és alkalmazásához, valamint új, modern, környezetkímélő és fenntartható, a finomvegyszerek szintézisében használható eljárások fejlesztéséhez.



Konszolidációs terv készült az MTA TTK működésének kiigazítására

Lovász László, a Magyar Tudományos Akadémia elnöke 2015. november 25-én, az MTA Természettudományi Kutatóközpontjában (MTA TTK) megrendezett kutatói fórumon jelentette be, hogy szakmai és pénzügyi vizsgálatot indít az MTA TTK-ban. A pénzügyi átvilágítást az IFUA Horváth & Partners Kft. végezte.

Az MTA TTK konszolidációs terve a szakmai és pénzügyi jelentés megállapításaira támaszkodik. A konszolidációs terv szerint a megállapított fedezethiányt a kutatóközpont vezetősége három év alatt szünteti meg. *(mta.hu)* **RF**

Bruckner-termi előadások

Gergely Szilveszter
■ BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, NIR Spektroszkópia Csoport

A sárkány és a spektrumok – fejtörők az infravörös spektroszkópia világából

Általános iskolás koromban, a ’80-as években – egy-egy megfázásnak köszönhetően – volt szerencsém Sas Elemér (1930–1998) [1] délelőtti iskola tv-béli előadásai közül megnéznem egy-két részt. A rezgések és hullámok világával való, feledhetetlen stílusú előadása során agyamba vésődtek a Tacoma folyón átívelő Narrow Bridge-ről készült képsorok, melyek a hídszerkezet – periodikusan jelentkező széllökéshullámai hatására bekövetkező – „behintázását” (innen a híd „galoppozó Gerti” gúnyneve), majd összeomlását rögzítették. Ez az a példa, mellyel hallgatóimnak bevezetem a közeli és közép- (analitikai) infravörös – NIR és (M)IR – tartományba eső elektromágneses sugárzás és az anyag kölcsönhatást, példát mutatva az „óriások” világából arra, amit a „törpék” világában (szubmolekuláris szinten) egyelőre még nem láthatunk. Ugyanis a rezgési spektroszkópia eszközével az atomok közti kötések (mint hidak) és a NIR-, ill. (M)IR-fotonok (mint hullámokban érkező gerjesztőenergiák) közti kölcsönhatásokat rögzíthetjük, így következtetve a vizsgált anyag kémiai (és sok esetben fizikai) tulajdonságaira.

Sir Isaac Newton 1704-ben megjelentetett *Opticks* című művében [2] lefektette az optikai spektroszkópia alapjait is, melyben többek között ismertette a fehér fény prizma általi felbontását különböző színekre. Majd száz év múlva a NIR-ág is megjelent Sir William Herschel német származású angol csillagász – nem mellesleg az Uránusz felfedezője – révén. 1800. február 11-én elvégzett kísérletében a színek hőmérsékletét szerette volna detektálni higanyos hőmérőkkel, de eközben észrevette, hogy a vörösön túl tovább emelkedett a hőmérséklet, annak ellenére, hogy szemmel már nem volt látható fény. A kísérleteiről szóló, a világ első tudományos folyóiratába – az 1665-ben indult *Philosophical Transactions* periodikába – beadott közleménysorozatával [3] ő lett a névadója az infravörös (latin *infra*: „alatt”) tartománynak is. Újabb száz év telt el, míg William W. Coblentz *Investiagtion of Infra-red Spectra* könyvsorozatának első tagja megjelent 1905-ben. [4] A maga épített IR-berendezéssel több mint száz anyag spektrumát rögzítette, ami a spektrumonként 2-3 órás méréseket tekintve is hatalmas munka volt. Ezen „spektrumkönyvtáron” túlmutatnak a mérési adatokból levont következtetései, melyek megteremtették a funkciós csoportok rezgésein alapuló, molekulák szerkezetkutatását lehetővé tevő IR-spektroszkópia alapjait. A 20. század világégései és hidegháborúi is hozzájárultak ahhoz, hogy a hadiiparból a polgári alkalmazásba is átkerüljenek a NIR- és (M)IR-technikákkal kapcsolatos fejlesztések. Az egyik ilyen fontos kapocs Karl H. Norris, a „NIR atyja”, [5] aki a ’60-as években úttörő szerepet játszott a gázok és tiszta oldatok addigra „rutinná vált” transzmissziós mérése után a porok, a sűrű szuszpenziók, az intakt minták diffúz reflexiós méréstechnikájának kitalálásában és kialakításában – miután letöltötte II. világháborús éveit az indiai Kalkuttában rádiótechnikusként.

Ma már a felhasználók céljaiknak megfelelően számos lehetőség közül választhatnak, ha a rezgési spektroszkópia eszköztárához fordulnak kérdéseik megválaszolása során. Ez a sokféleség megmutatkozik a készülékek felépítésében, mintakezelésében, méréstechnikájában. Elég, ha a bejövő nyersanyag-raktárakban helyszíni méréseket lehetővé tevő, kézben hordozható (ún. handheld), a minőséget ellenőrző laborok asztali (ún. bench-top) vagy a gyártási technológiák in/on-line műszereire gondolunk. Emellett a képalkotó (imaging) technikák is teret nyertek akár mikro-, akár makroszinten – legyen szó kutatólaborról vagy termelőüzemről. [6] A hardverek szolgáltatta közeli és/vagy közép- (analitikai) infravörös – NIR, ill. (M)IR – spektrumok seregébe olyan matematikai, statisztikai, kemometriai módszerek lehelnek életet, amelyek a nagy adathalmazokban (big data) rejlő információk kinyerésére képesek – akár más, több (pl. csatolt elválasztástechnikai módszerekből származó) adatmátrixszal kombinálva. [7]

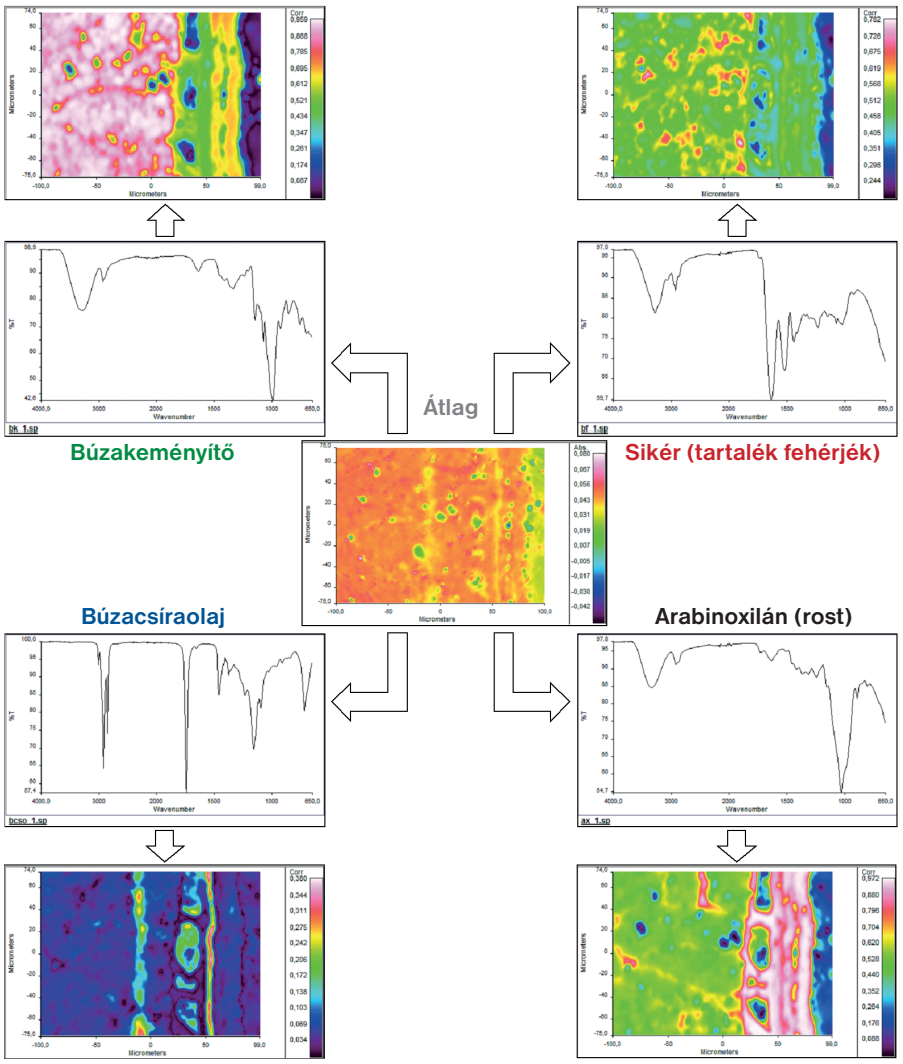
Az alábbiakban az elmúlt közel húsz évből egy-egy fejtörőn keresztül szeretnék egy vékony keresztmetszetet bemutatni arról, hogy a NIR- és (M)- spektroszkópiai technikák hogyan segítettek egy-egy oknyomozásban.

Első feladatom – mely a növényfiziológia, a NIR-spektroszkópia és a kemometria szakterületeinek metszetén alapult – a búza érésdinamikájának nyomon követése volt. A NIR-spektroszkópiával detektálható szabad és kötött vizek közti átmenet ezen élő biológiai rendszerben visszavezethető a kaotróp (vízmolekulák közti hidrogénhidakat a rendezetlenebb állapot felé vivő), poláris jellegű építőkövek (pl. aminosavak, mono- és diszacharidok) átalakulására, „polimerizációjára” kozmotróp (vízmolekulák közti hidrogénhidakat a rendezettebb állapot felé vivő) biopolimerekké (fehérjékké, keményítővé). [8] Vízalapú biológiai rendszerek esetén jóformán az összes kölcsönhatás esetén a részt vevő molekulák először a vízszerkezetükön keresztül „látják” egymást. [9] Természetesen a szárazanyag-tartalom fő részét kitevő szénhidrátok és fehérjék dinamikájának NIR-lenyomatait is vizsgáltuk az érés során, értelmeztük azokat a fiziológiai folyamatok tükrében. [10,11] Ekkor ismer-

tem meg a „hazai NIR atyját”, Kaffka Károlyt (1927–2014), [12] és mutatta meg polár minősítő módszerét, melyet még ezen oknyomozáson túl is számos feladatban sikeresen alkalmaztunk mintázatfelismerő eszközként. Felvetődik a kérdés: vett volna-e a múlt századot végigélő nagyapám NIR-készüléket a sokorói dombok tövében? Valószínűleg nem: átfolyatta a kalászból kimorzsolt magokat markából a tenyerébe figyelvén hangjukat, és ha elég kemények, szárazak voltak az aratáshoz, surrogva, zsizsegve koppantak egymáshoz. De a hatalmas amerikai, kanadai, ausztrál búzatermő vidékeken már a késő ’70-es, kora ’80-as évek óta ott vannak ezek a berendezések – sőt, a precíziós mezőgazdaságnak köszönhetően ma már szó szerint a búzamezőkön: a GPS-szel felszerelt arató-cséplő gépekben (amiket a két műveletet kombinálása miatt ma már inkább kombájnoknak hívunk). Az így kapott „on-combine” vagy „on-the-go” berendezésekkel már a betakarítás során osztályozhatóak a magok például a fehérjetartalom alapján, [14] mely beltartalmi paraméter meghatározhatja a malomipari felhasználást, s kenyérhez, tésztához vagy épp sós kekszhez való céllisztet gyárthatunk.

A búzával való foglalatosságunk a „legyen egészséges, ami finom” jegyében az egészségre jótékony hatással bíró (pl. béldaganatokat megelőző) bioaktív összetevők (alkilrezorcinok, arabinoxilánok, szterolok stb.) fele fordult. Az EU HealthGrain keretprogramjában 2005 és 2010 között a világ több száz gabonafajtáját három termesztési évből, olykor négy ország termőhelyéről vizsgáltuk, hogy mind a genetikai, mind a környezeti (talaj, időjárás stb.) hatásokat beépíthessük kalibrációs modelljeinkbe. [15] Az arabinoxilánok (gyakorlatilag xilóz-gerincről lelógó arabinózoldalláncok) egészségvédő szerepe az, hogy csökkentik a vér glükóz- és koleszterinszintjét, megnövelik az ürülék térfogatát csökkentve az áthaladási időt, megkötik a toxikus metabolitokat, karcinogéneket. Ezen túl ún. technofunkcionális tulajdonságokkal is rendelkeznek: azok a lisztek, melyek többet tartalmaznak ezekből a fajta szénhidrát biopolimerekből, a tésztagyártás során több vizet képesek megkötni befolyásolva a viszkozitást, a tészta konzisztenciáját, így a kelesztés során keletkező gázbuborékok visszatartását, ezzel a sütőipari termék textúráját. [16] Vett volna-e nagyapám NIR-készüléket az arabinoxilánok meghatározására? Valószínűleg nem: napkeltétől napnyugtáig megvolt a jó levegőn a munkája, hozzá az adalékmentes házi kenyere, szalonnája, pálinkája, no és stressz helyett a hite, hogy amit ember nem, Isten majd elrendez. De ma, a rengeteg embert tápláló élelmezésiparban már a „farm-to-fork” (a gazdaságtól, a tanyától a villáig mint evőeszközig) vagy a „stable-to-table” (istállótól az asztalig) láncot megelőzve, már a növénynemesítőknél szükség van olyan gyors, roncsolásmentes eszközökre (hisz a vetőmag nem semmisülhet meg a mérések során), amelyek segítenek az adott célra megfelelő búzafajták kiválasztásában. A molnároknak is fontos információ lehet, hogy a magon belül ezek a bioaktív komponensek hol, milyen vastagságban helyezkednek el – ehhez az infravörös alapú kémiai képalkotással (CI) tudunk segítséget nyújtani, például korrelációs térképek segítségével.

Ha már a búza szóba került, a bor sem maradhat ki. A NIR-spektrumok alapján a bor, a pezsgő és egyéb szeszes italok (vermutok, likőrök) minősítése, alkohol- és cukortartalmának mennyiségi elemzése volt az a feladat, [17] amely a diffúz reflexiós mérések után a „klasszikus” transzmissziós mérések világával megismertetett. A legkisebb borvidékeinktől az országos minősítő intézetig ott vannak ezek a NIR- és/vagy (M)IR-berendezések, hogy gyors döntések születhessenek a technológia kézben tartására, a kezelési hibák elkerülésére, vagy épp a hamisítások kiderítésére. Vett volna-e nagyapám NIR-készüléket borainak vizsgálatára? Valószínűleg nem: tudta, milyen szőlőből lett a mustja, megtanulta – olykor saját kárán –, mikor hogy bánjon a fejlődő borral, és annyi volt neki, amennyit beosztva nyár végéig kitartott. De ma – hogy a növényfiziológiához egy példa erejéig visszanyúljunk – akár bogyónként, kézben hordozható „on-field” NIR-eszközökkel, akár tőkénként, távérzékelési mód-



1. ábra. Egy búzaszem korrelációs térképei (200×150@1,5625µm) a fő összetevők FT–IR spektrumaival való korreláció szerint hamisan színezve. Jobbról balra haladva a rögzítőgyanta, a korpa, az aleuron, végül a magbelső rétegei figyelhetők meg

szerekkel kombinált, repülőgépekre telepített NIR-berendezésekkel elemzik a cukrok és az antociánok érés közbeni változását, hogy optimális időpontban történjék meg szüret. [18]

Az élesztők a pékek és borászok barátai is, de fermentációval a biotechnológiai alapú gyógyszeriparban is találkozhatunk, igaz, ott nem gombák, hanem baktériumok vagy emlőssejt-tenyészetek vannak segítségünkre, például egy-egy célzott rákellenes szer, kemoterápiás kezelések utáni immunrendszer-erősítő hatóanyag előállításában. Az ipari léptékű bor- és gyógyszeripar fermentációs folyamatait a minőségközpontú fejlesztés, gyártás, ellenőrzés (QbD) szemléletű folyamatelemző technológiák (PAT) kötik össze, melyek egyik eszköze a NIR-technika. [19,20] 2006-tól működünk együtt szorosabban hazai gyógyszergyárakkal, tanuljuk együtt a rezgési spektroszkópia lehetőségeit és korlátait, ötvözzük sokváltozós adatelemzési ismereteinket a felügyelni kívánt folyamatok, eljárások háttérismereteivel. [21]

Az infravörös-alapú kémiai képalkotás szó szerint új dimenziót nyitott meg e téren is kutatásainkban. Gyógyszeripari példánál maradva a „sikeres” eredeti tabletta mellett előbb-utóbb megjelennek hamis társai is, de „házon belül” szintén adódhatnak olyan gyártási problémák, amely okának felderítéséhez a spektroszkópia és a mikroszkópia ötvözete kínálhat megoldást. [22] A gyógyszer-, élelmiszer-, műanyag-, vegy- és elektronikai iparokból számos olyan feladatot kapunk, ahol a meghatározandó struktúra mérete okán csak a mikroszkóppal – és olykor spektrumkönyvtárakkal – megtámogatott NIR/(M)IR spektroszkópiai segít. Ebben a kombinációban bízunk akkor is, mikor a daganatok gyorsabb felismerése, diagnózisa felé kutakodunk kollégáimmal, hallgatóinkkal. [23]

És hogy hol vannak a sárkányok? Nálam – talán a fentiekből kiderülhetett – az infravörös fotonok azok, melyek segítségével bejárhatjuk a spektrumok dombjait és völgyeit. Ugyanúgy, ahogy Alan Alexander Milne versében a papírsárkány segít, merre visz a szél útja. Itt szeretném megköszönni tanáraimnak azt, hogy egy-egy szalaggal díszítették sárkányomat, megmutatták a trükköket és fogásokat (viharban és napsütésben egyaránt), végül a kezembe adták a zsineget – és engedtek játszani.

Köszönetnyilvánítás. Hálás szívvel emlékül győri gyakorlós és révais, valamint műegyetemi tanáraimnak. Köszönöm hallgatóimnak lelkesedésüket, segítő munkájukat.

Alan Alexander Milne
Wind on the Hill

No one can tell me,
Nobody knows,
Where the wind comes from,
Where the wind goes.

It's flying from somewhere
As fast as it can,
I couldn't keep up with it,
Not if I ran.

But if I stopped holding
The string of my kite,
It would blow with the wind
For a day and a night.

And then when I found it,
Wherever it blew,
I should know that the wind
Had been going there too.

So then I could tell them
Where the wind goes...
But where the wind comes from
Nobody knows.

Szél a dombon

Senki sem mondja,
Senki sem tudja,
Honnan jön a szél,
S merre visz útja.

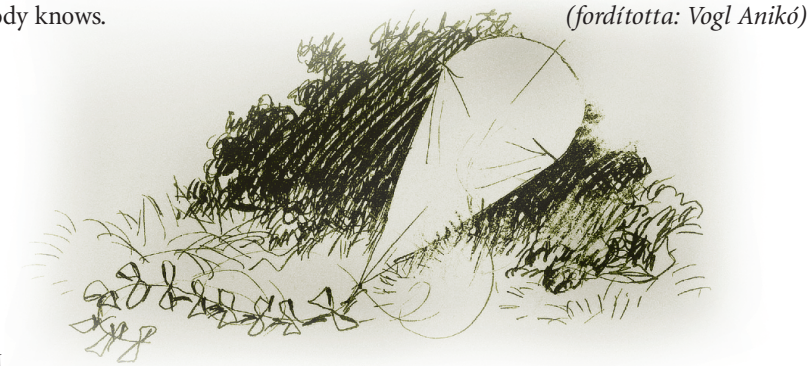
Repül valahonnan,
Szélsebesen lohol,
Ha futnék, még akkor
Sem érhetném utol.

De ha elengedném
Papírsárkányomat,
Elszállna a széllel
Egész éjjel és nap.

S mikor megtalálnám,
Bárhova is esett,
Tudnám, hogy a szél is
Pont arra mehetett.

Akkor elmondhatnám
Merre visz az útja...
De honnan jön a szél,
Azt senki sem tudja.

(fordította: Vogl Anikó)



IRODALOM

[1] G. Radnai, *Fizikusok és matematikusok az Eötvös Collegiumban 1895–1950*, ELTE Eötvös József Collegium, 2014.
[2] I. Newton, *Opticks: or, A treatise of the reflexions, refractions, inflexions and colours of light*, Royal Society, 1704.
[3] W. Herschel, Phil. Trans. R. Soc. Lond. (1800) 90, 284.
[4] W. W. Coblentz, *Investigations of infra-red spectra*, Carnegie institution of Washington, 1905.
[5] A. M. C. Davies, NIR news (2005) 16, 9.
[6] E. Stark, K. Luchter, *Diversity in NIR instrumentation.* In: A. M. C Davies, A. Garrido-Varo (eds.), *Near Infrared Spectroscopy: Proceedings of the 11th International Conference*, NIR Publications, 2004, 55.
[7] T. Næs, T. Isaksson, T. Fearn, T. Davies, *A user-friendly guide to multivariate calibration and Classification*, NIR Publications, 2002.
[8] S. Gergely, A. Salgó, J. Near Infrared Spec. (2003) 11, 17.
[9] J. S. Clegg, Am. J. Physiol. (1984) 246, R133.
[10] S. Gergely, A. Salgó, J. Near Infrared Spec. (2005) 13, 9.
[11] S. Gergely, A. Salgó, *J.* Near Infrared Spec. (2007) 15, 49.
[12] MTA ÉTB, NAIK ÉKI, MÉTE, *358. Tudományos Kollokvium – Kaffka Károly professzor emlékére*, NAIK ÉKI Tanácsterem, 2015. február 27.
[13] K. J. Kaffka, L. S. Gyarmati, J. Near Infrared Spec. (1998) 6, A191.
[14] D. S. Long, J. D. McCallum, P. A. Scharf, Agron. J. (2013) 105, 1529.
[15] P. R. Shewry, G. Charmet, G. Branlard, D. Lafiandra, S. Gergely, A. Salgó, L. Saulnier, Z. Bedő, E. N. C. Mills, J. L. Ward, Trends Food Sci. Tech. (2012) 25, 70.
[16] B. Bucsella, D. Molnár, A. H. Harasztos, S. Tömösközi, J. Cereal Sci. (2016) 69, 40.
[17] S. Gergely, K. Farkas, A. Forgács, A. Salgó, *Quantitative and qualitative differentiations of alcoholic beverages by near infrared spectroscopy* in A. M. C Davies, A. Garrido-Varo (eds.), *Near Infrared Spectroscopy: Proceedings of the 11th International Conference*, NIR Publications, 2004, 569.
[18] B. Sethuramasamyraja, S. Sachidhanantham, R. Wample, Int. J. Geomatics Geosci (2010) 1, 372.
[19] J. C. Menezes, *PAT in different industries: challenges and opportunities for near infrared spectroscopy (abstract)* in M. Manley, C. M. McGoverin, D. B. Thomas, G. Downey (eds.), *Proceedings of the 15th International Conference on Near Infrared Spectroscopy*, NIR Publications, 2012, 186.
[20] D. Cozzolino, W. Cynkar, N. Shah, *Near infrared monitoring of wine fermentation* in M. Manley, C. M. McGoverin, D. B. Thomas, G. Downey (eds.), *Proceedings of the 15th International Conference on Near Infrared Spectroscopy*, NIR Publications, 2012, 187.
[21] S. Gergely, L. Párta, A. Salgó, Magyar Kémiai Folyóirat (2013) 119, 40.
[22] S. Šašić, Y. Ozaki (eds.), *Raman, infrared, and near-infrared chemical imaging*, John Wiley & Sons, Inc., 2010.
[23] E. Kontsek, S. Gergely, A. Salgo, Z. Schaff, A. Kiss, Der Pathologie (2015) 36(S1), 37.

