

A TARTALOMBÓL:

Alternatív  $\beta$ -világ?

Számítógépes szimulációk

Fullerének asztrokémiája

Idei Nobel-díjak

Eladósodottság  
a vegyiparban  
és a gyógyszeriparban



# MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA LXV. ÉVFOLYAM 2010. DECEMBER ÁRA: 800 FT

## VÖRÖSISZAP- KATASZTRÓFA

Decemberi számunkban:  
a sugárterhelés becslése





# UNICAM

Magyarország Kft.

**Kiváló teljesítmény és megbízhatóság:**

**Thermo Scientific** analitikai műszerek a  
Unicam Magyarország Kft.-től



## LTQ Velos lineáris ioncsapda LC/MS

### *A legérzékenyebb és a leggyorsabb*

- Egyedülálló kettősnyomású technológia, amely kiváló csapdázási hatékonyságot, pásztázási sebességet és felbontást biztosít
- Egyidejű azonosítás és mennyiségi meghatározás komplex mintákból, alacsony koncentrációk esetén is
- 25,000 FWHM felbontású Ultra ZoomScan
- EASY-nLC nano-HPLC bővítési lehetőség
- Ideális proteomikai, metabolomikai alkalmazásokra

GC

•

GC/MS<sup>n</sup>

•

HPLC

•

UHPLC

•

LC/MS<sup>n</sup>

### *Kizárólagos képviselet:*

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

Telefon: 1-221-5536 • Fax: 1-221-5543

E-mail: [unicam@unicam.hu](mailto:unicam@unicam.hu) • Web: [www.unicam.hu](http://www.unicam.hu)

**Thermo**  
SCIENTIFIC



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

Szerkesztőség:

Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS  
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA  
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE  
Szerkesztők:  
ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,  
CHLADEK ISTVÁN, GÁL MIKLÓS,  
JANÁKY CSABA, KOVÁCS LAJOS,  
LENTE GÁBOR, ZÉKÁNY ANDRÁS  
Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,  
a szerkesztőbizottság elnöke,  
SZEKERES GÁBOR örökös főszerkesztő,  
ANTUS SÁNDOR, BECK MIHÁLY,  
BIACS PÉTER, BUZÁS ILONA,  
GÁL MIKLÓS, HANCSÓK JENŐ,  
HERMECZ ISTVÁN, 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,  
SZEBÉNYI IMRE, TÖMPE PÉTER,  
ZÉKÁNY ANDRÁS

Kapják az egyesület tagjai és a megrendelők

A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS  
Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.  
Tel.: 225-8777, 201-6883, fax: 201-8056  
E-mail: 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: 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 9600 Ft  
Egy szám ára: 800 Ft. Külföldön terjeszti  
a Batthyány 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.: 201-6883,  
fax: 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)

**Apponyi Albert program**

A projekt a Nemzeti Kutatási  
és Technológiai Hivatal támogatásával valósult meg



Devecsert – súlyos emberáldozatokat követelve és komoly környezeti károkat okozva. Most nem hibáztathatunk senkit, ezt magunk toltuk el.

A szomorú esemény másnapján utaztam külföldre, konferenciára, így csak a Euronews hírcsatornáján követhetem az eseményeket. Nem örültem, hogy napokon át vezető hír voltunk. Nagy volt a kollegák, elsősorban persze a környező országok kutatói részéről az érdeklődés a részletek iránt. Hazajövetelem után tájékoztam. A 10 évvel ezelőtti cianidos katasztrófával szemben most meglepődöttséggel töltött el a szakma reagálásának gyorsasága, hiszen egy nap alatt összeállt az MTA szakértői csapata és megkezdte a veszélyes anyag okozta károk felmérését, a környezeti szennyezések mérését, a társszervezetek adatainak összegyűjtését, az adatok értékelését. Ez nagy fejlődés a 10 évvel ezelőtti tétova, habozó fellépéssel szemben.

Az első, a veszélyt bagatellizáló nyilatkozatok után megalapozott, a veszélyt és a károkat elismerő, de a pánikot nem tápláló szakértői állásfoglalások jelentek meg az MTA honlapján (igaz, az adatok publikussága már hagyott némi kívánnivalót maga után, de ez nem szakmai döntés volt). A szakmai háttér megvolt ahhoz, hogy őszinte, politikusi megnyilvánulások hangozzanak el a tömegkommunikáció csatornáin. Hogy ez mennyire sikerült, olvasóink megítélhetik.

E számunkban a veszprémi Pannon Egyetem munkatársainak írását olvashatják a vörösiszap radioaktív sugárzásának veszélytelenségéről. A vörösiszap-„áradás” okozta környezetkárosodás mértékéről, a károk elhárításával kapcsolatos szakmai tettekről és teendőkről, a katasztrófa megismétlődésének érdekében szükséges feladatokról januári számunkban olvashatnak az MTA kilencfős szakértői csapatának vezetője, Szépvölgyi János tollából.

A legfontosabbnak az utolsó feladatot tartanám: nagyon jól emlékszem a környezetvédő szakemberek 10 évvel ezelőtti fogadkozására, hogy modellvizsgálatokat, számításokat, elemzéseket kell végezni, hogy felkészülten fogadhassunk egy ilyen vagy hasonló környezeti katasztrófát. Hát nem láttam, hogy ezen a téren felkészültebbek lettünk volna, legalábbis a vörösiszap támadását illetően nem nagyon. A következő év folyamán szétnézünk egyes vegyipari és gyógyszeripari vállalatainknál, hogyan állnak a biztonságtechnika terén, mennyire felkészültek egy hasonló katasztrófa megelőzésében, a károk minimalizálásában.

A beköszöntő ugyan nem, de lapunk másról is szól, mint a vörösiszapról. Olvassák kíváncsisággal és elégedettséggel.

2010. december

Kiss Tamás  
felelős szerkesztő

## TARTALOM

### VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

Somlai János, Kovács József, Sas Zoltán, Bui Pál, Szeiler Gábor,

Jobbágy Viktor, Kovács Tibor: Vörösiszap-tározó sérülésével kapcsolatos  
sugárterhelés becslése 378

Perczel András: Egy alternatív  $\beta$ -világ lehetőségéről 380

Darvas Mária, Jedlovsky Pál: Számítógépes szimulációk – a határfelületek  
modellezésének új eszközei 384

Braun Tibor: Fullerének asztrókémiaja 388

Iványi Zoltán: Regioizomer androszt-5-én- és androszta-5,16-dién-vázis  
N-fenil-pirazolok szintézise 391

Nemes Sándor: Eladósodottság a vegyiparban és a gyógyszeriparban 394

Markó László: Kémiai Nobel-díj, 2010 397

Hargittai István: Az idei fizikai Nobel-díj egy kémikus szemével 399

### MEGEMLEKEZÉS

Rácz László: Szekeres Gábor (1924–2010) 402

### ÉVFORDULÓ

Mátravölgyi Norbert: A Korróziós Figyelő 50 éve 403

### VEGYÉSZLELETEK

Lente Gábor rovata 406

### A HÓNAP HÍREI

408



**Címleap:**  
Vörösiszap-  
katasztrófa  
Szépvölgyi János  
felvétele

Somlai János<sup>1</sup>–Kovács József<sup>2</sup>–Sas Zoltán<sup>1</sup>–Bui Pál<sup>2</sup>–Szeiler Gábor<sup>1</sup>–Jobbágy Viktor<sup>1</sup>–Kovács Tibor<sup>1</sup><sup>1</sup> Pannon Egyetem Radiokémiai és Radioökológiai Intézet, 8200 Veszprém Egyetem út 10. | somlai@almos.vein.hu<sup>2</sup> Pannon Egyetem Környezetmérnöki Intézet, 8200 Veszprém Egyetem út 10. | kovacs@almos.vein.hu

# Vörösizsap-tározó sérülésével kapcsolatos sugárterhelés becslése

**A**z Ajka környéki vörösizsap-tározó gát-szakadásának híre bejárta az egész világot. Súlyos ipari katasztrófa történt, ami komoly ökológiai következményekhez vezetett.

Az alumíniumgyártás alapanyagaként szolgáló bauxit a talajoknál mért átlagos radionuklid-koncentrációnál (<sup>238</sup>U: 33 Bq/kg, <sup>232</sup>Th: 45 Bq/kg, <sup>226</sup>Ra: 32 Bq/kg, <sup>40</sup>K: 412 Bq/kg) [1] nagyobb koncentrációban tartalmazza a természetes eredetű uránt, (rádiumot), tóriumot (<sup>238</sup>U: 400–600 Bq/kg, <sup>232</sup>Th: 300–400 Bq/kg) [2].

A feldolgozáskor világszerte a Bayer-technológiát követik, amelynek során a bauxitot tömény NaOH-oldattal tárják fel. A folyamat melléktermékeként keletkezik a vörösizsap, melynek általában nagy a lúgtartalma. Az elnevezésre utaló vörös színt a magas (24–45%) vas-oxid-tartalomtól nyeri. A bauxit alumíniumtartalmától függően a vörösizsap a keletkezett timföld (Al-oxi-hidroxid) mennyiségének 1–1,5 szerese. Ez a nagy mennyiségű melléktermék magas víztartalmú és erősen lúgos a bent maradó NaOH következtében.

A bauxitban található természetes eredetű radionuklidok szinte teljes mennyiségben a vörösizsapba kerülnek.

Magyarországon jelentős mennyiségű bauxitot bányásztak, illetve dolgoztak fel az elmúlt évtizedekben. Ajkán 1943-ban kezdődött meg a timföldgyártás. A keletkezett, több mint 30 Mt vörösizsapot 10 kazettában helyezték el, amelyből kettő üzemel (a beszáradt hányókat lefedték, monitorozzák).

Mint ismert, 2010. október 4-én a X. tározó támfala megsérült, és közel 800 000 m<sup>3</sup> erősen lúgos (pH ≈ 13) zagy zúdult a környező településekre, illetve a Torna-patakba. A több méter magas iszapáradat épületeket, embereket sodort el, magas lúgtartalma miatt több mint 100 ember szenvedett súlyos kémiai égési sérüléseket, kilenc ember meghalt. A vörösizsap közel 1000 ha lakó-, illetve mezőgazdasági területet szennyezett el.

Mivel ismert volt, hogy a vörösizsap természetes eredetű radionuklidtartalma rela-

*A vörösizsap-tározó gát-szakadásának további környezetvédelmi következményeivel, a károk mértékével és az elhárításukra tett intézkedésekkel, azok szakmai vonatkozásaival következő számunkban foglalkozunk. Az MTA kormány által felkért kilenc tagú szakértői csapatát, elsősorban annak vezetőjét, lapunk szerkesztőbizottságának elnökét, Szépvölgyi Jánost szeretnénk megnyerni egy összefoglaló elemzés megírására. A kárelhárítás mindennapos teendői ehhez még nem biztosítják a nyugodt körülményeket. Kérjük olvasóink türelmét. (A felelős szerkesztő)*

tíve magas, felmerült a radiológiai veszélyeztetettség kérdése is. A területen lerakódott vörösizsapban található radionuklidok bomlását kísérő gamma-fotonok miatt ugyanis megnövekedhet a levegő gamma-dózisteljesítménye, a magasabb <sup>226</sup>Ra-tartalom miatt a radonexhaláció is így a levegő radonkoncentrációja, másrészt felmerül a rendkívül finom szemcsés vörösizsap kiszáradás utáni felporzódása, illetve belégzése során fellépő sugárterhelés lehetősége is.

Így munkánk során mértük a szennyezett területen a gamma-dózisteljesítményt, a radonkoncentrációt, a területen vett vörösizsapszámíték radionuklid-koncentrációját, a porkoncentrációt, a vörösizsap szemcseméret-eloszlását és az adatokból becsteltük a várható sugárterhelést.

**Gamma-dózis.** A vörösizsappal elárasztott lakott területeken belül az udvarokban, kertekben, utak mentén, konvencionálisan 1 méter magasságban mértük a dózisteljesítményt. A méréseknél Automess 6150 ADB környezeti szintű dózisteljesítmény-mérőt használtunk.

A területen a vörösizsap vastagsága 2–8 cm volt. A mért dózisteljesítmény 110–135 nGy/h között változott. Ez az adott környezetben 10–30 nGy/h növekményt jelentett a szennyezett területhez képest. (Meggjegyezzük, hogy lakóépületekben – mesterséges forrásoktól általában – 500 nGy/óra a korlát. Az ajkai, tatabányai épületekben, ahol a szénsalagot beépítették, a természetes eredetű radioizotópok miatt akár 400–800 nGy/óra értéket is mérhetünk, illetve korábban mértünk. Egyes országokban az ún. emelt szintű háttér limitjének a 300 nGy/óra értéket állapították meg.)

Amennyiben a vörösizsapot nem távolítanák el, és 2000 óra/év ott-tartózkodást, valamint a kevésbé sugárérzékeny szervek árnyékoló hatását figyelembe vevő 0,7 Sv/Gy dóziskonverziót feltételezzük, akkor ez maximum 0,042 mSv/év többletdózist eredményezne (ami a kb. 3 mSv/év természetes háttérsugárzáshoz viszonyítva elhanyagolható).

**Vörösizsapszámíték radionuklid-koncentrációja.** A Kolontár, illetve Devecser területéről gyűjtött vörösizsapszámítékat (9 db) kiszárítottuk, majd 600 cm<sup>3</sup> térfogatú fém Marinelli-edényben lezártuk. Az egyensúly beállta után ORTEC n-típusú HPGe detektorral 40 000 másodpercig mértük az intenzitást.

A számíték átlagos radionuklid-koncentrációja: <sup>238</sup>U: 265 (197–332) Bq/kg, <sup>232</sup>Th: 264 (194–337) Bq/kg, <sup>226</sup>Ra: 180 (143–237) Bq/kg, <sup>40</sup>K: 283 (228–360) Bq/kg.

Összességében elmondható, hogy a vörösizsap radionuklid-koncentrációja magasabb, mint a talajok átlagos radionuklid-koncentrációja, de jelentősen alatta van a radioaktív anyagokra vonatkozó aktivitásértékeknek, így nem tekinthető radioaktív anyagnak. Ezeket az anyagokat a szakirodalom NORM (Naturally Occurring Radioactive Materials) anyagokként kezeli.

**A levegő radonkoncentrációja.** Devecserben felállítottunk egy mérőállomást, ahol néhány napig egyéb paraméterek (porkoncentráció, meteorológiai paraméterek stb.) mellett a radonkoncentrációt is folyamatosan monitoroztuk. A méréseket Alphaquard PQ 2000 típusú műszerrel végeztük. A radonkoncentráció változását az **I. ábrán** tüntettük fel.

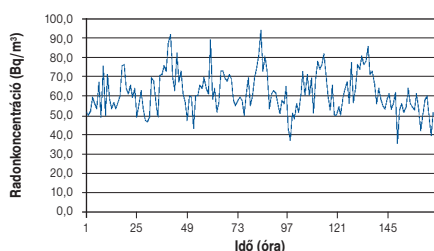
Látható, hogy a szabad légtérhez viszonyítva (amikor csak a talajból áramlik fel a ra-





don, a világátlag 10 Bq/m<sup>3</sup> [2]) relatíve magasabb értékeket mértünk – átlag 62 (36–94) Bq/m<sup>3</sup>-t. Ez egyrészt a nagy felületen szétterülő vörösiszapból származhat, de feltételezhetően nem elhanyagolható a környékben megtalálható többi vörösiszap-, illetve a rádiumot közel egy nagyságrenddel nagyobb mennyiségben tartalmazó pernyehányókból kiáramló radon sem. (Erre vonatkozó korábbi mérési eredmények nem álltak rendelkezésünkre.)

A mért érték azonban jelentősen alatta van a lakásokra vonatkozó legújabb 300 Bq/m<sup>3</sup> ICRP-, illetve WHO-ajánlásoknak [3] (korábban ez 600 Bq/m<sup>3</sup> volt).



1. ábra. A radonkoncentráció változása Devcesterben, a szabadban

Munkahelyeken hazánkban 1000 Bq/m<sup>3</sup> a cselekvési szint [4], ami 2000 óra/év ott-tartózkodást figyelembe véve kb. 6,3 mSv/év lekötött effektív dózissal felel meg.

Az itt mért értékek tehát több mint egy nagyságrenddel kisebbek. A kárelhárításban dolgozóknál 2000 óra/év ott-tartózkodást figyelembe véve is csak 0,4 mSv/év lenne a radontól származó sugárterhelés, ami elhanyagolható.

**Porkoncentráció, részecskeanalízis.** A vörösiszap kiszáradása esetén a munkálátoknál számítani kell a fokozott porképződésre is. Az ennek belélegzéséből származó sugárterhelés becsléséhez ismerni kell a vörösiszap szemcseméretét.

Korábbi vizsgálatok alapján megállapítottuk, hogy a részecskék nagy része (94,7%-a) a finomszemcsés 20 µm alá esik, ami belélegzés szempontjából a legveszélyesebb frakciónak számít (1. táblázat).

A Fritsch Analysette 22 típusú készülék-

1. táblázat. A vörösiszap szemcseméret-eloszlása

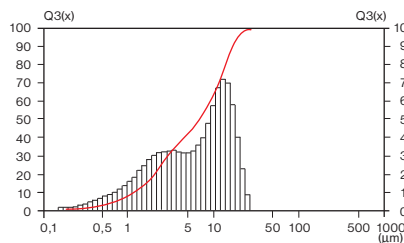
Részecskeméret (µm)	Vörösiszap (m/m%)
> 125	2,1
80–125	0,7
63–80	2,0
30–63	0,3
20–63	0,2
< 20	94,7

Mért radionuklid	Feltételezett egyensúly	Tényező (µSv/Bq)	Aktivitás-konc. (Bq/µg)	Lekötött effektív dózis (pSv/µg·m <sup>3</sup> )
<sup>238</sup> U	<sup>238</sup> U	2,9	265·10 <sup>-9</sup>	5,404
	<sup>234</sup> U	3,5		
	<sup>230</sup> Th	14		
		<b>20,4</b>		
<sup>226</sup> Ra	<sup>226</sup> Ra		180·10 <sup>-9</sup>	1,422
	<sup>210</sup> Pb	1,1		
	<sup>210</sup> Po	3,3		
		<b>7,9</b>		
<sup>232</sup> Th	<sup>232</sup> Th	25	264·10 <sup>-9</sup>	17,847
	<sup>228</sup> Ra	2,6		
	<sup>228</sup> Th	40		
		<b>67,6</b>		
<sup>235</sup> U (~ 0,7%)		<b>3,1</b>	1,85·10 <sup>-9</sup>	0,006
Összes				<b>24,72</b>

2. táblázat. A hosszú felezési idejű izotópok belélegzéséből származó lekötött effektív dózis

kel kapott, 20 µm alatti frakció eloszlását a 2. ábrán tüntettük fel. Az ábrán jól látható, hogy a por nagyobbik része a 10 µm alatti (>68%) frakció. Ez az a mérettartomány, amely a belélegezhető frakcióképezi, így az egészségre veszélyes lehet.

A Devcesterbe kihelyezett mérőállomáson október 7–13. között folyamatosan, órás intervallumokban mértük a 10 µm alatti porkoncentrációt. A méréseknél mobil mérőrendszerbe integrált, Environment Sa gyártmányú, MP 101 típusú mérőberendezést használtunk. Ezen időszak alatt a porkoncentráció átlaga 33,4 (0,1–114,6) µg/m<sup>3</sup> volt.



2. ábra. A vörösiszap finomszemcsés eloszlása

Az adatokat elemezve megállapítható, hogy a legmagasabb értékek az éjszakai órákban voltak, amikor a fűtés miatt megnövekedett a porkoncentráció. (A kiépített mérőrendszer a meteorológiai paraméterek folyamatos adatgyűjtését biztosította, így bizonyított ezen megállapítás.)

**Vörösiszap-belélegzésből származó sugárterhelés számítása.** A számításoknál az UNSCEAR kiadványoknak megfelelően a hosszú felezési idejű radionuklidokat vettük alapul (2. táblázat).

A felnőtt lakosságra vonatkozó 7300 m<sup>3</sup>/év légzésteljesítményt, illetve a szabadban töltött 0,2-es faktort figyelembe véve [1] 1 µg/m<sup>3</sup> vörösiszap-porkoncentráció 36 nSv/év lekötött effektív dózist eredményez. Figyelem-

be véve a jelenlegi porkoncentráció-adatokat, 1,2 µSv/év lekötött effektív dózis várható.

A területen dolgozók esetén 1,2 m<sup>3</sup>/h légzésteljesítményt és 2000 óra/év munkaidőt figyelembe véve 1 µg/m<sup>3</sup> vörösiszap-porkoncentráció belélegzése esetén 59,31 nSv/év lekötött effektív dózis várható, azaz folyamatosan 16,9 mg/m<sup>3</sup> vörösiszap-porkoncentráció (ami a mért érték kb. 500-szorosa) belélegzése esetén érné ez el a lakosságra vonatkozó 1 mSv/év dóziskorlátot.

A fenti becslés több szempontból is konzervatív: feltételezzük, hogy az összes por vörösiszap, a porkoncentráció egész évre érvényes (ami a rekultiváció miatt felülbecslést jelent), az összes por a tüdőre veszélyes szemcseméretben fordul elő (illetve a <sup>226</sup>Ra esetén nem vettük figyelembe, hogy a <sup>222</sup>Rn bomlástermék egy része eltávozik, így az utána következő <sup>210</sup>Pb, <sup>210</sup>Po koncentrációja is kisebb lesz).

Összefoglalva elmondhatjuk, hogy a területet elszennyező vörösiszap okozta gamma-dózisteljesítmény-növekmény miatti külső, illetve a belélegzett por miatti belső sugárterhelés minimális, és a levegőben mérhető radonkoncentráció is elhanyagolható sugárterhelést eredményez.

IRODALOM

[1] United Nations. Sources and effects of ionizing radiation. United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation, 2008. Report to the General Assembly, with scientific annexes. United Nations, New York, 2008.  
 [2] United Nations. Sources and effects of ionizing radiation. United Nations Scientific Committee on the Effects of Atomic Radiation, 2000. Report to the General Assembly, with scientific annexes. United Nations, New York, 2000.  
 [3] World Health Organization (2007). WHO handbook on indoor radon A public health perspective Radon Project Survey on Radon Guidelines, Programmes and Activities. WHO, Geneva. 2009, ISBN 978 92 4 154767 3  
 [4] Az egészségügyi miniszter 16/2000. (VI.8.) EüM rendelete, az Atomenergiáról szóló 1996. évi CXVI. törvény egyes rendelkezéseinek végrehajtásáról. Magyar Közlöny 55. szám, Budapest, 2000.

Perczel András

■ ELTE Szerves Kémiai Tanszék

# Egy alternatív $\beta$ -világ lehetőségéről

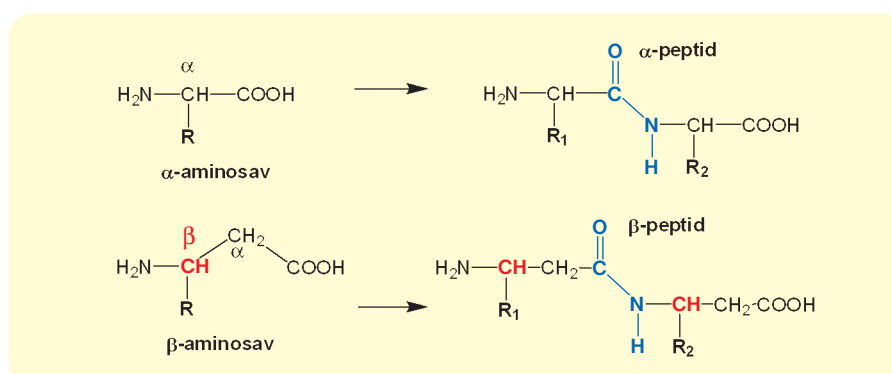
**A** tudományos fantasztikum határát súrolva újra és újra megjelennek felvetések arról, hogy létezik-e a Földünkön kívül olyan bolygó, ahol van esetleg élet, vagy annak csírája fellelhető, de legalábbis tárgyi előfeltételei megtalálhatók. A kérdésre nem tudjuk a választ, noha az asztrobiológusok kutatásai ígéretes jeleket és lenyomatokat vélnék felfedezni például egyes meteoritokon, különféle égitesteken, s az exobiológusok folyamatosan keresik az élet lehetőségét vagy annak megjelenési formáit a Naprendszeren belül és kívül. Nem lőttük még más bolygón az élet jeleit, igaz, az ember a Holdnál távolabb még nem merészkedett, s a Marsnál messzebb még nem kísérletezett. Talányok azonban nemcsak a földön kívüli, hanem a földi életéről is megfogalmazódtak már. Ilyen például a „*vis vitalis*” (életerő elmélet) kapcsán kibontakozott kérdésfeltevés. Nevezetesen ha *Berzelius* svéd kémikus dualisztikus felosztása a világ anyagaira – szerves és szervetlen molekulákra – igaz, és ha az is helytálló, hogy a szerves molekulák csak élőlényekben alakulhatnak ki, akkor jogos az a kérdés is, hogy hogyan alakultak ki az élőlények, amelyek egyfelől a szerves molekulákat „gyártják” és „átalakítják”, másfelől azonban ezeket keletkezésükhöz és működésükhöz is igénylik. *Chevreuil* kísérleteit követően 1824-ben *Wöhler* adta meg a választ. Előbb oxálsavat, majd pár évvel később karbamidot állított elő egyszerű, szervetlen vegyületekből. Tudjuk, hogy nincs élesen meghúzható határ szerves és szervetlen molekula között, hiszen például mindkét típusban található szénatom, még ha más és más arányban is. Ez utóbbi elemhez kapcsolódott egy másik érdekes kérdés: vajon lehetséges-e a nemszénalapú élet, s ha igen, akkor az adott égi-

testen milyen peremfeltételek szükségesek ehhez? (Noha a legtöbb szakember elveti, sokak fantáziáját megmozgatta mind a szilícium-, mind a nitrogénalapú élet lehetősége.) A szénalapú élet – az, amit egyedül megismerhettünk – sok feltétele mellett az egyik az, hogy egyszerre legyenek jelen a molekulákban eltérő oxidációs állapotú szénatomok. Ilyen vegyület például az ecetsav (–3, +3), az aminosav, más néven a glicin (–1, +3), de ilyen az összes további fehérjeépítő  $\alpha$ -aminokarbonsav (0, +3) is. Érdekes, hogy a ma ismert élet minden formájában – az archeáktól és baktériumoktól kezdve, a gombákon és növényeken átívelően, az állatokig előforduló bármelyik fehérjében – kizárólag ugyanaz a 20 természetes, L-konfigurációjú  $\alpha$ -aminosav jelenik meg. Nem értjük pontosan a „földi” kiralitás eredetét, s azt sem, hogy miért az L-aminosavak azok, amelyek a riboszomális szintézis során beépülnek a fehérjékbe. Kémiai szempontból annak sincsen egyértelmű oka, hogy miért pont húsz és miért pont ez a húsz  $\alpha$ -aminosav építi fel az ismert fehérje-univerzumot. (Bár a szelenociszteinnel, illetve egyes metanogén archeában előforduló pirrolizinnel megtalálták a kodonját, e két

„extra” aminosav kódolása és megjelenése az összképet jelentősen nem befolyásolja.) Vélhetőleg kevesebb aminosavból felépülő ősfehérjék is elláthatták a maihoz hasonló feladatokat a földtörténet korábbi szakaszaiban. Végül, de nem utolsósorban, feltehetjük azt a kérdést is, hogy mi az  $\alpha$ -aminosavak kizárólagos preferáltságának az oka a DNS által kódolt fehérjék esetében.