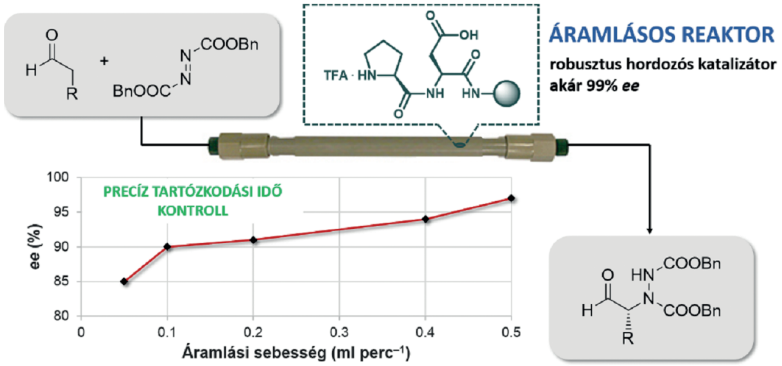
Ötvös Sándor Balázs
■ SZTE Gyógyszerkémiai Intézet, MTA–SZTE Sztereokémiai Kutatócsoport

Áramlásos módszerekkel új kémiai terek irányába: szelektív és hatékony szintézisek

Gyakorlatilag évszázadok óta gömblombikban vagy más edényben mechanikusan kevertetve hajtunk végre kémiai reakciókat. Manapság azonban a kémiai szintéziseknek egyre több elvárásnak kell megfelelnie, úgymint fokozott kemo-, regio- és sztereoszelektivitás, költséghatékonyság, környezettudatosság, fokozott üzembiztonság, gyorsaság és fenntarthatóság. [1] Ezért az utóbbi években újszerű szintézistechnikai módszerek megjelenése volt megfigyelhető. Ezek közül kiemelkedő jelentőségű az áramlásos kémia, amely során a reakciókat a reagensek folyamatos áramoltatása közben valósítjuk meg szűk csatornákban vagy töltetes oszlopokon keresztül. [2] Ez a kísérleti elrendezés számos előnnyel jár a hagyományos lombikos eljárásokhoz képest, azonban megvalósítása a kémiai infrastruktúra átalakítását igényli. [3]

Annak ellenére, hogy már az 1970-es években több leírás is született áramlásos rendszerek laboratóriumi felhasználásával kapcsolatban, a módszer széles körű elterjedésére csak jóval később került sor. A 2000-es évektől viszont robbanásszerű fejlődésen ment át e tudományterület, melynek hátterében a szintetikus kémiában bekövetkezett szemléletváltás állt. [4] Noha a gyógyszeripar manapság még tipikusan szakaszos gyártásra van berendezkedve, egyre inkább megfigyelhető a nyitás az új módszerek irányába. [5] Az áramlásos kémia alkalmazása fenntarthatóbb környezetet és felhasználóbarát kémiát teremthet, sőt bizonyos esetekben teljesen új reakcióutakat és kémiai átalakítási lehetőségeket nyithat.

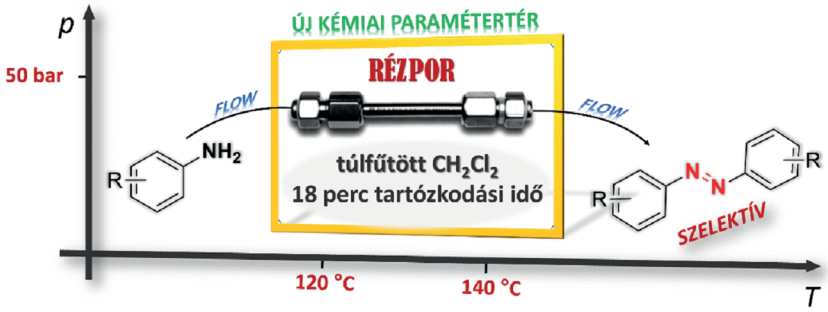
Királis vegyületek enantiomerjei szélsőségesen eltérő biológiai hatással is rendelkezhetnek. Ezért a gyógyszerkémia egyik legfontosabb törekvése az enantioszelektív szintézismódszerek kidolgozása. Aldehidek azodikarboxilát-észterekkel történő organokatalitikus α-aminálása értékes királis vegyületeket eredményez. [6] A reakció prolin, illetve prolinszerű organokatalizátorokkal jó termelés és enantiomerfelesleg mellett hajtható végre, azonban szilárd hordozós katalizátorokkal nem gazdaságos, ugyanis az azodikarboxilát komponens bizonyos mellékreakciók útján gyors katalizátor-deaktiválódást okoz. [7] Kutatócsoportunk olyan szilárd hordozós peptid-organokatalizátort fejlesztett ki, amely kellően tartós akár hosszú idejű folyamatos áramú igénybevétel során is. [8] A heterogén katalizátort áramlásos oszlopreaktorba töltve, meglehetősen egyszerű és hatékony szintézismódszerhez jutottunk **(1. ábra)**. Előnye e kísérleti elrendezésnek azonban nemcsak egyszerűsége, hanem az is, hogy a katalizátor-szubsztrát kontaktidő (ún. tartózkodási idő) nagyon precízen szabályozható az áramlási sebességgel. [9] Ez azért fontos, mert a peptid-katalizátor túl hosszú kontaktidő esetén racemizálhatja a konfigurációsan labilis α-hidrazino-aldehid terméket, túl rövid kontaktidő esetén viszont nem játszódik le a reakció. Hagyományosan, lombikban végrehajtva a reakciót csak 70% körüli enantiomerfeleslegeket tudtunk elérni, ugyanis a magas konverzió hosszú reakcióidőt követelt meg. Azonban áramlásos berendezésben a nagy lokális katalizátorfeleslegnek és a precíz tartózkodási idő kontrollnak köszönhetően 90–99%-os enantiomerfelesleg adódott magas konverzió mellett. Eredményeink kiemelik az áramlásos kémia és a precíz tartózkodási idő kontroll jelentőségét konfigurációsan labilis vegyületek organokatalitikus előállítása során.



1. ábra. α-Hidrazino-aldehid-szintézis áramlásos reaktorban precíz tartózkodási idő kontroll mellett

Az aromás azovegyületeket széles körben alkalmazza a vegyipar, azonban manapság e vegyületcsalád egyre inkább előtérbe kerül a gyógyszerkutatás és a biotechnológia terén is (pl. gyógyszerhordozó rendszerek, molekuláris motorok, mesterséges izmok stb.). [10] Az aromás azovegyületek előállítására számos eljárás található az irodalomban, azonban a legtöbb módszer jelentős problémákkal küzd. [11] Mivel az azobenzol-származékok egy érzékeny redoxirendszer centrumában találhatók, ezért számos esetben jelent problémát nemkívánatos melléktermékek képződése, ami alacsony kemoszelektivitáshoz, csekély atomhatékonysághoz és hulladékképződéshez vezet. Bizonyos reakcióutak esetén reaktivitásbeli problémák is adódnak. Ezeket speciális reagensek és/vagy katalizátorok alkalmazásával ugyan ki lehet küszöbölni, azonban fenntartható alkalmazásuknak gátat szab magas áruk. Megállapítható tehát, hogy az aromás azovegyületek hagyományos szintézismódszerei a „zöld kémia" számos elvárását nem teljesítik. [1] Ezért célul tűztük ki az áramlásos kémia és bizonyos új kémiai paraméterterek segítségül hívását azobenzolszármazékok hatékony és környezettudatos előállítására. [12]

A célvegyületeket szubsztituált anilinek rézkatalizált oxidatív homokapcsolása útján kívántuk előállítani. [13] Katalizátorként egyszerű rézport alkalmaztunk töltetes oszlopreaktorban **(2. ábra)**. [14] Ellentétben például hordozós ezüst-, arany- vagy platinakatalizátorokkal, a rézpor ol-



2. ábra. Aromás azovegyületek áramlásos szintézise túlfűtött oldószerben

cső és könnyen hozzáférhető, és a felületi oxidréteg következtében katalitikusan aktív Cu(I)-et és Cu(II)-t egyaránt hordoz. [15] Anilinek rézkatalizált homokapcsolását lombikos szintézisek során magas forráspontú oldószerekben (pl. toluol) refluxkörülményeken hajtják végre tipikusan közepes hozam elérése mellett. [13] Azonban megmutattuk, hogy áramlásos reaktorban a túlfűtött diklór-metán sokkal hatékonyabb oldószere a reakciónak, ugyanis azonos körülmények mellett jóval magasabb konverziók adódtak, mint a legelterjedtebb magas forráspontú oldószerekben. [14,16] A reakciókörülmények hatását vizsgálva azt tapasztaltuk, hogy a hőmérséklet és tartózkodási idő precíz beállítása mellett 100%-os kemoszelektivitással, vagyis melléktermékek képződése nélkül képződnek a kívánt aromás azovegyületek. Az áramlásos módszerrel többszörösen szubsztituált anilinszármazékok reakcióit is sikeresen végrehajtottuk, sőt a reaktor-hőmérséklet emelése után halogén-szubsztituált anilinekkel is jó hozamokat értünk el, amire az irodalomban eddig nagyon kevés példa született.

IRODALOM

[1] C.-J. Li, B. M. Trost, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. (2008) 105, 13197
[2] T. Wirth, Microreactors in Organic Chemistry and Catalysis, John Wiley & Sons, 2013.
[3] I. M. Mándity, S. B. Ötvös, G. Szőllősi, F. Fülöp, Chem. Rec. 2016, doi: 10.1002/tcr.201500286.
[4] G. M. Keserű, T. Soós, C. O. Kappe, Chem. Soc. Rev. (2014) 43, 5387.
[5] S. V. Ley, D. E. Fitzpatrick, R. J. Ingham, R. M. Myers, Angew. Chem. Int. Ed. (2015) 54, 3449.
[6] T. Vilaivan, W. Bhanthumnavin, Molecules (2010) 15, 917.
[7] X. Fan, S. Sayalero, M. A. Pericàs, Adv. Synth. Catal. (2012) 354, 2971.
[8] S. B. Ötvös, A. Szloszár, I. M. Mándity, F. Fülöp, Adv. Synth. Catal. (2015) 357, 3671.
[9] I. M. Mándity, S. B. Ötvös, F. Fülöp, ChemistryOpen (2015) 4, 212.
[10] M. Roldo, E. Barbu, J. F. Brown, D. W. Laight, J. D. Smart, J. Tsibouklis, Expert Opin. Drug Deliv. (2007) 4, 547.
[11] E. Merino, Chem. Soc. Rev. (2011) 40, 3835.
[12] V. Hessel, D. Kralisch, N. Kockmann, T. Noël, Q. Wang, ChemSusChem (2013) 6, 746.
[13] C. Zhang, N. Jiao, Angew. Chem. Int. Ed. (2010) 49, 6174.
[14] Á. Georgiádes, S. B. Ötvös, F. Fülöp, ACS Sustainable Chem. Eng. (2015) 3, 3388.
[15] S. B. Ötvös, F. Fülöp, Catal. Sci. Technol. (2015) 5, 4926.
[16] S. B. Ötvös, Á. Georgiádes, M. Ádok-Sipiczki, R. Mészáros, I. Pálinkó, P. Sipos, F. Fülöp, Appl. Catal. A: Gen. (2015) 501, 63.

Köszönetnyilvánítás. A szerző köszönetét fejezi ki a hivatkozott saját közlemények társszerzőinek. A közlemény az MTA Poszdoktori Kutatói Program és a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült.

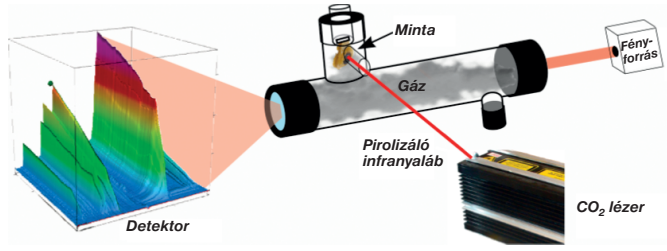
Bordácsné Bocz Katalin
BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék | kbocz@mail.bme.hu

Az égésgátlás korszerű módszerei

Bevezetés

A műanyagok többsége gyúlékony, s gyors lángterjedéssel ég. A műanyag-felhasználás robbanásszerű növekedésével drámaian megnőtt a tűzesetek száma és veszélyessége, ezáltal mindennapi életünk is kockázatosabbá vált. Az elmúlt évek szigorodó európai uniós normáinak köszönhetően azonban a hatékonysági és gazdaságossági megfontolások mellett ma már a környezetvédelem és a biztonságtechnika is egyre hangsúlyosabb szerepet kap. Ennek egyik következménye, hogy egyre bővül azon ipari alkalmazások köre, amelyeknél alapvető követelmény a termékek csökkentett éghetősége, esetleg teljes égésgátoltsága.

Bár ma már többféle lehetőség nyílik a polimerek éghetőségének hatékony csökkentésére, nem hagyhatjuk figyelmen kívül a halogénszármazékok egészség- és környezetkárosító hatását és azt, hogy a – sokszor nagy koncentrációban alkalmazott – égésgátló adalékok nemcsak jelentősen növelik a termék árát, hanem lerontják azok mechanikai, stabilitási és esztétikai jellemzőit is. A korszerű polimeralapú termékek gazdaságos égésgátlásához ezért új megközelítések alkalmazására, illetve új mechanizmusok kiaknázására van szükség.

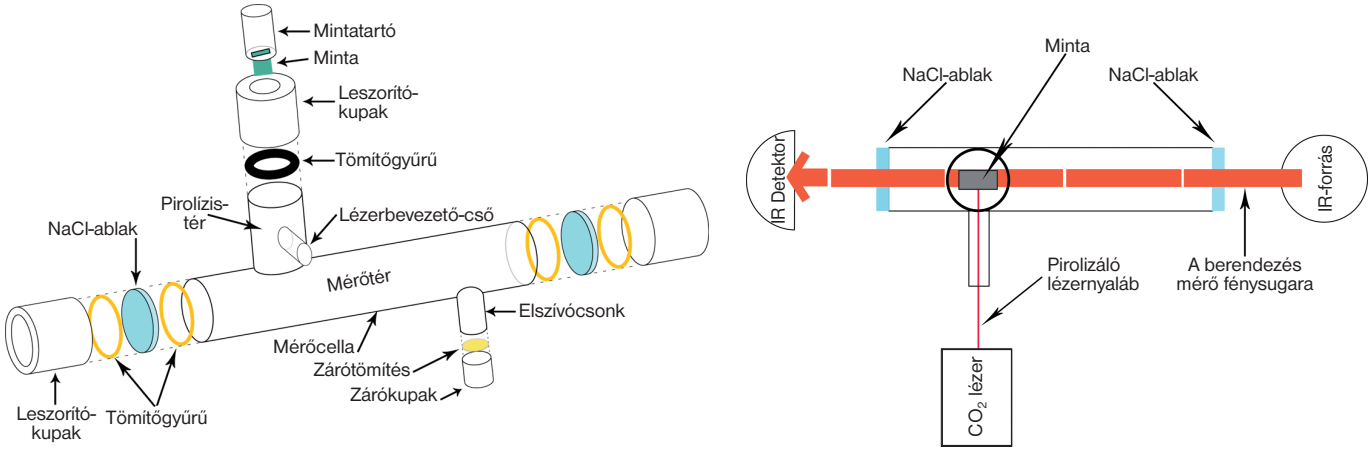


1. ábra. Lézerpirolízis (LP)–FTIR kapcsolt rendszer sematikus ábrája

Új vizsgálati módszer fejlesztése

Égésgátolt polimer rendszerek fejlesztése során elengedhetetlen a polimer mátrix bomlási jellemzőinek, valamint az adalékok hatásmechanizmusának meghatározása. A régóta elterjedten alkalmazott vizsgálatok (pl. TGA–FTIR) kialakítása égő minták elemzésére nem optimális. Ezek tapasztalataiból kiindulva egy új vizsgálati módszert fejlesztettünk ki **(1. ábra)**, amely lehetővé teszi a polimerek termikus, illetve termooxidatív bomlási körülményeinek modellezését és az égés során lejátszódó kémiai folyamatok nyomon követését a gázfázisban, hozzájárulva ezzel az égésgátolt agyagfejlesztés irányainak meghatározásához.

A vizsgálati rendszer alapját két fő egység alkotja: 1) CO_2 lézer a pirolízis model-



2. ábra. A lézerpirolízis mérőcellája, a sugarak útja (felülnézet)

lezésére, 2) infravörös spektrométer (FTIR) a fejlődő gáz halmazállapotú bomlástermékek detektálására. A spektrométerbe integrált gázteret egy 25 mm átmérőjű és 10 cm hosszú üvegcső képezi, amit a két végen 4 mm vastag NaCl-ablak zár le, melyeket két-két szilikongumi gyűrű közé fogva egymenetes leszorítókupak rögzít **(2. ábra)**. A lézerrel történő kezelés a pirolízistérben történik, melynek következtében a keletkező bomlástermék a mérőtérbe kerül, és ott halmozódik fel. Az analizáló infravörös nyaláb a cső tengelyének irányában halad keresztül a gázcellán, ezáltal valós idejű detektálást tesz lehetővé.

A műszerfejlesztési lépéseket követően a paraméterek beállítását alappolimereken – polipropilénen, etilén-vinil-acetáton – végeztük. A módszerben rejlő lehetőségek felderítésére az égésgátolt polimer rendszerek széles skáláját vizsgáltuk meg. Különböző hatásmechanizmusú égésgátló adalékokat hasonlítottunk össze, mint például fém-hidroxidokat, vagy foszfortartalmú felhabosodó égésgátló rendszereket hőre keményedő és hőre lágyuló polimer mátrixokban egyaránt.

Az új módszer mintaszükséglete, költsége és mérési időigénye több mint egy nagyságrenddel kisebb, mint a jelenleg alkalmazott módszereké. A környezet és az egészségkárosító gázok detektálása mellett új, gázfázisban ható égésgátlók még felderítetlen hatásmechanizmusának meghatározása is lehetővé vált [1]. Az új kapcsolt módszert a kutatás mellett az oktatásba is integráltuk.

Új égésgátló mechanizmus kutatása

Önerősített polimer kompozitok esetében az erősítő szál és az azt beágyazó mátrix azonos anyagcsaládba tartozik. Mechanikai teljesítőképességük és egyszerű újrahasznosíthatóságuk miatt ezek a rendszerek a hagyományos szálerősítéses kompozitok környezetbarát alternatíváit jelentik. Az újonnan kifejlesztett – elsősorban műszaki alkalmazásokra szánt – önerősített kompozitok égésgátlását kizárólag környezetbarát, foszfortartalmú égésgátló adalékokkal történő módosítással kívántuk megvalósítani. A kísérleteink során felhasznált ammónium-polifoszfát-alapú (Exolit AP766, Clariant GmbH), felhabosodó égésgátló (intumescent flame retardant, IFR) hatását a kompozitok éghetőségi és mechanikai tulajdonságaira egyaránt széleskörűen vizsgáltuk.

Növekvő mennyiségű (0, 9, 13, 17 és 21%) IFR-t tartalmazó önerősített PP kompozitok (SRC-IFR) éghetőségi jellemzőit azonos kémiai összetételű, azonban erősítetlen PP keverékekkel (PP-IFR) összevetve igen meglepő eredményeket kaptunk **(1. táblázat)**. Azonos égésgátlóadalék-tartalom mellett az önerősített kompozitok esetében rendre jelentősen magasabb oxigénindexeket (LOI) mértünk, mint az egyszerű bekeveréssel készített égésgátolt PP minták esetében. A megfigyelt jelenség talán még jobban érzékelhető, amennyiben az UL-94 éghetőségi vizsgálat eredményeit tekintjük. Látható, hogy önerősített kompozitok esetében mindössze 9% égésgátló adalékkal elértővé vált a kompozit önkioltó viselkedése, azaz a legjobb, V-0 éghetőségi besorolás, míg PP keverékek esetében 18% ugyanilyen típusú égésgátló sem volt elegendő, ez esetben a szakirodalomi adatokkal megegyezően [2] legalább 20–22% IFR alkalmazására volt szükség.

Cone-kaloriméteres [3] vizsgálatok során is megfigyelhettük az önerősített kompozitokban alkalmazott IFR adalék kimagasló égésgátló hatékonyságát. Az égésgátolt önerősített kompozitok égését átlagosan 40%-kal alacsonyabb hőkibocsátási maximum és mintegy 25%-kal kevesebb összes kibocsátott hőmennyiség jellemezte **(3. ábra)**.

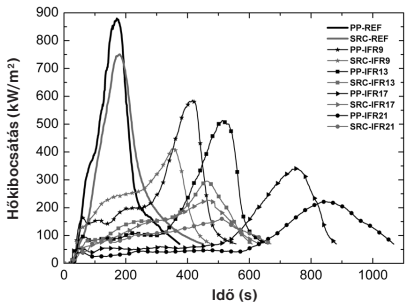
Mivel az előállított keverékek és önerősített kompozitok kémiai összetétele megegyezett, arra következtettünk, hogy az ön-

1. táblázat. Növekvő égésgátló- (IFR) tartalmú egyszerű PP keverékek és önerősített PP kompozitok oxigénindexének és szabványos UL-94 éghetőségi vizsgálat szerinti besorolásának összehasonlítása

PP komp.	LOI* (v/v%)	UL-94** Éghetőségi fokozat	SRC önerősített	LOI (v/v%)	UL-94 Éghetőségi fokozat
PP-REF	18	HB	**SRC-REF**	19	HB
PP-IFR9	24	HB	**SRC-IFR9**	26	V-0
PP-IFR13	27	HB	**SRC-IFR13**	30	V-0
PP-IFR17	31	V-2	**SRC-IFR17**	36	V-0
PP-IFR21	35	V-0	**SRC-IFR21**	42	V-0

**Oxigénindex:* A meghatározott sebességgel áramló oxigén-nitrogén gázelegynek az a minimális oxigéntartalma térfogatszázalékban kifejezve, amelyben meghatározott vizsgálati körülmények között a meggyulladt anyag égése fennmarad.

***UL-94 éghetőségi vizsgálat:* Szabványos éghetőségi teszt, elsősorban a minták gyúlékonyságának jellemzésére, ill. lángterjedési sebességének meghatározására alkalmas. A teszt eredményeként a vizsgált próbatestek jól definiált éghetőségi osztályokba sorolhatók: HB (könnyen éghető) < V-2 < V-1 < V-0 (önkioltó).



3. ábra. Azonos IFR-tartalmú PP keverékek és önerősített kompozitok Cone-kalorimeterrel mért (50 kW/m²) hőkibocsátási görbéi

erősített kompozitok esetében megfigyelt égésgátlási mechanizmusban valamely fizikai jelenség játszik fontos szerepet. Számos paraméterre kiterjedő kísérletsorozat elvégzése után a különleges éghetőségcsökkentő effektust a hő hatására kialakuló – az önerősített kompozitok esetében – különleges, kompakt szenes habszerkezet **(4. ábra)** kiemelkedő égésgátló hatására vezettük vissza [4]. Feltártuk, hogy a speciális, szenes hőszigetelő réteg kialakulásában a nagymértékben nyújtott, orientált PP szálak játszanak kulcsfontosságú szerepet. A hő hatására zsugorodó orientált PP szálak és a hő hatására felhabosodó (táguló) égésgátló adalékrendszer kedvező együttes hatását mint az égésgátlási mechanizmus egy új elemét értelmeztük [5]. Az önerősített kompozitok égésgátlására irányuló kutatásaink azt bizonyítják, hogy a megfigyelt különleges éghetőségcsökkentő hatásnak köszönhetően a kívánt éghetőségi szint eléréséhez csak jóval kevesebb égésgátló adalékot szükséges felhasználni, amelynek következtében az égésgátolt kompozit megtartja kiindulási, kiváló mechanikai tulajdonságait, s egyúttal a kompozit előállítási költsége is csökken.

Az új mechanizmust kiaknázva kedvező mechanikai tulajdonságú (szakítószilárdság: 80 MPa, perforációs energia: 16 J/mm) önerősített kompozitok állíthatók elő kizárólag másodlagos nyersanyag (vegyes poliolefinhulladék) felhasználásával égésgátolt formában is. A műanyag hulladékokból történő kompozitgyártás során egyúttal a felhasznált műanyag hulladékok műszaki és piaci értéke egyaránt jelentősen nő [6]. Az erősített kompozitok egy másik alternatíváján – az önerősített politejsav példáján – azt mutattuk ki, hogy nagy műszaki értékű kompozitok gyárthatók teljes mértékben megújuló, biodegradálható nyersanyagokból kiindulva. Ezekkel egy lépéssel közelebb lehet kerülni a zárt ciklusú erőforrás-gazdálkodás megvalósulásához [7].

Új, multifuncionális égésgátló adalékok alkalmazása biokompozitokban

Természetes szálakkal erősített biokompozitok égésgátlásához új, foszfortartalmú multifunkcionális adalékokat állítottunk elő. Olyan anyagokat kerestünk, amelyek alapfunkcióik mellett (pl. lágyító, erősítő, kompatibilizáló stb.) égésgátló hatást is kifejthetnek.

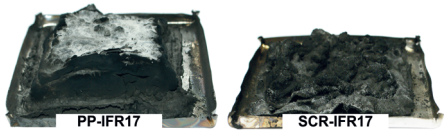
Égésgátolt termoplasztikus keményítő (TPS) előállítása érdekében foszfortartalmú poliolt, – glicerin és foszfor-pentoxid reagáltatásával előállított – glicerin-foszfátot (GP) alkalmaztunk a keményítő lágyítására. A módosított keményítő megnövelt szenesítő hatást fejtett ki politejsavban (PLA-ban), és ezáltal csökkent éghetőségű PLA/TPS keverékek keletkeztek.

Ezzel párhuzamosan olyan új reaktív felületkezelőszert (PSil) állítottunk elő foszfortartalmú poliol (OP 560) és 3-(trietoxiszilil)propil-izocianát addíciós reakciójával, amellyel a lenszálakat kezelve a foszfor-szilícium szinergizmus kiaknázható. A PLA/TPS és PLA/TPS-GP keverékek égési oxigénigénye egyaránt csökken, ha erősítőanyagnak kezeletlen lenszálakat választunk. A – szálas anyagokra jellemző, hátrányos – kanóchatás csak akkor szűnt meg teljes mértékben, amikor a szálakat a szintetizált foszforszilánnal felületkezeltük. A bioszálak esetében nagymértékű szenesedést értünk el (TGA-ban 500 °C-on 47% szenes maradék) anélkül, hogy a cellulózalapú szálak hőstabilitása számottevően csökkent volna.

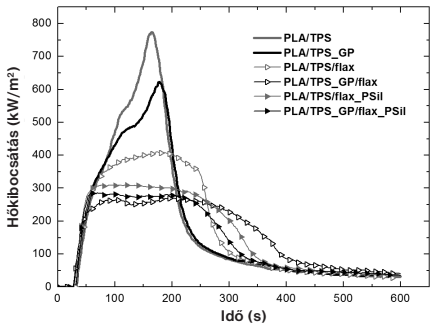
Amikor az égésgátló lágyítót kombináltuk a PSil-kezelt lenszálakkal, a referencia biokompozithoz képest 30%-os hőkibocsátási maximum csökkenést értünk el **(5. ábra)**. Amennyiben az erősítő szálak felületén és a biodegradálható mátrixanyagban egyaránt alkalmaztuk a foszfortartalmú multifunkcionális vegyületeket, megfelelő szilárdságú és merevségű, hatékonyan égésgátolt biokomopzitokat kaptunk további adalékok alkalmazása nélkül [8].

Összefoglalás

Kutatómunkánk során az „eco-design”, azaz környezetbarát tervezés elveit követve, újrahasznosítható önerősített kompozitokat és megújuló erőforrásból származó és biodegradálható kompozitokat állítottunk elő égésgátolt formában. A kompozitfejlesztés során – a versenyképes mechanikai tulajdonságok elérésére való törekvés mellett – biztonsági, környezetvédelmi és gazdasági szempontokat is figyelembe veszünk annak érdekében, hogy az újrahasznosítható és megújuló erőforrásból származó kompozitok a hagyományos kőolajalapú versenytársak valós (vagy jobb) alternatívájául szolgálhassanak. A kutatómunka során kifejlesztett környezetbarát és biztonságos szálerősített kompozitok, a megfigyelt új égésgátló mechanizmus, továbbá az alkalmazott új vizsgálati módszerek tudományos és ipari érdeklődésre egyaránt számot tarthatnak.



4. ábra. 17% IFR-t tartalmazó egyszerű PP keverék és önerősített kompozit égési maradékai



5. ábra. Lenszál erősítésű PLA/TPS biokompozitok hőkibocsátási görbéi

IRODALOM

[1] B. Bodzay, B. B. Marosfoi, T. Igricz, K. Bocz, G. Marosi: Polymer degradation studies using Laser Pyrolysis-FTIR microanalysis. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis (2009) 85, 313–320.

[2] S. Zhang, A. R. Horrocks: A review of flame retardant polypropylene fibres. Progress in Polymer Science (2003) 28, 1517–1538.

[3] C. Huggett: Estimation of rate of heat release by means of oxygen consumption measurements. Fire and Materials (1980) 4, 61–65.

[4] K. Bocz, T. Bárány, A. Toldy, B. Bodzay, I. Csontos, K. Madi, Gy. Marosi: Self-extinguishing polypropylene with a mass fraction of 9% intumescent additive – A new physical way for enhancing the fire retardant efficiency. Polymer Degradation and Stability (2013) 98, 79–86.

[5] K. Bocz, T. Igricz, M. Domonkos, T. Bárány, G. Marosi: Self-extinguishing polypropylene with a mass fraction of 9% intumescent additive II – Influence of highly oriented fibres. Polymer Degradation and Stability (2013) 98, 2445–2451.

[6] K. Bocz, A. Toldy, Á. Kmetty, T. Bárány, T. Igricz, Gy. Marosi: Development of flame retarded self-reinforced composite from automotive shredder plastic waste, Polymer Degradation and Stability (2012) 97, 221–227.

[7] K. Bocz, M. Domonkos, T. Igricz, Á. Kmetty, T. Bárány, G. Marosi: Flame retarded self-reinforced poly(lactic acid) composites of outstanding impact resistance. Composites Part A (2015) 70, 27–34.

[8] K. Bocz, B. Szolnoki, A. Marosi, T. Tábi, M. Wladyka-Przybylak, Gy. Marosi: Flax fibre reinforced PLA/TPS biocomposites flame retarded with multifunctional additive system. Polymer Degradation and Stability (2014) 106, 63–73.



Braun Tibor
ELTE Kémiai Intézet, MTA Könyvtár és Információs Központ | braun@mail.iif.hu

Aiszkhüloszi érzelmek nyomán a kémiában

Vendéglátó-vendég és börtön-rab szupramolekuláris kapcsolatok

Előszó

Mint dolgozatunk címe is jelzi, a továbbiakban a molekuláris vendéglátó-vendég (host-guest) kémiai kölcsönhatásokkal, de azokon túlmenően a börtön-rab kémiai kapcsolatokkal is foglalkozunk, és ez lényegében utal a molekulák, atomok vagy ionok kémiai *rabul ejtésére* (*encarcerating*) is, amit szintén témánkhoz tartozónak vélünk.

Ezen utóbbira vonatkoztatva az alábbiakban nem arról lesz szó, hogy hogyan ejti rabul a kémia a kémiai ismeretekre éhező koponyákat. Bár ez utóbbi lehetőség is fennállhat, és e sorok szerzője maga is átesett e folyamaton zsenge ifjúkorában, az, amivel itt foglalkozni kívánunk, magában a kémiában és nem a kémiával történik.

Ezek után valószínűsíthető, hogy lesznek, akik a dolgozat címét fejcsóválva olvassák. Hát már a kémiában is…, mondhatják azok, akik a rabul ejtést kizárólag az élővilágra jellemző jelenségnek hitték. Optimistább alkatúak talán nem is a negatív kicsengést vélik kihallani a rabulejtés mögül, hiszen romantikus emberi kapcsolatok során érzelmileg is rabul ejthető a partner és lélekmelengető írások foglalkoznak ezzel a költészetben és a szépirodalomban. A kémiában azonban mindez másképpen van. A fenti címben kiemeljük a molekulák közötti *börtön-rab* fogalmat, ami a *börtön* (*carcer*) szó felemlítésével már enyhíteni, sőt feledtetni látszik a szívbemarkoló aiszkhüloszi vendéglátó-vendég kapcsolatot, amely romantikát és szigorúbb kölcsönhatásokat ígér. Pedig még a kémiában is milyen szépen, barátságosan indult minden.

Bevezetés

1974-ben az egyesült államokbeli *Donald* és *Jane M. Cram* kutatóvegyész házaspár a „vendéglátó-vendég” (host-guest) elnevezést javasolta bizonyos kémiai kölcsönhatások és kapcsolatok (komplex vegyületek) jelölésére [1]. Javaslatukat a már előzőleg megfogalmazott kémiai elvek esztétikai kiegészítéseként *Aiszkhülosz* athéni költő és drámaíró egyik gondolatára is alapozták, aki 2500 évvel azelőtt írta, hogy „a legkellemesebb (emberi) kapcsolat a vendéglátó és vendégek kapcsolata” [2]. Cramék nézeteiket a következőképpen foglalták össze „az elmúlt 17 évben kutatásaink során a vendéglátó (host) és a vendég (guest) közötti kellemes kapcsolattal foglalkoztunk a szerves molekulák szintjén”. A vendéglátó-vendég, valamint a komplex fogalmát és kötéseiket a következők szerint definiáljuk [3]. A komplexek két vagy több molekulából vagy ionból állnak, melyeket egyedi szerkezeti kapcsolat tart össze olyan elektrosztatikus erőkkel, amelyek mások, mint a teljes, igazi kovalens kötések. Molekuláris komplexeket általában *hidrogénkötések*, *ionpárok*, *π-savas* vagy *π-bázisos* együtthatók, és *fém-ligandum* vagy *van der Waals* vonzási erők tartanak össze. Magas fokú szerkezeti szervezés általában csak sokszoros kapcsolati helyeken jön létre. Egy vendéglátó-vendég kapcsolat a vendéglátó és vendég kötés helyein létrejövő komplementer sztereoelektronikus elrendezést feltételez. A vendéglátót olyan szerves molekulaként vagy ionként definiálják, aminek a kötési helyei konvergálnak, míg a vendég komponens bármilyen molekulaként vagy ionként jellemezhető, aminek a kötési helyei divergálnak a komplexben. Általában az egyszerű vendégek bőségesen állnak rendelkezésre, míg a vendéglátókat meg kell tervezni és szintetikus úton elő kell állítani [4]. Cram véleménye szerint „egy új terület új terminológiát igényel, melyet ha pontosan definiálnak, analógia segítségével megkönnyíti a gondolkodást a kutatás területén [3]. A Cram házaspár folytatta fent említett kutatásait és későbbi eredményeit egy „Container molecules and their guests” című kötetben foglalta össze [5].

Donald Cram saját kutatásai előzményeinek tekintette *Charles Pedersen* 1967-ben megjelent cikkeit [6, 7], amik a koronaéterek (crown ethers) felfedezéséről és azoknak az alkálifémekkel alkotott komplexeikről számoltak be. Ugyancsak vendéglátó-vendég kémiai kapcsolatok előzményeként kezelte Cram *Jean-Marie Lehn* és munkatársai 1969-ben publikált felfedezését a kriptand-molekulák tervezéséről, szintéziséről és kötési tulajdonságairól [8, 9]. Jean-Marie Lehn az általa tovább folytatott kutatásait egy új területként definiálta, aminek a *szupramolekuláris kémia* elnevezést adta [10]. Itt tartanánk fontosnak megjegyezni, hogy Charles Pedersent, Donald Cramot és Jean-Marie Lehnt 1987-ben a Nobel Bizottság kémiai Nobel-díjjal tüntette ki „for their development and use of molecules with structure-specific interaction of high selectivity” (szerkezet-specifikus molekulák és nagy szelektivitású kölcsönhatásaik kidolgozásáért és felhasználásáért) [11–13].

Annak a bemutatására, hogy mennyire átfedőek voltak Cram és Lehn eredeti né-

zetei és kutatási szándékai, talán elég itt az e dolgozat elején már szó szerint idézett, Cram-féle vendéglátó-vendég kapcsolatok definícióját összehasonlítani a Lehn Nobel-előadásán elhangzottakkal. „A molekuláris kémia a kovalens kötés kémiájával foglalkozik, illetve azon szabályokkal, amik irányítják, meghatározzák a molekuláris kémiát, és a molekulán túli kémiaként definiálható. Állíthatjuk, hogy a szupramolekulák a molekuláknak és az intermolekuláris kötéseknek ugyanazok, mint a molekulák az atomoknak és a kovalens kötéseknek.” [13].

Koronaéterek

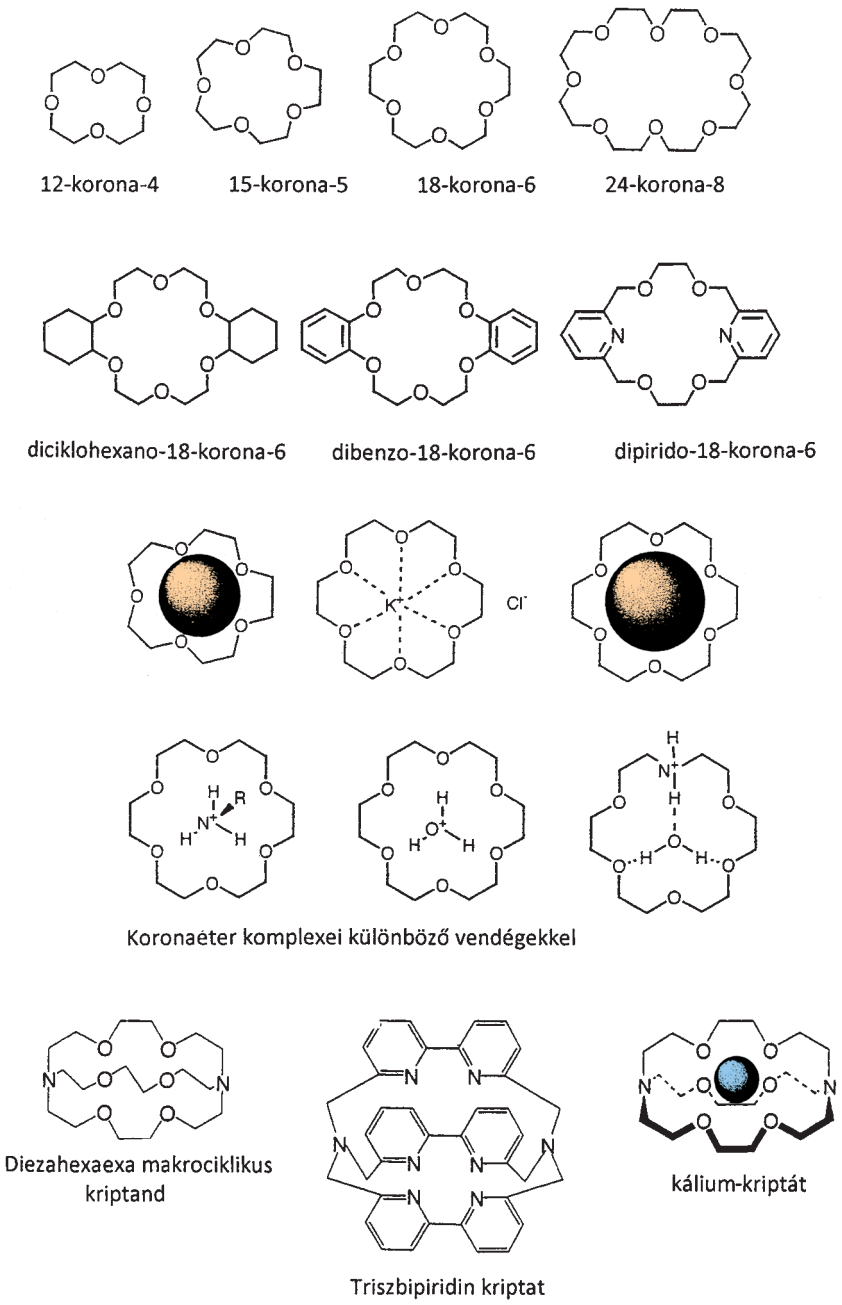
De térjünk vissza kicsit részletesebben a kezdetekhez, illetve előzményekhez, azaz az 1967-ben Pedersen által felfedezett és általa koronaétereknek nevezett ciklikus poliéterekhez [6, 7]. Ezek a vegyületek nagyszámú, körben, szabályos intervallumokban elhelyezkedő szénatomokból állnak (innen Pedersen „korona” elnevezése), amiket oxigénatomok szakítanak meg **(1. ábra)**. Fémionok hiányában a koronaéter gyűrű petyhüdt (floppy) jellegű. Azonban fémion bevezetésére (amikor a kötés a koronaéter gyűrű közepén jön létre), az ion a koronát szervezettebb, sík lapszerű alakúvá teszi. Pedersen ezen felfedezése a kémiai kutatás új irányát jelentette különös hangsúllyal az ionos kötések irányába, valamint utalás, illetve átvezetés a biológiában és a biotikus rendszerekben ismert nagyon gyenge nemkovalens kötések, azaz a gyenge kölcsönhatások felé. Időben még távolabbra visszautalva megemlíthetők *Linus Pauling* 1940-es, gyenge kölcsönhatásokra fókuszáló kutatásai, különösképpen azok, amik a kémiai részleges ionos jellegre utaltak a negativitás fogalmának felhasználásával [14]. 1969-ben Lehn és munkatársai [8] követték és folytatták Pedersen koronaéterekre vonatkozó elveit és vizsgálatait több hidat kapcsolva a koronaéterekhez, s háromdimenziós irányba fejlesztették még stabilabbá téve Pedersen síklapszerű komplexeit.

Kriptandok és szferandok

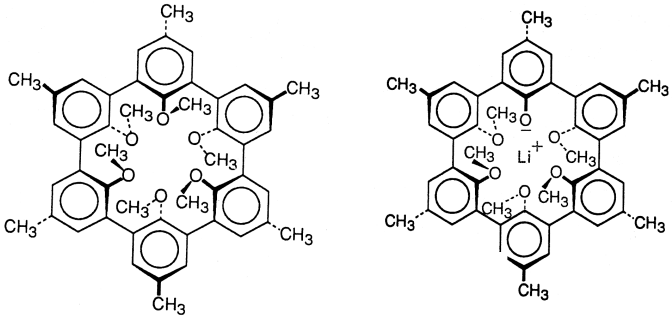
Ezeket a háromdimenziós policiklusos vegyületeket, mint már említettük, Lehn *kriptand*oknak [8, 9], illetve azok fémionokkal képzett vegyületeit *kriptát*oknak, illetve *kriptaplexe*knek nevezte **(2. ábra)**. Röviddel azt követően, hogy Pedersen, aiszkhüloszi érzelmek nyomán, felfedezte a koronaétereket, azaz vendégfogadásra, megkötésre szintetikus vendéglátó molekulákat, Lehn folytatta kutatásait újabb vendéglátók, a kriptandok szintézisével, majd 1987-ben újból Cram következett egy új vendéglátó család, a szferandok, illetve ugyancsak vendéglátó-vendég komplexeivel, a szferaplexek szintézisével [5, 12]. Tehát az aiszkhüloszi vendéglátó sor immár a vendéglátó szívélyesség kémiai megfelelőjével, a kötési affinitással jellemezve a *koronaéterek* < *kriptandok* < *szferandok* sort követte.

Már csak a fejlődés folyamatossága okán is hivatkozhatunk a Cram házaspár e dolgozat elején említett kijelentésére, miszerint a vendéglátó-vendég kapcsolatokhoz „egyszerű vendégek bőségesen állnak rendelkezésre, míg a vendéglátókat meg kell tervezni és szintetikus úton elő kell állítani” [4].

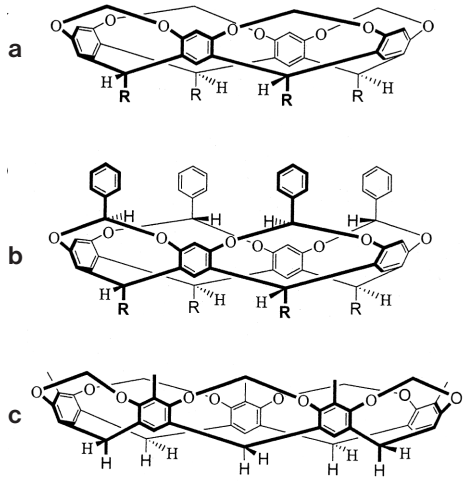
E gondolatok jegyében Cram és munkatársai egy csoport olyan új ligandumrendszert terveztek, amelyekben azok már a komplexképzést megelőzően előszerveződtek. Az ilyen előszerveződött vendéglátó-rendszereket Cram és munkatársai, mint már említettük, szferandoknak, illetve azok vendéglátó-vendég komplexeit szferaplexeknek nevezték [15]. A szferandok meglehetősen összetett szintézisének kérdéseivel itt nem kívánunk foglalkozni, de egy vendéglátó szferandmolekulát és egy vendéglátó-lítium vendégmolekulát a *2. ábrán* bemutatunk.