A továbbiakban azzal a kérdéssel szeretnénk behatóbban foglalkozni, hogy bár az  $\alpha$ - mellett a  $\beta$ -aminosavak is előfordulnak a természetben, s noha a földi élet fontos alkotói, ez utóbbi molekulák miért nem alkotnak rövidebb-hosszabb polipeptidláncot. Miért nincsenek  $\beta$ -aminosavakból felépülő fehérjék? Kémiai értelemben a  $\beta$ -aminosavak nemcsak elvben képesek a társaikhoz hasonlóan peptidek vagy fehérjék létrehozására, de vélhetőleg jelen voltak a Földön az élet hajnalán is. Ezt mi sem bizonyítja jobban, mint hogy meteoritokban már azonosítottak nem földi eredetű  $\beta$ -aminosavakat, illetve hogy a híres Miller-féle kísérlet során (Science 1953)  $\beta$ -aminosavak is keletkezhetnek. Hogy mennyire biogén molekulákról van szó, jól mutatja az is, hogy ha transzfer-RNS-hez kap-

1. ábra. Az  $\alpha$ - és  $\beta$ -aminosavakból felépülő  $\alpha$ - és  $\beta$ -peptidek sematikus szerkezete

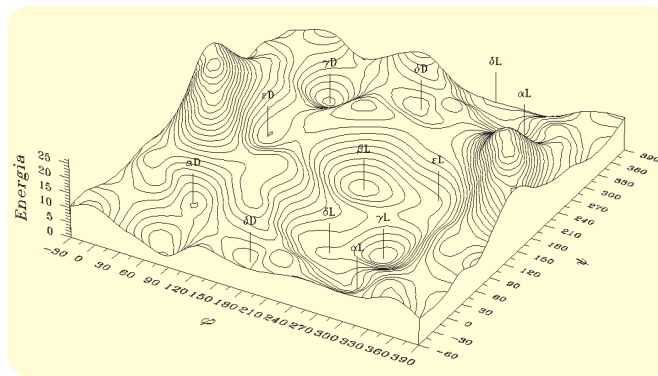


■ A szerző 2010 májusa óta az MTA levelező tagja.



csoltak  $\beta$ -aminosavat, akkor riboszomális szintézissel  $\beta$ -peptideket is elő lehetett állítani. Különböző  $\beta$ -aminosavak és származékaik sok helyen előfordulnak a természetben. A legelterjedtebb  $\beta$ -aminosav a  $\beta$ -alanin, más néven homoglicin vagy 3-aminopropionsav. Ez az aminosav előfordul a természetben önmagában, vagy egy hisztidinszármazékkal összekapcsolva az anszerinben ( $\beta$ -alanil-*N*-metilhisztidin). Megtalálható továbbá a B<sub>5</sub>-vitaminban (pantoténsavban), ami a koenzim-A fontos építőeleme, s egy sor antibiotikum fontos alkotórésze is. (Gondoljunk csak a penicillin  $\beta$ -laktámgyűrűjére.) Noha látszik, hogy a  $\beta$ -aminosavak elvben „életképesek”, érdekes módon a természetben egymással összekapcsolódva  $\beta$ -peptideket ez idáig nem azonosítottak. Ez már csak azért is különös, mert – sok más kutató mellett – Dieter Seebach svájci, Samuel Gellman amerikai, Fülöp Ferenc magyar kutatók és munkatársaik teljesen rutin szintetikus eljárásokkal, szokványos laboratóriumi körülmények között sokfajta  $\beta$ -peptidet állítottak már elő. Éppen ezért érdekes, hogy  $\beta$ -peptideket mégsem tudunk a természetből izolálni. Be fogjuk látni, hogy noha szintetikus okok miatt a  $\beta$ -peptideknek létképeseknek és elterjedteknek kellene lenniük a természetben, nagyon is sajátos – az  $\alpha$ -aminosavakból felépülő párjaiktól jellegzetesen eltérő – térszerkezeti tulajdonságokkal rendelkeznek. Ez utóbbi különbség lehet éppen a magyarázata annak, nem a  $\beta$ -, hanem az  $\alpha$ -peptidek (és fehérjék) rendelkeznek olyan konformációs tulajdonságokkal (1. ábra), amelyek következtében evolúciós előnyhöz juthattak.

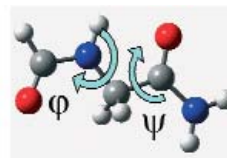
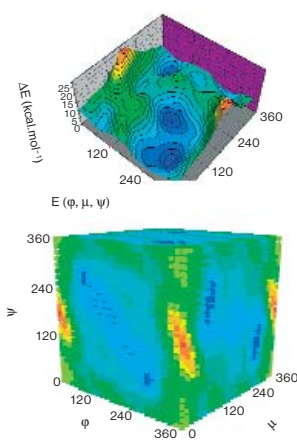
Bár a legtöbb szerves makromolekula tartalmaz egynéhány olyan kovalens kötést, amely mentén a megfelelő molekularészletek egymáshoz viszonyítva viszonylag szabadon elfordulhatnak, hajlamosak vagyunk ezt a tulajdonságot elfelejteni és a molekulát egyetlen, szerencsés esetben a legstabilabb téralkatának megfelelően ábrázolni. Az etán C1–C2 kötése mentén történő metilcsoportok forgatása, amit a  $\phi$  változóval jellemezhetünk, éppen 3 minimumot és egy



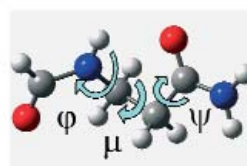
2. ábra. A For-L-Ala-NH<sub>2</sub> Ramachandran-felszínén,  $E=f[\phi, \psi]$ , a 9 elvart minimum közül a legtöbb azonosítható. Így például látható a  $\beta$ -redőzött térszerkezetet építő elem, a  $\beta_L$  téralkat, az  $\alpha$ -hélixet eredményező  $\alpha_L$ -konformáció stb.

szimmetrikus potenciálisenergia-görbét ( $E=f[\phi]$ ) eredményez. Mivel ebben az esetben az  $E=f[\phi]$  függvény 3 minimuma azonos energiájú (azaz degenerált), az etán esetében egyetlen konformerről, tehát egyetlen, időben tartósan megvalósuló téralkatról beszélhetünk csupán. Az egy szénatommal bővített propán esetében, a C1–C2 és C2–C3 kötések mentén már egy kissé bonyolultabb 2D felület analízise eredményezi ugyanezt a kvalitatív képet: a propánnak is csak egyetlen téralkata van. Tovább vizsgálva a homológ sort, a bután esetében már 3 független torziósszög mentén ( $\phi, \mu$  és  $\psi$ ) kell a probléma megoldását keresnünk. Ez utóbbi esetben egy 3D kockában ( $E=f[\phi, \mu, \psi]$ ) kell a nehezebben szemléltethető minimumokat

3. ábra. A legegyszerűbb  $\alpha$ - és  $\beta$ -aminosavból – a glicinből és a homoglicinből (más néven  $\beta$ -alaninból) – felépülő  $\alpha$ - és  $\beta$ -peptid-modellek. A két amidcsoport közé zárt metilén-, illetve etilén-csoportok flexibilitása eltérő. Míg az N-formil-glicinamid gerinckonformációit két torziósszög ( $\phi$  és  $\psi$ ), addig az N-formil-homoglicinamidét a  $\phi, \mu$  és  $\psi$  torziósszög-hármas írja le. E 2, illetve 3 változóhoz tartozó potenciálisenergia-felület ( $E=f[\phi, \psi]$ ), illetve -kocka ( $E=f[\phi, \mu, \psi]$ ) kirajzolja azokat a torziósszög-kombinációkat, amelyek a legalkalmasabb téralkatokat tükrözik



For-Gly-NH<sub>2</sub>



For-hGly-NH<sub>2</sub>

azonosítani. Beláthatjuk, hogy bár a kockában rejtőző minimumok száma összesen 27 ( $=3 \times 3 \times 3$ ), a butánnak mégis mindössze két megkülönböztethető energiájú minimuma van, azaz a bután összesen 2 lehetséges téralkattal rendelkezik.

Ez utóbbi kvalitatív információt a legtöbb elsőéves hallgató is ismeri, s vizsgán fel tudja rajzolni a szinklinális (vagy röviden gauche), illetve az antiperiplanaris (röviden anti) térszerkezeteket. De akkor minek beszélni hiperfelületek minimumairól, megjelenő és degenerált térszerkezetekről? Azért, mert ha a

propán metilén-csoportjához kapcsolódó két metilcsoportot formamiddal helyettesítjük, és így a For-Gly-NH<sub>2</sub>-t kapjuk, akkor a minimumok szimmetria okozta degeneráltsága egy csapásra lecsökken, és akár mind a 9 minimum megkülönböztethetővé válhat. A bután hasonló „átszabása után”, megkapva a For-homoGly-NH<sub>2</sub>-t, a legegyszerűbb  $\beta$ -peptidet, azt látjuk, hogy a 3D-kockában a minimumok száma továbbra is 27, ám ezek közül a legtöbb már nem degenerált.

A poliamid rendszerek konformációanalízise több évtizedes múltra tekint vissza, s amióta közismertté vált a ramachandrani intuitív kép, azóta a polipeptidek konformációs tulajdonságait, a lehetséges téralkatok számát és jellemzőit elvben meg tudjuk becsülni. Az  $\alpha$ -peptidek térszerkezetük kialakítása során aminosavanként rendre akár 9 különböző gerinc-alaptéralkat közül is választhatnak (2. ábra). Mivel a  $\beta$ -peptidek esetében ugyanez a szám 27 ( $=3^3$ ) – az egyel több CH<sub>2</sub>-csoport megjelenése, illetve az ezzel járó extra torziósszög beépülése miatt –, érezzük, hogy az utóbbi polimer típus – már az oldallánc „téralkat-színező” hatásától eltekintve is – lényegesen flexibilebb molekulákat takar (3. ábra).

Számba véve a lehetséges gerinc-téralkatok, idegen kifejezéssel „foldamer”-ek számát beláthatjuk, hogy ha egy hexapeptid  $\alpha$ -aminosavakból épül fel, akkor kb. félmillió, míg ha  $\beta$ -aminosavból, akkor több mint 3 milliárd térszerkezet közül választhat (1. táblázat). E két po-



Alegységszám	$\alpha$ -peptid	$\beta$ -peptid
1	9	27
2	81	729
3	729	9 683
4	6561	531 441
5	59 049	14 348 907
6	531 441	387 420 489
7	4 782 969	10 460 353 203
8	43 046 721	2,8243 E+11
9	387 420 489	7,6256 E+12
10	348 678 4401	2,1 E+14
20	1,2 E+19	4,2 E+28
40	1,5 E+38	1,8 E+57
60	1,8 E+57	7,6 E+85
80	2,2 E+76	3,2 E+114
100	2,7 E+95	1,4 E+143

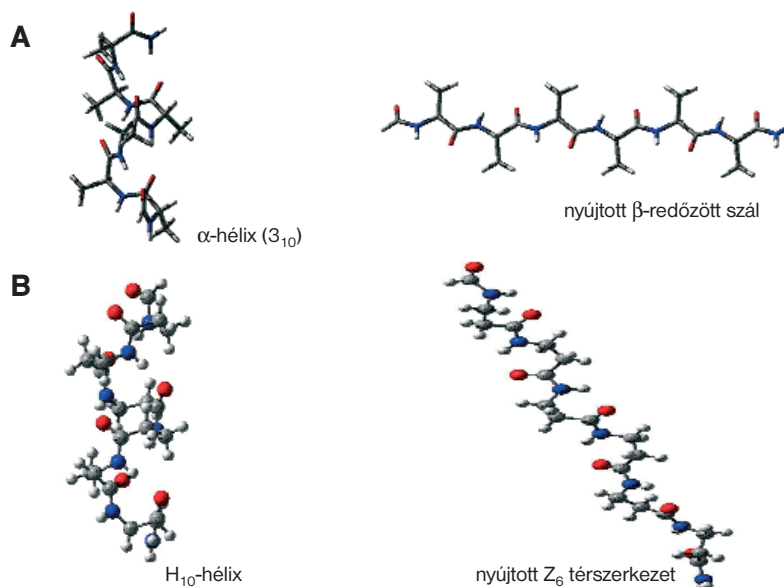
1. táblázat. Néhány  $\alpha$ - és  $\beta$ -aminosavból felépülő (pl. For-(L-Ala)<sub>n</sub>-NH<sub>2</sub> és pl. For-(L-hAla)<sub>n</sub>-NH<sub>2</sub>) lehetséges gerinckonformereinek maximális száma

liamid rendszer esetében a szekvenca hosszának növekedésével ez a különbség elvben folyamatosan és jelentős mértékben nő. Ám mint hamarosan látni fogjuk, a valóság mégsem ez. (A konformációs sokszínűség különbsége még nagyobb volna a  $\beta$ -peptidek javára, ha figyelembe vennénk azt a szerkezetben rejlő további lehetőséget, hogy a  $\beta$ -aminosavak az  $\alpha$ -, a  $\beta$ -, vagy akár mindkét szénatomon szubsztituálhatók egy, esetleg két oldallánccal is.)

A rövidebb polipeptidek szerkezetvizsgálata során éppen az a szakmai kihívás, hogy már viszonylag kis tagszám esetén is az egymással egyensúlyt tartó foldamerek száma sok száz vagy ezer (1. táblázat), mivel azonban stabilitáskülönbségük kicsi, akár mind a száz vagy ezer egy időben jelen is van a molekuláris rendszerben. Továbbá a rendszerhez tartozó potenciális-energia-(hiper)felületen a minimumokat elválasztó nyeregponatok kellően alacsonyak (2. ábra) – tehát a konformerek könnyen egymásba alakulhatnak –, és ezért például szobahőmérsékleten az esetenként nagyon is eltérő térszerkezetek dinamikus sokaságot alkotnak a Boltzmann-eloszlásnak megfelelően. Mindez egy aligha megismerhető rendszerré bonyolódna, ha a primer szekvenca hosszának függvényében nem jelenne meg egy további, az önrendeződést elősegítő fontos kölcsönhatás. A korábban említett dinamikus sokaság egyes téralkatai – az aminosav-összetétel és/vagy a polipeptidlánc hosszának függvényében – extra stabilitásra tehetnek szert. Ennek hátterében több eltérő jelenség húzódik meg, amely nemcsak a szomszédos, de akár a molekula szekvenciáli-

san távoli pontjait is összekapcsolhatja. Ilyen összekötő kölcsönhatások lehetnek a megjelenő hidrogénhidak és ionos kölcsönhatások (pl. sóhidak), valamint a hidrofób kontaktusok. Például egy  $\alpha$ -peptid csak akkor tudja „kipróbálni” a  $3_{10}$ - vagy  $\alpha$ -hélix téralkatot (4. ábra), ha legalább 3-, illetve 4-amidkötést (4-, illetve 5-aminosavat) tartalmaz. (A „kipróbálni” kifejezés a sokaság sztochasztikus leírás módjából adódik.) Ez nem jelenti azt, hogy a szóban forgó peptid a helikális szerkezet elvi megjelenése után egy csapásra helikálissá is válik, hiszen a hélix továbbra is csak egy a sok ezer felvehető téralkat közül (1. táblázat). Kiemelt jelentősége mégis azért

4. ábra. A legegyszerűbb  $\alpha$ - és  $\beta$ -aminosavból felépülő gerinc-térszerkezetek között vannak helikálisak (pl. a-,  $3_{10}$ -,  $H_{10}$ -hélix), vannak nyújtott (pl.  $\beta$ -redőzött szál,  $Z_6$ ) szerkezetek stb., melyek közül több kiválasztottat másodlagos szerkezeti elemnek hívunk

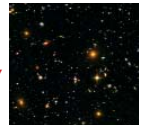


van egy helikális térszerkezetnek, mert az annak palástja mentén megjelenő „új” hidrogénhid/hidak extra stabilizációt (2–4 kcal·mol<sup>-1</sup>) jelenthet(nek), ami viszont már jelentősen befolyásolhatja a konformerek Boltzmann-eloszlását. A hidrogénhidak „megjelenése” más térszerkezetek kiválasztódását is elősegítheti, azok stabilizációjának növelésével. Ezért jelennek meg a  $\beta$ -kanyar, a hajtűkanyar, a  $\beta$ -redőzött rétegek stb. egy-egy peptidszekvenca esetében.

Az egyszerűség kedvéért úgy is szemlélhetjük a jelenséget, hogy ha ezek a hossz függvényében „újjonnan” megjelenő és kedvező kölcsönhatások együttesen kompenzálni tudják a sokaság leszűküléséből adódó kedvezőtlen entropikus tényezőt, akkor a molekuláris rendszer egyfajta térszerkezeti szelekció alá esik. Hasonlóan a kristályosodáshoz, ebben az esetben is egy-egy termodinamikai szempontból kedvező téralkat dominanciája nő meg, s válik akár kizárólagossá a molekula számára. Mindez a gyakorlat szintjén azt jelenti, hogy a kémiai konstitúció – tehát hogy  $\alpha$  vagy  $\beta$  a rendszert felépítő aminosav –, az oldalláncszerkezet és mozgékonyág, valamint a vizsgált rendszer molekuláris környezete (oldószer típusa stb.) függvényében más és más hosszúnál és kémiai összetételnél jelenhetnek meg az időátlagban egységes téralkatok.

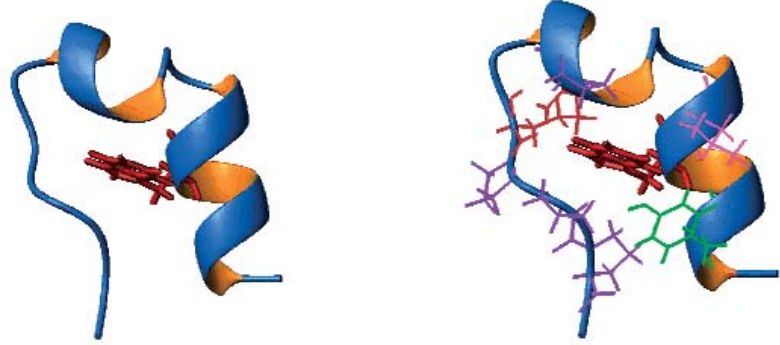
Térjünk most vissza korábbi kérdésünkhöz, amely szerint lehetséges-e hogy a  $\beta$ -aminosavak kémiailag nem, de konformációsan nagyon is különböznek  $\alpha$ -párjaiktól? S ha igen, akkor lehet-e, hogy éppen ez az oka annak, hogy nem tudtak





jobban integrálódni az „élet” hordozó-molekulái közé? Átfogalmazva, az első kérdést tegyük úgy fel, hogy milyen peptidlánc-hossz esetén jelennek meg az önszerveződő másodlagos szerkezeti elemek az  $\alpha$ - és a  $\beta$ -petidek esetében? Az elmúlt évek szintetikus erőfeszítései, spektroszkópiai vizsgálatai és molekulamodellezésből származó tapasztalatai egybehangzóan azt mutatják, hogy noha a  $\beta$ -aminosavak flexibilisebbek, mint  $\alpha$ -párjaik (3. ábra), már kisebb aminosavszámú rendszereikben (azaz rövidebb  $\beta$ -peptidek esetében) is alkothatnak stabil, sőt „túlságosan is stabil” térszerkezetű konformereket. Éppen az aminosavankénti extra metilén-csoport (1. ábra) és a helyi flexibilitás növekedése teszi lehetővé, hogy a  $\beta$ -peptid gerince hajlékonyabb, adaptivitása nagyobb legyen. Ezért már rövidebb peptidlánc esetében is fel tud úgy tekeredni, hogy a kialakuló kedvező kölcsönhatások túl tudják kompenzálni az „entropikus veszteséget”. Ennek eredménye az, hogy bizonyos szekvenciák esetén akár már egy 6–8 aminosavból felépülő  $\beta$ -peptid is időátlagban csupán egyetlen helikális szerkezetet mutat (pl. a-[hVal-hAla-hLeu]<sub>2</sub>- a H<sub>14</sub>-szerkezetet veszi fel). Ugyanez elképzelhetetlennek tűnik  $\alpha$ -peptidek esetében, hiszen elég csak a penatratin-molekulára gondolnunk, amely egyike a legrövidebb ma ismert helikális struktúráknak: a penatratin 16 aminosavból épül fel, és csak a hélixbe csavarodást segítő TFE-ben (CF<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-OH) veszi fel a rugószerű téralkatot. Úgy tűnik tehát, hogy nemcsak a hélixek, de általában a kialakuló másodlagos szerkezeti elemek mérete rövidebb és fajlagos stabilitása is nagyobb akkor, ha a peptid  $\beta$ - és nem  $\alpha$ -aminosavakból épül fel. (Bár a térszerkezeti családok rokoníthatók a két peptid típus között – pl. helikális, nyújtott, csavart, visszahajló –, a konkrét másodlagos szerkezeti elemek egymástól kissé mindig különböznek.)

Csupán egy kérdés maradt, amit érdemes még megválaszolni: miért gond az a további önszerveződés szempontjából, hogy a kialakuló másodlagos szerkezeti elemek túlságosan stabilak? Ha megnézzük az ismert térszerkezetű fehérjéket, akkor azt látjuk, hogy azok közül sokan olyan globuláris térszerkezettel rendelkeznek, amelyben a hidrofób aminosavak belülrre kerülve a vizes fázistól elfordulnak, majd eltemetődnek. Ez úgy valósul meg, hogy a tipikus másodlagos szerkezeti elemek (pl. hélixek) időnként megtörnek, majd arrébb újratekercődnek (lásd hemoglobin, mioglobin stb.). A másodlagos szer-



5. ábra. A ma ismert legrövidebb globuláris jellegű minifehérje a Tc5b. Jól látszik, hogy a hélix-rész megtörik, valamint a molekula „folytatása” visszahajlik alá azért, hogy a központi hidrofób aminosav (Trp) (A) el tudjon a víz elől temetődni (B)

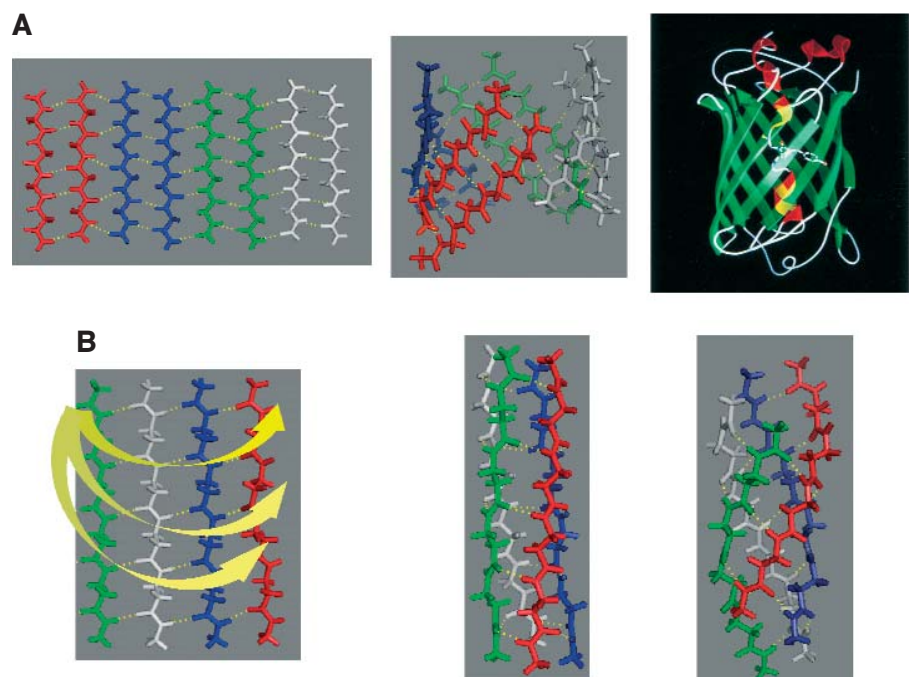
kezeti elemeknek tehát nagy szerepük van az önszerveződés elindításában s az előzetes konformációs szelekcióban, de ha azok túlságosan is stabilak, vagy méretük túlságosan is rövid, akkor nehézség támadhat a harmadlagos szerkezetté való továbbalakulásban, illetve a hidrofób részek hatékony eltemetésében (5. ábra).

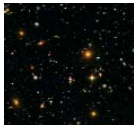
Ha tehát nemcsak rövidebbek, hanem merevebbek is (tehát kevésbé adaptívak) a  $\beta$ -peptidek másodlagos szerkezeti elemei, akkor tényleg nehézségük támadhat a globulussá tekeredésük során, hiszen ezen a módon nem tudnak termodinamikailag kedvezőbb állapotba jutni. Ma azt gondoljuk, hogy az enzimek és más fontos biológiai rendszerek globuláris térszerkezete és biológiai funkciója összefügg. Ne feledjük, hogy az anfinzeni felfedezés (1972-es Nobel-díj) lényege éppen az, hogy a fehérjék

térszerkezete hordozza a molekulák bioaktivitását. Így a mai ismereteink szerint a fehérjékhez hasonló, önszerveződő, globuláris téralkatú s ezáltal biológiai funkciót betölteni képes makromolekulák  $\beta$ -aminosavakból nem tudnak felépülni, mivel már a feltekeredési „út” elején termodinamikai mélypontra, azaz csapdába kerülnek. Lehet, hogy a földi evolúció során a rövidebb szekvenciák túlzott stabilitása, illetve azok adaptív önszerveződésének hiánya miatt szorultak ki a molekuláris evolúcióból a  $\beta$ -peptidek?

Kitekintésként gondoljuk még meg, hogy lehet-e ezekből a termotabil, biokompatibilis, részben biodegradábilis, azaz „zöld” molekulákból, racionális tervezéssel, hasznos szerkezeti anyagokat előállítani. A válasz igen, de mielőtt a részletekre kitérnénk, kanyarodjunk vissza a korábbi gondolat-

6. ábra. A  $\beta$ -hordó szerkezetté feltekeredő fehérjék (A) hasonlóságot mutatnak a  $\beta$ -peptidek által létrehozható nanocsövekkel (B)





menethez. Ha tehát a  $\beta$ -peptidek vízbe kerülve nem tudják hidrofób aminosavaikat további feltekeredéssel a víz elől „eltüntetni”, akkor lehet, hogy ugyanezt a feladatot más módon oldják meg. Az alternatív stratégia lehet például nanocsövek létrehozása és így a hidrofób régiók begöngyölése. Elképzelhető továbbá, hogy olyan oligo- és polimerek orientált önszerveződését valósítják meg, ahol aztán a hidrofób aminosavak eltűnhetnek a vízmolekulák elől. A nanocsőképzés ötlete a fehérjék világától sem áll messze. A  $\beta$ -redőzött rétegekből felépülő  $\beta$ -lemez úgynevezett  $\beta$ -hordóvá tud feltekeredni, amire több példát is láthatunk a természetben (6/A ábra). Ma talán a legismertebb ilyen molekula a GFP fehérje (zölden fluoreszkáló fehérje), amelynek felfedezéséért 2008-ban Nobel-díjat adtak. Számításaink értelmében úgy tűnik, hogy a  $\beta$ -peptidek hasonlóan könnyen képesek változatos méretű nanocsöveket létrehozni (6/B ábra). Ez utóbbi kategóriára kísérleti evidenciák még nem állnak rendelkezésünkre.

Kiemelkedő rugalmasságuk és jó szilárdságtani mutatóik miatt az utóbbi évtizedekben a tudományos és műszaki élet figyelme olyan természetes és fehérjeszerű anyagok felé fordult, mint a pók- vagy hernyóselyem, az emberi haj, vagy a tropokollagén. Várható, hogy a peptidekből és fehérjékből álló biodegradábilis és biokompatibilis rendszerek egyre fontosabb szerephez jutnak a jövőben az új típusú szerkezeti anyagok tervezése és előállításának során. Ebben a sorba illeszkednek a  $\beta$ -észterek és  $\beta$ -peptidek, amelyek között vannak az önfelszívódó varratok és a gyémántkeménységű szívbillentyűk komponensei is ( $-\text{[O-CH(CH}_3\text{)-CH}_2\text{CO]}_n-$  és  $-\text{[O-CH(COOH)-CH}_2\text{CO]}_n-$ ). Várható, hogy a szerkezeti anyagok széles arzenálját tovább fogják gazdagítani az optimált tulajdonságú  $\beta$ -peptidek. Ezek a racionálisan tervezett nanostruktúrák felhasználhatók lehetnek enzimrezisztens bioanyagok, nanocsövek, nanopólusok, ellenanyag- és hordozómolekulák, ioncsatornák stb. előállítása során. Ha a természet ez idáig mellőzte is és „mostohán bánt” a  $\beta$ -peptidekkel, a molekulák „házasításának” 21. századi előretörésével ők is szerephez juthatnak.

Végül a szerző köszöni az ELTE Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium (<http://www.chem.elte.hu/departments/protnmr/>) összes kollégájának munkáját; különösen Beke Tamás, Pohl Gábor, Czajlik András, Jákló Imre és Gáspári Zoltán segítségét.



Darvas Mária–Jedlovsky Pál

■ ELTE Kémiai Intézet

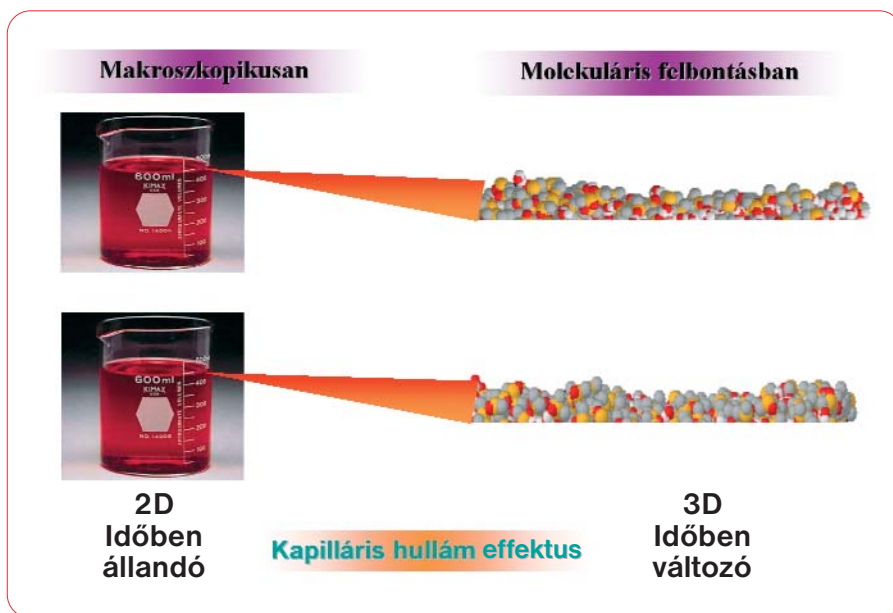
■ EKF Kémia Tanszék  
MTA Műszaki Analitikai Kémiai Kutatócsoport  
ELTE Kémiai Intézet | [pali@chem.elte.hu](mailto:pali@chem.elte.hu)

# Számítógépes szimulációk – a határfelületek modellezésének új eszközei

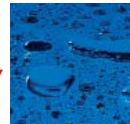
**M**i sem lehet egyszerűbb feladat, mint egy pohár víz felületét jellemezni, egy teljesen sík, tökéletes kétdimenziós réteget, amely a levegőt és a vizet egymástól elválasztja. Ha azonban ugyanezt a felületet egy olyan képzeletbeli mikroszkóppal nézzük meg, melyen keresztül a vízmolekulák egyenként látszanak, a szemünk elé táruló látvány már korántsem lesz ennyire hétköznapi (1. ábra). A határfelületet al-

kotó vízmolekulák ugyanis folyamatos mozgásban vannak, ami a felületen kis amplitúdójú, időben folyamatosan változó hullámokat kelt, melyeket kapilláris hullámoknak szokás nevezni. Mindemellett egyes vízmolekulák el is hagyják a felületet, miközben helyüket mások töltik be. Vagyis a makroszkopikus, szabad szemmel látható kétdimenziós, időben teljesen állandónak tekinthető képet egy igencsak mozgalmas,

1. ábra. Folyadékfázis határfelülete makroszkopikusan és molekuláris felbontásban



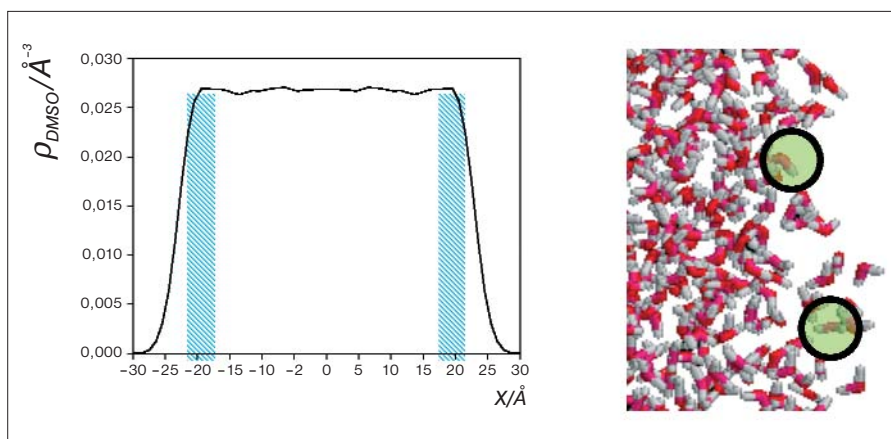




háromdimenziós és időben is folyton változó molekuláris mozi váltja fel, ha a felületet az atomok méretével nagyjából meg egyező felbontásban vizsgáljuk.

Természetesen hasonló a helyzet akkor is, ha mikroszkópunkat két, egymással nem elegyedő folyadék, például olaj és víz között húzódnó határfelületre irányítjuk. Közismert tény, hogy a határfelületek tulajdonságai eltérnek az azonos anyagi minőségű tömbfázis tulajdonságaitól, ebből adódik például a fázishatárokon fellépő (határ)felületi feszültség is. Makroszkopikus méretű rendszerek vizsgálata során persze a határfelület különleges tulajdonságait joggal hagyhatjuk figyelmen kívül, hiszen a felületi molekulák száma elhanyagolhatóan kicsi a fázis belsejét alkotókéhoz képest. A manapság dinamikusan fejlődő tudományterület, a nanotechnológia azonban éppen olyan méretű rendszerek vizsgálatával foglalkozik, ahol a fent említett elhanyagolás már egyáltalán nem jogos, hiszen a nano- vagy legfeljebb mikrométeres mérettartományba eső részecskék esetében a felületi molekulák a teljes részecske jelentős hányadát adják, sőt sokszor az egész rendszer tulajdonságait a részecskék felületének tulajdonságai határozzák meg. Nem véletlen tehát, hogy manapság a kutatók nagy energiát fektetnek határfelületek szerkezetének minél részletesebb felderítésébe. A közelmúltban számos olyan kísérleti technikát fejlesztettek ki, amellyel a felületet gyakorlatilag atomi felbontásban láthatjuk.

E kísérleti módszerek közé tartoznak az úgynevezett nemlineáris spektroszkópiai technikák [1], például az összegfrekvencia-keltési (*Sum Frequency Generation Spectroscopy, SFG*), vagy a második felharmónikus keltési spektroszkópia (*Second Harmonic Generation Spectroscopy, SHG*). A berendezések bonyolultsága és a mérések költséges volta miatt azonban ezek a módszerek ma még nem terjedtek el tömegesen, leginkább speciális határfelületekkel foglalkozó vizsgálatokra használják őket. A nemlineáris technikáknál sokkal gyakrabban találkozhatunk az irodalomban röntgen-, illetve ultraibolya fotoelektron-spektroszkópiás vizsgálatokkal [2]. Ezen módszerek során a felületi molekulákra jellemző elektronikus gerjesztési frekvenciák alapján következtetnek a felület elemi összetételére. A fejlett fotoelektron-spektroszkópiai berendezések lehetőséget nyújtanak az összetétel felületre merőleges irányú változásának, azaz végső soron bizonyos molekulák határfelületen történő adszorpciójának vizsgálatára is. A kísérleti mód-



2. ábra. A sűrűségprofilon alapuló felületanalízis során elkövetett rendszeres hiba eredete

szerek közül meg kell még említenünk a röntgen- és neutronreflexiók technikákat [3], melyek kiválóan alkalmasak határfelületek vizsgálatára. A neutronreflexiót izotóphelyettesítéssel kombinálva akár a felületi molekulák szelektív meghatározása is lehetséges.

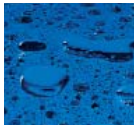
A fent bemutatott kísérleti módszereket jól kiegészítik a rohamosan fejlődő számítógépes szimulációs technikák (molekuláris dinamika, Monte Carlo) [4], melyek segítségével, megfelelően kiválasztott modellt alkalmazva, a kísérletek nyújtotta lehetőségeknél sokkal kényelmesebben alkothatunk atomi felbontású képet modellrendszerünk térbeli szerkezetéről. A használt modell érvényességét természetesen mindig ellenőrizni kell a valódi kísérleti adatokkal való összehasonlításokkal. A számítógépes vizsgálatok során a határfelületet általában a rendszer sűrűségének a felületre merőleges irányú profilja alapján definiálják. Az ilyen eljárásokban azokat a molekulákat tekintik határfelületinek, melyek a két fázis közötti átmeneti sűrűségű rétegben találhatók. Ez a megoldás azonban ismeretlen nagyságú rendszeres hibával terhelt, mivel nem veszi figyelembe a felület kapilláris hullámok által okozott molekuláris szintű érdességét. A 2. ábra alapján jól látszik, hogy vannak olyan molekulák, melyeket minden oldalról folyadék-molekulák vesznek körül, de az átmeneti sűrűségű régióban találhatók, azaz a sűrűségprofil alapján határfelületinek tekintendők, de valójában a tömbfázis részét képezik. Ugyanakkor találhatunk olyan molekulákat is, melyek az átmeneti sűrűségű régió kívül esnek, szigorú értelemben azonban mégis határfelületinek tekintendők.

Ezen hiba kiküszöbölésére számos módszert dolgoztak ki. Ezek az eljárások két alapvető csoportba sorolhatók. Az első

csoportba tartozó módszerek [5–7] azon az elven működnek, hogy a szimulációs dobozt a felület normálvektorával párhuzamos szeletekre osztják, és ezekben külön-külön meghatározzák a sűrűségprofil, vagyis a határfelületre jellemző átmeneti sűrűségű régiót. Ezzel a technikával tehát a folyadékfázis valódi felületi sűrűségprofilja közelíthető. A módszerek másik csoportja nem a valódi felületnek, hanem a felületen található molekulák teljes listájának a meghatározását veszi célba [8–10].

A kutatócsoportunk által kifejlesztett ITIM (Identification of the Truly Interfacial Molecules) módszer [10] ez utóbbi csoportba sorolható, és legnagyobb előnye az, hogy körültekintő alkalmazása esetén kis számításgépi igény mellett a határfelületi molekulák pontos listáját kaphatjuk meg [11]. Ezzel sikerrel kiküszöbölhetjük a felületi molekulák mozgása által keltett, azaz a kapilláris hullámok okozta rendszeres hibát, tehát nem azonosítunk egyetlen tömbfázisbeli molekulát sem tévesen felületinek, és természetesen egyetlen felületi molekula sem marad ki a listából akkor sem, ha éppen nem az átmeneti sűrűségű rétegben található.

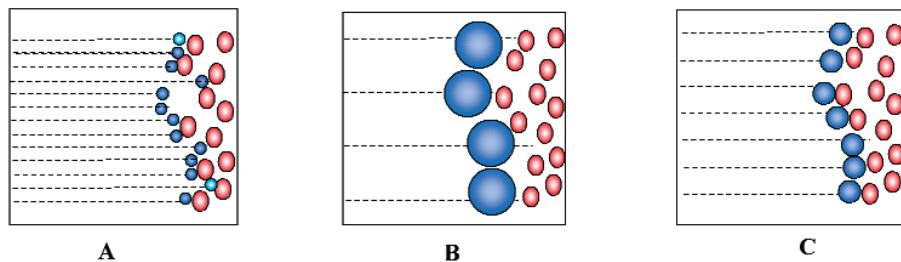
A módszer elve egyszerűen az, hogy a vizsgálni kívánt felületre merőlegesen egymástól egyenlő távolságra lévő rácsvonalak mentén egy  $R_p$  sugarú próbagolyót ejtünk a felületre az ellenkező fázis belsejéből. Ha a próbagolyó molekulával ütközik, azaz a molekula a golyót megállítja, akkor az adott molekulát határfelületinek tekintjük. Amint a próbagolyót minden egyes rácsvonal mentén elmozgattuk, megkapjuk a vele ütköző molekulák, vagyis végső soron a határfelületen található molekulák teljes listáját. Ahhoz, hogy egy molekula ütközését a próbagolyóval detektálni tudjuk, ismernünk kell az öt alkotó atomok méretét, amit az ITIM-analízis során álta-



lában az adott atom modelljének a szimuláció során alkalmazott méretparaméterével szokás megadni. A módszer nagy előnye, hogy a határfületeként azonosított molekulák képzeletbeli eltávolítása után a felület alatti további molekuláris rétegek is azonosíthatók.

Az ITIM-analízis csak akkor ad megbízható és kellően pontos képet a határfületről, ha a próbagolyó  $R_p$  sugarát megfelelően választjuk meg. Belátható, hogy  $R_p$  értékét a legcélszerűbb úgy megadni, hogy a rendszert alkotó molekulák atomjainak sugarával egy mérettartományba essen. A 3. ábra tanúsága szerint, ha  $R_p$  túl kicsi, akkor a próbagolyót – a határfületei molekulák között átjutva – a tömbfázis egyes molekulái is megállíthatják, melyeket így tévesen határfületeinek érzékelnénk.  $R_p = 0$  határesetben ez akár a rendszer összes molekuláját is jelentheti. Ezzel szemben ha a próbagolyó sugarát túl nagyra választjuk, akkor a golyó nem fog minden határfületei molekulát érinteni. Abban a határesetben, ha a golyó átmérője a szimulációs doboz felülettel párhuzamos élével esik egy mérettartományba, csak egyetlen molekulát fog érinteni, nevezetesen azt, amelyik az ellenkező fázishoz a legközelebb esik. A próbagolyó méretét jól megválasztva viszont értékes információt nyerhetünk a határfületeket jellemző legfontosabb tulajdonságokról, a felület szerkezetéről, időbeli változásáról, a molekulák egymáshoz viszonyított állásáról, valamint többkomponensű elegyek esetén könnyedén kiszámíthatjuk a határfületei réteg összetételét. Ez utóbbi kérdés azért nagyon fontos, mert jó néhány olyan vizes oldat ismeretes, amelynek felületi feszültsége a vízénél sokkal kisebb (egyszerű példa erre az alkoholok vagy a tenzidek vizes oldata). E számtalan vegyipari folyamat során kihasznált jelenség háttérben az áll, hogy az oldott komponens a felületen a tömbfázishoz képest feldúsul.

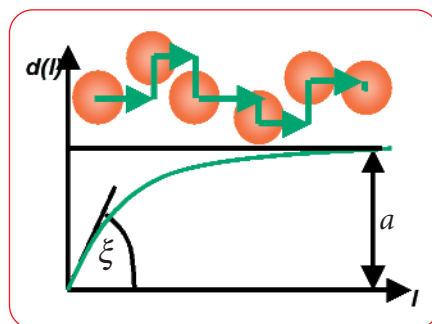
A határfületek összetételére természetesen a rendszert alkotó molekulák darabszám vagy tömeg szerinti sűrűségprofiljának elemzése alapján is lehet következtetni. Amennyiben a felület közelében (azaz az átmeneti sűrűségű régióban) az egyik komponens sűrűsége a máséhoz képest jelentősen megnövekszik, feltételezhetjük, hogy az adott komponens dúsul a határfületeken. A felületi molekulák pontos listájának ismeretében a fenténél pontosabb képet kaphatunk a felület összetételéről. Ennek segítségével ugyanis kiszámíthatjuk a rendszerünket alkotó molekulák pontos koncentrációját a határfületei rétegben,



3. ábra. A próbagolyó méretének hatása a felületként azonosított molekulák listájára. Az A esetben a próbagolyó sugara túl kicsi, a B esetben túl nagy, a C esetben pedig közel optimális

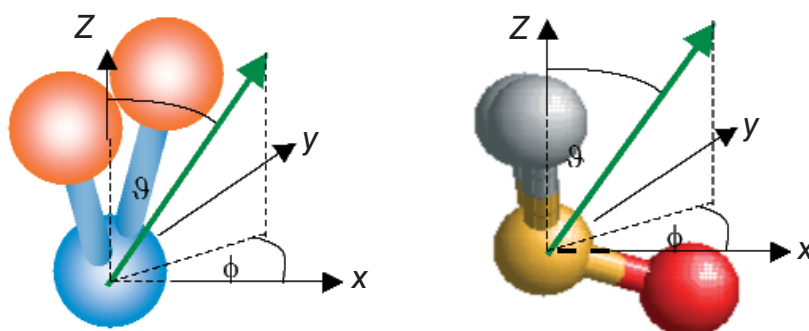
melyet a tömbfázisbeli koncentrációval összehasonlítva a felületi adszorpció mértéke számszerűsíthető. Ez a kép tovább finomítható akkor, ha kiszámítjuk a felület alatti további molekuláris rétegek összetételét is [12–15].

4. ábra. A felület érdességét leíró függvény kiszámításának sematikus ábrája, a függvény alakja a frekvencia ( $\xi$ ) és az amplitúdó jellegű ( $a$ ) paraméter jelentésével



Akár egy-, akár többkomponensű rendszerről beszélünk, nyugodtan állíthatjuk, hogy molekuláris felbontásban egy folyadék felülete sohasem teljesen sík. A felület érdességének pontos leírásához szintén szükség van a valódi határfületei molekulák azonosítására. Ne gondoljuk azonban, hogy az érdesség kvantitatív jellemzése e lista ismeretében triviális feladat volna. Belátható, hogy a felületi érdesség leírásához

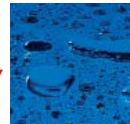
5. ábra. A felület  $\underline{X}$  normálvektorának  $\vartheta$  és  $\phi$  gömbi polárkoordinátái a molekulához viszonyított Descartes-féle koordináta-rendszerben, víz és dimetil-szulfoxid esetében



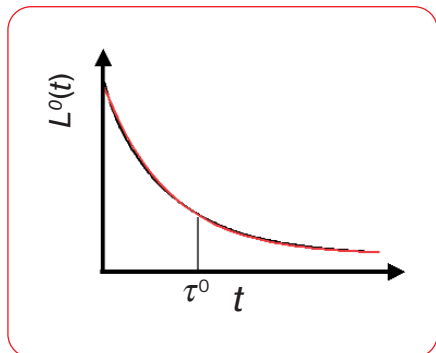
legalább két, egymástól független paraméter meghatározása szükséges, melyek egyike egy frekvencia, a másik pedig egy amplitúdó jellegű változó (hasonlóan egy hagyományos hullámjelenség, például egy tóba dobott kő által keltett hullámok leírásához). A kutatócsoportunk által javasolt módszer [14] alapja az a megfigyelés, hogy a felületi molekulák laterális, azaz a felület makroszkopikus síkjával párhuzamos távolságának ( $l$ ) függvényében ábrázolva a molekuláknak a felületre merőleges irányú átlagos távolságát, egy kezdeti egyenes szakaszt követően telítésbe menő görbét kapunk (4. ábra), melynek  $\xi$  kezdeti meredeksége a felületi érdesség frekvenciáját,  $a$  telítési értéke pedig az amplitúdóját jellemzi. Az ITIM-analízis során a próbagolyó helykoordinátáinak a listája azokban a pontokban, ahol a golyót egy felületi molekula megállítja, a vizsgált fázis geometriai burkolófelületét adja. E pontok ismeretében a  $\bar{d}(l)$  függvény kiszámítható.

Hasonlóan bonyolult feladat a felületi molekulák orientációs eloszlásának meghatározása. Ehhez – amennyiben a szimulációkhoz merev molekulamodelleket használunk – két jól megválasztott, független orientációs változó együttes eloszlásának kiszámítása szükséges. A felület gőzfázis felé mutató  $\underline{X}$  normálvektorának  $\vartheta$  és  $\phi$  gömbi polárkoordinátái orientációs változóként megfelelő választásnak bizonyul-





tak abban az esetben, ha a normálvektort a molekulához rögzített Descartes-féle koordináta-rendszerben ábrázoljuk (5. ábra) [16]. Megjegyzendő, hogy míg  $\vartheta$  két általános térvektor által bezárt szög, addig  $\phi$  két síkbeli vektor szöge, ezért a  $\cos\vartheta$  és  $\phi$  szerinti kétváltozós együttes eloszlás pon-

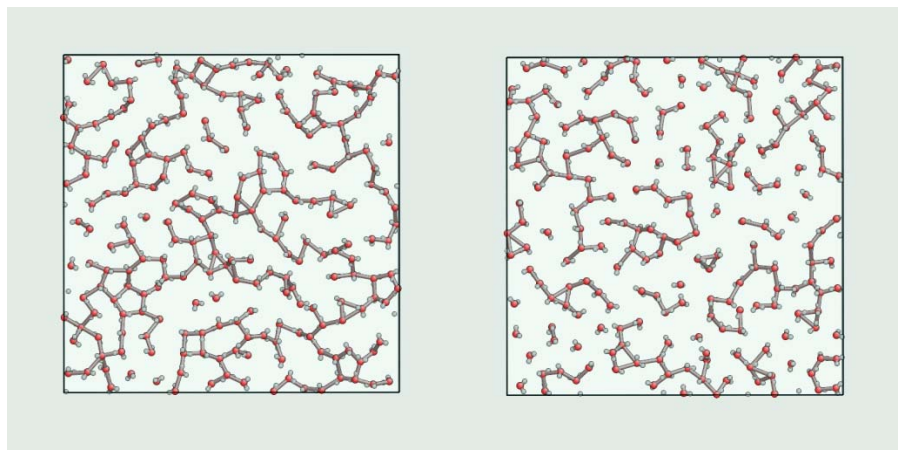


6. ábra. A felületi és tömbfázisbeli molekulák kicserélődésének dinamikáját jellemző, exponenciális lecsengésű tartózkodási valószínűség görbe

tosan abban az esetben egyenletes, ha a molekulák orientációja a felület normálvektorának irányától független.

A bevezetőben említettük, hogy a felületi molekulák nem maradnak örökké a fázisuk felületén. A felület és a tömbfázis molekulái egymással dinamikus egyensúlyban vannak, és e molekulák kicserélődését elsőrendű kinetika jellemzi. Így ez a folyamat matematikailag a radioaktív bomlási törvénnyel teljesen azonos módon írható le, ami egyszerűen megoldható, feltéve hogy pontosan azonítottuk a felületen tartózkodó molekulákat. Az ITIM-analízis segítsé-

7. ábra. Szimulációs pillanatfelvétel víz folyadék-gőz határfelületén a valóban határfelületi molekulák rétegéről (balra), illetve a felület alatti második molekuláris rétegről (jobbra). Az ábra a molekulák közötti oldalirányú hidrogénkötéseket is mutatja (vonalak). Látható, hogy míg a molekulák oldalirányú hidrogénkötéses hálója a felületi rétegben a teljes felületre kiterjed, addig a második rétegben hidrogénkötéses oligomerekre bomlik fel



gével meg tudjuk mondani, hogy adott időpillanatban mely molekulák tartózkodtak a határfelületen és melyek a tömbfázisban, így megvizsgálhatjuk a molekuláknak a felület és a tömbfázis között végbemelő kicserélődését is.

A felület időbeli változását a rendszerünket alkotó különböző molekulafajták átlagos határfelületi tartózkodási idejével jellemezhetjük. Ennek meghatározásához első lépésben ki kell számítanunk annak a valószínűségét, hogy egy, a  $t_0$  időpillanatban a felületen tartózkodó molekula egy adott  $t_0+t$  időpillanatig folyamatosan a felületen is marad. A kapott  $L^o(t)$  valószínűséget az idő függvényében ábrázolva kapjuk meg a tartózkodási valószínűség görbét (6. ábra), mely a molekulák határfelület és tömbfázis közötti kicserélődésének első rendű kinetikája miatt exponenciális lecsengést mutat.

A bevezetőben szintén említett felületi feszültség jelenségének molekuláris szintű oka folyadék/gőz határfelületek esetében az, hogy a határfelületi részecskék kevesebb szomszédos részecskével lépnek viszonylag erős vonzó kölcsönhatásba, mint a tömbfázisbeliek.

A vonzó kölcsönhatások csökkenése a határfelületi részecskék között esetlegesen fellépő, a tömbfázisbelieknél erősebb oldalirányú kölcsönhatásokkal részben kompenzálható, ami végső soron akár a teljes felületet átfogó molekuláris hálózatok kialakulását eredményezheti. Ezt a jelenséget legjobban talán a tiszta víz első molekuláris rétegében kialakuló, kétdimenziós hidrogénkötéses háló szemlélteti (7. ábra). A jelenség a felület alatti molekuláris réte-

gekben már nem jelentkezik [17], hiszen ezekben a rétegekben már lehetőség van a vízmolekulák számára kedvező háromdimenziós hálózat kialakítására is. ●●●

IRODALOM

[1] G. L. Richmond, Chem. Rev. (2002) 102, 2693.  
 [2] T. A. Carlson, Photoelectron and Auger Spectroscopy, Plenum Press, 1975.  
 [3] J. Daillant, A. Gibaud, X-Ray and Neutron Reflectivity: Principles and Applications, Springer, 1999.  
 [4] M. P. Allen, D. J. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, 1987.  
 [5] I. Benjamin, J. Chem. Phys. (1992) 97, 1432.  
 [6] E. Chacón, P. Tarazona, Phys. Rev. Lett. (2003) 91, 166103.  
 [7] M. Jorge, M. N. D. S. Cordeiro, J. Phys. Chem. C (2007) 111, 17612.  
 [8] B. Lee, E. M. Richards, J. Mol. Biol. (1971) 55, 379.  
 [9] J. Chowdhary, B. M. Ladanyi, J. Phys. Chem. B (2006) 110, 15442.  
 [10] L. B. Pártay, Gy. Hantal, P. Jedlovsky, Á. Vincze, G. Horvai, J. Comp. Chem. (2008) 29, 945.  
 [11] M. Jorge, P. Jedlovsky, M. N. D. S. Cordeiro, J. Phys. Chem. C (2010) 114, 11169.  
 [12] L. B. Pártay, P. Jedlovsky, Á. Vincze, G. Horvai, J. Phys. Chem. B (2008) 112, 5428.  
 [13] L. B. Pártay, P. Jedlovsky, G. Horvai, J. Phys. Chem. C (2009) 113, 18173.  
 [14] Darvas M, L. B. Pártay, P. Jedlovsky, G. Horvai, J. Mol. Liq. (2010), 153, 88.  
 [15] K. Pojják, M. Darvas, G. Horvai, P. Jedlovsky, J. Phys. Chem. C (2010) 114, 12207.  
 [16] P. Jedlovsky, Á. Vincze, G. Horvai, J. Chem. Phys. (2002) 117, 2271.  
 [17] Gy. Hantal, M. Darvas, L. B. Pártay, G. Horvai, P. Jedlovsky, J. Phys.: Cond. Matter (2010) 22, 284112.