1. ábra. Koronaéterek, kriptátok és vendéglátó-vendég komplexeik [3, 5, 8, 10]



2. ábra. Vendéglátó szferand-molekula és szferaplex vendéglátó-lítium komplex [5]



3. ábra. Tipikus vendéglátó kavitandok: a) szabályos kavitand, b) mély üregű kavitand, c) széles aljú kavitand [5]

Kavitandok

A fentebb említett vendéglátó szívélyességi affinitási sor további kiegészítéseként említést kell tegyünk Cram újabb vendéglátó molekuláiról, a kavitandokról. Ezek szintetikus szerves vegyületek, amiknek megerősített belső üregei (enforced cavities) eléggé nagyok ahhoz, hogy befogadjanak, komplexáljanak komplementer szerves vegyületeket vagy ionokat [5, 16]. Itt a két kulcsszóra, azaz a „megerősített”-re és az „üreg”-re (cavity), kell hangsúlyozottan gondolni. Az előző, magasan előszervezett merev szerves molekulákra utal, azaz olyanokra, amelyek kevés konformációs vagy mozgási lehetőséggel rendelkeznek. Ebben az értelemben a kavitandok általában többszörös aromás gyűrűből képzett makrociklusos vegyületek, amik magasan konstriktív módon, kovalensen kötődnek egymáshoz. Az „üreg” szó magától értetődően a topológiában egy egész idomsorra terjedhet ki a konkáv vagy tál alakútól egészen a teljesen bekapszulált molekuláris felületig. Amikor Cram bevezette az elnevezést, ő nem tett különbséget e két különböző (konvex-konkáv) görbület között [16]. Viszont a „tál” (bowl) alakú molekulák elterjedésével, azaz az olyan molekulákkal, amelyek tálszerűen teljesen magukba tudtak fogadni vendégmolekulákat, a kavitandfogalom a nyitott, konkáv alakú vendéglátók szinonimájává vált. A tál (bowl) alakú vendéglátók legkiemelkedőbb példáját a rezorci[4]arének és a ciklotriveratrilének jelentik [5]. A **3. ábra** tipikus vendéglátó kavitandokra mutat példát.

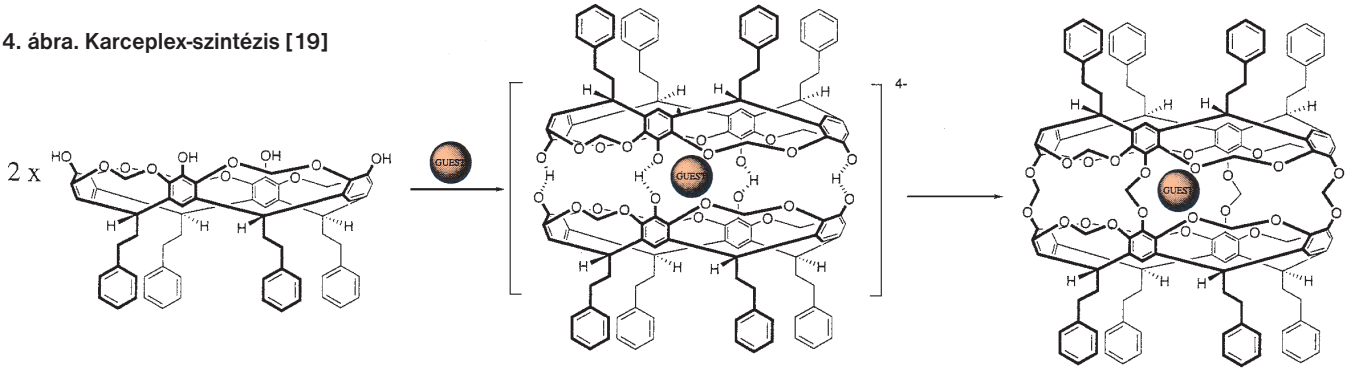
Karcerandok

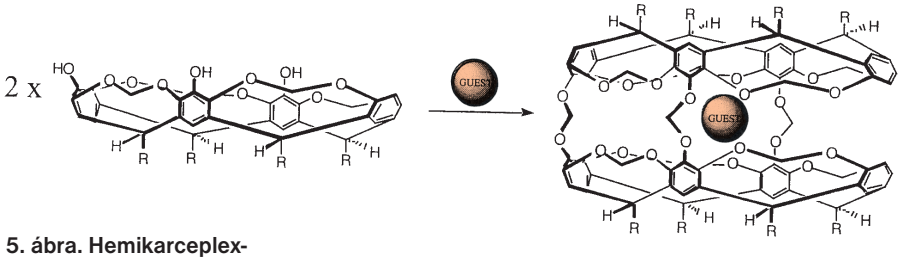
Az előbbiekben vázolt eredmények és megállapítások, mint írtuk, teljes összhangban lévőnek tűntek az aiszkhüloszi érzelmek alapjára épített vendéglátó-vendég (host-guest) kémiai elvekkel [17]. Azonban 1985-ben felhők kezdtek gyülekezni az aiszkhüloszi vendéglátó-vendég kémia egén. Ugyanis ebben az évben jelent meg Cram és munkatársainak a karcerandok és karceplexek felfedezéséről beszámoló cikke [18]. Cramék dolgozatából szó szerint idézve: „az eddig leírt több millió szerves vegyületen kívül léteznek olyan zárt felületű vendéglátók, amelyek megerősített, belső tere eléggé nagy ahhoz, hogy kovalens rácsok mögé olyan vendégeket tudjanak bebörtönözni (incarcerate), melyeknek mérete a közönséges oldószer-molekulákénak felel meg. Erre a vegyületcsoportra a karcerandok megjelölést alkalmazzuk” **(4. ábra)**. Az aiszkhüloszi érzelmi kapcsolatok feletti felhősödés a fentieket olvasva abból az ezúttal szívszorító tényből származik, hogy a karcerandok és azok komplexei, a karceplexek esetében olyan kifejezések, mint „rács mögött tartás”, „bebörtönzés”, „fogoly” és a még elszomorítóbb „vendégek rács mögött” kezdtek feltűnni a molekuláris konténervegyületekkel foglalkozó irodalomban. Ilyen esetekben definiálja Cram: a vendégmolekula vagy ion a karceplexekből csak köznapiasan mondva rácsfűrészeléssel, azaz kémiailag kovalens kötéstöréssel szabadulhat, s ezúttal már nem vendég, hanem rab (fogoly). Nem szükséges túl érzékeny és bonyolult magyarázó nevezéktan ahhoz, hogy az ilyen viszonyok már nem vagy csak nagyon nehezen tekinthetők aiszkhüloszi értelmezésben „kellemes érzelmi kapcsolatoknak”. Az olyan kapcsolatban, amiben a vendég nem tud szabadon jönni-menni, hanem ténylegesen „fogolyként” vagy „rabként” van jelen, azaz „rabul ejtett”, „rács mögötti” vagy bebörtönzött lesz, nem a kellemesség az uralkodó érzés.

Hemikarcerandok

Enyhítően hat mindezekre Cram továbbfejlesztése abban az irányban, hogy megalkotott és előállított olyan kavitandalapú, nagy üregű karcerandokat, amelyek eléggé nagy méretű réseket tartalmaztak ahhoz, hogy azokon keresztül magasabb hőmérsékleten a „vendégek” ezentúl már „rabok”, „foglyok” nem könnyen, de kiszabadulhassanak. Ezeket hemikarcerandok-

4. ábra. Karceplex-szintézis [19]





5. ábra. Hemikarceplex-szintézis [19]

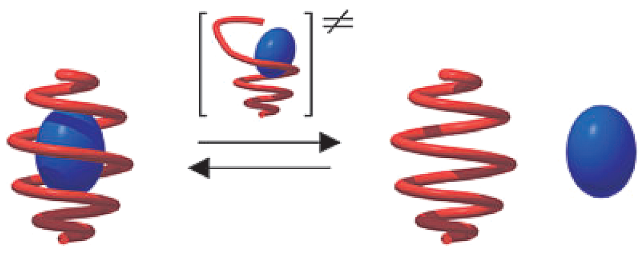
nak, illetve hemikarceplexeknek **(5. ábra)** nevezte [5, 19]. Mindezek tudatában talán ha mégolyan elszomorodott szívünkkel valamilyen enyhítést keresve bátorkodunk valamilyen közeledést találni a valóban lélekemelő aiszkhüloszi érzelmek és a nem igazán szívderítő bebörtönzési törekvések közé, esetleg megtehetjük, hogy kétféle kapcsolati csoportosítást képzelünk el azáltal, hogy a két extrém állapot, azaz „vendég", illetve „fogoly" közé a kémiát és a molekulákat is érintő, közbeeső helyzetet, állapotot iktatunk. Ennek értelmében a koraplexeket, kriptaplexeket, szferaplexeket, kriptaszferaplexeket, hemiszferaplexeket, kaviplexeket stb. [5] „látogató", vagy ha akarjuk, „vizitand" (vizit: látogatás) kapcsolatú vegyületeknek tekinthetjük, mivel a „látogatás" folyamán a vendéglátó-vendég aiszkhüloszi kellemes „vizitelő" kapcsolata érvényesül. Ezzel szemben a karceplexek mint „kaptivand" (captivand) vegyületek jelennek meg, ahol a „foglár" molekulák a „foglyokat" a „börtön-rab" kapcsolatban „befogják", és irreverzibilisen, kovalens rácsok mögött tartják nem igazán kellemes érzelmi, hanem szigorú „fogoly-foglár" érzelmetlen kapcsolatban.

A fentiek további kiterjesztésére feltétlenül megjegyzendő, hogy a „foglár-fogoly", illetve „börtön-rab" kémia nemcsak az előbbiekben ismertetett különböző típusú és alakú karcerandok, molekulakonténerek, molekulakapszulák képződésével és tanulmányozásával foglalkozhat, hanem azzal az egyáltalán nem elhanyagolható kérdéssel is, hogy vajon milyen jellegű „belső kapcsolatok", azaz kémiai reakciók játszódhatnak le a „foglár", a „börtön" molekulák belsejébe bezárt különböző „foglyok" illetve „rabok" között. Helyhiány miatt itt természetesen ezekkel sem foglalkozhatunk.

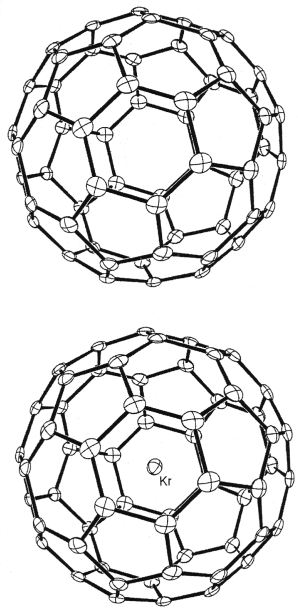
Bár mint már az előzőekben említettük, az aiszkhüloszi értelemben itt említett és leírt vendéglátó molekulák előállításával ebben a dolgozatban nem kívánunk foglalkozni főleg azért, mert ezek szintézise az itt idézett irodalomban bőven megtalálható [5, 10, 20, 21]. Ennek ellenére érezzük úgy, és tényként nagyon érdekesnek véljük, hogy a kémiai értelmezés szerinti Cram-féle karcerandok, illetve börtönök egyikét sem sikerült „üresen", azaz „rabok" vagy „foglyok" nélkül, illetve azok távollétében előállítani. Ennek Cram szerint entalpiás és entrópiás okai vannak [5]. Aiszkhüloszi értelmezésben a jó hír az, hogy az üres börtönök léte lélekmelengetőbb jelenség, mint a rabokkal vagy foglyokkal töltöttek. A rossz hír sajnos azonban az, hogy ilyenek nem léteznek. De mint a megfelelő fentebbi fejezetben leírtuk, léteznek a *hemikarcerandok (5. ábra)* és ezeket talán börtön helyett átjárhatóbb, illetve enyhébb értelmezésben fogházaknak nevezhetnénk. Még mindig a karcerandok, illetve a börtönök körül időzve rendkívül érdekesnek tartjuk Cram erre vonatkozó összegező nézeteit, amiket a legcélszerűbbnek tartunk szó szerint idézni:

„A karceplexek belseje eléggé unikális, egyedi ahhoz, hogy azt az anyag egy új fázisának (a new phase of matter) nevezhessük. Ezek a komplexek körvonalazható belső terű zárt molekuláris cellák, amik megtartják szerkezeti integritásukat szilárd anyagként, oldott szolutumként vagy még rövid életű (DC–MS-sel mért) gázokként is. Vendégei (jelen szerző szerint foglyai) kiszabadulni csak kovalens kötések feltörésével (jelen szerző szerint rácsfűrészeléssel) tudnak. A karceplexek olyan diszkrét molekuláris tulajdonságokkal rendelkeznek, mint molekulatömeg, térfogat, molekulaképlet, kromatográfiás retenciós idő, és kristályszerkezet-vizsgálatoknak is alávethetők. A karceplexek belseje szabad tér és vendég (jelen szerző szerint rab) által elfoglalt tér, és ezek relatív mennyisége megtervezhető. A bebörtönözhető vendégekre (rabokra) vonatkozó korlátozások azok molekulamérete és térfogata. A vendég (rab) molekulatérfogata kevesebb kell legyen, mint a karcerand (börtön) belsejéé. Több mint egy, sőt még egynél többfajta vendég (rab) is lehet egyidejűleg a belső fázisban (börtönben), az egyetlen korlátozás a rendelkezésre álló tér. A vendég (rab) nagymértékben megváltoztathatja a karceplex tulajdonságait. E komplexek oldékonysági tulajdonságai funkciós csoport manipulálással megváltoztathatók. A karceplexek belső fázisai egyedi helyek, ahol reakciók megvalósíthatók" [5]. Érdekességként a karceplexekhez hasonlítható olyan börtön-rab kapcsolatot is megemlítenénk, ahol a börtön-üreg (cavity) nem gömbölyű, hanem a börtönrácsokat hámozott almahéjszerű (apple peel) börtönrács alkotja [22] **(6. ábra)**.

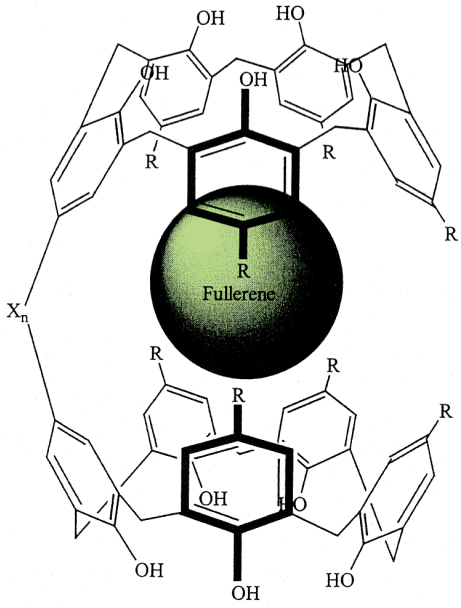
A vendéglátó-vendég, illetve börtön-rab szupramolekuláris kapcsolatok jelentőségét és alkalmazási lehetőségeit a kémiában és a biológiai folyamatok jobb megértésében, modellezésében itt nem kell külön hangsúlyoznunk, elég, ha utalunk a már említett 1987-es kémiai Nobel-díj laudációszövegére. Ellenben szót érdemes és kell ejtenünk a fentiekből kiindult fejlesztésekről. Ezek jobb átlátásához és megértéséhez az újonnan kifejlesztett vegyületek kémiájához, tipológiájához átfogó nómenklatúrát, rendszerezést is kidolgoztak [23]. Már csak a fentebb leírt karcerandokra, illetve molekuláris börtönökre vonatkoztatva a Cram által bevezetett konténermolekulák fogalmát, például könyve [5] címéből követve, a témára vonatkozó szakirodalom számos átfedő szinonim elnevezést, mint molekuláris cellák, molekuláris kapszulák, molekuláris edények és számos mást is használ. És persze átfedően, illetve belefoglalóan tekintetbe kell venni az olyan fogalmakat is, mint például a molekuláris önszervezés (molecular self-assembly) [24] vagy molekuláris önfelismerés (molecular recognition) [25]. Ezáltal is világossá válik, hogy mindazt, amiről a fentiekben beszámoltunk, azaz az ismertetett molekulákat olyan nemkovalens erők, mint hidrogénkötés, fémion-koordinálás, hidrofobicitás, van der Waals-kötések, π-π kölcsönhatások és elektrosztatikus, valamint elektromágneses kölcsönhatások és kapcsolatok irányítják. Nyugodtan mondhatjuk, hogy egy világnyi esemény játszódik vagy ját-



6. ábra. Tojás formájú molekula-rab bebörtönzése két végén szűkülő spirálbörtönbe [22]



7. ábra. Buckminsterfullerén börtönmolekula és endohedrális kripton rab



8. ábra. Buckminsterfullerén börtön bebörtönzése hidazott kalix[5]arén börtönrácsok mögé [29]

szódhat le például azokban a molekuláris konténerekben (például kavitandokban vagy karcerandokban), amelyeket megfelelő körülmények között a kémiai kapcsolatok és mondhatjuk, mégiscsak aiszkhüloszi érzelmek hoznak létre [26].

Fullerénbörtönök és endohedrális fullerén börtön-fogoly kapcsolatok

A továbbiakban ismertetetteket csak azért említjük röviden itt, mert úgy véljük, hogy szervesen kapcsolódnak az előbbiekben vázolt gondolatokhoz. A rövidséget az is indokolja, hogy ezekről más vonatkozásban már más helyen is beszámoltunk [27–29]. Ennek értelmében hivatkozunk itt egy másik eseményre, mely ugyancsak hozzájárult az Aiszkhülosz-érzelmű vendéglátó-vendég kémiai vonatkozások fent említett nevezéktani felhősödéséhez: ez a buckminsterfullerén és oligomerjeinek 1985-ben történt felfedezése volt. Ezek a szén új allotróp módosulatai, melyeknek ugyancsak zárt a felületük, üres gömb alakúak és potenciálisan elég nagy a belső terük ahhoz, hogy atomokat, ionokat vagy kis molekulákat rabként vagy fogolyként börtönszerűen foglyul tudjanak ejteni **(7. ábra)**. A karcerandokhoz viszonyítva, amik, mint már említettük, üres, fogoly nélküli börtönként nem állíthatók elő, a fullerénbörtönök üresen is létrehozhatók, sőt úgy, hogy üres belsejükben vákuum van. Ezek után teljes meglepetésnek nevezhető, hogy a börtön bebörtönzését is megvalósították [30], mint az a **8. ábrán** látható.

Végszó

Befejezésül vissza kell térnünk Pedersen, Cram és Lehn e dolgozatban már említett, 1987-beli kémiai Nobel-díjának indoklására, és azt ki kell egészítenünk szó szerinti idézésben a következőkkel: „A díjazottak kutatásai nagy jelentőségűek a koordinációs kémia, a szerves szintézis, az analitikai kémia és a bioszerves, valamint a bioszervetlen kémia fejlődésére, és ezáltal alapjait képezték a kémián belüli interdiszciplináris területnek, ami jelenleg eljutott oda, hogy vendéglátó-vendég vagy szupramolekuláris kémiának nevezhető" [31]. Úgy véljük, hogy ezeknek a felfedezéseknek és azok továbbfejlesztésének az ebben a dolgozatban bemutatott megközelítése mindennapi emberi érzelmi hangsúlyt ad vagy adhat az azokra vonatkozó kémiai felfedezéseknek. E sorok szerzője azt sem tudja eltitkolni, hogy jelen dolgozat hangulatát jelentős mértékben befolyásolták Eugene Garfield 1986-ban publikált gondolatai [32].

IRODALOM

[1] D. J. Cram, J. M. Cram, *Host-guest chemistry,* Science (1974) 183, 803.

[2] Aeschylus (525-416 B.C.), *The Choephore* (translated by Sir G. Murry) taken from J. Bartlett, Familiar Quotations, *C. Morley and L. D. Everett, Eds*. Garden City, N.Y., ed. 11, 1944, 963.

[3] D. J. Cram, *The design of molecular hosts, guests and their complexes,* Science (1988) 240, 760.

[4] E. P. Kyba, R. C. Helgeson, K. Madan, G. W. Gokel, T. L. Tarnowski, S. S .More, D. J. Cram, *Host-guest complexation. 1. Concept and illustration,* J. Am. Chem. Soc. (1977) 99, 2564.

[5] D. J. Cram, J. M. Cram, *Container molecules and their guests. Monographs in supramoecular chemistry.* Royal Society of Chemistry, London, 1994.

[6] C.J. Pedersen, *Cyclic polyethers and their complexes with metal salts,* J. Am. Chem. Soc. (1967) 89, 2495.

[7] C. J. Pedersen, *Cyclic polyethers and their complexes with metal salts,* J. Am. Chem Soc. (1967) 89, 7017.

[8] B. Dietrich, J.-M. Lehn, J.-P. Sauvage, *Diaza-polyoxamacrocycles et macrobicycles,* Tetrahedron Lett. (1989) 2885.

[9] B. Dietrich, J.-M. Lehn, J.-P. Sauvage, *Les cryptates,* Tetrahedron Lett. (1969) 2889.

[10] J.-M. Lehn, *Supramolecuar chemistry. Scope and perspectives,* J. Incl. Phenomen. (1988) 6, 351.

[11] Ch. J. Pedersen, *The discovery of crown ethers,* Nobel lecture, December 8, 1987.

[12] D.J. Cram, *The design of molecular hosts, guests, and their complexes,* Nobel lecture, 8 December, 1987.

[13] J.-M. Lehn, *Supramolecular chemistry, scope and perspectives. Molecules, supramolecules, and molecular devices,* Nobel lecture, 8 December, 1987.

[14] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry, Cornell University Press,* Ithaca, NY, 1960.

[15] D. J. Cram, T. Kaneda, R. C. Helgeson, S. B. Brown, C. B. Knobler, E. F. Maverick, K. N. Trueblood, *Host-guest complexation. 35. Spherands, the first completely preorganized ligand systems,* J. Am. Chem. Soc. (1985) 107, 3645.

[16] J. R. Moran, S. Karbach, D. J. Cram, *Cavitands: synthetic molecular vessels,* J. Am. Chem. Soc. (1982) 104, 5826.

[17] F. Völgtle, E. L. Böschke (Eds.), *Host-guest chemistry, in Topics in Current Series*, vol. 1–3, Springer, Berlin, 1982–1984.

[18] S. Karbach, Y. H. Kim, L. Baczynskyj, G. W. Kallemeyn, *Shell closure of two cavitands forms carcerand complexes with components of the medium as permanent guests*, J. Am. Chem. Soc. (1985), 107, 2575.

[19] B. C. Gibb, *Carcerands and Hemicarcerands,* in *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry.* Eds. Atwood, J. W Steed, J. Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004, 189.

[20] J. Atwood, J. W. Steed (Eds.,), *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry,* Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.

[21] J. A. Bryant, M. T. Blanda, M. Vincenti, D. J. Cram, *Host-guest complexation. 55. Guest capture during shell closure*, J. Am. Chem. Soc. (1991) 113, 2167.

[22] J. Garric, J-M. Léger, I. Huc, Molecular Apple Peels, Angew. Chem. Int. Ed. (2005) 44, 1954.

[23] E. Weber, *Classification and Nomenclature of Supramolecular Compounds*, in J. Atwood, J. W. Steed (Eds.,) *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.

[24] https://en.wikipedia.org/wiki/Self-assembly

[25] https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_recognition

[26] R.J. Hooley, J. Rebek Jr., *Chemistry and catalysis in functional cavitands, Chem Biol.,* (2009) 16, 255.

[27] Braun Tibor, *A fullerénkalitkák belvilága és az endohedrális X@C_{2n} vegyületek fizikai kémiája,* Magy. Kém. Lapja (1995) 50, 369.

[28] Braun Tibor, *A káprázatos C_{60} molekula,* Akadémiai Kiadó, Budapest, 1996.

[29] T. Braun Ed., *Advances in fullerene science*, vol. 1–6, *Kluwer Academic Publishers*, Dordrecht, Boston, London, 2000–2007.

[30] C. L. Ralston, *Complexation of fullerenes*, in J. Atwood, J. W. Steed (Eds.,) *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.

[31] Royal Swedish Academy of Sciences. *Awarded for syntheses of molcules that mimic important biological processes.* 14 October 1987 (*Press release*)

[32] E. Garfield, *Further reflections on the poetry-science connection,* Current Contents (1986) 7, 3.



Kápolnai Zsombor[1] – Vidéki Imre[2]

[1] ELTE Földtudományi Doktori Iskola | kapolnaizsombor@gmail.com

[2] ELTE Társadalom- és Gazdaságföldrajzi Tanszék | videkiimre@caesar.elte.hu

A gyógyszeripar kutatás-fejlesztésben vezető vállalatainak feldolgozóiparon belüli jelentősége

Vizsgálatunk arra irányul, hogy a szakemberek által csúcstechnológiai ágazatnak minősített szektor kutatás-fejlesztési ráfordításait egy megbízható adathalmazból kigyűjtsük, a meghatározó vállalatok kiadásait székhely szerint aggregáljuk és szemléltetés céljából térképen ábrázoljuk. Így érzékelhető a gyógyszeripar fontossága és részesedése a feldolgozóipari K+F fejlesztésekből, és részben lehetővé válik egyes települések kutatásban betöltött szerepének megítélése. Írásunkban a továbbiakban gyógyszeripar alatt a gyógyszer- és biotechnológiai ipart értjük.

Az adatok forrása

Az EU, az OECD és az IBRD szokott kutatás-fejlesztéssel foglalkozó – országokra vonatkozó – adatokat gyűjteni, statisztikákat kibocsátani. Az EU emellett a K+F-re legtöbbet költő 1000 unióbeli – illetve más országokkal együtt 2000 (2013-ban 2500) – vállalat rangsorát is közreadja 2004 óta, az iparági besorolással együtt. Munkánkban az EU Industrial R+D Investment Scoreboard legutolsó kiadványának [1] adatait használtuk.

Ez, ha nem is teljes körű, de megbízható összehasonlítást tesz lehetővé a vállalatok és a feldolgozóipar ágazatai között. A felmérésben szereplő vállalatok az ipari kutatás-fejlesztési ráfordítások kb. 90%-át teszik ki.

Az egyik évről a másikra kialakult rangsor jelentősen változhat, mivel gyakran fordul elő a vállalatok összeolvadása, felvásárlása, ritkábban pedig szétválása.

A kutatás-fejlesztés jelentősége

Azok az országok vagy vállalkozások, amelyek élen járnak ebben a tevékenységben, általában a Föld fejlettebb és hasznuk révén a gazdagabb részéhez tartoznak. A kutatás-fejlesztés eredményeképpen magasabb hozzáadott értéket képesek elérni és versenyképesebbnek bizonyulnak másoknál. A hozzáadott érték fedezi a munkavállalók bérét, a vállalkozók hasznát, a beruházásokat és magát a kutatást-fejlesztést is.

Ahhoz, hogy az EU tagjainak versenyképessége ne maradjon el a világgazdasági központokétól (USA és Japán), a K+F-re fordított kiadások növelése alapvető fontosságú. Az Unió lisszaboni célkitűzése szerint 2010-re a K+F GDP-hez viszonyított arányának 3%-ra kellett volna emelkednie. Ez nem teljesült, a 28 tagországból csak néhányban haladja meg a 3%-os értéket (Finn-, Svédország, Dánia). Az európai gazdaság vezető államában, Németországban 2,84%, míg Franciaországban 2,25%. Ugyanakkor tíz országé nem éri el az 1%-ot sem! A 2004-ben csatlakozott országokat tekintve Szlovénia és Észtország kiemelkedik, 2011-ben elért 2,47%-os és 2,38%-os értékével [2]. Rajtuk kívül Csehország (1,84%) és hazánk (2012-ben 1,3%) mutatója haladja meg az 1%-ot.

2011-ben az EU tagállamaiban a GDP-ből a kutatás-fejlesztésre fordított arány 2,03% volt, jóval alacsonyabb Japán (3,36%) és az USA (2,87%) értékénél.

Más oldalról közelítve: a közösségen belül a K+F-re fordított kiadások összege 2011-ben 257 milliárd euró volt, jelentősen (42%-kal) meghaladva a 10 évvel korábbi értéket. Ez az USA által K+F-re fordított összegnek kb. a 7/8-a, viszont 1,8-szor több, mint amennyit Japán fordított kutatás-fejlesztésre.

A GDP-ből a kutatásra-fejlesztésre fordított hányad az EU 2020-ig tartó elképzeléseiben az öt kulcsmutató közül az egyik.

A társadalom különböző tevékenységeiben a kutatás-fejlesztés fontossága eltérő módon jelenik meg. Vannak kifejezetten magas kutatás-fejlesztési igényű (az értékesítés legalább 5%-a) tevékenységek, vannak azonban olyanok, amelyekben kisebb (1% vagy az alatti) a kutatás-fejlesztésre fordított összeg. Ezt az összeget a gyógyszergyártásban az éves nettó értékesítéshez szokták viszonyítani. Ezt K+F intenzitásnak nevezik.

A feldolgozóiparban a leginkább kutatás-fejlesztés igényes ágazatok: a gyógyszer- és biotechnológiai ipar, a számítógép-, az elektronikai és optikaitermék-, valamint a légi- és űrjárműgyártás. Ezek egyúttal a csúcstechnológia (high tech) megvalósítói.

Európában a csúcstechnológiai ágazatok közül a gyógyszeripar rendelkezik a legnagyobb kutatási intenzitással, a legmagasabb egy főre jutó hozzáadottértéktermeléssel és nem utolsó sorban a legjelentősebb külkereskedelmi aktívummal.

A gyógyszeripar megítélése és néhány jellemzője

Fentiek miatt a világgazdaság erőközpontjai – így az EU is – különös figyelmet fordítanak az ágazatra. Ráadásul a népesség



korösszetételéből adódóan az elöregedő népesség egészségi állapota fokozott kihívást jelent a tagországok többsége számára.

Az előrejelzések szerint 2050-re a 65 évesnél idősebb lakosság a maihoz képest várhatóan háromnegyed résszel fog növekedni. Amennyiben a megnövekedett létszám képtelen, vagy korlátozott mértékben képes dolgozni, az veszélyezteti az egészségügyi és a nyugdíjellátó rendszert. A bármilyen mértékű egészségkárosodás, annak megelőzésére, enyhítésére igénybe vett eszközök, szolgáltatások ugyancsak terhet rónak az említett rendszerekre. Fontos felhívni a figyelmet arra, hogy a tagországokban nagy különbségek vannak például a gyógyszerekhez való hozzáférés lehetőségében is. Az Európai Gazdasági és Szociális Bizottság éppen ilyen okok miatt szorgalmazta tavaly a gyógyszeripar szerkezetváltását [3].

A fejlődő országokban egészen más kérdések kerülnek előtérbe. A népességnövekedés lassítása mellett a fertőző megbetegedések megakadályozása vagy visszaszorítása jelent komoly feladatot az ágazat számára.

A meghatározó fontosságú ágazatként való kezelés indoka, hogy az EU és az USA feldolgozóiparában kb. egy évtizede eltérő prioritás észlelhető. Míg az EU-ban a közepes-magas fejlettségű technológiát alkalmazó ágazatok fejlesztése került előtérbe – különösen a közúti járműgyártás –, az USA-ban a fejlett technológiát igénylők – az IKT-eszközök gyártása, a gyógyszeripari tevékenységek. Az EU-ban 2013-ban a kutatás-fejlesztési kiadások fele autóipari fejlesztéseket szolgált, egy évtizede csupán a negyede. Az USA-ban viszont az IKT ágazatba jutott a kutatás-fejlesztési pénzek 63%-a, a korábbi 45%-kal szemben.

A csúcstechnológiai tevékenységekben az EU a gyógyszergyártás kivételével lemaradásban van az USA-tól. Különösen szembetűnő ez a biotechnológiai iparban, ahol a kutatásban élenjáró vállalatok száma az ötöde, az általuk K+F-re költött összeg pedig a tizede az USA-val összehasonlítva [1].

Az elmaradás hosszabb távon is megfigyelhető: ha az EU által biotechnológiai kutatásra fordított pénzt összehasonlítjuk a 2005 és 2012 közötti időszakra vonatkozóan az USA-kiadásokkal, azt tapasztaljuk, hogy az csupán a töredékét éri el: 6,7–8,7% között mozog. A gyógyszeripari kutatás-fejlesztésre fordított hányad már jóval magasabb: az USA-beli 78–90%-a.

A gyógyszeripar jellemzői között megemlíthető a magas K+F ráfordítás mellett a tőkeigényesség: egy új gyógyszer kifejlesztése napjainkban 1,1 milliárd euróra tehető. Jelentős a kockázatvállalás is, mivel egy originális gyógyszer fejlesztése, gyógyszerként való törzskönyvezése, bevezetése 10–15 évig is eltarthat, számos preklinikai, klinikai fázison kell sikeresen megfelelnie [4]. A tapasztalatok szerint 10 000 molekulából 1–2 válik később gyógyszerré.

A kockázat csökkentése, az óriási tőkeigény, a piacszerzés magyarázatul szolgál arra, hogy miért jellemző a jelentős K+F-fel rendelkező gyógyszer- vagy biotechnológiai vállalatok felvásárlása, egyesülése.

A gyógyszeripar jelentősége a gazdaságban

2010-ben az európai uniós gyógyszergyártás 4 ezer vállalata 85,9 milliárd euró hozzáadott értéket termelt. A feldolgozóiparból való részesedése azt mutatja, hogy az alkalmazottak 1,8%-a a hozzáadott érték 5,4%-át állította elő [5].

A vállalkozásokat tekintve jellemző a kevés, ám tőkeerős nagyvállalkozás. Az ágazat két alágazatra bontható: a gyógyszerek, illetve a hatóanyagok előállítására. Mind a foglalkoztatott létszám, mind a hozzáadott érték termelésében a gyógyszergyártás sokkal jelentősebb, mint a hatóanyag készítése.

Az EU–27 gyógyszeripari hozzáadott értékének előállításában a legnagyobb szelet Németországnak jutott (18%), majd Írország (15%), az Egyesült Királyság (12,4%), Franciaország és Olaszország (10–10%) következett. Írország feltűnő adata erős specializációra utal. Az ír hozzáadott értéknek (a nem pénzügyi üzleti ágazatokat tekintve) a 15,8%-át a gyógyszergyártás adta. A tagországok közül Szlovénia 3,6%-kal követi. Az unión kívüli Svájcnak ez a mutatója 5,4%.

Az európai gyógyszergyártásban 2012-ben 690 ezer fő dolgozott [6]. Ez az adat magában foglalja az EU-tagokon kívül – többek között – a Svájcban és Törökországban foglalkoztatottak számát is.

Az USA-ban a gyógyszeripart sikerágazatnak tekintik. 810 ezer főre teszik az ágazatban közvetlenül foglalkoztatottak számát, míg 3,4 millió fő közvetett módon függ az ágazat teljesítményétől. Az ágazat vonzó a munkavállalók számára: az ott dolgozók keresete évente közel 110 ezer USD volt, szemben az átlagos 54 ezerrel [7]. Az USA-ban kiemelik az ágazat gazdasági hasznát is, például a szív- és érrendszeri megbetegedésekre használt orvosságok a számítások szerint 2011-ben 89 ezer fő korai halálát előzték meg, ami 5,8 milliárd USD megtakarításával járt.

Számottevő a gyógyszeripari hozzáadott érték multiplikátor hatása is: hazánkban 1,66 [8], az USA-ban 1,40 [9].

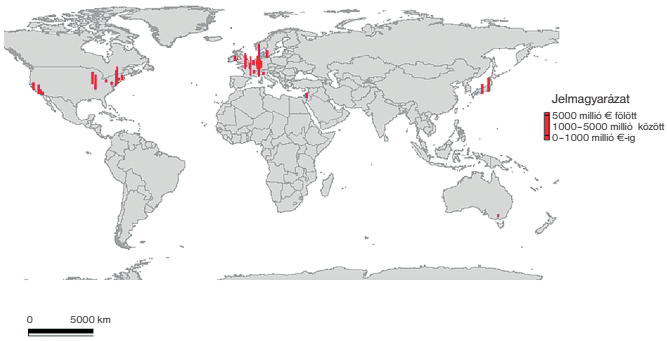
A gyógyszergyártásban, valamint a tőle nehezen elválasztható biotechnológiai iparban a termeléshez tercier tevékenységek sora kapcsolódik (megelőzik a termelést, beépülnek abba vagy utólag nélkülözhetetlenek), amelyek a (profit) nyereségképződés, továbbá a versenyképesség zálogai. A szolgáltatásokkal való kapcsolat nem csupán a csomagolásban, az elosztásban, a promócióban, a tájékoztatásban testesül meg. A termelő- és a szolgáltatótevékenységek egymásra utaltsága, összekapcsolódása olyan mértékű, hogy hovatovább nincs értelme az ipar és a szolgáltatás megkülönböztetésnek. (Az angolban erre a szerteágazó kapcsolatrendszerre több kifejezést is használnak: servisification of manufacturing, servicizing, manuservice.)

A sok szálon való kapcsolódásnak kiemelkedő a terület fejlődésére gyakorolt hatása. Jól példázza ezt, hogy az Észak-Karolina állambeli Research Triangle Park körzetében, például Durhamben a foglalkoztatottak 30%-a az egészségügyi vagy az élettudományi jellegű vállalkozásokban dolgozik. (Egyebek mellett a BASF, a Bayer, a Syngenta, a Monsanto rendelkezik ott gyártó- vagy kutatóegységgel.) Nem véletlen a város „city of medicine" elnevezése. Ugyanebben az államban, Wake megyében a 25 évesnél idősebb népesség fele felsőfokú végzettséggel rendelkezik.

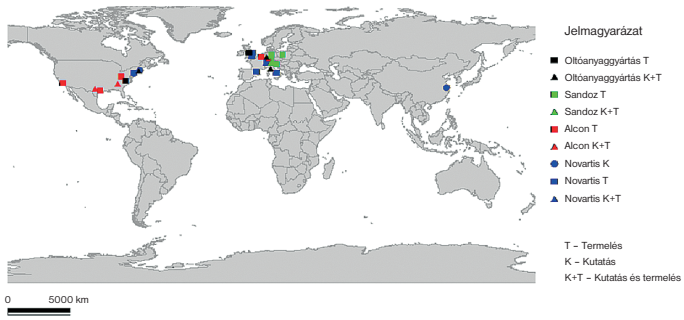
A vizsgálat eredményeinek térképi megjelenítése

Az **1. ábrán** – a 2500 cégből – annak az ötven gyógyszeripari vállalatnak a székhelyét tüntettük fel pontszerűen, amelyek 2013-ban a legtöbbet költötték kutatás-fejlesztésre. Ahol több vállalat központja található, ott összevontuk a ráfordításokat. A K+F kiadások konkrét telephelyekre lebontva jóval több és pontosabb információt hordoznának. A vállalatok adatközlése sajnos erre többnyire nem ad lehetőséget. A térképi ábrázolás azonban a koncentráció bemutatására alkalmas. Kirajzolódnak a legfontosabb országok, a legjelentősebb centrumok.

A legtöbb (21 vállalat) székhelye az USA-ban található. Kiemelkedő New York (3) és a keleti part államai (pl. New Jersey (4), Massachuetts (2), továbbá Illinois (3), Indianapolis), illetve a nyugati parton Kali-



1. ábra. A K+F-re legtöbbet költő gyógyszeripari vállalatok székhely szerinti kiadásai, 2013 (The 2014 EU Industrial R+D Investment Scoreboard [1] adatai alapján saját szerkesztés)



2. ábra. A Novartis-csoport fontosabb kutatási és termelési központjai, 2013 ([10] adatai apján saját szerkesztés)

fornia (5) jelentősége. Japánból 7 vállalat található az első ötvenben, Tokióban (4), míg Oszakában (3). Európában (20 vállalat) az első ötvenben lévő cég kutatási-fejlesztési ráfordítását 100-nak véve a svájci (3) vállalatok költik a legtöbbet, részesedésük 37%. Fontosságukat jelzi, hogy a listán szereplő cégek között az első két helyen svájci vállalkozások állnak. Székhelyük: Bázel. Németországban (4) székhely alapján nem lehet koncentrációt kimutatni. A központok a Rajna–Neckar-vidéken és a déli országrészben – Bajorország – sűrűsödnek. Franciaországban (4) Párizs és tágabb környéke (Ile de France), továbbá Lyon koncentrálja a K+F-re legtöbbet áldozó cégeket. Az Egyesült Királyságban (2) Brentford és London, Írországban (2) Dublin, Dániában (3) ugyancsak a főváros (vagy annak közvetlen környéke) szolgál központként.

A gazdasági erőközpontokon kívül csupán két ország vállalatai kerültek be az 50 legjelentősebb közé. A hazai K+F éllovasa, a Richter Gedeon az 58. helyen áll ebben a rangsorban.

Az *1. ábrán* szereplő vállalatok multinacionális cégek. A legjelentősebbek 100 ezer főnél is több munkavállalót foglalkoztatnak, tucatnyi kutatási-fejlesztési, valamint termelési telephellyel rendelkeznek. Sok esetben több központból irányítják tevékenységeiket. A Novartis-csoportnak Bázelben van a székhelye, ám például egyik tagjának, a szembetegségek gyógyszereinek és a szemüveglencse gyártására szakosodott Alconnak Fort Worthban, az oltóanyag-részlegnek pedig ugyancsak az USA-beli Cambridge-ben, az elsősorban generikus gyógyszergyártást folytató Sandoznak a németországi Holzkirchenben van a központja.

A **2. ábrán** a Novartis-csoport főbb kutatási és termelési egységeit tüntettük fel. A vállalat 2013-ban a K+F kiadásokban a gyógyszergyártók között az első volt. Az ábrán jól érzékelhető a szerteágazó tevékenységi kör, valamint a Föld számos országában való jelenlét.

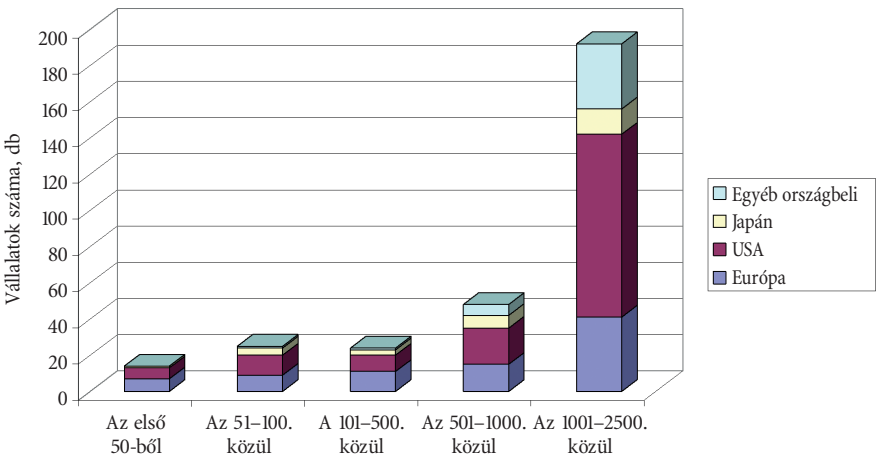
Megjegyzésre érdemes: ha a vállalatokat az értékesítés nagysága szerint vagy a foglalkoztatottak száma alapján rangsorolnánk, az az *1. ábrán* ábrázolttól eltérő képet mutatna. Vannak olyan nagyvállalkozások, amelyek több vegyipari üzletágban is meghatározóak. Ilyen például a Bayer, amely a gyógyszer- és biotechnológiai iparon kívül a növényvédelemben és az anyagtudományokban is fontos szerepet játszik, vagy a Johnson és Johnson, amely az egészségügyi technológiai berendezések, kellékek előállításában is számottevő bevétellel rendelkezik.

A **3. ábra** mutatja be, hogy hány gyógyszeripari vállalat található a K+F-re legtöbbet költő cégek között, valamint tájékoztat országonkénti megoszlásukról. Megállapítható a gyógyszeripar viszonylag nagy jelentősége: az összes – 2500 – vállalat 12,1%-a ebben az ágazatban tevékenykedik. A területi koncentráció ugyancsak nagymértékű, a vállalatok harmada USA-beli székhelyű, közel 85%-a pedig a világgazdaság vezető centrumaiban található. Az összes többi ország a cégek alig 15%-ának szolgál székhelyéül. Feltűnő Oroszország hiánya vagy Kína szerény jelentősége. Utóbbinak csupán az 1001–2500. közötti kategóriában szerepelnek vállalatai. Ez a tény – bár feltehetően csak rövid ideig lesz igaz – igazolni látszik azt, hogy Kína egyelőre a tömegtermelésben és nem a csúcstechnológiai ágazatokban játszik fontos szerepet.

Indiát tekintve megemlítendő, hogy bár napjainkban vállalatai nem tartoznak a meghatározó gyógyszergyártók közé (az 501–1000. közötti kategóriában 3 cége szerepel), a 600 km² kiterjedésű Genome-Valley Hyderabad közelében már ma is nagy jelentőségű térség a biotechnológiai kutatásokban.

Összegzésképpen megállapítható, hogy a feldolgozóipari ágazatok között a gyógyszeripar rendelkezik a legmagasabb kutatási intenzitással (14,4%), a 2500 vállalat kutatás-fejlesztési kiadásaiból pedig a legmagasabb részesedésű (18%). Ez 2013-ban kereken 97 milliárd eurót jelentett.

3. ábra. A gyógyszeripari vállalatok száma a K+F-re legtöbbet költő 2500 vállalatból és megoszlásuk, 2013 (The 2014 EU Industrial R+D Investment Scoreboard adatai [1] alapján saját szerkesztés)





Az USA és az EU gyógyszer- és biotechnológiai iparának K+F kiadásait összehasonlítva szembetűnő, hogy előbbi jelentősen többet fordít ilyen célú kutatásokra. Az EU különösen a biotechnológiai ágazatban van lemaradva versenytársától.

Az ágazat jövőképe biztató, hiszen a népesség korszerkezetében bekövetkezett és jelenleg is érvényesülő tendenciák, az egészségi állapot megőrzésére vagy helyreállítására fordított kiadások növekedése, az új betegségek megjelenése jelentős elvárásokat támaszt a gyógyszeriparral szemben.