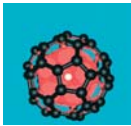
ÖSSZEFOGLALÁS

Darvas Mária–Jedlovsky Pál: Számítógépes szimulációk – a határfelületek modellezésének új eszközei

Fluid határfelületek tulajdonságainak számítógépes szimulációja megköveteli a valóban határfelületi, azaz a két fázis határán lévő molekulák megkülönböztetését azoktól, melyeket minden oldalról saját fázisbeli szomszédok vesznek körül. A felület fluid természetű, azaz a kapilláris hullámok jelenléte miatt azonban ez a feladat távolról sem egyszerű. A cikk a kutatócsoportunk által nemrégiben erre a célra kidolgozott *Identification of the Truly Interfacial Molecules* (ITIM) módszer alapjait ismerteti, és bemutat egy csokrot a módszer lehetséges alkalmazásai közül.

Az Elemek Múzeuma Magángyűjteményembe és annak Műszaki Könyvtárába továbbra is szívesen átveszek leselejtezett, kidobásra ítélt, kémiával, vegyiparral, gyógyszerészettel kapcsolatos eszközöket, műszereket, könyveket, jegyzeteket stb. Bővebb információ: [www.elemekmuzeuma.mlap.hu](http://www.elemekmuzeuma.mlap.hu).

Váray Károly kutatótanár



Braun Tibor

■ ELTE Kémiai Intézet

# Fullerének asztrokémiája

## Bevezetés

A fullerének felfedezése (1985) [1], majd vegyületként való elválasztása és jellemzése (1990) [2] világszerte nagy érdeklődést keltett és tudományos forradalmat idézett elő a kémiában a huszadik század végén [3], egyszersmind járványszerű kutatási tevékenységi áradatot [4] indított el számos tudományterületen, beleértve a fizikát, a geológiát, a biológiát és az orvostudományokat is [5–7].

Bár furcsán hangzik, a fullerének alapgondolata szó szerint az égből pottyant. Ezt alátámasztja, hogy a felfedezés legelső kigondolója (H. Kroto) a csillagközi terekben található vegyületek (hosszú láncú szénmolekulák) létével és vizsgálatával foglalkozó spektroszkópos vegyész volt. Sőt az 1990. évi kémiai felfedezés szerzői asztrofizikusokként végezték kutatásaikat (W. Krätschmer, D. R. Huffman).

Mindhárom kutatónak (és társaiknak) célja az volt, hogy kutatásaik során jobban megismerjék a csillagközi tér összetételét és az ott végbemenő folyamatokat, illetve azok mechanizmusát. Érdeklődésként azonban feltétlenül megemlíthető, hogy a fullerének felfedezése a véletlen (angolul: serendipitous) felfedezések csoportjába sorolható. Ez kissé bővebben azt jelenti, hogy a kutatók (felfedezők) elindultak egy kiszemelt úton, remélve, hogy ezen az előre elhatározott célhoz érnek. Utólag derült ki, hogy az út nem oda, hanem teljesen váratlan, de szintén hasznos, új érkezői ponthoz vezetett. Ezt a pontot egy új molekulacsalád, a fullerének képezte, és ezek tanulmányozása világszerte lázas kutatási tevékenység tárgya lett.

Ezek után talán nem is annyira meglepő, hogy a fullerénkutatás súlypontja áttevődött ezen molekulák és vegyületeik tulajdonságainak földi vizsgálatára [3–7], és a fullerének csillagközi (égi) jelenlétének, eredetének, tulajdonságainak tanulmányozása bizonyos mértékben a földi vizsgálatokhoz viszonyítva háttérbe szorult.

## Asztrokémiiai vizsgálatok

Az elektromágneses sugárzás tekinthető az egyetlen olyan diagnosztikai eszköznek, ami a kutatók rendelkezésére áll a világűrben jelen lévő elektronok, ionok, atomok, molekulák, makromolekulák és szilárd szemcsék (csillagközi por) tanulmányozására. Az utóbbi néhány évtized során csillagászati megfigyelések, laboratóriumi szimulációk és extraterresztriális anyagok elemzése jelentősen hozzájárultak a csillagterekre vonatkozó ismereteinkhez [8–10].

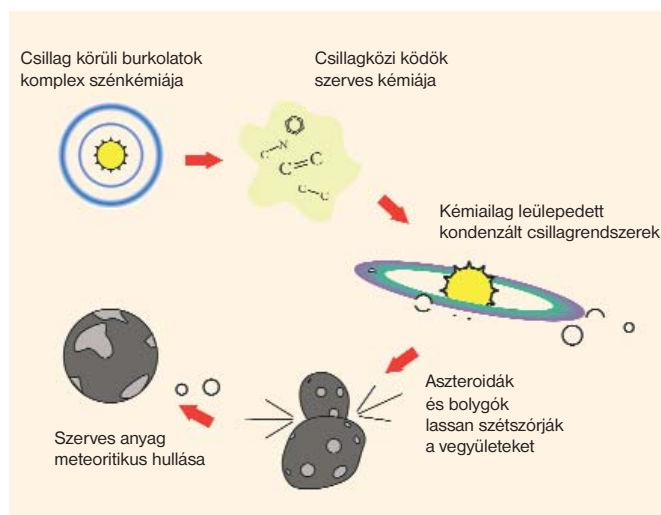
Ezek az adatok kimutatták, hogy az űr kémiája komplex és sokféle (1. ábra). Az a tény, hogy ugyanazokat a széntartalmú molekulákat azonosították földi és különböző galaktikus kör-

nyezetekben, azt sugallja, hogy a szén kémiája univerzális utakat követ [11].

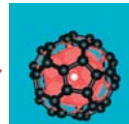
Aдва lévén a csillagközi terekben található nagy számú atom és molekula, melyek jelenléte az elektromágneses sugárzás mérésével aránylag egyszerűen kimutatható lenne, kimondottan frusztráló, amikor e komponensek közül több is abszorbeál, polarizál vagy fényt szór a vizsgált vagy ahhoz nagyon közeli sávban, illetve hullámhosszon. A csillagközi terekből származó anyagok asztrokémiiai vizsgálatának egyik legjelentősebb problémáját a mérések, megfigyelések ugyanazon anyagok földi laboratóriumi körülmények közötti mérésekkel való összevetése jelenti.

A csillagközi terek sűrűsége még a legdúsabb csillagközi ködöknél is olyan alacsony, hogy gyakran nehezen közelíthető meg a földi vákuumot előállító rendszerekkel. A legtöbb laboratóriumi vizsgálat (szerves) szilárd fázisú anyagok szobahőmérsékleten végzett abszorpciós spektrális mérésére vonatkozik, amiket aztán rendkívül alacsony sűrűségű körülmények között különböző hőmérsékletű (szerves) anyagok emissziós spektrális asztrofizikai megfigyeléseivel hasonlítanak össze. Bizonyos előrehaladást jelentett az alacsony sűrűségű csillagközi körülmények modellezése inert gáz közegekkel. Az ilyen esetekben, sajnos, a mátrix-kölcsönhatások az abszorpciós sávok ismeretlen, illetve előre látható eltolódását okozhatják.

**1. ábra. Gáz- és szilárd fázisú reakciók számos szerves molekulát hoznak létre a csillag körüli és csillagközi térben. A protoszoláris összeomlás során csillagközi gáz- vagy szilárd fázisban levő molekulák protocsillag-korongokba integrálódtak, és ezekből képződtek a bolygók és kisebb naprendszeri testek. Planétamaradékok, kométák és aszteroidák formájában ütköztek a fiatal planétákkal és szerves anyagot vittek a felületükre [11]**







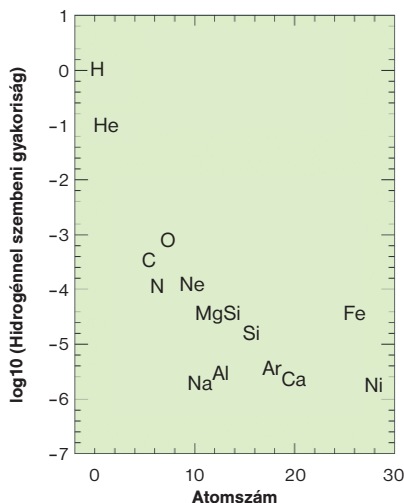
Fejlődést jelentett a (szerves) molekulák laboratóriumi emissziós mérése, ami segítette a molekulák hőmérséklettől függő hullámhossz-eltolódásának az értelmezését.

Elméleti asztrokémiai számítások előre jelzik, hogy bizonyos vegyületeknek ionos állapotban kellene lenniük a csillagközi terek legjobban megfigyelt régióiban. Mind a kvantumkémiai számítások, mind a laboratóriumi kísérletek a sávok relatív intenzitásának, valamint központi hullámhosszainak jelentős változását mutatják ionizált állapotban. Mindezek csillagközi és a laboratóriumi körülmények közötti különbsége jelentősen megnehezíti a csillagközi térben lévő vegyületek pontos azonosítását.

## A csillagközi tér összetétele

Amikor a fulleréneket 1985-ben felfedezték, már léteztek olyan rejtélyes megfigyelések, amelyek a csillagközi térből jövő sugárzásokra vonatkoztak. Ezek közül érdekesekeknek mutatkoztak azok a galaxisból jövő jelek, a diffúz interstelláris sávokként (DIS-ként) ismert emissziós régiók, amelyeket a galaxisunkban és azon túl számos csillag spektrumában azonosítottak [12–14]. Ezeket jellemzően egy 400 nm és 1,3  $\mu\text{m}$  közötti sávban figyelték meg, de kiemelkedőbbeknek az 550 és 650 nm közöttiek bizonyultak. A DIS-ek a sáv szélesség és sávintenzitás széles skáláját mutatják. Mindenhol megtalálhatók galaxisunkon belül és kívül, sőt a szupernóvák vidékén is, ami azt jelzi, hogy:

1. kémiailag stabilisak,
2. gyakoriak és
3. valószínűleg szénalapúak, lévén hogy a szén – a hidrogén, az oxigén és a hélium után – a kozmosz leggyakoribb eleme (2. ábra).



2. ábra. Elemgyakoriságok az űrben

Asztronómiai, valamint laboratóriumi egybehangzó eredmények szerint a DIS-ek gázfázisú speciesekből állnak és összetételük szerint poliaromás szénhidrogének (PAH-ek) [14] vagy fullerének, illetve mindkettő [17].

Nagy felbontású spektrális mérések folyamatosan új DIS-eket azonosítanak és ezek száma manapság már több százra tehető [18–20].

220 nm alatt a DIS-eket nehezen tudták azonosítani csillagászati spektrumokban. Ez érvényes a közeli infravörös spektrumtartományokra is, amelyeket a földi légkörből [21] számos tellurikus vonal szennyez. A  $\text{C}_{60}$ -kation és más nagyméretű szénmolekulák átmenetei a közeli infravörösben figyelhetők meg. Szá-

mos sáv lehet jelen 1  $\mu\text{m}$  alatt és ezek csak nemrégén hozzáférhetőek a nagy felbontású spektrometriás megfigyelések révén [22]. Egyes szűk DIS-ekben a szubstrukturák nagy molekulák rotációs körvonalaiént értelmezhetők, amelyeknek tehetetlenségi nyomatékuk a  $\text{C}_{60}$ -fullerénvegyületével kompatibilis.

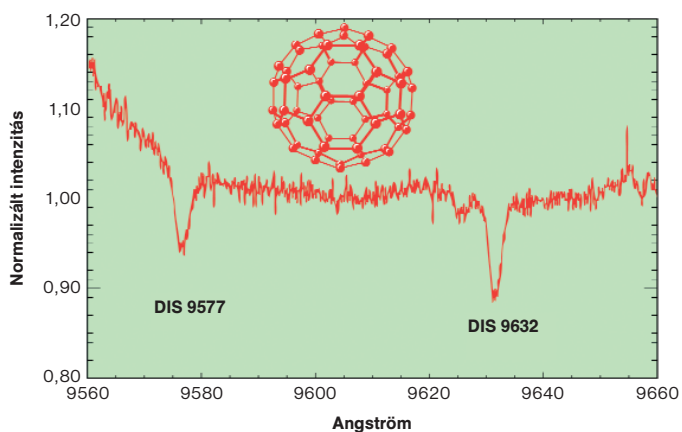
Felvetették, hogy kis mennyiségben fullerének képződhetnek az R Coronae Borealis csillagok burkolatában is [23].

Elméleti modellek a diffúz csillagközi gázban fullerének képződésének lehetőségét a  $\text{C}_2$  láncok felépülésén keresztül  $\text{C}_{10}$ -ig  $\text{C}^+$  beillesztési molekulaiion és semleges-semleges reakciókon keresztül feltételezik [24]. Ion-molekula reakciókat is vizsgáltak a fullerénekhez vezető, lehetséges úton [25].

A  $\text{C}_{60}^+$ -ion ujjlenyomatait csillagok diffúz csillagközi ködök mögötti közeli infravörös spektrumában is felfedezték. A  $\text{C}_{60}^+$  gyakoriságát optikai mérésekből a kozmikus szén 0,3–0,9%-ának ítélték [26, 27]. Feltételezik, hogy a  $\text{C}_{60}$  alacsony ionizációs potenciálja (7,57eV) miatt kationként van jelen a csillagközi térben.

A  $\text{C}_{60}$  laboratóriumi spektruma nem mutat olyan erős látható spektrumtartományú sávokat, amelyek megegyeznének az ismert DIS-ékével [28, 29].

Neongáz-mátrixban mérve azonban kimutatták, hogy 957,7 és 963,2 nm-nél mért két DIS spektruma azonos a  $\text{C}_{60}^+$  értékeivel [26, 27, 29–31] (3. ábra).

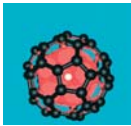


3. ábra. A HD 183143 csillag közeli infravörös spektruma rendkívül száraz körülmények között megfigyelve a Canad France Hawaii-teleszkóppal [31]

Az asztrokémiai vegyületek között feltételezett fullerének és egyes vegyületeik jelenlétét a csillagközi extinkciós görbe különböző csúcsaihoz kötötték és a DIS-ek egyik feltételezett okozójának tulajdonították.

A specifikus DIS-ek hovatartozását, a fullerének és fullerénvegyületek ismeretlen energiáit és átmeneteit elméleti számításokkal kellett ellenőrizni. Talán a legjelentősebb evidenciát a  $\text{C}_{60}^+$  néhány infravörös abszorpciós sávjában mért csúcsok és a DIS, valamint a  $\text{C}_{60}$  és fullerének, továbbá a hidrogénezett  $\text{C}_{60}\text{H}_{2n}$  ( $n=1,30$ ) közötti egyezés mutatja [32, 33].

Egy a protoplanetáris ködből sugárzott fényből arra következtettek, hogy az a hidrogénezett amorf szén szemcsékből, különböző hidrogénezettségű fullerének, részben dehidrogénezett, kationos poliaromás szénhidrogén-molekulák (PAH) és szilikátok alkotta konglomerátumból ered [34]. Valószínűtlen, hogy bármelyik szénvegyület domináns mennyiségben legyen jelen. Amennyiben fullerének valóban előfordulnak a csillagközi térben, a fő kérdés az, hogy hol képződtek és honnan kerültek elő. A legáltalánosabb feltételezés szerint a csillagközi (kozmoszbeli) fulleré-



nek eredetileg szénben gazdag, hidrogénben szegény csillagok légkörében képződtek, és az erős csillagszelek szállították őket a csillagközi térbe. Szintézisként elképzelhető a szén kondenzálása [35, 36], hidrogénezés [37, 38], gázmolekulák pirolízise [39], amorf hidrogénezés és a szén bomlása [40].

Alapos kísérleti eredmények azt mutatják, hogy több más elemi szénminta is képződhet a fullerének mellett, de még mindig nem egyértelmű, hogy ezek közül melyek a leggyakoribbak a releváns asztrokémiai környezetekben.

Jelenleg a csillagközi térben képződő fulleréneket vizsgáló kutatók az amorf szén, szénhagymák, elemi szén és karbinok különböző arányban való keverékének a képződését feltételezik. A csillagközi térbe kerülve a fullerének és a fullerénszármazékok részt vehetnek e környezetek komplex kémiájában.

A  $C_{60}$  ionizálási energiája és a csillagközi ködökben fennálló alacsony UV-fluxus lényegében kizárja a fotoionizálást. Ellenben töltésátviteli elektronleválás a  $C_{60}$ -ról, vagy a protonok és a kozmikus sugarak kölcsönhatása létrehozhat  $C_{60}^{2+}$ -t és  $C_{60}^{3+}$ -t.

Mindkét species mennyiségének csökkenési valószínűségét elektronokkal való  $C_{60}^+$ -ionná való részleges semlegesítése okozhatja. Nem egyértelmű, hogy  $C_{60}$ -ionok képződhetnek-e szabad elektron csatlakozásával vagy elektron átadásával negatívan töltött PAH-hal.

Azonban a már képződött  $C_{60}$ -ionoknak meglehetősen stabilnak kell lenniük, adva lévén a semleges molekula nagy elektronaffinitása. Ellenben a három pozitív molekula reakcióba léphet a csillagközi ködök különböző molekuláival. Ezek reaktivitása a  $C_{60}^{3+} \rightarrow C_{60}^+$  irányban csökken. Az eddig tanulmányozott reaktánsok közül kimutatták a  $C_6H_6$ ,  $C_{20}H_{10}$ ,  $C_{14}H_{10}$ ,  $CH_3OH$ ,  $HC_3N$ ,  $NH_3$  molekulákat és több más komponens.

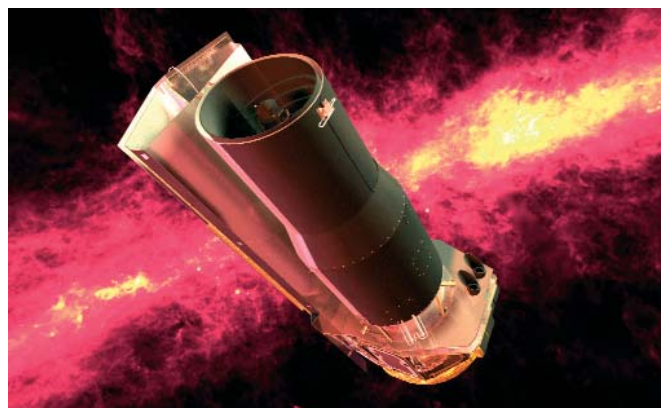
Egyes komponensekkel az ionok és a semleges  $C_{60}$  [4+2] cikloadduktokat képezhetnek. Kondenzált PAH-okkal, mint például koranulénnel az addukt töltésátviteli komplex [41]. A fentiekben idézett cikkek nem tartalmazzak számolt egyensúlyi eloszlásokat a képződhető különböző fullerénmolekulákról, mivel ezek számítása nem végezhető el addig, amíg a  $C_{60}$  és a hidrogén reakciójáról nem áll rendelkezésre több ismeret. De számos utalás van arra, hogy a semleges  $C_{60}$  a legbőszesebben jelen lévő molekula a csillagközi terekben, amennyiben ott egyáltalán létezik.

### Utóirat

Ez a dolgozat a fullerének asztrokémiájának az eredményeit foglalja össze a fullerének felfedezésétől (1995) egészen 2010. július 21-ig úgy, ahogyan a szerző a hozzáférhető szakirodalom alapján bemutathatta.

Ez a dátum ugyanis az az időpont, amikor a szerző a dolgozat végére pontot tett, és azt befejezettnek nyilvánította. Rendkívül érdekes fejleménynek tekinthető, hogy egy közbejött esemény miatt ez a döntés tévesnek bizonyult. Ugyanis 2010. július 22-én jelent meg [42] az Interneten egy a Science folyóiratban publikálendő cikk előzetes változata, ami jelen dolgozat következtetéseit radikálisan megváltoztatta. Az említett cikk ugyanis forradalmian új eredményként, vitathatatlan kísérleti eredményekkel bizonyította azt, ami jelen dolgozatban csak feltételezésekre épülhetett, jelesen, hogy a fullerének (pontosabban a  $C_{60}$  és  $C_{70}$ ) jelen vannak a csillagközi térben.

Az említett dolgozat szerzői a NASA által működtetett 950 kg súlyú Spitzer-űrtávcső (4. ábra) által a Földre küldött emissziós infravörös spektrum számítógépes feldolgozásánál észrevették, hogy annak csúcsai pontosan megegyeznek a  $C_{60}$  és  $C_{70}$  földi kö-

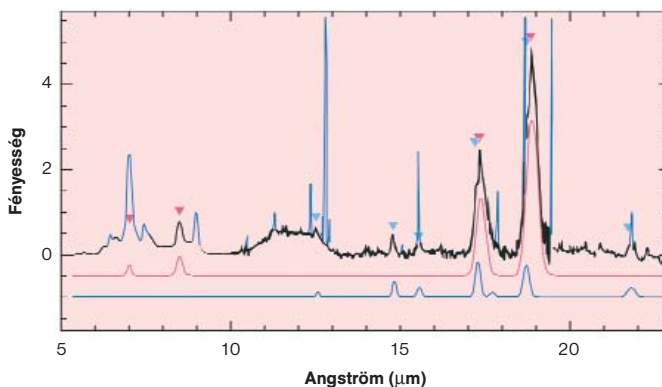


4. ábra. A NASA által felbocsátott és működtetett Spitzer-űrtávcső. A távcsövet Lyman Spitzer (1914–1997) neves űrkutatóról nevezték el, aki elsőnek vetette fel az űrtávcső megépítésének a gondolatát

rülmények között felvett infravörös spektrumának csúcsaival (5. ábra). Ehhez olyan számítógépes programokat kellett kidolgozni, amelyek szimulálták azokat a körülményeket, amelyek a rögzített spektrumot létrehozták. Mivel a  $C_{60}$  hullámhosszai és sáv szélességei hőmérsékletfüggőek, ki tudták számítani, hogy a  $C_{60}$ -sávok relatív intenzitásai a 330 K termikus emisszióknak felelnek meg. A  $C_{70}$ -sávokat úgy számolták, hogy azok a 180 K-es gerjesztéstől érkezzenek.

A Spitzer-űrtávcsövet a NASA Delta-2 rakétájával Cape Canaveralból bocsátották fel bolygók és távoli galaxisok kutatására. A távcső felszereléseire egy infravörös kamera és egy infravörös spektrométer is tartozott. A felvett és feldolgozott spektrum egy déli félgömbi Ara-Camis csillagképhez tartozó TC1 csillagászati jelölésű fehér, új törpecsillag olyan nebulájából származott, amiben nagyon kevés a hidrogén, és ezáltal PAH-vegyületek ott nem képződhetnek. Ez a TC1 földünkötől körülbelül 6500 fényévi távolságra fekszik. Azt is megbecsülték, hogy a  $C_{60}$  és  $C_{70}$  mind-egyikének teljes mennyisége a nebulában körülbelül  $10^{23}$  kg, azaz tömegük körülbelül másfélszerese Földünk holdjának. A kanadai, egyesült államokbeli és francia szerzők eredményeit világszenzációként fogadták mindenütt a tudomány eredményei iránt érdeklődők és a szakemberek egyaránt – azzal a meggyőződéssel,

5. ábra. A TC1 Spitzer-űrtávcsővel mért infravörös spektruma. A 11 és 13  $\mu\text{m}$  közötti széles platót SiC-ködnek tulajdonítják, míg a 23  $\mu\text{m}$  utáni rész a MgS-tól ered. A vörös nyilak azokat a hullámhosszakat jelzik, amelyek a  $C_{60}$  összes infravörös-aktív hullámhosszára vonatkoznak. A kék nyilak mutatják a  $C_{60}$  négy legerősebb azonosított csúcsát [42]





hogy ez a felfedezés új utakat nyit az asztrokémia területén, és rendkívül érdekes eredményekhez vezethet a jövőben. A közeljövőre tervezett és a fent ismertetett kutatások folytatására bevételekre készen áll a NASA és a Német Űrkutatási Központ együttműködésében nemrég elkészült, repülőgépre szerelt, SOFIA elnevezésű infravörös spektrométeres űrtávcső.

E dolgozat elején említésre került, hogy a fulleréneket 1985-ben véletlenül fedezték fel. Ezek után igazán nem kell és nem is lehet csodálkozni azon, hogy Jan Cami, aki 2010-ben a C<sub>60</sub> és C<sub>70</sub> űrbeli jelenlétét felfedező kutatócsoportot vezetette, egy interjú során szerényen kijelentette, hogy nem ők, hanem a Spitzer-űrtávcső működtetői (NASA) irányították a távcsövet a megfelelő időben a megfelelő helyre. Egy évszázad múlva a fullerének ott fent talán már túl „hidegek” lettek volna ahhoz, hogy érzékeljék őket. Állíthatjuk tehát, hogy ez is véletlen felfedezés? Hozzátehetjük, hogy ennek nincs jelentősége, és akár így, akár másként, a tudomány gazdagabb lett egy jelentős új ismerettel. ●●●

## IRODALOM

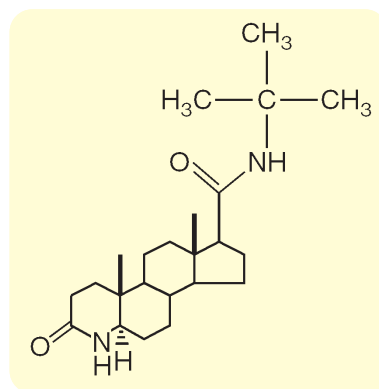
- [1] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. J. Curl, R. E. Smalley, *Nature* (1985) 318, 162.
- [2] W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, *Nature* (1990) 347, 354.
- [3] Braun Tibor, A káprázatos C<sub>60</sub> molekula, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1996, 15. o.
- [4] T. Braun, *Angew. Chem. Internat. Ed.* (1992) 31, 588.
- [5] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. C. Eklund, *Science of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Academic Press, New York, 1996.
- [6] H. Ehrenreich, F. Spaepen (Eds.), *Solid State Physics, Fullerenes*, Academic Press, New York, 1994.
- [7] A. Hirsch, M. Brettenreich, *Fullerenes, Chemistry and Reactions*, Wiley-VCH, 2004.
- [8] T. Heunig, F. Salama, *Science* (1998) 282, 2204.
- [9] P. Ehrenfreund, S. B. Charnley, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* (2000), 38, 427.
- [10] T. Roush, D. P. Conikshank, In: *Astrobiology: Future Perspectives*, P. Ehrenfreund, W. Irwine, T. Owen, L. Becker, J. Blank, J. Brucato, L. Colangeli, S. Derenne, A. Dutrey, D. Despois, A. Lacazano, F. Roberts, Eds., *Astrophys. Space Sci. Library*, 305, 149–178., Kluwer Acad. Publishers, Dordrecht, 2004.
- [11] P. Ehrenfreund, S. Rasmussen, J. Cleaves, L. Chen, *Astrobiology*, (2005) 6, 490.
- [12] G. H. Herbig, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* (1995) 3, 19.
- [13] T. Snow, *Spectrochim. Acta A* (2001) 57, 615.
- [14] P. Ehrenfreund, J. Cami, J. Jimenez-Vicente, B. H. Foing, L. Kaper, A. van der Meer, N. Cox, L. d'Hencourt, J. P. Maier, F. Salama, P. J. Sarre, T. P. Snow, P. Sonnentrucker, *Astrophys. J. Lett.* (2002) 576, L117.
- [15] J. Sollerman, N. Cox, S. Matilla, P. Ehrenfreund, L. Kaper, B. Leibundgut, P. Lundquist, *Astron. Astrophys.* (2005) 429, 559.
- [16] F. Salama, E. L. O. Bakes, L. I. Allamandola, A. G. G. M. Tielens, *Astron. Astrophys.* (1996) 488, 61.
- [17] P. Ehrenfreund, B. H. Foing, *Planet. Space Sci.* (1995) 43, 1183.
- [18] P. Jenikens, X. Desert, *Astron. Astrophys. Suppl.* (1994) 105, 39.
- [19] G. H. Herbig, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* (1995) 33, 19.
- [20] O'Tuarisg, J. Cami, B. H. Foing, P. Sonnentrucker, P. Ehrenfreund, *Astron. Astrophys. Suppl.* (2000) 142, 225.
- [21] B. H. Foing, P. Ehrenfreund, In G. M. Tielens and T. P. Snow, (Eds.), *The Diffuse Interstellar Bands*, 62–72, Kluwer, Dordrecht, 1995.
- [22] P. Ruiterkamp, N. L. J. Cox, M. Spaans, L. Kaper, B. H. Foing, F. Salama, P. Ehrenfreund, *Astron. Astrophys.* (2005) 431, 431.
- [23] A. Goeres, J. Sedlmayr, *Astron. Astrophys.* (1992) 265, 216.
- [24] R. P. A. Bettens, E. Herbst, *Astrophys. J.* (1997) 478, 585.
- [25] S. Petrie, D. K. Bochme, *Astrophys. J.* (2000) 540, 869.
- [26] B. H. Foing, P. Ehrenfreund, *Nature* (1994) 369, 296.
- [27] B. H. Foing, P. Ehrenfreund, *Astrophys. Lett.* (1997) 317, L59.
- [28] G. H. Herbig, *Astrophys. J.* (2000) 542, 334.
- [29] A. Sassara, G. Zerza, M. Chergui, S. Leach, *Astrophys. J.* (1997) 423, 263.
- [30] Z. Gaysna, L. Andrews, P. N. Schulz, *J. Phys. Chem.* (1992) 96, 1525.
- [31] P. Ehrenfreund, B. H. Foing, *Adv. Space Res.* (1997) 19, 1033.
- [32] A. S. Webster, *Astronom. Astrophys.* (1992) 257, 750.
- [33] A. S. Webster, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* (1992) 255, 41.
- [34] P. Garzia-Laro, A. Machado, A. Ulla, M. Mateiga, *Astrophys. J.* (1999) 513, 941.
- [35] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Astrophysical Journal* (1987) 314, 352.
- [36] H. W. Kroto, *Ann. Phys. (Paris)* (1989) 14, 169.
- [37] A. Webster, *Mon. Not. R. Astronom. Soc.* (1993) 263, LSS–L58.
- [38] A. S. Webster, *Mon. Not. R. Astronom. Soc.* (1993) 264, 121.
- [39] N. Merlin, I. Bohe, C. Reynaud, A. Gazez, J. N. Ronzand, *Astron. Astrophys.* (1998) 330, 1127.
- [40] D. K. Boehme, *Chem. Rev.* (1992) 92, 1487.
- [41] S. Petrie, D. K. Boehme, *Mon. Not. 2 Astron. Soc.* (1995) 268, 103.
- [42] J. Cami, J. Bernhard-Salas, E. Peeters, E. Malek, *Science (Express)* (2010) 22 July.

Iványi Zoltán\*

■ SZTE Szerves Kémiai Tanszék, Szeged

# Regioizomer androszt-5-én-és androszta-5,16-dién-vázás N-fenil-pirazolok szintézise

**A**z *exo*-heterociklusos szteroidok jelentős élettani hatása közismert [1]. Azon képviselőik, amelyek 3β-hidroxi funkciót tartalmaznak, a 17α-hidroxiláz/C<sub>17,20</sub>-liáz enzim hatásának viszaszorításában játszanak szerepet, míg a Δ<sup>4</sup>-3 ketoszteroid elemet tartalmazók az 5α-reduktáz gátlásával tűnnek ki. Ezek az enzimek csökkentik a C<sub>17</sub>-hidroxiszteroidok képződését, végső soron a dihidrotesztoszteron keletkezését, és ezzel visszaszorítják az androgénfüggő betegségek, így a *benignus prostata hyperplasia* és a *prostata carcinoma* kialakulását [2]. A jelenleg kereskedelmi forgalomban kapható gyógyszerkészítmények hatóanyaga a finaszterid (1. ábra), melynek hatékonyabb, főleg *exo*-heterociklust hordozó szteroidokkal történő kiváltása a világ számos szteroidkémiai kutatócsoportjának törekvése.

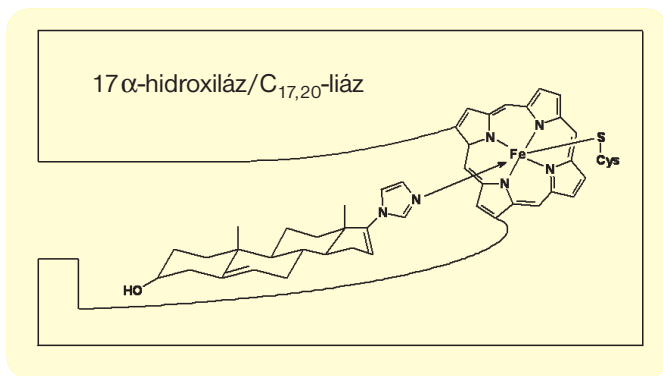


1. ábra. A finaszterid

A C<sub>17</sub>-es helyzetű *exo*-heterociklust tartalmazó szteroidokkal végzett vizsgálatok bizonyították, hogy a heteroatom nemkötő elektronpárjával koordinálódni képes az enzim aktív centrumában lévő vasatomhoz, és ezzel fejt ki hatását. Hasonló szerepet tulajdonítanak a Δ<sup>16</sup>-helyzetű kettős kötésnek is [3, 4] (2. ábra).

\* A Szegedi Ifjú Szerves Kémikusok Támogatásáért Alapítvány 10. tudományos előadói ülésén elhangzott előadás.





2. ábra. Az *exo*-heterociklusos szteroid koordinációja a  $17\alpha$ -hidroxiláz/ $C_{17,20}$ -liáz enzim aktív centrumában lévő központi fémionhoz [4]

Miután az elektrondonor atomot (*N*, *O*, *S*) tartalmazó heterociklus kulcsfontosságú feltétele az enzimhatásnak, számos dolgozat számolt be a  $C_{17}$ -*exo*-heterociklusok szintéziséről és a kapott vegyületek biológiai vizsgálatáról [2, 4, 5].

Az SZTE Szerves Kémiai Tanszék Szteroidkémiai Kutatócsoportjában korábban  $17\beta$ -tetrahydrooxazinil-, dihydrooxazinil-, oxazolidonil, illetve oxazolinil-szteroidokat állítottak elő, mely vegyületek oxigén és nitrogén donoratomokat tartalmaztak. Az előállított vegyületek figyelemre méltó enzimgátló aktivitást mutattak [6–9]. A korábbi kutatások folytatásaként a két nitrogénatomot tartalmazó  $17\beta$ -pirazolil-szteroidok előállítását tűztük ki célul. Az ilyen típusú vegyületek előállítására a  $\beta$ -dikarbonilvegyületek fenilhidrazon-képzési, majd az azt követő gyűrűzárási reakciója szolgál, amelynek eredményeként 1,3- és 1,5-diszubsztituált *N*-fenil-pirazol regioizomerek képződése következik be. A reakció a szteroidokra is alkalmazható, ha a megfelelő szüntön ekvivalensül szolgáló  $\beta$ -dikarbonil funkciót a szteroid oldalláncon kialakítjuk. A  $3\beta$ -acetoxi-pregn-5-én-20-onból (1) kiindulva (3. ábra), etilformiáttal végzett Claisen-kondenzációval a 21-hidroximetilidén-pregn-5-én-3 $\beta$ -ol-20-onhoz (3a) jutottunk. A vegyület fenilhidrazinnal, ecetsavas közegben végzett reakciója – az irodalomban leírtakkal ellentétben – két regioizomer, a  $17\beta$ -(1-fenil-5-pirazolil)androszt-5-én-3 $\beta$ -ol (5aa) és a  $17\beta$ -(1-fenil-3-pirazolil)androszt-5-én-3 $\beta$ -ol (4aa) keverékéhez vezetett. Hasonló kísérleti körülmények között korábban végzett átalakítással Doorenbos és Milewich csak az 5aa képződését tapasztalta [10]. A reakció regioselektivitását a 2 kiindulási vegyület láncvégi formilcsoportjának nagyobb reaktivitásával értelmezték. A vegyület szerkezetét szerkezetbizonyító szintézissel, valamint  $^1\text{H-NMR}$ -spektrum alapján igazolták.

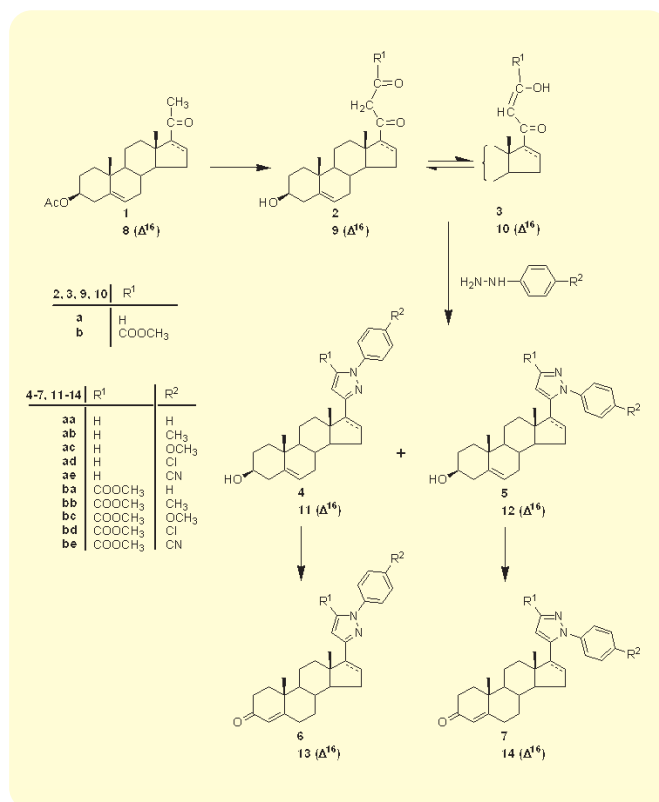
Saját vizsgálatainkat kettős céllal végeztük. Egyrészt választ kívántunk kapni, hogy a regioizomerek képződését mennyiben befolyásolja a *p*-helyzetben szubsztituált fenilhidrazin alkalmazása. Másrészt hogyan változik a kapott vegyületek  $17\beta$ -hidroxiláz/ $C_{17,20}$ -liáz aktivitása? A  $17\alpha$ -*N*-fenil-pirazolil-szteroidok szintézisét *p*-szubsztituált fenilhidrazin-származékokkal elvégezve minden esetben regioizomerek képződését tapasztaltuk, melyek aránya erősen függött az alkalmazott szubsztituens jellegétől. Elektronküldő szubsztituensek ( $\text{CH}_3$ ,  $\text{OCH}_3$ ) elősegítették az 1,3-diszubsztituált pirazolil-izomer (4ab, 4ac) képződését, míg az elektronvonzó szubsztituensek ( $\text{Cl}$ ,  $\text{CN}$ ) esetén túlnyomó többségben az 1,5-diszubsztituált regioizomer (5ad, 5ae) keletkezett. A jelenségre a ható reagenserősség adhat magyarázatot. Az elektronvonzó szubsztituensek lecsökkentik a fenilhidrazin nitrogén-

jeinek nukleofilítását, így az  $\text{NH}_2$ -nitrogén főként a reaktívabb, láncvégi karbonilcsoporttal reagál, melynek eredményeként gyűrűzárás után az 1,5-diszubsztituált terméket kapjuk. Elektronküldő szubsztituens alkalmazása esetén a nitrogénatomok nukleofilítása megnő, így az  $\text{NH}_2$ -nitrogénnek lehetősége van a kisebb reaktivitású, láncközi karbonillal reagálni, ezáltal számottevő mennyiségű 1,3-diszubsztituált termékre számíthatunk.

Kísérleteinket *K*-acetáttal pufferelt ecetsavas közegben végeztük, a fenilhidrazin-származékokat hidrokloridok formájában alkalmaztuk. A szintézist kiterjesztettük a pirazolgyűrűn karbmetoxicsoporttal szubsztituált *exo*-heterociklusos szteroidok előállítására. Az ehhez megfelelő szüntön ekvivalensül, a 21-karbmetoximetilidén-pregn-5-én-3 $\beta$ -ol-20-on (3b), ugyancsak a  $3\beta$ -acetoxi-pregn-5-én-20-onból (1) kiindulva, dimetil-oxaláttal végzett Claisen-kondenzációval állítottuk elő. A fenilhidrazinnal, valamint annak *p*-helyzetben szubsztituált származékaival történő gyűrűzárási reakció itt is regioizomerek keverékét adja, azonban ezek aránya már nagymértékben az 1,5-diszubsztituált pirazolil-származékok (5ba–be) felé tolódik el. A karbmetoxicsoportok hidrolízisével a vízdékonyságot jelentősen megnövelő karboxilcsoport alakítható ki, mely az élő szervezetben történő felszívódást segíti.

Az irodalmi adatok szerint a D gyűrűben kettős kötést is tartalmazó androszta-5,16-dién-vázis *exo*-heterociklusos szteroidok enzimgátló aktivitása a megfelelő androszt-5-én-származékénál lényegesen nagyobb lehet [11]. Ez a megállapítás vezetett arra, hogy az ezideig jó kitermelést nyújtó szintézismódszert a  $3\beta$ -acetoxi-pregna-5,16-dién-20-on (8) esetében is alkalmazzuk. A dimetiloxaláttal, nátrium-metilát jelenlétében, toluolban végzett Claisen-kondenzáció során a  $\Delta^{16}$  kötésen lejátszódó Michael-adíció is tapasztaltuk, amely a nemkívánatos  $16\beta$ -metoxi-21-karbmetoxi-metilidén-3 $\beta$ -hidroxipregn-5-én-20-on megjelenéséhez vezetett. A katalizátort kálium-*t*-butiláttal helyettesítve már jó

3. ábra.  $17\beta$ -Pirazolil-szteroidok előállítása







Nemes Sándor

■ Debreceni Egyetem Alkalmazott Kémiai Tanszék | nemes@tigris.unideb.hu

# Eladósodottság a vegyiparban és a gyógyszeriparban

**M**ilyen mértékű a vegyipari és a gyógyszeripari vállalatok eladósodottsága? Milyen jövedelemtermelő képesség mellett alacsony a kockázata az eladósodottnak? Mit mondanak erről az elmúlt húsz év historikus adatai?

A vállalat működése folyamán felhasznált összes forrás egy része saját forrás; más része törlesztendő, kifizetendő, visszafizetendő idegen forrás. A vállalati mérlegben a vállalat működéséhez felhasznált összes forrás (*total assets*) = saját tőke (*total equity*) + kötelezettségek összesen (*total liabilities*). Az eladósodottság fokának egyik lehetséges mutatója = (összes kötelezettség/összes forrás)  $\times$  100%, vagyis az idegen tőke aránya a működéshez használt összes forrásban. Ebben az esetben az adósságot a legtágabb értelemben vesszük, az összes kötelezettséget adósságnak tekintjük. Az összes kötelezettségek között szerepelnek a rövid és hosszú lejáratra kapott kölcsönök, a kötvénykibocsátásból eredő tartozások, a rövid és hosszú lejáratú hitelek költségei, a halasztott adók, az áruszállítások és szolgáltatások igénybevételének ki nem fizetett számlái, a munkavállalókkal szembeni kötelezettségek stb.

Az idegen források igénybevétele lehetőség nagyobb teljesítmény elérésére. Az idegen források igénybevétele nem mindig vezet megnövekedett eredményhez. Nagyarányú kötelezettség vállalása csak megfelelő jövedelemtermelő képesség mellett ésszerű. Szűkülő piaci lehetőségek, lassuló gazdaság, növekvő árverseny és a kötelezettségek emelkedő költségeinek együttállása esetén a túlzott eladósodottság vezethet veszteséges működéshez is. Ilyen dekonjunkturális időszakokban az eladósodottság hátrányt jelenthet az olyan versenytársakkal szemben, amelyek kisebb mértékben adóssodtak el. Az eladósodottság mértéke függ az adott országban uralkodó pénzügyi kultúrától is. Összehasonlításokat tenni elsősorban az ugyanazon ágazatban működő versenytársak között ésszerű. Itt a vegyiparral és a gyógyszeriparral azért foglalkozunk együtt, mert a kémiához való kötődésük miatt nemrég még ugyanazon ágazathoz tartoztak a gazdasági tevékenységek osztályozási rendszerében.

## A tanulmányozott vállalatok köre, az adatok forrása, a pénzügyi mutatószámok

A tanulmányozott vegyipari cégek között vannak a legnagyobb globális piaci szereplők és néhány regionális vállalat. Ábécé sorrendben: Asahi Kasei (Japán), BASF (Németország), Bayer (Németország), Borealis (Ausztria), Dow Chemical (USA), Du Pont (USA), Georgia Gulf (USA), Mitsubishi Chemical (Japán), Mitsui

(Japán), Norsk Hydro (Norvégia), Nova Chemicals (Kanada), SABIC (Szaúd-Arábia), Shin-Etsu (Japán), Sinopec Shanghai Petrochemical (Kína), Solvay (Belgium), Sumitomo Chemical (Japán).

(A Norsk Hydro termelési profilja története során többször változott. A múltban a Norsk Hydro üzleti tevékenysége magában foglalta a műtrágya- és alumíniumgyártást, a gáz- és olajipari tevékenységet. Ma a Norsk Hydro termelési profiljának fő eleme az alumíniumgyártás, vízenergia és alternatív energiaforrások hasznosítása, előállítás és kínálata. Mindezen változások ellenére historikus adatai jól beleillenek a vegyipari cégek adatainak sorába.)

A vizsgált gyógyszeripari cégek között vannak a legnagyobb innovatív gyógyszergyártók és néhány regionális generikus gyártó. Ábécé sorrendben: Abbott Laboratories (USA), AstraZeneca (Egyesült Királyság), Bristol-Myers Squibb (USA), Egis (Magyarország), Eisai (Japán), Eli Lilly (USA), GlaxoSmithKline (Egyesült Királyság), Johnson & Johnson (USA), Merck (USA), Mylan (USA), Novartis (Svájc), Pfizer (USA), Richter (Magyarország), Roche (Svájc), sanofi-aventis (Franciaország), Takeda (Japán), Teva Pharmaceuticals (Izrael).

A tanulmányban szereplő adatok nyilvánosan hozzáférhető adatok. Az adatok legfőbb forrása: az Amerikai Egyesült Államok Értékpapír- és Tőzsd felügyeletéhez (*U. S. Securities and Exchange Commission = SEC*) benyújtott dokumentumok (a 10-K jelű dokumentumok: *Annual Reports*, és a 20-F jelű dokumentumok: *Annual Reports of Foreign Private Issuers*), valamint a Hoover's Online adatbázisa és a vállalatok honlapján a befektetőknek szánt éves pénzügyi jelentések.

A tanulmányban a következő származtatott gazdasági mutatókat használtuk: eladósodottsági mutató [= (összes kötelezettség/összes forrás)  $\times$  100%] (*total liabilities to total assets ratio*) és a nettó eredmény – összes kötelezettség arány [= (nettó eredmény/összes kötelezettség)  $\times$  100%] (*total net income to total liabilities ratio*).

A zavarbaejtően sokféle pénzügyi mutatószámról, értékeikről, hiányosságokról számosan írtak már [1–2]. Tény, hogy a pénzügyi mutatószámokból nyerhető kvantitatív információk hasznosak a vállalatvezetők, részvénytulajdonosok, részvényekkel kereskedő brókerek, gazdasági elemzők és tanácsadók, hitelnyújtók, könyvvizsgálók, a szabályozásban illetékes felügyeleti szervek szakértői stb. számára [3]. A számos pénzügyi mutatószám természetesen nem egyformán hasznos a különböző felhasználók számára, és nincs általános egyetértés abban, hogy adott felhasználói kör számára mely mutatószámok a leghasznosabbak. A legtöbb pénzügyi mutatószám önmagában is szemléletes jelenté-

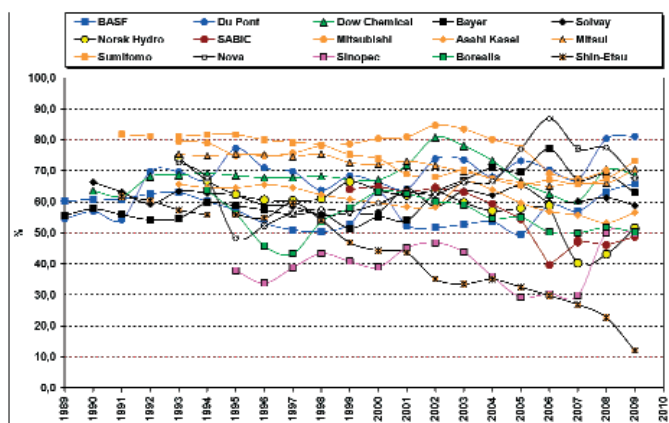




se van. Azonban hasznosabb a pénzügyi mutatószámok összehasonlítása; ugyanazon cég mutatói időbeli alakulásának és/vagy ugyanazon ágazatban tevékenykedő versenytárs vállalatok mutatószámainak az összevetése.

### Vegyipar és gyógyszeripar – tőkeszerkezet, eladósodottság

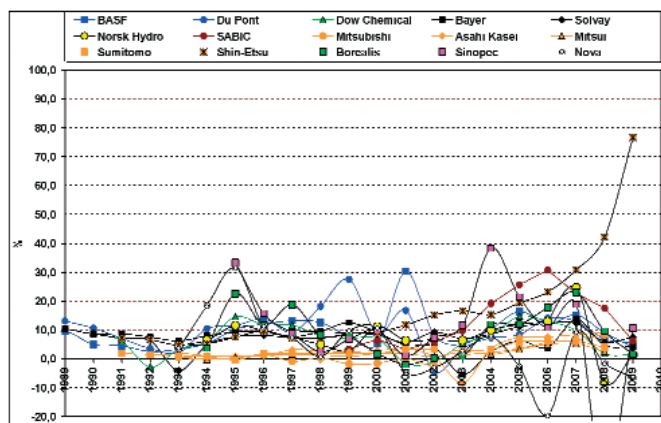
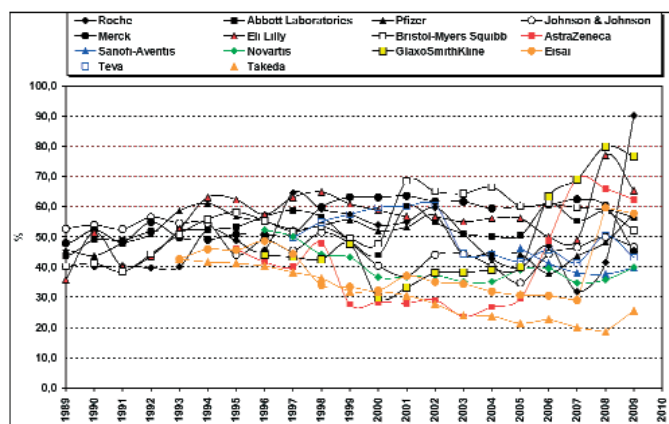
A vállalatok vagyoni helyzetének jellemzésére a működésükhöz igénybe vett idegen tőke összes forráshoz viszonyított arányát vizsgáltuk, a fellelhető adatok alapján, az elmúlt húsz év távlatában. Minél alacsonyabb a mutató értéke, annál kevésbé függ a vállalat az idegen tőke tulajdonosaitól, annál biztonságosabb a gazdálkodása. A magas idegentőke-arányt azok a cégek engedhetik meg maguknak, amelyek üzleti kockázata viszonylag alacsony, a jövedelemtermelő képessége magas.



1. ábra. Vegyipari vállalatok összes kötelezettségeinek aránya az összes forrásukhoz

Az 1. ábra a vegyipari vállalatok, a 2. ábra a gyógyszergyártók összes kötelezettségének összes forráshoz viszonyított arányait mutatja a fellelhető adatok alapján. Ennek a mutatónak az 50%-os értéke azt jelenti, hogy a vállalat működése során annyi idegen tőkét használ (annyi az összes kötelezettsége), mint amennyi a saját tőkéje. Az 50% fölötti tartományban az összes kötelezettség több, mint a saját tőke. Az ábrák adatainak tanúsága szerint a vállalatok többsége közelítőleg annyi, vagy több adósságot halmoz fel, mint amennyi saját tőkéje van. Az 1. ábra adatai szerint a vegyipari vállalatok többségének eladósodottsági mutatói

2. ábra. Gyógyszergyártók összes kötelezettségeinek aránya az összes forrásukhoz



3. ábra. Vegyipari vállalatok kötelezettségarányos nettó eredményei

a 65% környezetében, az 50–80%-os sávban vannak. A vizsgált húsz év egészében a vegyipari vállalatok nagyobb részének eladósodottsági mutatói kisebb-nagyobb ingadozást mutatnak, azonban ezek az ingadozások egy szinten mozgó trenddel összefonódva jelentkeznek. Megjegyzendő, hogy a Sinopec Shanghai Petrochemical a sajátos kínai gazdasági környezetben működik. Figyelemre méltó a Shin-Etsu trendszerűen csökkenő eladósodottsága. A 2. ábra adatai alapján megállapítható, hogy a gyógyszergyártók többségének adatai az 50% környezetében, a 30–70%-os sávban szóródnak. A gyógyszergyártók többségére is igaz, hogy eladósodottsági mutatóik mérsékeltabb vagy erősebb volatilitása stagnáló trendre épül rá. Az utóbbi években jelentősen megnövekedett kötelezettségállományú cég az AstraZeneca, a GlaxoSmithKline és a Roche. A Takeda esetében a trendszerűen csökkenő eladósodottság a figyelemre méltó.