IRODALOM
[1] The 2014 EU Industrial R+D Investment Scoreboard EU, 2014. ISBN 978-92-79-43861-5
[2] Science, technology and innovation in Europe 2013 edition, Eurostat pocketbooks, Eurostat, European Commission, 2013.
[3] Európai Gazdasági és Szociális Bizottság: Ipari szerkezetváltás az európai gyógyszeripari ágazatban, Brüsszel, 2014. április 29. CCMI/119 gyógyszeripar
[4] Vidéki Imre: A hazai gyógyszeripar gazdaságföldrajzi bemutatása. In: Nyári D. (szerk.): VI. Magyar Földrajzi Konferencia, Szeged, 2012. szeptember 5–7., Tanulmánykötet, 1000–1010.
[5] Eurostat: Business Economy by Sector, Manufacture of Pharmaceutical Statistics, Nace Rev. 2. 2013. http://ec.europa.eu/eurostat/statistics-explained/index.php/Manufacture_of_pharmaceuticals_statistics_-_NACE_Rev._2
[6] EFPIA: The Pharmaceutical Industry in Figures, 2014. Brüsszel, p. 28
European Federation of Pharmaceutical Industries and Associations
[7] PhRMA (Pharmaceutical Research and Manufacturers of America) 2014 profile of pharmaceutical industry, Washington, 2014.
[8] Sipos Júlia, Cseh András: A Magyarországon termelőkapacitással rendelkező gyógyszergyárak (Richter Gedeon NyRT., Egis NyRT., Teva, Sanofi-csoport) szerepe a magyar gazdaságban, Magyar Kémikusok Lapja, 2014. május, 139–143.
[9] PhRMA (Pharmaceutical Research and Manufacturers of America) 2012 profile of pharmaceutical industry, Washington, 2012.
[10] www.novartis.com



Ipari és kulturális örökség

A MOM Kulturális Központ

Amikor a nyolcvanas években mikulásünnepségre jártunk a MOM-kultúrházba, nem gondoltam, hogy az épületet hamarosan műemlékké nyilvánítják, azt pedig végképp nem, hogy a Magyar Optikai Művek még a századforduló előtt – szinte szó szerint – porrá lesz.

A gazdasági-társadalmi szerkezetváltás miatt – nem csak Kelet-Európában – számos üzem néptelenedett el. Szerencsés esetben a kiürült gyárépületeket újra felhasználják, például kulturális térré alakítják át. Jó példa erre Helsinki régi kábelgyára vagy Budapesten a Ganz-telepi Millenáris.

A korábbi szocialista országokban eleve épültek kultúrházak a nagy gyárak szomszédságában. Ezek részben megmaradtak – néha olyankor is, amikor a gyárakat bezárták –, és kulturális funkciójukat is megőrizhették. Megkockáztatjuk, hogy nemcsak a kulturális, hanem az ipari örökségnek is részét képezik – különösen akkor, ha elfogadjuk azt a definíciót, amely az ipari örökség fogalmához társítja az iparhoz kapcsolódó társas tevékenységek helyszíneit is. [1] A nevezetes „gyári” kultúrotthonok közé tartozik, többek között, a Fővárosi Művelődési Ház és – mai nevén – a MOM Kulturális Központ.

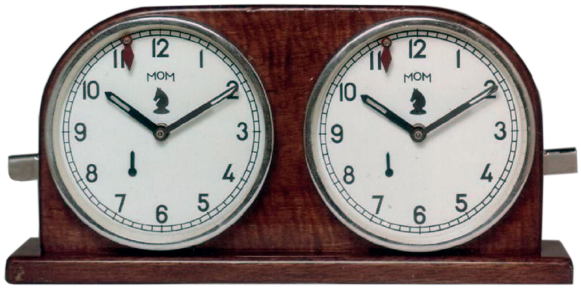
Mikor és miért keletkeztek ezek az épületek? A kultúrházak történetének magyarországi kezdeteit 1949-re teszik. A művelődési otthonok létesítése a szovjet példán kívül hazai hagyományokra is támaszkodott. Ezek pedig az úri kaszinóban gyökereztek: „… ez az intézmény volt a példája a legkülönfélébb más köröknek, társasági és művelődési egyesületeknek, gazdaköröknek, iparos köröknek, olvasóköröknek stb. Számuk rohamosan szaporodott, a múlt [19.] század végére már behálózták az egész országot.” [2]

A következő néhány idézet a kultúrház-alapítás körülményeit érzékelteti. 1950. június 21-én az MDP KV[1] Titkársága javaslatot fogadott el „kultúrotthonok hálózatának kifejlesztésére”, és határozatot hozott, hogy „kiindulópontként az év végéig 50 üzemi és 300 falusi és városi kultúrotthon létesítendő.” [3] A határozat végrehajtásáról a Politikai Bizottságnak (PB) tettek jelentést a következő tavaszon, és a PB megállapította, hogy „pozitív, egészséges, az egész szocialista építésnek használó mozgalom a kultúrotthon-mozgalom… A szakszervezetek gondoskodjanak róla, hogy az üzemi kultúrházakban klubok alakuljanak és a munkásság nagyobb számban látogassa ezeket.” [4] Egy 1952-es jegyzőkönyv szerint a PB „a szovjet vállalatok kultúrotthonainak fejlesztésére fordítandó 14 millió forint beruházási összeget jóváhagyja”. [5]

Miért támogatott az MDP „szovjet vállalatok”-at? A második világháború után, a potsdami egyezmény értelmében, szovjet tulajdonba ment át a magyarországi német vagyon. Mivel számos gyár részvénytársasági formában működött, jelentős német érdekeltséggel, 1946-ban a német részvények is szovjet kézbe kerültek. Magyarországon kb. 400 gyár vált részben vagy teljesen szovjet tulajdonná. [6] Közéjük tartozott a Magyar Optikai Művek Rt. is.

A Magyar Optikai Művek (MOM) története a 19. század utolsó negyedében kezdődött. A kolozsvári egyetem új „gépészállomásá”-nak vezetésével a marburgi Ferdinand Süsst bízták meg. Alkalmazása mellett máig ismerősen hangzó érveket hozott fel Brassai Sámuel, az egyetem dékánja: „Nem állítjuk, hogy az egyetemi mechanikus ezentúl minden physikai, vegytani, élettani stb. apparátusát fogja az egyetemnek elkészíteni, de azért a javításokon kívül sok újat is fog jutányos áron kiállítani műhelyéből és így különböző helybéli iparosnak (úm. asztalosnak, sárgaréz-öntőnek stb.) foglalkozást adni.” [7] Ferdinand Süss néhány év múlva Baross Gábor kérésére Budapesten állított fel mechanikai tanműhelyt. A Mozsár, majd Alkotás utcai műhely bérmunkát is vállalt. [8] Geodéziai, erdészeti, bányászati, tengerészeti műszereket

[1] Magyar Dolgozók Pártja Központi Vezetősége.





MOM-órák (retronom.hu, **[14]**)



Teodolit [14]



„Derivatograph"
(anyagmérnok.hu)

gyártottak; egészen az 1940-es évekig ők készítették, állandóan továbbfejlesztve, Eötvös Loránd torziós ingáját. A tanműhely állami támogatása 1900-ban megszűnt, és létrejött Süss Nándor magánvállalata, ahol folytatódott a mechanikusképzés. Az Alkotás utcában is megindult azonban a villamosforgalom, ami nem kedvezett a precíziós berendezések készítésének. A gyár 1905-ben még távolabb költözött a várostól, a Csörsz utcába. 1918-ban részvénytársasággá alakult át, és néhány év múlva megvette a Goerz cégtől az optikai üvegcsiszolás licencét; 1939-től nevezték Magyar Optikai Művek Rt.-nek. [9] A prosperáló vállalatot a két világháború között újabb üzemekkel bővítették: „… az épületegyüttes Magyarország legszebb, legkorszerűbb ipari épülete volt." [10] A MOM 1930-ban már jelentős katonai megrendeléseknek tett eleget (a hadiipar számára is finommechanikai-optikai műszereket gyártott). A részvények egyik fele a Honvédelmi Minisztérium, a másik a Zeiss és a Goerz cég tulajdonába került. 1944-ben a gyár gépparkjának és felszerelésének nagyobbik felét nyugatra vitték, az ostrom alatt az épületek fele romba dőlt vagy megsérült. [8, 11] 1946-ban a német részvényeket a Szovjetunió kapta meg. [9, 11]

A háború után – szovjet irányítással – újraindult a munka.[2] A gyár 1952-ben került vissza a magyar állam tulajdonába. A következő évtizedekben továbbfejlesztették a finommechanikai-optikai gyártmányokat, és új, sikeres termékeket – többek között laboratóriumi berendezéseket, számítástechnikai kiegészítőket – is készítettek.[3] A fejlődés az 1980-as évek közepéig tartott. 1989-ben a budapesti és a (hatvanas években létesült) vidéki gyárakból önálló rt.-ket és kft.-ket hoztak létre; némelyiket a 90-es években értékesítették. A Magyar Optikai Művek 1998-ban jogutód nélkül megszűnt. [9] A budapesti telephelyet – egyetlen üzemi épület kivételével[4] – lebontották.

A gyár emlékét a MOM Emlékalapítvány igyekszik életben tartani. [14] A gyártelep helyére, környékére irodaház, bevásárlóközpont, sportközpont és lakópark épült. A Csörsz utca és a Nagy Jenő (Sirály) utca sarkán azonban megmaradt a kultúrház, amelyet még 1992-ben műemléknek nyilvánítottak. Építését a második szovjet igazgató, Konsztantyin Szmirnov rendelte el 1950-ben. Az Állami Ellenőrzési Központhoz intézett levele szerint a létesítmény a „Podjomnyik [Szovjet Állami Gépipari Rt.] és a felettes szovjet hatóságok »nagylelkű elhatározásából« épül … 3,3 millió forintért." [15]

A kultúrházat ifj. Dávid Károly (1903–1973) tervezte, aki az 1930-as évek elején Le Corbusier irodájában töltött majdnem egy évet. Két munkáját szinte mindenki ismeri. Az egyik a (ma már szintén műemlék) Ferihegy 1. terminál, amelynek építése az 1930-as évek végén kezdődött, de a repülőteret – a háború miatt – csak 1950 májusában adták át. A másik a Népstadion (Puskás Ferenc Stadion). Dávid Károly 1950-ben három kultúrházat is tervezett. [16] Az egyik a Hazai Fésűsfonó és Szövőgyár kultúrháza, amelyben ma irodák vannak. A gyár többé-kevésbé romos épületeinek egyikébe viszont beköltözött a kultúra; itt működik a Bakelit Multi Art Center. A Fésűsfonó kultúrházára nagyon hasonlít a Pamuttextilműveké, amelyet 1950. december 21-én – Sztálin 71. születésnapján – adtak át a gyár dolgozóinak. [17] Ez a kultúrotthon az 1960-as évek elején Fővárosi Művelődési Házzá (FMH) alakult át; az idők folyamán legendás kulturális központ lett (itt működött például az Illés Klub). A

A Hazai Fésűsfonó és Szövőgyár kultúrháza az 1950-es években [18]



[2] A szovjet–magyar vegyes vállalatokban az elnök magyar, de a hatalmat gyakorló vezérigazgató szovjet volt. [12] 1952-től a magyar kormány fokozatosan visszavásárolta a „szovjetizált" vállalatokat, amelyek árát, több éven át, pénzben és áruban kellett kiegyenlíteni. [13]

[3] A gyár ismertségére – és a korra – jellemző, hogy a MOM-ot centenáriuma alkalmából táviratban köszöntötte Alekszandr Nyeszmejanov, a Szovjet Tudományos Akadémia korábbi elnöke, az Elemorganikus Vegyületek Intézetének igazgatója (Fókusz, 1976. szeptember 27.).

[4] Homlokzatát átalakították, két szinttel megemelték; ma ez a Fotex Plaza. [10]



A MOM Kulturális Központ napjainkban

60 éves épületet néhány éve lebontották, és 60 lépésnyire újat építettek helyette.

A három közül a legrangosabb épület, a MOM-kultúrház, 1951-re készült el. Dávid Károly mindhárom kultúrháza L alaprajzú. Az „L egyik szárába" kerültek a klubok, a másikba a színház. A két szárnyat a MOM-kultúrház esetében henger alakú elem kapcsolja össze. [16] A MOM-kultúrház és Ferihegy 1 forgalmi épülete között több hasonlóság is felfedezhető, például mindkettőnek jellegzetes az alaprajza – a terminálé repülőt formáz. [15]



A Szabad Nép korabeli tudósítása szerint „a korszerűen, kényelmesen berendezett színház- és moziterem 800 látogatónak biztosít kellemes estéket. Az emeleti könyvtárban szépirodalmi és tudományos könyvek ezrei, a süppedő szőnyegekkel borított olvasóterem, vagy a különböző játéktermek, tanácskozóhelyiségek várják a vendégeket." [19] A klubszárny beosztása is utalt a mozgalmi és a művelődési funkciókra. A földszinten kapott helyet például az úttörő- és a szakszervezeti szoba, a Magyar Nők Demokratikus Szövetségének irodája; az emeleten a játék-, a sakk-, a sportszoba, a könyvtár, a fotólabor. [15] Az időközben Szakasits Árpádról elnevezett intézmény programjai szintén tükrözték a kettős törekvést: „Az 50–60-as években az igényeknek megfelelően hivatalos színházi együttesek tartottak előadásokat. Manapság is [1976] él ez a szép hagyomány … Olyan tömeggyűléseknek is gyakran adott helyet kultúrpalotánk, amelyeknek szónokai a hazai, illetve a nemzetközi politika jelentős személyiségei voltak." [19] A bizományi áruház művészeti aukcióit hosszú évekig a MOM-kultúrházban rendezték meg. A dolgozók képzését szolgálta például a jellegzetes nevű Munkásakadémia, Nők Akadémiája, Társadalompolitikai Akadémia (ahol arról tartottak először előadást – 1976 novemberében –, hogy milyen szerepet töltenek be a műholdak a világrészek közötti információcserében). A kultúrház vezetésének fontos volt a fiatalok bevonása: 1976-ban hetente játszott a Beatrice (ekkor még nem érkezett el a kemény rockhoz), később itt alakult meg a Hobo Blues Band első klubja.

Miért vált műemlékké a MOM-kultúrház? Az épület határhelyzetben született. A szocreál stílust 1951 őszén – a kultúrház befejezése idején – kiáltották ki egyeduralkodóvá. Az „emberről való gondoskodás" elvét követő építészetet klasszicista formákkal kellett megalkotni. A MOM Kultúrház átmenet a modern és a szocreál között. Az ideológiai változásra elsősorban a kupola utal, amely a munkásművelődés színterére hívja fel a figyelmet. A letisztult formák azonban a modernizmushoz kötik az épületet – amely tehát történeti okokból és kvalitásai miatt lett műemlék [15], de ipartörténeti emlékként is érdemes számon tartanunk. 2011-ben felújították: a város egyre népszerűbb kulturális központja.

Silberer Vera

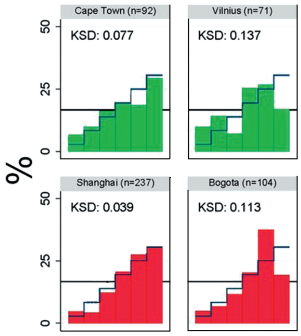
A MOM-kultúrház előcsarnoka, archív felvétel [20]



IRODALOM
[1] Albrecht, H., Walther, D., SHIFT-X: Industrial heritage as a promoter of sustainable economic development. Industrial Patrimony (2013) 29, 12.
[2] Kovalcsik J., A kultúra csarnokai, I. Művelődéskutató Intézet, Budapest, 1986. 13–19.
[3] Az MDP KV Titkárság 1950. június 21-i ülésének jegyzőkönyve (Magyar Országos Levéltár, 276 f. 54. cs. 105. ő. e.)
[4] Az MDP Politikai Bizottsága 1951. április 19-i ülésének jegyzőkönyve (Magyar Országos Levéltár, 276 f. 53. cs. 72. ő. e.)
[5] Az MDP Politikai Bizottsága 1952. január 16-i ülésének jegyzőkönyve (Magyar Országos Levéltár, 276 f. 54. cs. 176. ő. e.)
[6] Borhi, L., Hungary's role in the Soviet bloc, 1945–1956. In: Imposing, maintaining, and tearing open the iron curtain. The cold war and East-Central Europe, 1945–1989 (szerk. Kramer, M., Smetana, V.). Lexington Books, 2013. 89.
[7] Fókusz. A Magyar Optikai Művek dolgozóinak lapja. 1976. szeptember 13.
[8] Százéves a Magyar Optikai Művek (szerk. Bernolák K. et al.). Közgazdasági és Jogi Könyvkiadó, Budapest, 1976.
[9] http://www.mombudapest.hu/muvhazas_tortenet.html (letöltés: 2015. 10. 24.)
[10] Rosch G., Hegyvidéki épületek. Budapest, 2005. 14–18.
[11] Kérész Gy., Elhunyt a MOM egykori főmérnöke. Hegyvidék (2010) január 12.
[12] Borhi L., A vasfüggöny mögött. Magyarország nagyhatalmi erőtérben, 1945–1968. Ister, 2000. 38.
[13] Borhi, 108–109.
[14] http://www.mombudapest.hu (letöltés: 2015. 10. 24.)
[15] Fehérvári Z., Prakfalvi E., Az egykori Magyar Optikai Művek művelődési háza. In: Kő kövön. Dávid Ferenc 73. születésnapjára (szerk. Szentesi Edit et al.), Vince Kiadó, 2013. 32–43.
[16] Fehérvári Z., Prakfalvi E., Ritoók P., Ifj. Dávid Károly építész (1903–1973). In: Kő kövön. Dávid Ferenc 73. születésnapjára (szerk. Szentesi Edit et al.), Vince Kiadó, 2013. 13–31.
[17] Drucker T., A Fővárosi Művelődési Ház története. In: A közművelődés házai Budapesten, I. Budapesti Művelődési Központ, 2002.
[18] Preisich G., Budapest városépítészetének története. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1960.
[19] In: Fókusz, 1976. október 11.
[20] http://hg.hu/cikkek/varos/8437-negymilliardbol-ujul-meg-a-mom-muvhaz (letöltés: 2015. 10. 24.)

TÚL A KÉMIÁN

Az állami és egyéni korrupció összefonódása



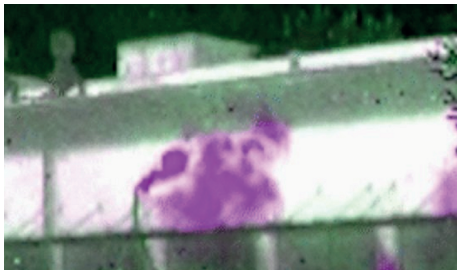
Azt már sokan és sokszor leírták, hogy ha egy országban az állami vezetők és a hivatalok hajlamosak a korrupcióra, akkor az az állampolgárok számára a kisebb-nagyobb csalásokat elfogadható magatartásként állítja be. A közelmúltban egy nagyon széles körű tanulmányban ezt a hatást tudományos módszerekkel és statisztikai kiértékeléssel is bizonyították. A kutatók öt év alatt 23 országban végeztek felméréseket: önkénteseket kértek arra, hogy dobjanak egy dobókockával úgy, hogy a felmérést végző szakember nem látja, mi jön ki, majd mondják el az eredményt. A nagyobb értékű kockadobásokért nagyobb pénzjutalom járt. Nem kellett nagy jóstehetség annak az előrelátásához, hogy a kockadobásokról kapott beszámolók eltérése a statisztikailag várható átlagtól igen jelentős volt. Az eredményeket országonként vizsgálva jelentős korrelációt tapasztaltak a Freedom House civil szervezet értékelőrendszerében az egyes országokban a korrupció elterjedtségének jellemzésére használt mutatóval: a korruptabbnak tartott országokban többen hazudtak a kockadobás eredményéről. A kísérletek tanúsága szerint azonban valamelyest még az őszintétlenségnek is van erkölcse: a statisztikai elemzések szerint a résztvevők az anyagilag legkedvezőbb eredményt hozó kockadobást viszonylag ritkán nevezték meg végeredményként, s többnyire a kicsit kevesebb hasznot hozó, de talán visszafogottabbnak ható hazugságokat választották.

Nature 531, 496. (2016)

Metánkamera

A metán az egyik leglényegesebb az üvegházhatású gázok közül, ezért is fontos minél pontosabban azonosítani a természetes és mesterséges forrásait. Ebben jelent nagy előrelépést annak a metánkamerának a kifejlesztése, amely infravörös képalkotás segítségével a levegőben is szokásosan jelen lévő koncentrációkban (kb. 2 ppm) ki tudja mutatni a metánt, illetve nagy térbeli felbontásának segítségével a kibocsátási helyek azonosítását is lehetővé teszi. Az új eszköz érzékenysége mintegy két nagyságrenddel jobb, mint a korábban ugyanerre a célra használt repülőgépes felméréseké, ugyanakkor jelentősen olcsóbb.

Nat. Clim. Change 6, 426. (2016)

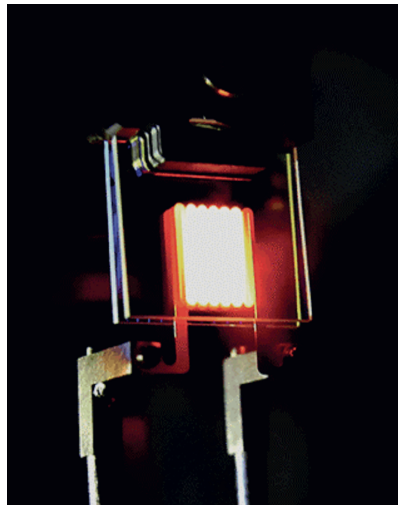




CENTENÁRIUM

Joseph Larmor: Negative Liquid Pressure at High Temperatures
Nature, Vol. 97, p. 361 (1916. június 29.)

Sir Joseph Larmor (1857–1942) brit fizikus és matematikus volt. Tudományos munkássága az elektromosságtan, a dinamika, a termodinamika és az elektronszerkezet leírása területeihez köti. Az NMR-spektroszkópiában ismert Larmor-frekvencia róla kapta a nevét.



Az izzók feltámadása

Az utóbbi bő évtizedben a korábban egy évszázadig szinte kizárólagosan használt izzókat kiszorították a sokkal energiatakarékosabb kompakt fénycsövek, majd az utóbbi néhány évben a még kedvezőbben használható LED-ek terjedése kezdődött meg. Egy amerikai kutatócsoportnak azonban a korábbiaknál sokkal hatékonyabban működő izzókat sikerült előállítania, ami újabb fordulatot is hozhat a világítóeszközök piacán. Az Edison által feltalált villanyégők még a 21. század elején sem alakították a felvett energia 2%-ánál többet látható fénnyé, ezért az Európai Uniós szabályok is a jellemzően 10%-os hatásfokot is elérő kompakt fénycsövek és LED-ek használatát írják elő egy ideje. Az új izzókban a volfrámszálra felváltva tantál-oxid és szilícium-oxid számítógépes szimulációkban meghatározott, ideális vastagságú rétegeit vitték fel. A több különböző hatás összegződésével létrejövő végeredmény 7% közeli hatásfok volt, amely a kutatók szerint a technológia kifejlesztésével akár 40%-ra is növelhető majd.