Általában a vegyipari vállalatok eladósodottsága nagyobb mértékű, mint a gyógyszergyártóké.

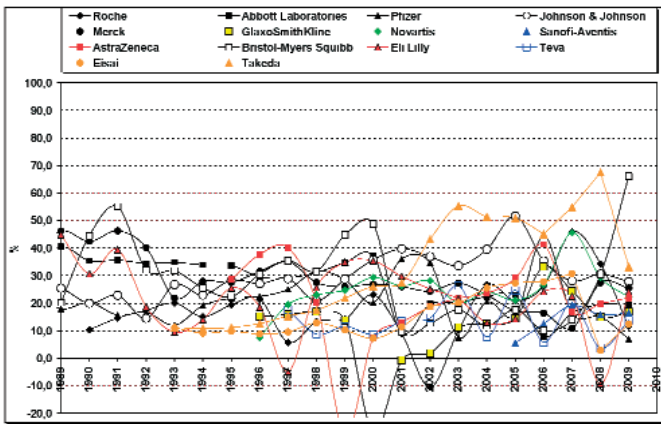
### Vegyipar és gyógyszeripar – a nettó eredmények viszonya a kötelezettségekhez

A gyógyszeripar a világgazdaság feldolgozóipari ágában a legeredményesebb ágazat. Más helyen már megmutattuk [4], hogy a vegyipar eredménytermelő képessége jelentősen elmarad a gyógyszeriparétól. Ugyanolyan eladósodottsági mutató nem jelent ugyanolyan pénzügyi helyzetet, ha a jövedelemtermelő képesség különböző.

A 3. ábra a vegyipari vállalatok, a 4. ábra a gyógyszergyártók nettó eredményének összes kötelezettségeikhez viszonyított arányait mutatja a fellelhető adatok alapján. Megállapíthatjuk, hogy a vegyipari vállalatok éves nettó eredményei az esetek többségében összes kötelezettségeiknek a 0–25%-át teszik ki. A gyógyszergyártók esetében a kötelezettségarányos nettó eredmények többsége az 5–45%-os sávban van. A húsz év távlatában a mindkét ágazat adatsoraiban mutatkozó ingadozások egy szinten mozgó trenddel összefonódva jelentkeznek (kivétel a Shin-Etsu).

A vegyiparban, kivételes esetekben, a kivételes helyzetű vegyipari vállalatok 3–5 évi nettó eredménye fedezi összes kötelezettségeiket. A többségnek azonban az összes kötelezettsége 10–30 évnél több nettó eredményével ér fel.

A gyógyszeriparban számos esetet találunk arra, hogy a cégek 2–3 évi nettó eredménye fedezi összes kötelezettségeiket. A többségnek azonban 3–10 évi nettó eredménye szükséges a kötelezettségek kifizetésére.



4. ábra. Gyógyszergyártók kötelezettségárányos nettó eredményei

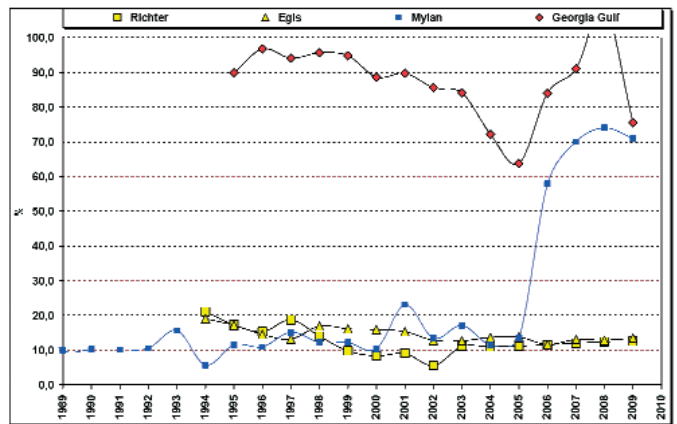
A gyógyszeriparban tehát általában kisebb fokú az eladósodottság, ugyanakkor nagyobb a jövedelemtermelő képesség, mint a vegyiparban; így a gyógyszergyártó tevékenység kockázata lényegesen kisebb, mint a vegyipari termelésé.

## Szélsőségek – tanulságok

A szélsőséges esetek mindig hordoznak valamilyen tanulságot. Ha más nem, például azt, hogy léteznek szélsőséges esetek. Az 5. ábra néhány kivételes esetet mutat.

Keresve is csak nehezen találunk olyan vállalatot, amely nagyon kevés saját tőkével, vagyis magas eladósodottsági mutatóval működőképes. Ez ugyan nem példa nélkül álló, de az ilyen tőkeszerkezetű vállalatok nem szoktak hosszú életűek lenni. Csak ritkán találkozunk olyan vállalattal, mint amilyen a vegyipari gyártással foglalkozó Georgia Gulf. Ám a Georgia Gulf létezik. Eredménymutatói a vegyipari ágazatban nem ritkák, azonban erősen ingadozó, jelezve a magas kockázatot. Az elmúlt tizenöt évben a Georgia Gulf kötelezettségárányos nettó eredményei a -15%-tól (veszteség) a 15%-ig (nyereség) terjedő tartományt járták be.

Vannak olyan vállalatok, amelyek az idegen tőke tulajdonosaitól való függetlenséget választják, a nagyobb kockázat mellett nagyobb várható eredmény helyett (pl. Egis, Mylan, Richter). Ezek azok a kivételes helyzetű vállalatok, ahol egy évi nettó eredmény az összes kötelezettségeikkel vagy azok többszörösével ér fel.



5. ábra. Kivételes eladósodottsági mutatójú vállalatok a vegyiparból és a gyógyszeriparból

A Mylan a gyógyszeripari ágazatra jellemző magas nyereséggel, ezenkívül a ritkaságszámba menő alacsony idegentőke-aránnyal működött 2006-ig. 2007-ben vállalatfelvásárlásokat hajtott végre és jelentős mértékű aladósodottság árán vált globális céggé.

## IRODALOM

- [1] T. Salmi, T. Martikainen, A Review of the Theoretical and Empirical Basis of Financial Ratio Analysis, The Finnish Journal of Business Economics (1994) 4, 426.
- [2] T. Salmi, J. Nikkinen, P. Sahlström, The Review of the Theoretical and Empirical Basis of Financial Ratio Analysis Revisited, University of Vaasa, Finland (2005) Available from <http://www.uvasa.fi/~ts/wbfa/wbfa.htm>, letöltve: 2010. június 7.
- [3] J. Al-Ajmi, The Usefulness of Corporate Governance and Financial Ratios to Credit and Financial Analysts: Evidence from Bahrain, European Journal of Economics, Finance and Administrative Sciences (2008) 11, 107.
- [4] Nemes S., A gyógyszeripar vegyipar?, Magyar Kémikusok Lapja (2010) 65, 142.

## ÖSSZEFOGLALÁS

### Nemes Sándor: Eladósodottság a vegyiparban és a gyógyszeriparban

Vegyipari és gyógyszeripari vállalatok éves pénzügyi jelentéseit tanulmányoztuk. Számos vegyipari és gyógyszeripari vállalat historikus mérlegadata és eredménykimutatása tanúsítja, hogy az 1989-től 2009-ig terjedő időszakban a vegyipari vállalatok jellemző eladósodottsági mutatói a 65% körüli széles sávban, míg a gyógyszeripari vállalatok ezen mutatói az 50% körüli széles sávban szóródnak. Általában a kötelezettségárányos nettó eredmények a vegyiparban jelentősen alacsonyabbak, mint a gyógyszeriparban.

## Állami kitüntetés Hernádi Zsoltnak



Hernádi Zsoltnak, a MOL elnök-vezérigazgatóját a Magyar Köztársasági Éremrend Középkeresztje a Csillaggal tüntette ki Schmitt Pál köztársasági elnök október 22-én, a Parlamentben rendezett ünnepségen.

Hernádi Zsolt a magyar és kelet-közép-európai régió energiaellátásának diverzifikálásában és biztonságának fokozásában, a MOL-csoport üzleti modelljének kialakításában végzett tevékenységéért kapta az elismerést.

A MOL elnök-vezérigazgatója az elismerés átvétele alkalmából elmondta: „A MOL-csoport az elmúlt évtizedben végrehajtott rendkívül eredményes fejlődésével Kelet-Közép-Európa egyik legjelentősebb cégévé vált. Magyarországon, Szlovákiában és Horvátországban is piacvezető pozíciót tölt be leányvállalatai révén, amelyek egyben a gazdaság meghatározó stratégiai szereplői is. A régiós megjelenés nemcsak üzleti tevékenységünket határozza meg, hanem geopolitikai gondolkozásunkat, stratégiánkat és felelősségünket is. Meggyőződésem, hogy a most átvett megtisztelő kitüntetés egyszerre szól a MOL üzleti téren és társadalmi szerepvállalásában megvalósított eredményeink.”



Markó László

# Kémiai Nobel-díj, 2010

**A** 2010. évi kémiai Nobel-díjat megosztva Richard F. Heck (79, University of Delaware), Akira Suzuki (80, Hokkaido Egyetem, Sapporo) és Ei-Ichi Negishi (75, Purdue University, Indiana) kapták, „for their development of palladium-catalyzed cross couplings in organic systems”.



Richard F. Heck



Akira Suzuki



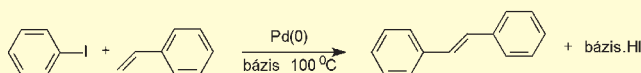
Ei-Ichi Negishi

NOBELPRIZE.ORG

„Cross coupling”-nak, keresztkapcsolási reakciónak nevezzük azokat a reakciókat, amelyekben két különböző szerves molekulát kapcsolunk össze egy új szén-szén kötés segítségével. A reakciót a leghatékonyabban palládium(0)-komplexek katalizálják homogén katalitikus körülmények között. Ezek a komplexek a reakcióelegyben alakulnak ki Pd(II)-vegyületekből valamilyen redukálószer, például PPh<sub>3</sub> vagy BuLi hatására.

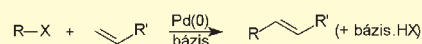
Számos ilyen kapcsolási reakciót dolgoztak ki az utóbbi 30–40 évben, ezek közül itt most csak a négy legfontosabbat tekintjük át főbb vonalakban. Közös jellemzőjük, hogy az egyik komponens mindig valamilyen szerves halogenid (esetleg tozilát vagy triflát). Ezek a reakciók eredetileg elsősorban olyan szénatomok közötti kötés kialakítására voltak alkalmazhatóak, amelyek viszonylag elektronegatív karakterűek (sp<sup>2</sup> hibridállapotúak vagy elektronegatív atomokhoz kapcsolódnak). Az újabb fejlesztések azonban – a palládiumkatalizátor aktivitását befolyásoló, változatos szerkezetű ligandumok alkalmazása révén – ezt a korlátot mára már enyhítették, és így sp<sup>3</sup> szénatomok bekötésére is vannak példák.

Az első ilyen típusú reakciót – azonos molekulákkal, de egymástól függetlenül, és némileg eltérő reakciókörülmények között – T. Mizoroki és R. F. Heck valósították meg 1971-ben, illetve 1972-ben (1. ábra).



1. ÁBRA

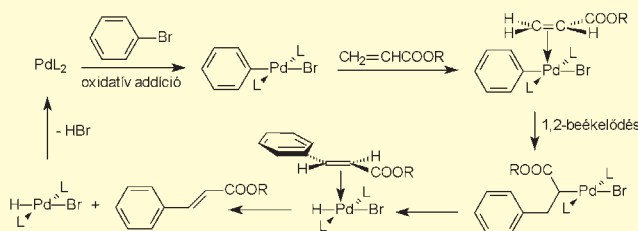
A **Heck-reakció** (amelyet a kettős felfedezés miatt néha Mizoroki–Heck-reakciónak is neveznek) széleskörűen alkalmazható aril- vagy vinil-halogenideknek a kettős kötéses szénatomokon legalább egy hidrogénatomot tartalmazó alkénnel való összekapcsolására (2. ábra). Ez a legáltalánosabban alkalmazott ke-



2. ÁBRA

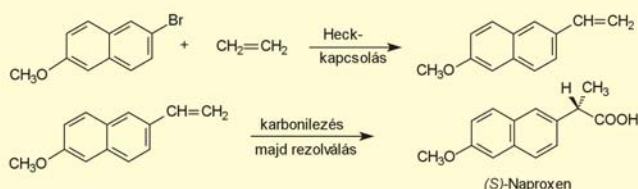
resztkapcsolási reakció, az ezzel foglalkozó publikációk száma mára már sok ezerre nőtt.

A palládium koordinációs övezetében lejátszódó reakció vázlatos mechanizmusát – bróm-benzol és egy akrilsav-észter példáján – szemlélteti a 3. ábra (L = PPh<sub>3</sub>).



3. ÁBRA

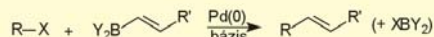
Mint látható, az új szén-szén kötés akkor alakul ki, amikor a π-komplex formájában megkötött alken beékelődik a palládium-szén σ-kötésbe.



4. ÁBRA

A Heck-kapcsolásnak ipari alkalmazásai is vannak, példaként álljon itt a nem-szteroid gyulladáscsökkentő Naproxen egyik szintézisútjának vázlatja (4. ábra).

A **Suzuki-kapcsolásban** (1979) a vinil- vagy aril-halogenid reakciópartnere szerves bórvegyület, leggyakrabban boronsav vagy

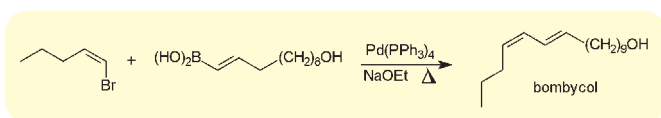


5. ÁBRA

boronsavészter (Y = OH vagy O-alkil). A bázis szerepe itt abban áll, hogy a bórhoz koordinálódva annak negatív töltést ad, és ezzel megnöveli reaktivitását (5. ábra).

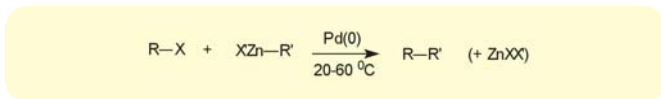
A módszer előnye, hogy a boronsavszármazékok könnyen előállíthatók, stabilisak és nem mérgezőek. Konkrét példaként álljon itt most a selyemhernyó szex-feromonja, a bombycol szintézise (6. ábra).





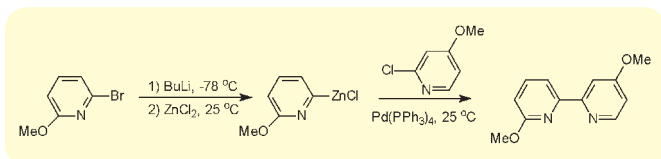
6. ÁBRA

A **Negishi-kapcsolásban** (1977) az aril- vagy vinil-halogenid alkil-cink-halogeniddel vagy dialkil-cink-vegyülettel reagál a palládiumkatalizátor jelenlétében (7. ábra).



7. ÁBRA

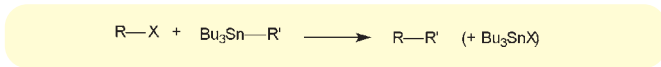
Az organocink-vegyületet általában *in situ* alakítják ki, a megfelelő lítium vagy alumínium organikus vegyületen keresztül. Az eljárás előnye, hogy sokszor még szobahőmérsékleten is lejá-



8. ÁBRA

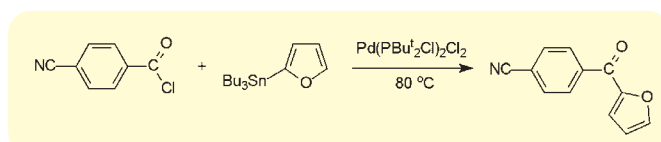
szódik, hátránya, hogy ezek a fémorganikus vegyületek igen levegő- és vízérzékenyek, tehát gondos inert technikát igényelnek. Konkrét példaként egy aszimmetrikus dipiridilszármazék szintézisét említeném meg (8. ábra).

A negyedik fontos keresztkapcsolási reakció a **Stille-kapcsolás** (1977), amelyben a vinil- vagy aril-halogenid reakciópartnerre önorganikus vegyület (9. ábra).



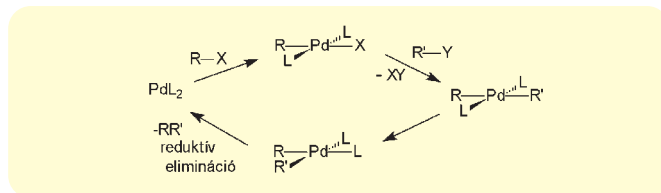
9. ÁBRA

Az R'-csoport aril- vagy vinil-jellege biztosítja azt, hogy szelektíven ezzel jön létre az új szén-szén kötés, és nem a butilcsoportok valamelyikével. A módszer előnye, hogy igen kevésbé érzékeny más funkció csoportokra, hátránya, hogy az önvegyületek mérgezőek és a termék tisztítása nehézkes. Megfelelő fosz-



10. ÁBRA

fánligandum esetén a halogenid-partner lehet akár karbonsavklorid is (10. ábra).



11. ÁBRA

A három utóbbi keresztkapcsolási reakció mechanizmusa hasonló, és egyszerűsített formában a 11. ábrán bemutatott ciklussal szemléltethető (Y = B(OH)<sub>2</sub>, ZnX<sup>+</sup> vagy SnBu<sub>3</sub>).

A Heck-féle mechanizmushoz képest a lényeges eltérés az, hogy a szerves halogenid oxidatív addíciója után a másik reakciópartner szerves csoportja ligandumcsere révén σ-kötéssel lép be a palládium koordinációs övezetébe, és intermedierként nem π-komplex képződik. Az új szén-szén kötés a ciklust lezáró reaktív eliminációval alakul ki.

## Megjegyzések

A Nobel-díj bizottság határozatát egy szomorú körülmény is befolyásolta: *John Kenneth Stille* 1989-ben az Egyesült Államokban repülőgép-szerencsétlenség áldozata lett. Mivel a Nobel-díj legfeljebb három részre osztva adható ki, valójában e tragikus esemény miatt válhatott egyértelművé a döntés.

*Richard F Heck* érdeme a kobalt-karbonilok által katalizált hidroformilezési reakció mechanizmusának felderítése is (1961). Ezzel akkor elsőként adott molekuláris szintű, egyértelmű értelmezést egy átmenetifém-komplex homogén reakciókörülmények közötti katalitikus működésére. Heck ekkor még a Hercules Powder Co. kutatóközpontjában dolgozott.



## MKE egyéni tagdíj (2011)

Kérjük tisztelt tagtársainkat, hogy a **2011. évi tagdíj** befizetéséről ziveskedjenek gondoskodni annak érdekében, hogy a Magyar Kémikusok Lapját 2011. januártól is zavartalanul postázhassuk Önöknek. A tagdíj összege az egyes tagdíj-kategóriák szerint az alábbi:

- alaptagdíj: 7000 Ft/fő/év
- nyugdíjas (50%): 3500 Ft/fő/év
- ifjúsági tag (25%): 1750 Ft/fő/év
- gyesen lévő (25%): 1750 Ft/fő/év

Tagdíjbefizetési lehetőségek:

- banki átutalással  
(az MKE CIB banki számlájára: 10700024-24764207-51100005)
- csekken (sárga csekket az MKE Titkárság küld, ill. innen kérhető)
- személyesen (MKE-pénztár, Budapest, Hattyú u 16. II/8)

Banki átutalásos és csekkes tagdíjbefizetés esetén a **név, lakcím, ösz-szeg rendeltetése** adatokat kérjük jól olvashatóan feltüntetni. Ahol a munkahely levonja a munkabérből a tagdíjat és listás átutalás formá-

ban továbbítja az MKE-nek, ez a lista szolgálja a tagdíjbefizetés nyilvántartását.

Tagdíj-információ a fizetési hátralékekban lévők számára:

	2010-ben (Ft/fő)	2009-ben (Ft/fő)	2008-ban (Ft/fő)
Alaptagdíj	7000	6500	6000
Nyugdíjas	3500	3250	3000
Ifjúsági tag	3500	3250	3000
Gyesen lévő	3500	3250	3000

Egyesületünk minden tagja saját maga is ellenőrizheti tagdíjbefizetésének a helyzetét az MKE-honlap (www.mke.org.hu) „Tagnyilvántartás” menübe történő belépéssel és az egyéni tagnyilvántartó lapja „tagság és díjfizetés nyilvántartó” oldal megnyitásával. Az egyéni tagnyilvántartó lapon a személyes adatok (online) pontosítására is van lehetőség.

**MKE Titkárság**



Hargittai István

■ BME Szervelten és Analitikai Kémia Tanszék és MTA-BME Anyagszerkezeti és Modellezési Kutatócsoport

# Az idei fizikai Nobel-díj egy kémikus szemével

„Miért lenne unalmas az igazán jó tudomány?”

Andre Geim [1]

Néhai barátom, Richard E. Smalley (1943–2005) emlékének ajánlom.

**A** kémikusok igazán elégedettek lehetnek a 2010-es Nobel-díjakkal. A kémiai igazi kémiaért adták és a fizikait olyan felfedezésért, amelyért akár kémiait is adhattak volna. A korábbi években sokat panaszkodhattunk azért, mert a kémiában osztott Nobel-díjak nem mindig estek a kémia fő irányába. A két díjazott fizikus, és a díjat a grafén első előállításáért kapták: a Királyi Svéd Tudományos Akadémia 2010. október 5-én bejelentette, hogy a fizikai Nobel-díjat közösen Andre Geimnek és Konstantin Novoselovnak (**1. ábra**) ítelték oda „a grafén kétdimenziós anyagra vonatkozó kísérleteikért” [2]. Mint az gyakran előfordul, az indokolás megfogal-



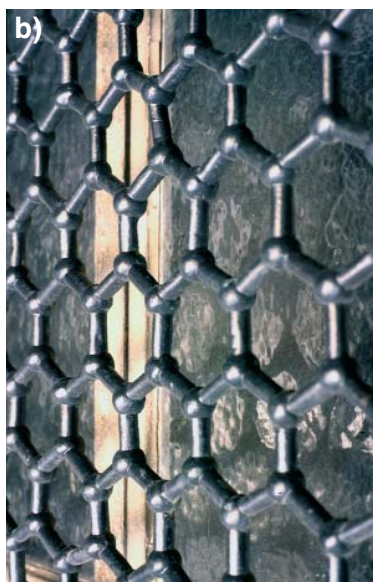
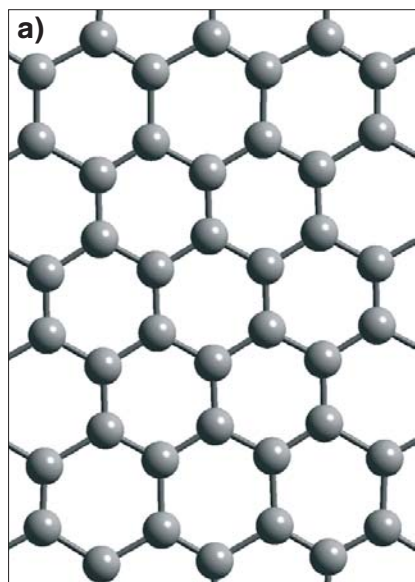
1. ábra. a) Andre Geim (Andre Geim szívességéből), b) Konstantin Novoselov (Konstantin Novoselov szívességéből)

mazása óvatos, de eddig nem tudunk semmilyen disszonáns hangról, amely bírálta volna ezt a választást, vagy feltűnően hiá-

nyolta volna egy harmadik, esetleg további személyek jelenlétét a díjazottak között (ilyen bírálatok az utóbbi időben többször is előfordultak).

Az idei fizika Nobel-díj azok közé a Nobel-díjak közé tartozik, amelyek viszonylag gyorsan követték a felfedezést. Geim és munkatársai a grafén előállításáról először 2004-ben számoltak be. Különösen szerencsés volt a névválasztásuk, mert ez a név könnyen megjegyezhető, és úgy hangzik, mintha már régóta ismert anyag neve lenne. Egy felfedezés vagy találmány esetében a névválasztást tartják az egyik legfontosabb aktusnak, sőt, egyesek szerint ez az egyetlen igazán egyéninek tekinthető teljesítmény a felfedezésben. Ugyanis a természettudományokban, ellentétben a művészetekkel, ha valaki nem fedezi fel azt, amit éppen felfedezett, akkor előbb vagy utóbb valaki más majd felfedezi. Viszont Beethoven szimfóniái vagy Picasso *Guernica* című festménye mástól nem származhatott volna; ha ők nem élnek, ezek a művek sohasem készülnek el [3].

2. ábra. Grafénmodellek. a) Varga Zoltán komputergrafikája, b) ablakrács az isztambuli Topkapi-szerájban © HARGITTAI I. FELVÉTELE

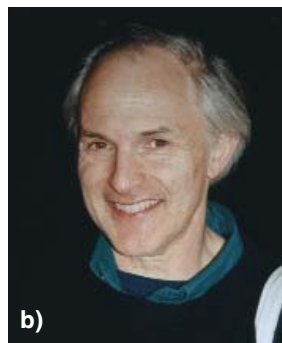




Az új anyag, a grafén rendkívül erős és stabilis, és nagyon sok egyéb olyan előnyös tulajdonsága van, amelyek mind a széles körű felhasználás ígérését hordozzák magukban. Arra lehet gondolni, hogy a Nobel-elismerés azért is ennyire gyorsan követte az anyag előállítását, mert azt várják, hogy néhány éven belül már nehéz lesz a rengeteg nagyszerű felfedező közül kiválasztani a díjra legérdemesebbeket. A grafént itt egy számítógép-rajzzal és egy ablakrácsról készült fényképpel szimbolizáljuk (2. ábra). Az ablakrács az isztambuli Topkapi-szerájban található, de bizonyára sok más helyen is van hasonló rács.

A két díjazott közül a fő felfedező, Andre Geim 1958-ban született az oroszországi Szocsuban, a Fekete-tenger keleti partján található híres üdülőhelyen. Amikor Andre hatéves volt, a család továbbköltözött Nalcsikba, amely a kaukázusi hegyvidék északi oldalán található, nagyjából félúton a Fekete-tenger és a Kaszpi-tenger között. Andre Nalcsikban végezte el középiskolai tanulmányait egy olyan iskolában, amely angol nyelvre szakosodott. A Moszkvai Műszaki-Fizikai Egyetemen folytatta, ahol 1982-ben szerzett diplomát. 1987-ben lett a fizikai tudomány kandidátusa – ezt a fokozatot a Szovjet (ma már Orosz) Tudományos Akadémia Szilárdtest-fizikai Intézetében végzett munkájáért kapta meg. Geim eredetileg Németországból áttelepült zsidó családban született. Zsidóságát személyi igazolványa a szovjet törvényeknek megfelelően nemzetiiségként tüntette fel, ami sok nehézséget okozott számára a továbbtanulásban. Mindig úgy kellett éreznie, hogy mindenkinél jobban kell teljesítenie ahhoz, hogy megkapja ugyanazokat a lehetőségeket, mint társai. A kandidátusi fokozat megszerzése után Geim kutatóként helyezkedett el a Szovjet (majd Orosz) Tudományos Akadémia Mikroelektronikai Technológiai Intézetében, amely a Moszkva környéki Csernogolovka városában található. A Szovjetunió összeomlásával együtt könnyebbé vált a külföldi utazás, és Geim posztdoktori munkára az angol Nottingham, majd Bath egyetemére, később a Koppenhágai Egyetemre került. Végül docensi állást kapott a Holland Nijmegen Radboud Egyetemen. Idővel azután, 2001-ben Geimet kinevezték a Manchesteri Egyetem Langworthy fizika-professzúrájára és ő lett a Center for Mesoscience and Nanotechnology igazgatója. Még Hollandiában megkapta az ottani állampolgárságot, és ma is holland állampolgár.