Nature Nanotechnol. 11, 320. (2016)

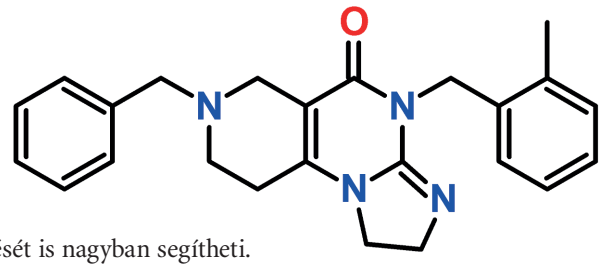
APRÓSÁG

A világ jelenleg ismert lítiumkészleteinek több mint a fele a „lítiumháromszög”-ben található Argentína, Bolívia és Chile területén, nagy tengerszint feletti magasságban.



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

A HÓNAP MOLEKULÁJA



Az ONC2011 azonosító jelű molekula ($C_{24}H_{26}N_4O$) már két éve is bekerült a szakmai hírekbe: a vegyület rákellenes felhasználásáról szóló, US8673923 számú szabadalomban ugyanis hibásan adták meg a képletét, s az e körüli jogi vita még jelenleg is tart. Az idén pedig azt mutatták ki, hogy az anyag daganatellenes hatásának mechanizmusa jelentősen eltér a korábban ismert rákellenes szerekétől. Ez a felfedezés új gyógyszerek kifejlesztését is nagyban segítheti.

Sci. Signal. 9, ra17 (2016).
Sci. Signal. 9, ra18 (2016).

Kémiai kaméleon

A kaméleonok a bőrükben lévő guanin nanokristályok közötti távolságok változtatásával képesek a környezetbe beleolvadó színt felvenni. Ezt a trükköt használva nemrégiben kémiai álcázó rendszernek alkalmas nanorészecskéket állítottak elő. A nagyjából 50 nm átmérőjű arany „nanodómokat” ezüstionokat tartalmazó gélelektrolitba helyezték. Ebből elektrolízissel szabályozható rétegeket lehet a részecskék felületére leválasztani, így a részecskék színe változtatható. A rendszert egy kamerával kiegészítve olyan vezérlőszoftvert is tudtak készíteni, amely a műkaméleon színét mindig a környezetéhez igazítja.

ACS Nano 10, 1788. (2016)



Metanol az űrben



Oláh György kutatócsoportjának új eredményei szerint a metanol sugárzás hatására bekövetkező reakciói a csillagközi térben szénhidrogének keletkezését eredményezhetik. A metánról már korábban is tudták, hogy a csillagközi ködökben előfordul, de az utóbbi időben a metanol jelenlétét is egyértelműen detektálták. A metanol a kísérletek és az elméleti számítások szerint is jóval reaktívabb a metánnál; belőle etilén képződhet, amely hosszabb láncú szénhidrogének keletkezése felé is megnyithatja az utat.

J. Am. Chem. Soc. 138, 1717. (2016)

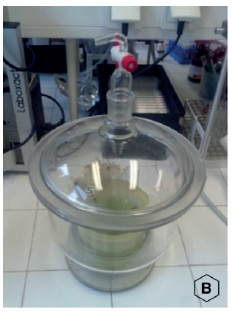


Izzadságanalízis

Az ember izzadságának összetétele sok mindent elárulhat a szervezet egészségéről. Ez a felismerés vezetett el az izzadságot kémiai módszerekkel analizáló csuklópánt elkészítéséhez, amelyet a róla szóló közlemény megjelenéséig huszonhat önkéntesen teszteltek. Az eszköz alapja egy hajlékony polietilén-tereftalát hordozóra felvitt nyomtatott áramkör. Az áramkör sok különböző érzékelőt tartalmaz, például a glükóz, a tejsav, a nátrium- és káliumionok koncentrációját, valamint az elektromos vezetésen keresztül a bőr felszíni hőmérsékletét is méri. Az eszköz az adatokat vezeték nélküli kapcsolaton keresztül továbbítja egy adatfeldolgozó egységnek, amely így az izzadság-összetétel időfüggéséről is értékes adatokat gyűjthet.

Nature 529, 509. (2016)









Tisztítás mesterfokon

Az NMR-csövek tisztítása sok kémikus számára a mindennapok része, de közülük csak kevesen tartják érdekes tudományos kérdésnek. Egy éppen anyagi források szűkében lévő laboratóriumban nemrég új és nagyon hatékony módszert dolgoztak ki a mosogatásra: a csöveket kiürítés után fejjel lefelé egy kevés oldószert vagy tisztítóoldatot tartalmazó nagy főzőpohárba állították. Ezután egy vákuumexszikkátorban több nyomáscsökkentési cikluson vitték át a főzőpoharat. A végső öblítéshez kis mennyiségű aceton is elegendő volt, s a NMR-csövek máris újra használhatók lettek.

Org. Process Res. Dev. 20, 319. (2016)

KITÜNTETÉS

Beck Mihály professzor kapta a 2016. évi Akadémiai Aranyérmet

Beck Mihály kémikus, a Magyar Kémikusok Egyesületének meghatározó egyénisége, az MTA rendes tagja vehette át a Magyar Tudományos Akadémia 187. közgyűlésének nyilvános ünnepi ülésén az Akadémiai Aranyérmet.



Beck Mihály professzor. Az ünnepeltről készült videó az MTA honlapján látható

Beck Mihály numizmatikai gyűjteménye új éremmel gyarapodott. Ezúttal nem historikus jelentőségű veretről van szó, hanem az MTA aranyérméről. Az 1825-ben alapított és 1865-ben felépült Akadémia először a magyar nyelv, irodalom és művészet legkiválóbb alkotóinak otthona volt, de mára már a természettudományok művelői vannak többségben. A 365 választott rendes tag, a levelező és külső tagokkal összesen 728 fő és a 15 292 köztestületi tag tizenegy tudományos osztályba szerveződik. A vegyészek a VII., Kémiai Tudományok Osztályában tevékenykednek.

A legmagasabb magyar tudományos elismerés, amit egy ma élő tudós elérhet, a Magyar Tudományos Akadémia Aranyérme, amit az évi közgyűlésen adnak át. A 11 osztály figyelembevételével egy-egy osztály választottja tizenegy évenként kaphatja meg az aranyérmet. Az Akadémiai Aranyérem kitüntetést az MTA elnöke hozta létre a 10/1960. MTA (A. K. 12. sz.) utasításával. A díj adományozója a Magyar Tudományos Akadémia Elnöksége, az érmet az Akadémia elnöke adja át a májusi közgyűlésen. Az Akadémiai Aranyéremből évente egy kitüntetés adományozható, kizárólag az Akadémia tagja számára kiemelkedő tudományos, tudományos közéleti, tudománypolitikai és tudományszervezői tevékenysége elismeréseként. A díjazott személyére a tudományos osztályok tesznek javaslatokat.

Az érem Vígh Tamás szobrász- és éremművész alkotása, 375g tömegű, előlapján a csónakon álló Arkhimédész balra néző, álló alakja látható, jobb kezében tartva a nevezetes ingát. A háttér teljesen sima, az álló alak kissé jobbra, fent van elhelyezve. A hátlapon hat sorban A / MAGYAR / TUDOMÁNYOS / AKADÉMIA / ARANY- / ÉRME felirat látható. A mindenkori díjazott neve és az adományozás dátuma a peremen olvasható.

Beck professzor munkásságát legtöbb vegyészkollégánk ismeri, de ismerik az áltudományok elleni harc és a tudománytörténet területén kifejtett tevékenységét is.

Debrecenben 1968-tól 1990-ig vezette az egyetem Fizikai Kémia Tanszékét, időközben pedig rektorhelyettese és egy éven keresztül megbízott rektora is volt az intézménynek. Doktori címe megszerzése után tíz évvel, 1973-ban az MTA levelező tagjává, majd 1979-ben rendes tagjává választották. 1976 és 1985 között a Kémiai Tudományok Osztályának elnöke volt, később is aktív szerepet vállalt több akadémiai bizottság munkájában. *Tudomány – áltudomány* című könyve nagy sikert aratott az 1970-es években. Tudománytörténeti munkái közül legismertebb a Than Károly életéről írt könyve, legutóbb pedig a *Humor a tudományban* című kötet jelent meg 2010-ben.

Az ünneplés csendes résztvevője, tanúja volt Piroska, az egykori évfolyamtárs, aki azóta is ennek az alkotó életnek részese és társa. De ott volt Beck professzor úr két fia, menyei, unokái és már egy dédunokája is. **Tömpe Péter**

OKTATÁS

Az Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny döntője

2016. április 22–24.

Ez évben (és még további két éven át) a Szegedi Tudományegyetem adott helyet a Magyar Kémikusok Egyesülete által szervezett Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny döntőjének. A megnyitót április 22-én tartották az orvoskar Dóm téri épületének nagyelőadójában. A diákokat, felkészítő tanáraikat és a gyerekeket kísérő szülőket *Szabó Gábor* akadémikus, az egyetem rektora, *Simonné Sarkadi Livia*, a Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke és *Wölfling János*, a Szervezőbizottság elnöke köszöntötte. *Pálinkó István*, a versenybizottság elnöke, néhány fontos tudnivaló közlésével és sok sikert kívánva a versenyzőknek, zárta a megnyitót.

Másnap az írásbeli és gyakorlati fordulókkal folytatódott a verseny. A kísérőtanárok, valamint a Kémiai Tanszékcsoportról szervezett javítók munkájának eredményeképpen estére részleges eredményhirdetést tarthattunk, amelyen kiderült, hogy kategóriánként hányan és kik szerepelhetnek a szóbeli fordulóban.

A szóbeli forduló zsűrijének tagjai *Simonné Sarkadi Livia*, az MTA doktora, egyetemi tanár (a zsűri elnöke), *Wölfling János*, az MTA doktora, egyetemi tanár, *Pálinkó István*, az MTA doktora, egyetemi tanár és *Petz Andrea* középiskolai tanár voltak.

A szóbeli forduló, és így az egész rendezvény ünnepélyes eredményhirdetéssel és zárófogadással fejeződött be.

A rendezvény kiemelt támogatói: MOL Nyrt., a Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kara és az Emberi Erőforrások Minisztériuma. A program részben az Emberi Erőforrások Minisztériuma megbízásából a Nemzeti Tehetség Program és az Emberi Erőforrás Támogatáskezelő által meghirdetett NTP-TV-15-0116 kódszámú pályázati támogatásból valósult meg.

A kategóriák első három helyezettjei és a különdíjasok az alábbiakban olvashatók.

I.a kategória

1. helyezés	Mihalicz Ivett	Révai Miklós Gimnázium	Győr
2. helyezés	Besenyi Tibor	Fazekas Mihály Gimnázium	Budapest
3. helyezés	Hegyi Mihály	Apáczai Csere János Gimnázium	Budapest

I.b kategória

1. helyezés	Juhász Benedek	Apáczai Csere János Gimnázium	Budapest
2. helyezés	Kovács Domonkos	Apáczai Csere János Gimnázium	Budapest
3. helyezés	Kovács Márton	Eötvös József Gimnázium	Budapest

I.c kategória

1. helyezés	Mihályi Zsolt	Petrik Lajos Szakközépiskola	Budapest
2. helyezés	Demény Petra	Boronkay György Műszaki Szakközépiskola	Vác
3. helyezés	Zöld Béla	Boronkay György Műszaki Szakközépiskola	Vác

III. kategória

1. helyezés	Garad Ágoston Attila	Boronkay György Műszaki Szakközépiskola	Vác
2. helyezés	Csajkos Norbert Péter	Mechwart András Szakközépiskola	Debrecen
3. helyezés	Ondrejó András	Mechantronikai Szakközépiskola	Budapest

Az *Irinyi János-díjat* az I. kategóriában *Mihalicz Ivett* kapta.

Az I. és III. kategóriákban a gyakorlati (laboratóriumi) fordulóban legjobb eredményt elért versenyzők *Fraknói Ádám* (Jedlik Ányos Gimnázium, Budapest), *Kádár Barnabás* (Piarista Gimnázium, Budapest), *Pálya Hanna* (Fazekas Mihály Gimnázium, Budapest) és *Kovács Márton* (Eötvös József Gimnázium, Budapest) voltak.

Az I. és III. kategóriákban az írásbeli fordulóban legeredményesebb elméleti feladatmegoldó *Juhász Benedek* (Apáczai Csere János Gimnázium, Budapest), számításos feladatmegoldó pedig *Mihalicz Ivett* volt.

II.a kategória

1. helyezés	Jedlovszky Krisztina	Fazekas Mihály Gimnázium	Budapest
2. helyezés	Marozsák Tóbiás	Óbudai Árpád Gimnázium	Budapest
3. helyezés	Molnár Balázs	Bányai Júlia Gimnázium	Kecskemét

II.b kategória

1. helyezés	Lakatos Gergő	Debreceni Kossuth Lajos Gimnázium	Debrecen
2. helyezés	Mohácsi Zsombor Márton	Érdi Vörösmarty Mihály Gimnázium	Érd
3. helyezés	Botlik Bence	Apáczai Csere János Gimnázium	Budapest

II.c kategória

1. helyezés	Sajtos Gergő	Vegyipari Szakközépiskola	Debrecen
2. helyezés	Dragan Viktor Konstantin	Petrik Lajos Szakközépiskola	Budapest
3. helyezés	Balázs Kornál	Vegyipari Szakközépiskola	Debrecen

Az *Irinyi János-díjat* a II. kategóriában *Jedlovszky Krisztina* kapta.

A II. kategóriában a gyakorlati (laboratóriumi) fordulóban legjobb eredményt elért versenyző *Kós Tamás* (Eötvös József Gimnázium, Budapest) volt.







A II. kategóriában az írásbeli forduló legeredményesebb feladatmegoldója *Jedlovszky Krisztina* volt.

Kiemelkedő tehetséggondozó munkájukért az alábbi felkészítő tanárok kaptak elismerést:

Hancsák Károly (Radnóti Miklós Kísérleti Gimnázium, Szeged)
Keglevich Kristóf (Fazekas Mihály Gimnázium, Budapest)
Sebő Péter (Apáczai Csere János Gimnázium, Budapest)

Pálinkó István
a versenybizottság elnöke
Szegedi Tudományegyetem

MOL
Nemzeti Tehetség Program
Emberi Erőforrás Támogatáskezelő
Emberi Erőforrások Minisztériuma
Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar
Richter Gedeon
Aktivit Kft.
ABL&E-JASCO Magyarország
B&K 2002 Kft.
Whatman
Green Lab
EGIS
LNICAM Magyarország Kft.
SIGMA-ALDRICH
pátria nyomda
VWR International
LaborExport A laborpartner
REANAL LABOR Vegyszerkereskedelmi Kft.

Agykutatás hete az SZBK-ban

Az agyunk és a drogok

Az idén is megrendezték országosan az immár hagyományossá vált Agykutatás hetét. Budapest, Pécs, Debrecen, Hevesvezekény mellett Szegeden is gazdag programmal hívták fel a szakemberek a figyelmet erre a még mindig oly titokzatos szervünknek a működésére. A szervezés oroszlánrészét ezúttal is a Szegedi Biológiai Kutatóközpont vállalta, Deli Mária és Harazin András irányításával

A zömmel fiatalok – főként középiskolások, egyetemisták – érdeklődésére számító rendezvény ezúttal a drogok agyra gyakorolt hatására fókuszált. Mintegy kétszáz diák vett részt a rendezvényen, de kisebb gyerekek is elmentek szüleikkel a játszóházba, ahol koruknak megfelelő módon ismerkedhettek meg az agyműködés rejtelmeivel.

A nyitó előadást a Szegedi Tudományegyetem kutatója, Szűcs Mária *A klasszikus drogok rövid és hosszú távú hatásai,* Sija Éva pedig *A drogcsata* címmel tartotta meg. Az estébe nyúló laboratóriumi bemutatók során a diákok mikroszkóp alatt vizsgálhatták az agyi sejteket, életképesség-mérést végezhettek, egereken végrehajtott memóriateszteket követhettek nyomon, megismerkedtek az ecetmuslicával mint az idegkutatás modern állatával. A rendezők gondoskodtak azonban arról is, hogy a biofizikai, a biokémiai, a genetikai intézetben szerzett komoly szakmai ismeretek ne legyenek túl megterhelők a fiatal agyak számára, kedvcsinálóként beiktatták a programba a helyi rockzenekar, a Show Me koncertjét, kvízjátékkal tették izgalmasabbá az ismeretszerzést: a kérdések kapcsolatban álltak a poszterekről, a médiában és a weboldalakon megszerezhető tudással. A helyes válaszokért hat tanuló részesült jutalomban. A *Képzelet és az agyunk* címmel meghirdetett rajzpályázatra 34 alkotás érkezett: az SZBK halljában kiállított művek a gyerekek színes fantáziájáról árulkodtak:



három kategóriában kilenc díjat és jutalmat osztott ki a zsűri. Szellemes ötletnek és finomnak bizonyult a közösen elfogyasztott, agy alakú torta.

Az SZBK nemcsak „édes” tudást nyújtott át az agykutatás hetén a fiataloknak, hanem igyekezett kedvet is teremteni a kutatói hivatáshoz. **Ch.Á.**

Középiskolás fokon

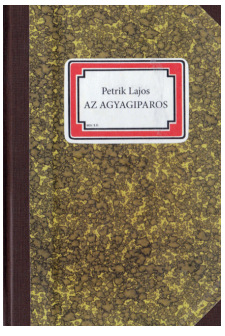
Könyvajánló

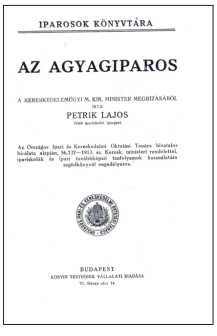
Ma a középiskolás fokon megszerzett tudás és lelkesedés hiányzik leginkább a gyárakban és mindennapi életünkben. Azok a jó alapképzettségű, szakmaszerető és mesterséget értő ifjak (és kevésbé ifjak), akik meghatározó erővel segítik a mérnököket és kutatókat. Együtt dolgoznak velük. Ma, amikor újra fontossá válik a magas színvonalú szakmunkások és technikusok képzése, értékes és izgalmas olvasmány, de szórakoztató is *Az iparos szakma múltjának emlékei sorozat* kilenc kötetének lapozgatása. A kilenc kötet az agyagiparos, a fémművesség, a vasöntő, az asztali üvegfúvás, a cukrász, a bútorasztalos, a takács, a téglamester és a festő mesterségével ismerteti meg az olvasót.

Nekünk, vegyészeknek, természetesen a Petrik Lajos által írt *Az agyagiparos* című könyv a legérdekesebb. Két okból is. Az egyik maga a szerző, a másik a könyv tartalma és tematikája. Kétségtelen, hogy a legmagasabb színvonalú magyar középfokú (technikus) vegyészképzés a Petrik Lajos vegyipari technikumhoz köthető. Sok egykori *petrikes* diák lett sikeres tudós, neves vegyész, de még politikus is. A gráci műegyetemet végzett Petrik Lajos színes egyéniség, kiváló vegyész, keramikus, fényképész és tanár volt, a Magyar Királyi Állami Felső Ipariskola tanára és igazgatója. Lelkes, „hivatásos turistaként” mint a Turisták Lapja főszerkesztője volt legismertebb.

A most újra megjelenő *Az agyagiparos* című könyv első fejezete a kémiai alapoktatás tankönyve is lehetne, mert olyan tisz-


Petrik Lajos (1851-1932)





tán és érthetően magyarázza el olvasóinak az atomok, molekulák, vegyületek és keverékek közti összefüggéseket, a kémiai változások lényegét és a kémiai kötések természetét. A könyv vegyszerismereti fejezete a leghasznosabb olvasmány, az agyag- és a cserépipar leírásai (és a színes mázak varázsa) pedig kedvet adnak az olvasónak, hogy egy maréknyi agyaggal a fazekaskoronghoz üljön.

A könyv és a sorozat többi tagja a Pytheas kiadótól, a *www.konyvmanufaktura.hu* honlapon megrendelhető.

Tömpe Péter

MEGEMLÉKEZÉS

Lakatosné Győri Katalin (1953–2016)

A Könnyűipari Műszaki Főiskolán szerzett könnyűipari mérnöki végzettséggel a Habselyem Kötöttárugyárban helyezkedett el, gyártmányfejlesztéssel foglalkozott, majd a vállalati fejlesztési tervek kidolgozásában és megvalósításában vett részt.



1984-ben a Textilipari Műszaki és Tudományos Egyesület (TMTE) munkatársa lett, először mint szervezőtitkár. Főként nemzetközi szakmai konferenciák és hazai rendezvények szervezésével foglalkozott. 1987-től az ügyvezető főtitkár-helyettesi, majd ügyvezető főtitkári teendőket látta el 2013. I. félévének végéig. A közhasznú társadalmi szervezet operatív irányítását, a területi munka koordinálását nagy agilitással végezte, felelősen ügyelt a gazdálkodásra. Az egyesületi kiadványok megjelentetésében, a szaklapkiadásban, hírlevél-szerkesztésében meghatározó részt vállalt. A TMTE felnőttképzési tevékenységének eredményes beindítása is nevéhez fűződik. Szorgalmas és fáradhatatlan munkája eredményeként az egyesület – a kedvezőtlenül megváltozott hazai textil- és textilruházati környezet ellenére – évről évre fejlődött. A hazai textil- és textilruházati ipar átalakulása, főként a textilipari nagyvállatok térvesztése az egyesület számára is új kihívásokat hozott. A megmaradt és új vállalkozások a korábbiaktól eltérő igényeket támasztottak a TMTE-vel szemben is. Az ipari háttérbázis döntő leépülésével nem volt könnyű a működési feltételek alapjául szolgáló anyagi forrásokat előteremteni, ebben is nagy aktivitással vett részt, főként az eredményes támogatásokkal sikerült megőrizni az egyesület biztonságos fennmaradását.

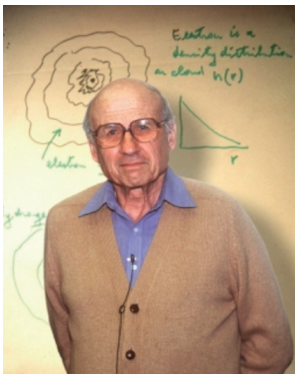
A Textilmúzeum Alapítvány kurátoraként a szakmakultúra megőrzésében is tevékenyen közreműködött.

A társegyesületekkel, főleg a Magyar Kémikusok Egyesületével is eredményes kapcsolatot tartott fenn. Legutóbb a Textilvegyész és Kolorista Egyesületek Nemzetközi Szövetsége (International Federation of Associations of Textile Chemists and Colourists, IFATCC) budapesti – a Magyar Kémikusok Egyesülete és a Textilipari Műszaki és Tudományos Egyesület által közösen szervezett – kongresszusának sikeres megrendezésében is aktívan részt vett.

Többek között külön kiemelendő, hogy a Nemzetközi Technológiai Platformhoz csatlakozva, Lakatosné Győri Katalin sokat vállaló személyes közreműködésével valósult meg a „Nemzeti Technológiai Platform a textil- és ruhaipar megújításáért” (TEXPLAT). Az utóbbi időben az Európai Unió az ún. SET (Saving Energy in Textiles, Textilipari Energiacsökkentés) projektben mindaddig eredményesen dolgozott, ameddig betegsége engedte.

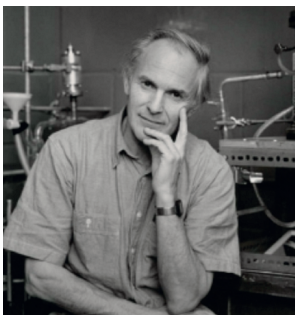
2016. április 14-én, 63 éves korában, hosszú és türelemmel viselt gyógyíthatatlan betegségben hunyt el. Halálával fáradhatatlan, agilis, a jó érdekében mindig tenni akaró, kedves embert veszített el a Textilipari Műszaki és Tudományos Egyesület és a hazai textilszakma. Emlékét kegyelettel megőrizzük, nyugodjék békében!

Kutasi Csaba



Walter Kohl kémiai Nobel-díjas 93 éves korában elhunyt

Walter Kohl, aki az 1998. évi kémiai Nobel-díjban megosztva részesült, április 19-én, 93 éves korában elhunyt. A University of California, Santa Barbara emeritus fizikaprofesszora volt, és a Nobel-díjat a sűrűségfunkcionál elmélet kidolgozásában való részvételéért kapta. *(ACS Energy Letters)*



A Nobel-díjas Harry Kroto 76 éves korában elhunyt

Harold W. Kroto, a kémikus, aki 1996-ban a Buckyball felfedezéséért megosztva megkapta a kémiai Nobel-díjat, 2016 májusának első hétvégéjén, 76 éves korában elhunyt. A felfedezést lelkesedés, ugyanakkor meglehetős szkepticizmus övezte, amit jól jellemez a Nobel Bizottság bejelentésének egy mondata is: „No physicist or chemist had expected that carbon would be found in such a symmetrical form other than those already known.” *(C&EN)*

Vegyipari mozaik

Eredményes közgyűlés a MOL-nál. A MOL éves közgyűlésén a részvényesek jóváhagyták az igazgatóság jelentését a 2015. évi pénzügyi teljesítményről, valamint a konszolidált pénzügyi beszámolókat. A közgyűlés elfogadta az igazgatóság 55 milliárd forintos osztalékjavaslatát, és a CEZ MH B.V. javaslatát az alaptőke 2%-kal történő leszállításáról a MOL saját tulajdonában lévő részvények bevonásával. A testület újraválasztotta dr. Világi Oszkárt, az igazgatóság tagját és Mosonyi Györgyöt, a felügyelőbizottság tagját. Emellett a felügyelőbizottság tagjává és az auditbizottság póttagjává választották Ivan Miklošt, valamint az auditbizottság tagja lett dr. Szivek Norbert.

A MOL-csoport 2015. évi jelentése felhasználóbarát formában megtekinthető a www.molgroup.info/annualreport2015 honlapon.

Hernádi Zsolt, a MOL elnök-vezérigazgatója elmondta: „Az olaj- és gázipar igen nehéz körülményekkel nézett szembe 2015-ben. Ennek ellenére, minden várakozást felülmúló, erős eredményt értünk el, amely jól bizonyítja, hogy integrált modellünk – amelyet az elmúlt években következetesen kiépített, magas mi-

nőségű, ám alacsony költségű eszközeink támogatnak – sikeresen működik. Az évre visszatekintve, egy felfelé módosított évközi cél mellett is sikerült növelnünk az EBITDA-t. Tovább csökkentettük beruházásainkat, és készpénzteremtő képességünkre összpontosítottunk, amelynek eredményeként szabad cash flownk tovább növekedett, és még erősebb lett mérlegünk, mint 2014-ben. Nehéz éven vagyunk túl, de képesek voltunk megerősödve kijönni belőle. Hatékonyabbak és versenyképesebbek lettünk. Meggyőződésünk, hogy az idei nehéz környezet ellenére, az integrált üzleti modellünk jól vizsgázik, és elérjük 2016-os céljainkat." *(MOL Magyarország Kommunikáció)*

BÉRES GYÓGYSZERGYÁR ZRT.

Letették a Béres új gyártórészlegének alapkövét. Több mint két évtizedes fennállásának legnagyobb fejlesztését valósítja meg a Béres Gyógyszergyár Szolnokon. Az 3,2 milliárd forintos beruházással új üzemet alakítanak ki és bővítik a logisztikai raktár kapacitását.



A Béres Rt. mára Magyarország legnagyobb, magyar tulajdonban lévő gyógyszergyárává vált. A vállalat 32%-os piaci részesedésével piacvezető a betegségmegelőző és egészségmegőrző készítmények piacán, termékei hitelesek, közmegbecsülésnek örvendenek, a Béres-csepp az elsőként hungarikummá nyilvánított egészségvédő gyógyszer.

1995-ben vásárolták meg szolnoki gyártóüzemüket, melyben ez idáig összességében 3,3 milliárd forint értékben valósítottak meg ingatlan-, gép- és eszközfejlesztést. Az itt foglalkoztatottak száma a kezdeti 64-ről mára 238 főre emelkedett, ezzel a Béres Gyógyszergyár Zrt. Jász-Nagykun-Szolnok megye tizedik legnagyobb magánfoglalkoztatójává vált.

A jelenlegi fejlesztést a Béres-termékek iránti igény generálta. A társaság jelenlegi kapacitásával már képtelen kiszolgálni a piaci igényeket, ugyanakkor elkötelezett aziránt, hogy a termékei idehaza, magyar tudásra támaszkodva, itthoni fejlesztéssel és munkaerővel készüljenek. A szolnoki beruházásban a Béres Gyógyszergyár 1640 m^2-rel növeli gyára területét, 800 m^2-rel logisztikai raktárát, új technológiát telepít, fejleszti az infrastruktúrát, és 60 új munkahelyet hoz létre. A beruházás egyedi kormánydöntés alapján, 50%-os vissza nem térítendő állami támogatással történik.

A Béres Gyógyszergyár Zrt. ezzel a fejlesztéssel hosszútávon elkötelezi magát magyarországi, ezen belül szolnoki gyárának fenntartása mellett, és amellett, hogy fő piacának továbbra is Magyarországot tekinti, megteremti a bázist dinamikusan növekvő export-tevékenységéhez is. *(beres.hu)*

RICHTER GEDEON

Milliókat érő egészség – idén is Richter Egészségváros. Az országos rendezvénysorozat résztvevői nemcsak saját egészségükért, hanem városukért is tesznek.

A hét éve sikeres egészségügyi program folytatásaként indítja újra jótékonysági akcióval összekötött országos szűrőprogramját a Richter Gedeon Nyrt. A hazai gyógyszercég egészségnevelő kezdeményezése arra bíztatja az embereket, hogy minél többen tegyenek egy lépést saját egészségük megőrzése, fenntartása érdekében. Tavasszal Siófokon, Kiskunfélegyházán és Makón szórakoztató családi programok mellett a látogatók ingyenes szűrővizsgálatokon, tanácsadásokon vehetnek részt. Az egészségnap különlegessége, hogy a város lakosai részvételükkel növelik a Richter Gedeon Nyrt. által a helyi kórház számára felajánlott alapadomány összegét.

A programnak komoly aktualitást ad a magyar lakosság egészségi állapota, hiszen hazánkban a nagymértékű dohányzás, a túlzott alkoholfogyasztás, az egészségtelen táplálkozás és a mozgásszegény életmód következtében előforduló megbetegedések riasztó képet mutatnak. Az életmód legalább 40%-ban befolyásolja az egészséges életkilátásokat, ezért fontos hangsúlyozni az egyéni felelősséget az egészségmegőrzésben. A Richter Egészségváros szűrésein résztvevők egészségügyi adatai – hasonlóan az országos átlaghoz – figyelmeztető képet adnak: nagyjából minden negyedik embernél mértek a normálistól eltérő eredményeket. A lakosság hozzáállása a kezdeményezéssel kapcsolatban azonban optimizmusra is okot ad: a több mint 115 000 résztvevőből minden ötödik ember részt vett legalább egy szűrővizsgálaton, aminek hasznos eredménye is lett: a program 7 éve alatt 47 városban összesen 19 ezer esetben mértek figyelmeztető eredményt a szakorvosok. A rendezvényen tanácsadások (fájdalomcsillapítás, memóriazavar, szorongás és depresszió, nőgyógyászat), előadások és beszélgetések során helyi szakemberek és a programhoz csatlakozott hírességek személyre szabottan nyújtanak segítséget az egészséges életvezetés kialakításában. A Richter Egészségvároson elvégezhető komplex szűrővizsgálatokon (koleszterinszint- és vérnyomásmérés, szív- és érrendszeri kockázatfelmérés, érszűkület-vizsgálat, prosztata (PSA) szűrés, asztmaszűrés, bőr- és körömgomba szűrés, mell-önvizsgálat) való részvétellel felmérhető az egyén jelen egészségi állapota, az esetleges öröklődő genetikus hajlamok, valamint kiszűrhetők a rizikótényezők. A programon helyben olyan ingyenes szűrővizsgá-



latok is elérhetők (pl. csontsűrűségmérés), melyekre az egészségügyi ellátórendszer keretében sok esetben hónapokat kell várni.

A program fővédnöke, Rudolf Péter színművész és egészségnagykövetei, Béres Alexandra fitnesz világbajnok, Katus Attila aerobik világbajnok, Radványi Dorottya és Jaksity Kata műsorvezetők, Krizsó Szilvia újságíró, valamint Rácz Zsuzsa írónő és Nagy Tímea olimpiai bajnok párbajtőrvívó hirdetik: minden életkorban és életszakaszban törődni kell a testi-lelki egészséggel. Újonnan csatlakozott a programhoz Jakupcsek Gabriella és Rákóczi Ferenc műsorvezető, akik személyes példájukkal is biztatják a lakosokat az egészséges életmódra.

A Richter Egészségváros célja, hogy mindenki egyszerre tegyen valamit saját maga egészségéért és városa egészségügyének fejlesztéséért. A Richter ennek érdekében minden városban 2 000 000 forint adományt ajánl fel a helyi kórház számára, melyet minden látogató személyesen növelhet a programok bármely elemében való részvételével, például a helyszínen elvégeztetett szűrővizsgálatokért vagy a meghallgatott előadásokért kapott adománypontok alapján.

A kezdeményezés az eddigi hét év alatt elért sikereit Beke Zsuzsa, a Richter Gedeon Nyrt. kormányzati kapcsolatok és PR vezetője foglalta össze: „47 városban fordultunk meg, a lakosok aktív részvételével több mint 209 millió forintot adományoztunk a kórházaknak. Mintegy kilencvenezer szűrésből tizenkilencezer olyan esetet szűrtünk ki, amely azonnal további ellátást, vizsgálatot igényelt. Programunk üzenete, az egészségért való tevőleges felelősségvállalás reményeink szerint százezrekhez jutott el." *(egeszsegvaros.hu)*



Tizenegy újabb Lendület-kutatócsoportot alapít az MTA. A 100 éves évfordulóhoz közeledve mit tudunk a trianoni békeszerződésről, és mi az, amit még nem? Hogyan használjuk egyik fő artikulációs szervünket, a nyelvünket, ha magyarul beszélünk? Milyen erők formálták a világegyetemet olyanná, amilyennek ma látjuk? Mit mond az evolúció a rák kialakulásáról? Egyebek mellett ezekre a kérdésekre keresi a választ az MTA Lendület programjának idei 11 nyertese. Kutatásaikat az Akadémia öt esztendőn keresztül évente összesen 400 millió forinttal támogatja.

A Magyar Tudományos Akadémia 2009-ben hirdette meg a fiatal kutatók számára kiválósági programját, a Lendületet. A külföldön dolgozó tehetséges kutatók hazahívása, illetve a magyarországi kutatóhelyeken tudományos munkát végző tehetségek itthon tartása mellett a program fő célja, hogy erősítse az MTA kutatóhálózatának nemzetközi versenyképességét. Az új célok között szerepel, hogy a pályázat elbírálásának folyamatát közelítsék az ERC-pályázatokéhoz, ami a kutatók tapasztalatszerzését szolgálja. Fontos cél az is, hogy az alapkutatások mellett az alkalmazott kutatásokat is támogatná az MTA, ezt szolgálja a kibontakozóban lévő Célzott Lendület alprogram.

Az MTA legutóbbi, 2015 végén meghirdetett Lendület-pályázatára 95 pályamunka érkezett. A legtöbbet, 41-et a matematikai és természettudományok művelői nyújtották be. Az élettudományokkal foglalkozó kutatók közül 33-an, a bölcsészet- és társadalomtudományok képviselői közül pedig 21-en pályáztak.

A pályamunkákat két szakaszban bírálták el. Először legalább 3-3 szakértő adott pontozásos, illetve szöveges véleményt a pályázatokról, egyben azt is jelezték, javasolják-e őket támogatásra. A második szakaszban nyilvános zsűri értékelte és összegezte tudományterületenként a pályázatokat, majd a pályamunkák és az



Lovász László, az MTA elnöke a Lendület program idei nyerteseivel

azokról szóló anonim vélemények ismeretében hozta meg döntését.

Az MTA 5 évre szóló, évente összesen 400 millió forintos támogatást nyújt a 11 nyertesnek. Az önálló kutatói pályájukat kezdő, jellemzően 38 év alatti, kiemelkedő és folyamatosan növekvő teljesítményt mutató, ígéretes fiatal kutatók számára kiírt Lendület I.-et négyen, a már sikeres önálló kutatói pályát folytató, jellemzően 35–45 év közötti, nemzetközileg is elismert, tartósan kiemelkedő és növekvő teljesítményű vezető kutatóknak kiírt Lendület II.-t pedig heten. Közülük ketten külföldről térnek haza. Mindkét kategória nyertesei vállalták, hogy a Lendület program keretében végzett kutatásaik során vagy azok befejezésekor pályáznak az Európai Kutatási Tanács (ERC) valamelyik kiválósági felhívására.

A nyertesek közül öten az MTA valamelyik kutatóközpontjában vagy -intézetében, hatan pedig egyetemeken alakíthatnak önálló kutatócsoportot akadémiai támogatással. Az MTA TTK-ban Beke-Somfai Tamás János vegyész szervezhet kutatócsoportot. Az MTA számára a Lendület is alapvető eszköze annak, hogy szorosabbra fűzze kapcsolatait a hazai egyetemekkel, amit az is jelez, hogy 2011 óta, amikor a kiválósági programot a hazai egyetemekre is kiterjesztette, összesen 53 Lendület-kutatócsoport alakult felsőoktatási intézményekben. *(mta.hu)*

Ritz Ferenc összeállítása

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

Rendezvénynaptár

2016. július 31. – auguszt. 4.	33th European Congress on Molecular Spectroscopy	Szeged
2016. auguszt. 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

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 19–23.
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 Counitries 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 u. 34.
Online regisztráció:
https//www.mke.org.hu/conferences/kozmetika2016/registration
További információk: Schenker Beatrix,
beatrix.schenker@mke.org.hu

Kedvezményes üdülés MKE-tagoknak

Hotel Sopron
9400 Sopron, Fövényverem u. 7.
Tel.: 99/512-261, fax: 99/311-090
E-mail: info@hotelsopron.hu
www.hotelsopron.hu/



Hunguest Hotel Béke
4200 Hajdúszoboszló, Mátyás király sétány 10.
Tel.: 52/361 411
E-mail: hotelbeke@hunguesthotels.com
http://www.hunguesthotels.hu/hu/hotel/hajduszoboszlo/hunguest_hotel_beke/

Hunguest Hotel Aqua-Sol
4200 Hajdúszoboszló, Gábor Áron utca 7–9.
Tel.: 52/273 310
E-mail: hotelaquasol@hunguesthotels.com
http://www.hunguesthotels.hu/hu/hotel/hajduszoboszlo/hunguest_hotel_aquasol/



A Magyar Kémikusok Egyesülete tagjai 10% kedvezménnyel vehetik igénybe a fenti szállodák szolgáltatásait az év bármely napján, beleértve az akciós programokat is. Az egyesületi tagságot a Titkárság igazolja. A kedvezmény az MKE-taggal egy szobában lakó társára is vonatkozik, de egy MKE-tag csak egy szobára veheti igénybe.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL
LXXI. No. 6. June 2016

CONTENTS

Enantioselective hydrogenation on modified metal catalysts 178
GYÖRGY SZŐLLŐSI and MIHÁLY BARTÓK
Bruckner Room Lectures
The dragon and the spectra – puzzles from the world of infrared spectroscopy 182
SZILVESZTER GERGELY
Towards new chemical spaces: selective and effective syntheses with flow methods 185
SÁNDOR BALÁZS ÖTVÖS
Modern flame retardant methods 186
KATALIN BORDÁCS BOCZ
"Aischylosian emotions" in chemistry. Host-guest and carcer-captive supramolecular relations 189
TIBOR BRAUN
Leading companies in pharmaceutical R&D: their positions in processing industry 194
ZSOMBOR KÁPOLNAI and IMRE VIDÉKI
Industrial and cultural heritage. The MOM Cultural Centre 197
VERA SILBERER
Chembits 200
GÁBOR LENTE
News of the Month 202

A jubileumi Mengyelejev Kémiai Diákolimpia

2016-ban ötödször vett részt magyar csapat Nemzetközi Mengyelejev Diákolimpián, és a versenyt is jubileumi, ötvenedik alkalommal tartották. A diákok eredményei:

		Iskola	Kémiatanár
Stenczel Tamás Károly	ezüstérem	Török Ignác Gimn., Gödöllő	Karasz Gyöngyi, Kalocsai Ottó
Turi Soma	ezüstérem	ELTE Apáczai Csere János Gimn., Bp.	Borissza Endre
Bajczi Levente	bronzérem	Török Ignác Gimn., Gödöllő	Karasz Gyöngyi, Kalocsai Ottó
Botlik Bence	bronzérem	ELTE Apáczai Csere János Gimn., Bp.	Villányi Attila

A jeles alkalom ellenére a verseny megrendezése nem volt akadálymentes. Az előzőleg jelentkező Türkmenisztán néhány hónappal a kezdés előtt visszalépett, így az állandó szervezőbizottságot és szakmai hátteret nyújtó Moszkvai Állami (Lomonoszov) Egyetem adott helyet a versenynek. A laboratóriumi forduló az egyetemen, a verseny további része pedig az egyetem Moszkva közeli üdülőjében zajlott.

Sajnos, az időzítés idén sem lett tökéletes, épp a magyar írásbeli érettségik időpontjában volt a verseny, így az eredetileg kiválasztott csapat két tagja és több tartalék sem tudott indulni, mert a versenyzés miatti mulasztást az Oktatási Hivatal diáknak felróhatónak ítéli.

A magyar csapattal így most három 11. osztályos és egy 10. osztályos versenyző érkezett. A versenyen bővült a részvétel, 21 ország (újak: Izrael, Mongólia, Nigéria) 114 diákja nevezett.

A háromfordulós, egyhetes megmérettetés feladatai továbbra is a legnehezebbek a kémiaversenyek között, de talán az idén az időhiány miatt kevésbé voltak tökéletesen kidolgozottak a feladatok. A magyar diákok a tavalyi Nemzetközi Kémiai Diákolimpia válogatója alapján kerültek be a csapatba, és mindannyian készülnek az idei „nagy olimpiára”, ahová a csapat kiválasztása még folyamatban van.

A magyar csapat részvételi költségeinek java részét az Emberi Erőforrások Minisztériumától először elnyert támogatás (a Nemzeti Tehetség Program és az Emberi Erőforrás Támogatáskezelő által meghirdetett NTP-TV- 15-0116 kódszámú pályázati támogatás) és az Egis Nyrt. önzetlen támogatása fedezte a Magyar Kémikusok Egyesülete közreműködésével. A diákok válogatását és felkészítését középiskolai tanáraik mellett az ELTE Kémiai Intézete végezte.

A verseny hivatalos nyelve az orosz; angol fordítást is készítenek a szervezők, de a vállalkozó kísérők a verseny előtti néhány



A csapat a Kreml előtt. Elöl: Botlik Bence, Turi Soma, Stenczel Tamás, mögöttük Bajczi Levente és a két tanár: Magyarfalvi Gábor és Kiss Andrea

éjjeli órában lefordíthatják a feladatokat anyanyelvükre. A verseny három, ötórás versenyszakaszából kettő elméleti. Az első nap 8 feladatot kell megoldani, a második nap a kémia 5 nagy területéről feladott 3-3 problémából területenként csak egy-egy megoldását értékelik. A feladatok jellemzője, hogy a kérdések megoldásához sok ötlet és gondolkodás mellett időnként messze az iskolai szintet meghaladó lexikai tudás is szükséges lenne. A laborfordulóban a diákok egy összetett rézvegyületet állítottak elő, majd meghatározták annak pontos összetételét.

A szervezők a rövid szabadidőt programokkal is színesítették, moszkvai városnézés mellett az egyetem, a Moszfilm stúdiói és a borogyinói csatamező megtekintése is része volt az emlékezetes programnak, amelynek persze a legfontosabb és nem beosztott része a sok nemzet diákjainak ismerkedése, barátkozása.

Magyarfalvi Gábor

EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTÉRIUMA
Nemzeti Tehetség Program
EMBERI ERŐFORRÁS TÁMOGATÁSKEZELŐ
EGIS
MKE

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

„Az Ön GLP partnere”

Thermo Scientific:

Thermo SCIENTIFIC
Authorized Distributor

- AA, ICP-OES és ICP-MS spektrométerek
- ED-XRF készülékek
- Kompakt NMR spektrométerek
- UV/látható spektrométerek
- Automata fotometriás analizátorok
- C, H, N, S, O elemanalizátor
- FTIR, Raman és NIR spektrométerek, mikroszkópok
- Hordozható Raman, NIR és XRF spektrométerek
- GC, kvadrupol GC/MS és GC/MS/MS
- Automatizált SPE és ASE mintaelőkészítők
- HPLC, UHPLC, nano-LC
- Kvadrupol és ioncsapdás LC/MS
- Orbitrap hibrid HR/AM LC/MS
- Ionkromatográfok
- Kromatográfiás oszlopok, kiegészítők és fogyóanyagok

Olympus:

OLYMPUS
Your Vision, Our Future

- Mikroszkópok

SOTAX:

sotax
Solutions for Pharmaceutical Testing

- Tablettavizsgáló berendezések

OI Analytical:

- Purge & Trap

Markes International:

- Termikus deszorpció

PS Analytical:

- Atomfluoreszcenciás Hg, As, Se, stb. analizátorok

Trace Elemental Instruments:

- TN, TS, TX, AOX meghatározók

HunterLab:

- Színmérő készülékek

Peak Scientific:

- Gázgenerátorok

iX Cameras:

- Nagysebességű kamerák