Konstantin S. Novoselov 1974-ben született az oroszországi Nyizsnyij Tagil vá-



3. ábra. a) Robert Curl, 1998, b) Harold Kroto, 1994, c) Richard Smalley, 2004

© HARGITTAI I. FELVÉTELEI

rosában, amely az Ural hegység déli vidékén található. Diplomamunkáját a Moszkvai Műszaki-Fizikai Egyetemen készítette el, az 1990-es évek elején került ki Nijmegenbe. Ott kezdte el PhD-tanulmányait, majd témavezetőjével, Geimmal együtt 2001-ben ő is Manchesterbe költözött. Orosz és brit kettős állampolgár.

Még Nijmegenben történt, 1997 áprilisában, hogy Geim egyik kísérlete nyomán egy kollégájával együtt közöltek egy fényképet, amelyen egy lebegő béka látható [4]. A képről sokan azt hitték, hogy áprilisi tréfa, pedig valójában Geimnek sikerült nemcsak a békát, hanem más nem mágneses tárgyakat is a gravitációval szemben alkalmazott erős mágneses térben lebegtetni. Ezeknek a kísérleteknek az értelmezéséhez alkotott a brit Michael Berry elméletet.

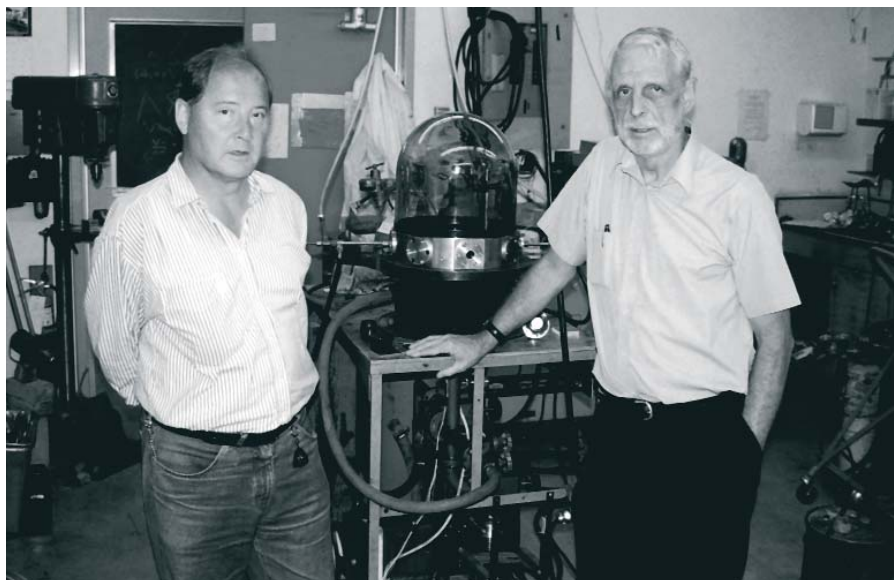
Amikor kiderült, hogy Geim kísérlete valódi, és a béka lebegtetése nem fényképezési trükk, sokan fehéborodtak, mondván, Geim értelmetlen dolgokra pazarolja a tehetségét és az anyagi erőforrásokat, ezért 2000-ben kitüntették az Ig-Nobel-

díjjal, amelyet magyarul gyakran citrom Nobel-díjként is szoktak emlegetni. Az Ig-Nobel-díjat adományozók tehát alaposan félreértették Geim kísérleteinek és a békás fényképek az értelmét, és nem értették meg, hogy a béka lebegtetése csak a figyelemfelkeltést szolgálta ezek iránt az egyébként úttörő jelentőségű kísérletek iránt.

Eredetileg az Ig-Nobel-díj életrehívói nagyszerű humorérzékről tettek tanúságot, de ebben az esetben nem értették meg valaki másnak a humorát. Ez a kitüntetés egyáltalán nem kedvetlenítette el Geimet, aki folytatta mélyreható kísérleteit, amelyek a mágneses tér alkalmazására és a mágneses térben való viselkedésre vonatkoztak. A következő évben megjelentetett cikkében társszerzője a tekintélyes nevének hangzó H. A. M. S. ter Tisha, volt, csak a szerkesztők nem vették észre hogy a H.A.M.ter = hamster jelentése hörcsög, és Geim szerzőtársul Tisha nevű kedvenc hörcsögét választotta [5].

A grafén felfedezése kémikusként önkéntelenül is felidéz bennünk a fullerének

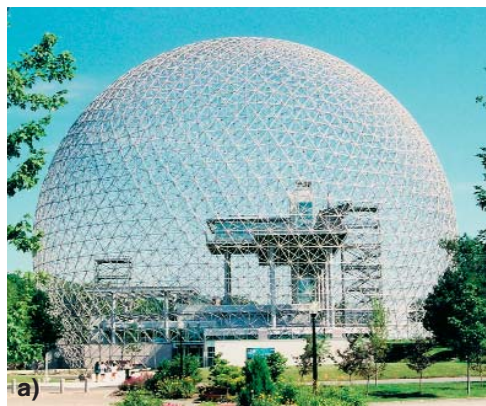
4. ábra. Wolfgang Krätschmer és Donald Huffman, 1999 © HARGITTAI I. FELVÉTELE







felfedezésével kapcsolatos eseményeket. Geim és Novoselov 2004-es felfedezésében az számított meglepetésnek, hogy sikerült monoatomos szénhártyát előállítani [6]. Korábban ugyanis szinte általánosan elfogadták, hogy nem léteznek kétdimenziós atomkristályok. Ezzel szemben 1966-ban a brit David Jones azt a kérdést vetette fel, hogy sikerülhet-e kétdimenziós szénatomlapot (grafitlapot) úgy felpöndöríteni, hogy abból hatalmas, zárt terű kalitkákat alakítsanak ki [7]. Amikor a japán Eiji Osawa 1970-ben leírta a csonkolt ikozaédes  $C_{60}$ -molekulát japán nyelvű dolgozatában, javaslatára nem kísérleten, nem is számításo-



8. ábra. a) Az 1967-es montreali világkiállítás amerikai csarnokának fullerényszerkezetű épülete, b) és annak egy részlete az egyik ötszögös elem kiemelésével © HARGITTAI I. FELVÉTELEI



5. ábra. Szénnanocsövek modellje a bangkoki királyi palota díszítőelemeként

© HARGITTAI I. FELVÉTELE

kon alapult, hanem csupán szimmetriameggondolásokon [8]. Ezután jelent meg D. A. Bocsvar és E. G. Galpern kvantumkémiái számítási dolgozata, amely megjósolta a csonkolt ikozaédes  $C_{60}$ -molekula

6. ábra. A  $C_{60}$  modellje az isztambuli Topkapi-szerájban

© HARGITTAI I. FELVÉTELE

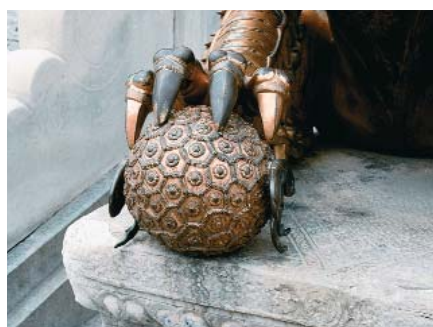


stabilitását [9]. Mindkét munka elsüllyedt az ismeretlenségben, és csak a buckminsterfullerén 1985-ös felfedezése [10], majd 1990-beli előállítása [11] nyomán kerültek a megkésett figyelem középpontjába.

A  $C_{60}$  kísérleti megfigyeléséért 1996-ban kémiai Nobel-díjat kapott az amerikai Robert Curl, Richard Smalley és a brit Harold Kroto (3. ábra). A  $C_{60}$  előállításában elsősorban két fizikus jeleskedett, az amerikai Donald Huffman és a német Wolfgang Krätschmer (4. ábra). Az utóbbi felesége egyébként a magyar *Hatvan* városából származik, amit Krätschmer utólagosan értelmezett égi jelnek vél abban, hogy egyáltalán a  $C_{60}$ -nal kezdett foglalkozni. Huffman és Krätschmer 1996-ban kiharadt a kémiai Nobel-díjból. A grafén és a szénnanocsövek, fullerének szoros rokonságban vannak, hiszen már Jones megfontolásai is arra utaltak, hogy a grafén a  $C_{60}$ -nal kezdett foglalkozni. Huffman és Krätschmer 1996-ban kiharadt a kémiai Nobel-díjból. A grafén és a szénnanocsövek, fullerének kiindulási anyagának tekinthető. Az elismerés szempontjából Geim és Novoselov szerencsésebb csillagzat alatt születtek, mint Huffman és Krätschmer. A nanocsöveket az 5. ábrán bemutatott fénykép szimbolizálja. A 6–8. ábra egyre növekvő méretű fullerén-analógokat mutat be.

7. ábra. Valamelyest szabálytalan fullerénmodell a kínai Tiltott Városban

© HARGITTAI I. FELVÉTELE



Geim és Novoselov felfedezését és az érte kapott Nobel-díjat tekinthetjük a kémiai és a fizikai (az anyagtudományról nem is beszélve) egyaránt érintő, gyönyörű felfedezéssorozat lezárásának és méltó elismerésének. Semmiképpen sem kell, hogy mindez a tudományág felfedezéseinek végét is jelentse. Inkább arra számíthatunk, hogy ezek a sikerek a közeljövőben még inkább tehetségeket és erőforrásokat fognak erre a területre irányítani.

IRODALOM

[1] A. Geim in a Profile: A physicist of many talents. *Physics World* (2006) February, 8–9.  
 [2] Hiába orosz nevek, nem transliteráljuk őket, mert viselőik nem Oroszországban élnek, és így használják neveiket.  
 [3] Hargittai I., *Út Stockholmba*. Galenus, Budapest, 2004, 184–191.  
 [4] M. V. Berry, A. K. Geim, Of flying frogs and levitrons. *Eur. J. Phys.* (1997) 18:307–313.  
 [5] A. K. Geim, H. A. M. S. ter Tisha Detection of earth rotation with a diamagnetically levitating gyroscope. *Physica B* (2001) 294–295:736–739.  
 [6] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorjeva, A. A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science* (2004) 306:666–669.  
 [7] D. E. H. Jones, *New Scientist* (1966) 32:245.  
 [8] E. Osawa, Superaromaticity (japánul). *Kagaku* (1970) 25:854–863.  
 [9] D. A. Bochvar, E. G. Galpern, Hypothetical systems: Carbo-dodecahedron, s-Icosahedron, and Carbo-s-Icosahedron (oroszul). *Dokl Akad Nauk SZSZSR* (1973) 209: 610–612.  
 [10] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, C60: Buckminsterfullerene. *Nature* (1985) 318: 162–163.  
 [11] W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, Solid C60: a new form of carbon. *Nature* (1990) 347:354–358.

ÖSSZEFOGLALÁS

Hargittai István: Az idei fizikai Nobel-díj egy kémikus szemével

Az idei fizikai Nobel-díjjal a grafén első előállítóját tüntették ki. Ezt a felfedezést ugyanannyira tekinthetjük fontos eredménynek a kémiában, mint a fizikában.



# Szekeres Gábor

## (1924–2010)

Nehéz tudomásul venni, hogy a hazai vegyipar egyik kiemelkedő alakja, Egyesületünk oszlopos tagja, lapunk örökös főszerkesztője életének 87. évében véglegesen távozott e világi körünkől. Őt és a szomszédos ágyon fekvő feleségét közel egy időben érte a halál az egyik budapesti kórház kórtermében. Az ágy melletti szekrényre kikészítette a kórházba kerülése miatt értesítendő listáját, amelyen szerepelt a Magyar Kémikusok Egyesülete is. Kettejüket 2010. október 28-án búcsúztatták a közeli Szent Gellért-templomban. Több mint fájdalmas, hogy téves időpont ismerete miatt többen csak a szertartás után jelentünk meg.

Szekeres Gábor a soproni Evangélikus Líceumban érettségizett, és a Budapesti Műszaki Egyetemen szerzett vegyészmérnöki diplomát 1948-ban. Az ácsi cukorgyárban, majd a mai Egyesült Vegyiművekben dolgozott, ahonnan 1952 közepén termelési osztályvezetőként távozott az akkori Bányászati és Energiaügyi Minisztérium Műszaki Fejlesztési Főosztályára. Itt és a minisztérium jogutódainál 1963-ig főmérnök, illetve csoportvezető főmérnök, majd 1981 elejéig főosztályvezető-helyettes volt. E főosztályon készítették a hazai műanyag-, petrokémiai, műszál-, gyógyszer- és növényvédőszer-ipar fejlesztését megalapozó döntés-előkészítő anyagok többségét. Emellett, többek között kiemelkedő szerepe volt a vegyipar ágazati stratégiájának elkészítésében és a vegyipari kutatóintézetek tevékenységének szervezésében. 1981-től az újonnan alakult Ipari Minisztérium Vegyipari Szakértői Csoportjába került, amelynek tevékenységét 1984-től 1990. évi nyugdíjba vonulásáig főtanácsosi rangban koordinálta. Egyik volt munkatársa szerint 1952 és 1990 között Szekeres Gábor volt „a magyar vegyipar szürke eminenciása”, a háttérben minden fontos fejlesztést érintő elhatározás előkészítésében döntő szereppel bírt, és a fordulatokban bővelkedő időszakban tiszta, erkölcsileg megtámadhatatlan tudott maradni.

Iparfejlesztő munkájának részeként szorgalmazta a tudományos eredmények széles körű ismertetését. Maga is számos ismeretterjesztő alap-, közép- és felsőfokú monográfiát készített. 1964-től a Budapesti Műszaki Egyetem oktatója volt, 1976-tól címzetes egyetemi docensként. A Magyar Vegyészet Múzeum létrehozásának egyik kezdeményezője és kiharcolója volt, Tudományos Tanácsát sokáig közvetlenül irányította.

Több mint fél évszázadig vett részt az egyesületi munkában. Az Egyesület felkérésére 1953-tól 1962-ig műszaki titkár, majd fő-

titkárhelyettes és IB-tag volt. Ezt a tisztséget 1985-ig töltötte be, amikor a rotációs elv miatt már nem lehetett újra jelölni. A nyolcvanas évek második felében a kémia és a vegyipar hazai jövőjét felvázoló egyesületi munkabizottság elnöki tisztségét látta el.

1959-től 2000-ig a Magyar Kémikusok Lapja felelős szerkesztője és haláláig a lap szerkesztőbizottságának aktív elnöke, illetve tiszteletbeli örökös elnöke volt. Talán szerencsés lehetett, hogy

e munkásságának jó része arra az időszakra esett, amikor a vegyipar nálunk is virágkorát élte. Nagy idők nagy és széles körben elismert tudósítója, ismeretterjesztője volt. Nem csupán ipari, hanem a szerzőknek nemzetközi ismertséget (és a lapnak idézettséget) is hozó tudományos közleményeket jelentetett meg. Ipari és tudományos sorozatokat indított és szerkesztett. Negyven körüli közleményt maga, vagy társszerzővel közösen írt. A lap mindmáig alkalmazott szerkezetének kialakítója volt. Megkövetelte a tömör, szélesebb körben is



Szekeres Gábor (balról a második) az utódok körében

érthető és szép magyarsággal írt közleményeket. Igényességét és a lap iránt érzett féltő szeretetét az évtizedek alatt sokan megtapasztalhattuk. Szokásos hétfégi telefonbeszélgetéseink alkalmával mindig érdeklődött, hogy „mit tudsz az Egyesületről”, „mit tudsz a lapról”, gyakran éreztetve, hogy hiányzik neki a lappal való törődés és nyüzsgés. Ennek fényében is Gábor nagyságát jelzi, hogy bő tíz évvel ezelőtt saját kezdeményezésére átadta a lap szerkesztését, és kissé hátrább húzóda önzetlenül segítette az új szerkesztő munkáját, gondoskodva a minél zökkenőmentesebb váltásról.

Gazdasági és egyesületi munkáját számos kitüntetéssel ismerték el. Többek között 1976-ban Eötvös Loránd-díjat kapott, 2007-ben pedig Egyesületünk Fabinyi Rudolf Emlékéremet adományozott részére.

Életének vége felé egyre aggódóbban beszélt ágyban fekvő, segítségére szoruló, nyugdíjas röntgen-főorvos feleségéről. Amikor lábpanasza miatt maga szorult kórházi ápolásra, onnan igyekezett hazamenni, hogy felesége mellett lehessen. Végül együtt kerültek kórházba, egymás melletti ágyba a kétszemélyes kórteremben. Isten nyugosztalja mindkettőjüket.

Személyében önmagával és másokkal szemben is igényes, nagy műveltségű iparfejlesztőt és ismeretterjesztőt, széles körben ismert és elismert, kiváló embert veszítettünk el. A Magyar Kémikusok Egyesülete és a Magyar Kémikusok Lapja tisztelettel és szeretettel őrzi Szekeres Gábor emlékét.

Rácz László





Mátravölgyi Norbert

■ Vekor Kft., Veszprém

# A Korróziós Figyelő 50 éve

**A** Korróziós Figyelő – a magyar, néha eredeti nyelven megjelenő műszaki tudományos szakfolyóirat – 2010-ben az 50. évfolyamába lépett. A lap főleg korrózióvédelemmel foglalkozik, de van benne azért számos kapcsolódó rokon szakma is. E jubileum alkalmából végeztem egy kis történeti kutatást, beszéltem a (fő)szereplőkkel, így készült el ez a visszaemlékezés.

## A lapról

A folyóiratnak kétféle kiadása van, a hagyományos nyomdai kiadás, amely postai úton éri el az előfizetőket, valamint egy elektronikus, amelyet az 50. évfolyammal vezetünk be, és a Vekor Kft. honlapján ([www.vekor.hu](http://www.vekor.hu)) regisztráció után megtalálható. A két kiadás között tartalmi különbség nincsen. A folyóiratot a Vekor Kft. adja ki, felelős kiadója a cég mindenkor ügyvezető igazgatója, jelenleg Horváth Márton. A felelős szerkesztő munkáját segíti a szerkesztőbizottság (2010-ben Dalmay Gábor, Haskó Ferenc, Hencsei Pál, Horváth Márton, Kahán Róbert, Kiss László, Lambertus Zsolt, Lengyel Béla, Medgyesi Iván, Simor László, Horváth János, Mátravölgyi Norbert, P. Nagy Sándor, Tompa Miklós, Zanathy Valéria), amelynek tagjai szakmájuk jeles képviselői. Hasznos tanácsokat adnak a szerkesztésben, a szakcikkeket lektorálják. Javaslatot tesznek a felelős szerkesztőnek arról, hogy egy cikk megjelenhet-e vagy sem. A szerkesztőbizottság elnöke Zanathy Valéria.

Az újságot előfizetői és reklámozói tartják fenn, valamint a Vekor-szerződést kötő támogatói (2010-ben Color Service Kft./Sigma Coatings, Budapest; Duna Menti Regionális Vízmű Zrt., Vác; E.ON EÜT Erőműüzemeltető és Szolgáltató Kft., Debrecen; GYŐRLAKK Festékgyártó Zrt., Győr; HELIOS, Szlovénia; HEMPEL Magyarországi Fióktelepe, Budapest; HENELIT International Kft., Székesfehérvár – HENELIT GmbH, Ausztria; Hídtechnika Kft., Budapest; International Farbenwerke GmbH,

Németország; KLEIN Műszaki Kereskedelmi Kft., Esztergom; MÉLYÉPTERV Komplex Zrt., Budapest; NIVELCO Ipari Elektronika Zrt., Budapest; Paksi Atomerőmű Zrt., Paks; SPRAY-TECH Kft., Budapest; TECHNO-WATO Kft., Budapest), akik nagymértékben hozzájárulnak a Korróziós Figyelő kiadásához. Nevüket feltüntetjük a lap hátoldalán.

Az újság egy-egy számának terjedelme 32–44 oldal között változik. Méretei: tükör 165×245 mm, teljes 200×285 mm, folyamatos oldalszámozású. Két fő részből áll, cikkek és szemle. A cikkek általában kutatási eredmények, ezek gyakorlati megvalósulása, új szemléletek, új elméletek, újdonságok leírása, valamilyen új termék bemutatása. A szemlemben írunk készülő rendezvényekről, itt található a hazai és külföldi korróziós rendezvénynaptár, rendezvények beszámolója, a hírek rovat, illetve a folyóiratok tartalmából rovat, melyben hazai és külföldi rokon folyóiratokat és a cserelapjainkat szemlizzük (Anyagvizsgálók Lapja, Budapest; Beton, Budapest; BKL Kohászat, Budapest; Corozione și Protecție Anticorozivă, Románia; Koroze a Ochrana Materiálu, Prága; Magyar Kémikusok Lapja, Budapest; A Magyar Zománcipari Egyesület Tájékoztatója, Budapest; Műanyag és Gumi, Budapest; Ochrana Przed Korozją, Lengyelország; Praktika Protivokorozionnoj Zashchitü; Journal of Protective Coatings & Linings, Pittsburgh, PA, USA; Zashchita Metallov, Moszkva). A reklámrovatban megismerhetik a cégek tevékenységét, anyagokat, technológiákat és műszereket.

A lap hagyományörző, külleme nem sokat változott az évek során, a legfontosabb küllemi elemeket meghagytuk (pl. logó, betűtípus, kéthasábos szerkezet stb.). Az újság 19 éve a legmodernebb technikával felszerelt veszprémi Prospektus Nyomdából jut el az olvasókhoz.

A Korróziós Figyelő története egyben a VEKOR története is, és ehhez ismernünk kell a NEVIKI megalapításának történetét.

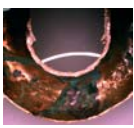


A Korróziós Figyelő evolúciója

A különböző iparágak fejlődése nem volt arányos és egyenletes. Leggyorsabban az építőipar fejlődött, hiszen lakásra mindenkinek szüksége volt. Az építkezés nem követelt széles körű ismereteket, a szükséges alapanyagok a természetben kő formájában rendelkezésre álltak, vagy előállításuk (pl. téglavetés, paticsfal stb.) könnyen elsajátítható volt. Nem így a vegyipar, amely nagyobb, kiterjedtebb tudást igényelt. Magyarországon a vegyi ipar első terméke a hamuszír volt, amelyet fahamu kilúgozásával, a nyert oldat bepárlásával készítettek, és már Mária Terézia idejében nagy mennyiségben exportáltak Franciaországba, ahol akkorra igen fejlett textilipar működött. 30–40 ezer mázsa hamuszírt exportáltak évente. Az 1800-as években több kisebb vegyipari üzem létesült, amelyek a kohászat számára állítottak elő különböző ásványi savakat [2].

A Monarchiában hazánk ipari fejlődésére az ország félgymarmati helyzete, a közös vámterület erősen rányomta bélyegét. A hazai nyersanyagok hiánya, illetve a meglévő gyenge minősége is gátolta a fejlődést. Mindezek ellenére az ipar fejlődése a





## ÉVFORDULÓ

20. század első évtizedeiben meggyorsult. Az 1900-as évek elején kialakult a hazai gyógyszeripar; csak a fővárosban 3 gyógyszergyár létesült (a mai Chinoin, a Richter és az EGIS). Legfejlettebb iparágunk 1914-ben az élelmezőipar, utána a vas- és fémipar, valamint a gépgyártás volt. Ezt követték a vegyipar és a könnyűipar köréhez tartozó iparágak [1, 2].

Az I. világháborút lezáró trianoni békediktátum megfosztotta a magyarországi vegyipart a legfontosabb ásványkincseitől (pl. kősó). Az új határok miatt országon kívül maradt számos fontos vegyipari gyár, olyan is, amelyek hadi és bányászipari célokra robbanószereket gyártott. Helyettük a kint rekedt gyárak gyors hazamenekítésével az 1920-as években létesült a balatonfűzfői Nitrokémia és a peremartoni Ipari Robbanóanyaggyár. Az első nitrogénműtrágya-gyár 1931-ben Péten épült napi 20 t ammónia kapacitással, amely a későbbiek során 1500 t/nap teljesítményűre bővült [2].

A II. világháború előtt önállóan felállított tudományos műszaki kutatóintézet Magyarországon nem működött. Pezsgő fejlődést hozott az a határozat, amely az 1950-es, 60-as években előírta a vegyipar kiemelt fejlesztését, ennek keretében létesültek a BVK, a TVK, az ÉMV és az olajfeldolgozó ipar létesítményei (DKV, Tiszai Kőolajipari Vállalat, Komáromi Kőolajipari Vállalat, Zalai Finomító stb.). Ezekkel a létesítményekkel a hazai vegyipar pótolni tudta azokat a fejlesztési hiányokat, amelyek időközben elmaradtak. Többek között a magyar műanyagipar is világszínvonalra került [2].

A Szervetlen Vegyipari Kutató Intézetet 1949-ben alapították, több rokon ipari kutatóintézet mellett. Az iparügyi miniszter főfelügyelete alatt működő ipari kutatási szerveknek az lett a feladatuk, hogy az iparág területén összefogják, irányítsák és ellenőrizzék azokat a kutatásokat, amelyeknek jellege általános, vagy az iparág egészét érintik. Az intézet rövidesen felvette a Nehézvegyipari Kutató Intézet (NEVIKI) nevet, és rövid budapesti működés után Veszprémbe költözött. Veszprém számos vegyipari üzem (Pét, Peremarton, Várpalota, Fűzfő Ajka stb.) földrajzi közepontjában helyezkedett el, így helyes döntés volt, hogy Veszprémet nehézvegyipari tudományos központtá fejlesszék [1].

Az iparba beruházott nagy értékű létesítmények biztonságos üzemeltetésére egy sor intézkedést hoztak, így többek között azok korrózióval szembeni védelmét is meg kellett szervezni. Ezt segítette, hogy

### FŐSZERKESZTŐK, FELELŐS SZERKESZTŐK [5]

P. Nagy Sándor: 1961–1962  
Kovács Klára: 1963–1969  
Bozsó Istvánné: 1970–2003  
Tóth Andrásné: 1984–1985  
Mátravölgyi Norbert: 2004–

### TECHNIKAI SZERKESZTŐK [5]

Felbán Ferencné: 1963–1966  
Blickle Tiborné: 1966–1982  
Hirsch István: 1983–1988  
Órsi Edit: 1988–1990  
Tóth László: 1990–2001  
Mátravölgyi Norbert: 2002–2003

### A SZERKESZTŐBIZOTTSÁG ELNÖKEI [5]

Kiss Béla: 1973–1986  
Dalmay Gábor: 1987–2010  
Zanathy Valéria: 2010–

### KIADÓ

NIM Műszaki Dokumentációs és Fordító Iroda: 1962–1982  
PRODINFORM Műszaki Tanácsadó Vállalat: 1983–1990  
NEVIKI korróziós osztály, VEKOR: 1991  
Vekor Kft.: 1992–

### NYOMDA

Veszprém megyei Nyomda: 1965–1966  
MTA KESZ Sokszorosító: 1966–1982  
Műszaki Fordító Vállalat házi sokszorosító: 1984–1986  
MSZH Nyomda, Budapest: 1987–1990  
Prospektus Nyomda, Veszprém: 1991–

1950-ben Bácskai Gyula és Kovács Klára vezetésével Veszprémbe települt a Szegedi Tudományegyetem korróziós kutatólaboratóriuma. Megalakult a NEVIKI korróziós osztálya [2].

Az osztály megalakulása óta sokat tett a hazai korróziós problémák feltárása, okai-

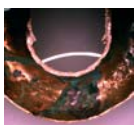
### P. Nagy Sándor, a VEKOR megszervezője



### Az első „szövegszerkesztő”

nak felderítése és számos sikeres védekezési módszer kidolgozása terén. Élén járt abban a nagy felvilágosító munkában, amely szükséges volt a korrózióvédelem fontosságának tudatosításában. Rendszeresen foglalkoztak a hazai üzemekben felmerült korrózióvédelmi kérésekkel és megszervezték a Korróziós Figyelőszolgálatot (1952), amelynek keretében begyűjtötték az országban észlelt korróziós esetek adatait. Szoros kapcsolatot létesített az iparral, mind a korróziótól szenvedő fémárúgyárakkal, mind pedig a korrózió elleni védőfestékeket és bevonatokat előállító üzemekkel [1].

1961-ben a Nehézipari Minisztérium elrendelte a Vegyipari Korróziós Szervezet (VEKOR) létrehozását. Ezzel a feladattal a NEVIKI-t bízták meg. A VEKOR-t a korróziós osztályon belül főfelelősi minőségben P. Nagy Sándor szervezte meg. A VEKOR létrehozása nagy segítséget jelentett, mivel akkoriban még kevés korróziós szakember tevékenykedett. Ennek során minden vegy- és rokon ipari vállalatnál főhatósági utasításra korróziós felelősöket neveztek ki, akik a NEVIKI-vel közvetlen kapcsolatba kerültek. Ezek száma 1963-ban már elérte a 173-at. A kapcsolattartás érdekében a korróziós főfelelős sajtóengedély hiányában körleveleket adott ki Korróziós Figyelő címmel, amelyben rendszeresen tudósította a munkában részt vevőket az aktuális feladatokról, munkaterv készítéséről stb. Ezek a körlevelek tájékoztatást nyújtottak a korróziós felelősök számára tervbe vett továbbképzésekről, amelyekre azért volt szükség, mert a korróziós szakmérnökképzés csak ezt követően indult meg. Persze ezek a körlevelek lehetőséget adtak, kisebb szakmai cikkek segítségével, a szakmai továbbképzésre is [2].



Az első számokat, amelyeket P. Nagy Sándor szerkesztett karbonszalagos írógépen, a NEVIKI házi nyomdájában sokszoroztatták.

## Változások az évek során

A kiadvány igen nagy szolgálatot tett a hazai és a külföldi korróziós kutatások eredményeinek ismertetésével. A körlevélből szakfolyóirat lett. 1962-ben kiadót kapott a lap (NIM Műszaki Dokumentációs és Fordító Iroda). 1964-ben az addig 500-as példányszámot 800-ra, 1968-tól pedig ezerre növelték. Rendszeresen áttekintették az előző év kutatási eredményeit, cikksorozatokat közöltek a korrózió elleni védelem elméleti és gyakorlati kérdéseiről. Célzámot adtak ki a szerves vegyületek okozta korrózió eddig kevésbé ismert területéről, a légköri korrózió vizsgálatáról és folyamatairól stb. A kiadványban egyaránt referáltak a külföldi szakirodalom jelentősebb közleményeit és a védekezésre használható újabb hazai gyártmányokat [1].

A Korróziós Figyelő sikerére tekintettel 1965-ben áttértek a kiadvány nyomdai előállítására. Ez tovább emelte a folyóirat színvonalát, mert lehetőség volt tónusos fényképes ábrák közvetítésére. Nemzetközi elismerését mutatta, hogy egyes számainak a szakma nagy tekintélyű folyóirata, a Corrosion Abstracts és a NACE szemléje referálta. A „baráti” országok pedig cserekiadványok fejében kérték megküldését [1].

A lap felelős szerkesztője 1963–1969 között Kovács Klára volt. 1970-től a munkát tőle Bozsó Istvánné vette át. A 70-es években a Hungarokorr kiállításokon a KOFI szerkesztőbizottságát rendszeresen oklevéllel tüntette ki az OMFB elnöke [1]. 1973-tól szerkesztőbizottság segítette a szerkesztő munkáját, első elnöke Kiss Béla volt. 1987-től Dalmay Gábor vette át a helyét. A szerzői közleményt az adott területek szakértői lektorálták is. A szerkesztőbizottság évente kétszer ülésezett a feladatokat egyeztetve [3].

Az első jelentősebb fordulópontra 1983-ban érte a Figyelőt. Addig jó 15 éven ke-



**A szerkesztőbizottság 1994-ben. Felső sor: Lengyel Béla, Dalmay Gábor, Horváth Márton, Hencsei Pál, Haskó Ferenc, Medgyesi Iván, Kovács Lajos, Székely Levente, Krivián Lajos. Ülő sor: Kálmán Erika, Kovács Klára, Bozsó Istvánné, Kiss László, P. Nagy Sándor**



**A nem teljes szerkesztőbizottság 2010-ben. Balról jobbra: Hencsei Pál, Lambertus Zsolt, Zanathy Valéria, Lengyel Béla, Tompa Miklós, Dalmay Gábor, Horváth Márton, Kiss László, Mátravölgyi Norbert, Bozsó Istvánné**

resztül a NIM finanszírozásával készült a lap. Azonban a központi műszaki fejlesztési forrásokkal való takarékoskodás a korábbi forrásokat megszüntette. Három évig a lap súlyos gondokkal küzdve, akadózva jelent meg, csak egy-egy füzet képviselt egy évfolyamot. 1986-tól aztán megoldódtak a gondok. Vállalatok egész sora vállalta, hogy kölcsönös előnyök alapján hirdetésekkel segítik a munkát. Ezeket a támogató vállalatokat és intézményeket ettől fogva rendszeresen feltüntették a lap első vagy hátsó borítóján.

Aztán elérkezett a rendszerváltozás.

## A Vektor Kft. alapítása

A NEVIKI-t – és így a korróziós osztályt is – 1988-cal kezdődően felszámolták. Az osztály munkatársai feltételezték, hogy a korróziós tevékenységre a megváltozott gazdasági körülmények között is szükség

lehet. Ezért a munkatársak a NEVIKI szellemi örököseként létrehozott Vektor Kft. keretében folytatták a munkát. 1991-ben a lap színvonalas nyomdai munkáját a veszprémi Prospektus Nyomda vállalta, ettől az évtől vezették be az előfizetői díjat is. 1992-től pedig már a Vektor Kft. volt a lap kiadója is. Bozsó Istvánné szerkesztő áldozatos munkával tartotta életben a lapot. Az anyagi alapot az előfizetők, támogatók, hirdetőik és nem utolsósorban a VEKOR Kft. biztosította. Sokszor előfordult, hogy a munkatársak által nehéz munkával megkeresett pénz egy részét a folyóiraatra költötték. Sok segítséget kaptunk szerzőinktől is, akik a lap fenntartása érdekében lemondtak a honoráriumukról. 2004-ben ezen sorok szerzője vette át a szerkesztői stafétát. Ilyen körülmények között érte meg a lap az ötvenedik évfolyamát [6].

## Statisztikák, érdekességek

Az 50 évfolyamban 290 szám jelent meg, terjedelmük 9475 oldal. 2030 cikk, beszámoló, hír volt 1343 szerző tollából. A KOFI-adatbázis ([www.vekor.hu/form.php](http://www.vekor.hu/form.php)) tárgymutatójában 2676 kulcsszó van [4–5].

1970-től az egyes cikkek végére angol nyelvű összefoglaló került. 1977-től ez kiegészült orosz nyelvű összefoglalóval, és az újság végén, 1987-től az újság elején ezeket egyszerre közölték. 1991-től újra csak angol nyelvű összefoglaló volt.

2000-ig csak magyar nyelven jelentek meg cikkek a Korróziós Figyelőben, 2000-től kezdődően az eredeti nyelven leadott kéziratokat két nyelven is közölték (a bal oldali hasábon angolul vagy németül, a jobb oldalin pedig magyarul). Eddig összesen 8 cikk jelent meg így. ●●●

## IRODALOM

- [1] Móra László: A Nehézvegyipari Kutató Intézet harmincéves története. Veszprém, 1982.
- [2] P. Nagy Sándor: Elérkezett az 50. évfolyam. Korróziós Figyelő 2010. 50. (1) 4–5.
- [3] Bozsó Istvánné: Elérkezett az 50. évfolyam. Korróziós Figyelő 2010. 50. (1) 4.
- [4] Korróziós Figyelő adatbázis, [www.vekor.hu](http://www.vekor.hu), 2010. április 19.
- [5] Bozsó Istvánné: Néhány adat a Korróziós Figyelő történetéből. Korróziós Figyelő 2003. 43. (6) 203.
- [6] Horváth Márton visszaemlékezései, szóbeli közlés





## A mozifilmek elemei

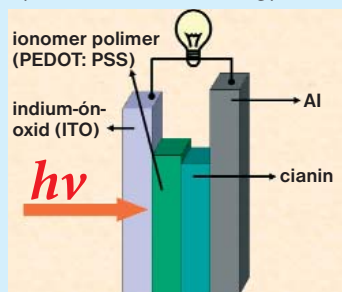
A kémiatanárok nagyon jól tudják, hogy mennyire nehéz a diákokhoz közel hozni ezt a tudományt. Ebben segíthet két amerikai oktató munkája, akik olyan filmeket gyűjtöttek össze, amelyek címében szerepel valamelyik kémiai elem neve. Összesen 31 elem nevét találták meg a legváltozatosabb filmek eredeti angol nyelvű címében. Persze ezek a magyar fordítás során nem egyszer átalakulnak, vagy esetleg az derül ki, hogy az elemre használatos angol szónak van más jelentése is. Például az 1998-as *A kód neve: Merkúr* (*Mercury Rising*) film magyar címéből nyilvánvaló, hogy a bolygóról van szó, és nem az elemről. Az arany több tucatnyi film címében szerepel, a *Neon City* (1992) alkotás címe mindkét nyelven azonos. A magyarul *Az ólomkatona* néven ismert, 1995-ös film eredeti címében (*Tin Soldier*) viszont másik elem jelent meg.

*J. Chem. Educ.* 87, 1056. (2010)



## Fénnyel feltölthető elem

A hagyományos napelemek az utóbbi időben egyre hatékonyabbá válnak, de van egy hátrányuk: csak addig működnek,



amíg a megvilágítás tart. Ezt a problémát orvosolja az angol tudósok által készített, fénnyel tölthető elem prototípusa. Egy ilyen elem többszörösen elágazó felépítésű, félvezető sajátosságú szerves dendrimermolekulákat tartalmaz, amelyeknek magja kationos,

cianinfestékekre hasonlító szerkezet, az ellenion pedig a jodidion. Fény hatására a cianinrész gerjesztődik (exciton jön létre), majd a jodidiontól elektront vesz fel, így megtörténik a töltésszétválás. Az első ilyen elem elég kis teljesítményű és hatékonyságú, de tíz feltöltés-kisütés cikluson át is stabilnak mutatkozott.

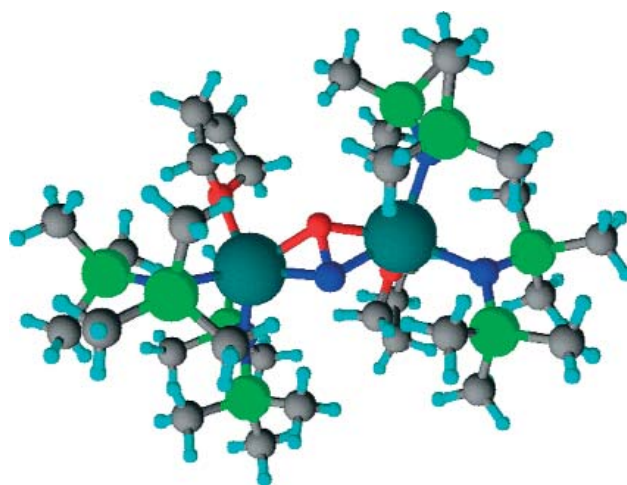
*Adv. Mater.* 22, 3954. (2010)

## CENTENÁRIUM



Wilhelm Schlenk, Anna Herzenstein: Zur Kenntnis der Triaryl-methyle *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft* Vol. 43, pp. 3541–3546. (1910. november–december)

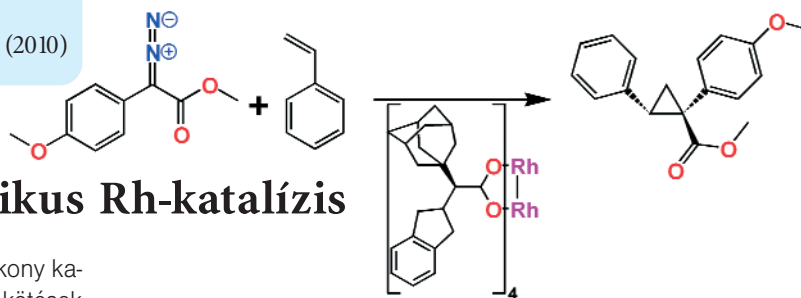
Wilhelm Johann Schlenk (1879–1943) német kémikus volt, Hermann Emil Fischer utódja a Berlini Egyetemen. Nevéhez fűződik az első szerves lítiumvegyület felfedezése és a levegőre érzékeny anyagokkal való kémiai munka technikájának kidolgozása.



## NO-meglepetés

A nitrogén-monoxid párosítatlan elektronja miatt redoxireakciókban elég aktív: elektronfelvétellel  $\text{NO}^-$ , elektronleadással pedig  $\text{NO}^+$ -iont képez. Az viszont már kevésbé magától értetődő, hogy a redukciós út tovább is mehet a superoxidionnal izoelektronos  $\text{NO}^{2-}$  keletkezéséig. Ezt a részecskét sikerült előállítani a közelmúltban a kétmagvú,  $\{[(\text{CH}_3)_3\text{Si}]_2\text{N}\}_2(\text{C}_4\text{H}_8\text{O})\text{Y}\}_2(m-h_2:h_2-\text{NO})$  összetételű itriumkomplexben kötött formában. A vegyületet az analóg  $\text{N}_2^{3-}$ -tartalmú részecskéből lehet létrehozni nitrogén-monoxid segítségével.

*Nat. Chem.* 2, 644. (2010)



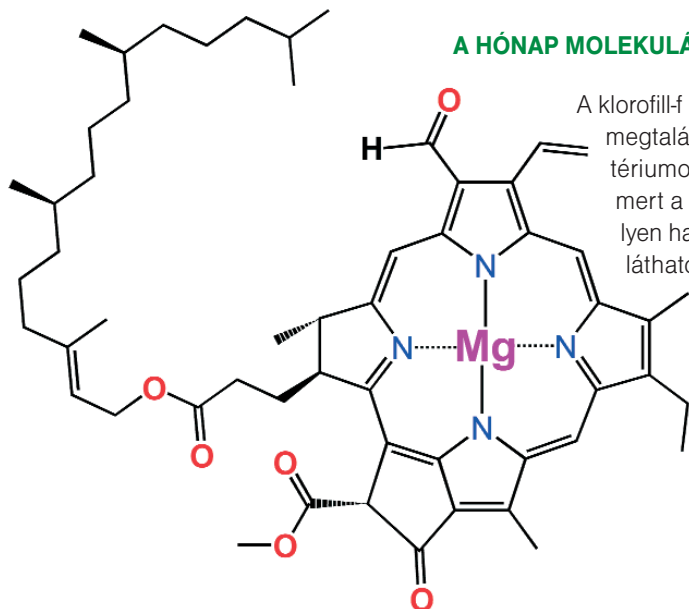
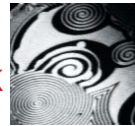
## Szuperhatékony, aszimmetrikus Rh-katalízis

Diazovegyületeken alapuló, oldószermentes, igen hatékony katalitikus módszert dolgoztak ki a közelmúltban szén-szén kötések kialakítására. A tesztreakció a sztirol aszimmetrikus ciklopropán-származékká való alakítása volt. Néhány különböző vegyületet kipróbálva azt tapasztalták, hogy amikor a diazoszármazék  $\text{CH}_3\text{OC}_6\text{H}_4\text{-CN}_2\text{-COOCH}_3$ , a katalizátor pedig egy kétmagvú,  $\text{Rh}_2(\text{S-PTAD})_4$  jelű ródiium(II)-komplex, akkor igen csekély meny-

nyiségű,  $5 \cdot 10^{-5}$  mol% katalizátor használatával szobahőmérsékleten, három nap alatt  $1,8 \cdot 10^6$  katalitikus ciklusszámot értek el 92%-os kitermelés mellett, a keletkező termék enantiomer-feleslege pedig 51% volt.

*Chem. Sci.* 1, 254. (2010)





A klorofil-f ( $C_{55}H_{70}MgN_4O_6$ ) egy régóta ismert növényi vegyületcsalád újonnan megtalált tagja, amelyet Ausztrália nyugati partjai közelében élő cianobaktériumokból izoláltak. Ez a felfedezés már csak azért is igen váratlan volt, mert a klorofil-d azonosítása (1943) óta eltelt bő fél évszázadban semmilyen hasonló, új vegyületre nem bukkantak az élővilágban. A klorofil-f UV-látható spektrumában az egyik csúcs 706 nm-nél van: ez az egész vegyületcsaládban kivételesen nagy, vagyis vörösbe tolódott érték. *Science* 329, 1318. (2010)



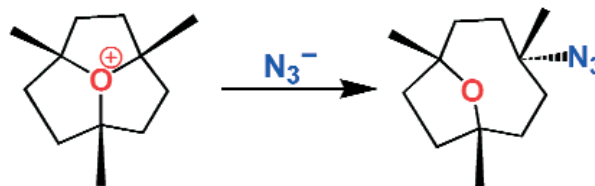
**APRÓSÁG**

A NASA Houstonban őrzött holdközvetgyűjteményéből tudományos célokra alkalmanként 1 g körüli minta igényelhető, ezért az 1972-ben még 380 kg körüli készlet 2010-re 170 kg-ra csökkent.

**$S_N2$  tercier szénen**

A nukleofil szubsztitúció ( $S_N$ ) a szerves kémia egyik legfontosabb mechanizmustípusa. Sok tankönyv szerint bimolekuláris nukleofil szubsztitúció ( $S_N2$ ) nem lehetséges tercier szénatomokon. Ezt a szabályt cáfolta meg az 1,4,7-trimetil-oxatrikinán oxóniumionjának a vizsgálata. Az ion ellenáll a szolvólízis típusú reakcióknak, hagyományos nukleofilek (metoxidion, cianidion, acetátion) pedig csak eliminációs reakciót képesek elindítani vele. Az azidion azonban valódi nukleofil szubsztitúcióba lép a gyűrűs oxóniumionnal, s ennek kinetikája elsődrendű a nukleofilra nézve, vagyis  $S_N2$  mechanizmusú folyamat – tercier szénatomon.

*J. Am. Chem. Soc.* 132, 10662. (2010)



**TÚL A KÉMIÁN**

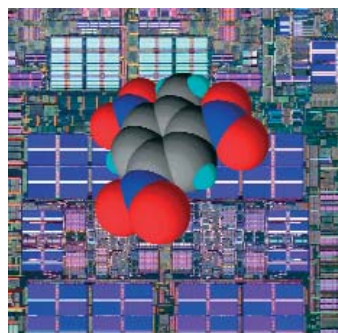
**Crô-magnoni, neandervölgyi és a többiek**

A dél-szibériai Altaj hegység egy barlangjában talált csontmaradványok újraírták az ősemberek történetét. A radiokarbon módszerrel mintegy 40 000 évesnek becsült rétegben talált ujjcsontokat ugyanis sikerült mitokondriális DNS-analízisnek alávetni egy lipcsei laboratóriumban. A modern ember (*Homo sapiens*) és a neandervölgyi ember (*Homo neanderthalensis*) mtDNS-e átlagosan 202 helyen különbözik. Az újonnan megvizsgált minta viszont a modern emberétől 385, a neandervölgyiétől 376 eltérést mutatott. Mindezek alapján olyan, eddig ismeretlen fajról lehet szó, amelynek a másik kettővel közös őse kb. 1 millió éve élhetett. A nemrégiben nagy szakmai vitát kiváltó *Homo floresiensis*szel együtt néhány tízezer éve így akár négy különböző *Homo* faj is együtt élhetett a Földön. Elképzelhető, hogy az egyelőre Hominin X-ként emlegetett új faj a *Homo habilis* vagy a *Homo heidelbergensis* egy hosszan túlélő populációja volt (ezek mtDNS-e nem ismert), bár a fajfejlődés szétválásának becsült kora az elsőhöz túl kicsinek, a másodikhoz túl nagyoknak tűnik.



*Nature* 464, 894. (2010)

**Szuperérzékeny TNT-detektálás szilícium-nanodróton**



Izraeli kutatók szilícium-nanodrótra felvitt, egy molekula vastagságú 3-aminopropil-trietoxiszilán segítségével olyan speciális detektort készítettek, amely a 2,4,6-trinitrotoluol (TNT) robbanóanyagot fM (vagyis  $10^{-15}$  mol/dm<sup>3</sup>) koncentrációban is képes kimutatni. A próbaként készített érzékelők némelyike még ennél is jobban működött: 50 aM ( $5 \cdot 10^{-17}$  mol/dm<sup>3</sup>) körüli értéknél is képes volt a megbízható működésre. A detektor egy héten keresztül használható volt az érzékenység csökkenése nélkül. Ennek a repülőtéri biztonságtechnikán kívül talaj- és vízanalízis esetében is jelentősége lehet. Ráadásul ez az első olyan emberi találmány, amely a TNT kimutatásában még a természet által kifejlesztett, kutyaorr nevű detektornál is érzékenyebb.

*Angew. Chem. Int. Ed.* 49, 6830. (2010)

Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: [lente@dragon.klte.hu](mailto:lente@dragon.klte.hu).



## MKE-HÍREK

### Együttműködési megállapodás

A Magyar Kémikusok Egyesülete (1015 Budapest, Hattyú u. 16. II/8; rövidítése: MKE) és a Magyar Gyógyszerésztudományi Társaság (1085 Budapest, Gyulai Pál u. 16.; rövidítése: MGYT), a továbbiakban *Felek* között, akik kinyilvánítják azon szándékukat, hogy ezen megállapodásban foglaltak szerint kívánják fejleszteni együttműködésüket.

#### Alapvetések

1. A *Felek* a kölcsönös előnyökön alapuló együttműködés alapján arra törekednek, hogy megerősítsék a kémia, a gyógyszer- és gyógyszerészeti tudományok eredményein alapuló szakmai munkájukat, továbbá hozzájáruljanak a tudásalapú társadalom és gazdaság fejlődéséhez, ezzel is javítva a magyar szakmai közösségek tudományos ismereteit, képzését, kutatásait és műveltségét.
2. A *Felek* közös felismerése, hogy az MGYT, mint non profit társadalmi szervezet és az MKE, mint közhasznú tudományos szervezet kapcsolatában rejlő lehetőségek felhasználása az együttműködés révén még hatékonyabbá teheti a tevékenységüket.
3. A *Felek* célja, hogy a kémia, a gyógyszer- és gyógyszerészeti tudományokkal kapcsolatos oktatás, képzés, továbbképzés, kutatás, illetve az ezekhez kapcsolódó gyakorlati szakmai tevékenységek terén ismeretekkel, módszerekkel és szolgáltatásokkal kölcsönösen segítsék egymást.

#### Az MGYT vállalásai

1. Támogatja, hogy az MKE tagjai az MGYT-be is belépjenek, továbbá azt, hogy csatlakozzanak szervezetei, szakosztályai munkájához.
2. Lehetőséget biztosít, hogy a fiatal szakemberek számára kiírt MGYT szakmai pályázatok és előadói versenyek (pl. Rozsnyay Mátyás Emlékverseny, Clauder Ottó Emlékverseny) rendezésénél és lebonyolításánál az MKE fiatal szakemberei is részt vehessenek.
3. Lehetőséget biztosít, hogy az MGYT szakmai kiadványaiban (*Acta Pharmaceutica Hungarica*, *Gyógyszerészet*, *Hírlevél*) a kölcsönös érdeklődésre számot tartó MKE-hírek megjelenjenek.
4. Lehetőséget biztosít és támogatást nyújt az MGYT szakkönyvkiadásai során az MKE által javasolt szakmai kiadványok megjelentetéséhez, külön megállapodásban rögzítettek szerint.

#### Az MKE vállalásai

1. Támogatja, hogy az MGYT tagjai az MKE-be is belépjenek.
2. Lehetőséget biztosít, hogy az MKE hivatalos lapjában (*Magyar Kémikusok Lapja*) a kölcsönös érdeklődésre számot tartó MGYT-hírek megjelenjenek.
3. Lehetőséget biztosít és támogatást nyújt az MKE szakkönyvkiadásai során az MGYT által javasolt szakmai kiadványok megjelentetéséhez, külön megállapodásban rögzítettek szerint.

#### Egyéb közös vállalások

1. A *Felek* támogatják, hogy a szervezeteik és a szakosztályaik között meglévő, illetve kialakuló együttműködésre támaszkodva az MGYT és az MKE oktatói, kutatói, gyakorló szakemberei szaktudásukkal segítsék a másik fél továbbképzési és szakmai anyagainak kidolgozását és oktatását, továbbá lehetőséget nyújtanak arra is, hogy ezeket a feladatokat az MGYT-nek, illetve az MKE-nek szóló felkérés alapján a másik fél számára elvégezzék.
2. A *Felek* támogatják, hogy a tagjaik körébe tartozó oktatók, kutatók és szakemberek a *Felek* által kiadott lapokban és kiadványokban publikáljanak, valamint, hogy egymás rendezvényein részt vegyenek és előadásokat tartsanak.



#### Az együttműködési megállapodás aláírása

3. A *Felek* támogatják a közösen akkreditált továbbképző programok szervezését és meghirdetését.
4. A *Felek* támogatják, hogy az MGYT és az MKE közösen szervezzenek szakmailag kiemelkedő évfordulókat és előzetesen egyeztetett módon gondoskodjanak azok méltó megünnepléséről.
5. A *Felek* kölcsönösen támogatják egymást, hogy méltó emléket lehessen állítani a hazai kémia és gyógyszerészet kiemelkedő személyiségeinek, eredményeiknek, iskoláiknak.
6. A *Felek* lehetőséget nyújtanak egymás szolgáltatásainak (pl. könyvtári, rendezvényszervezési, informatikai stb.) igénybevételére, külön megállapodás szerint.
7. A *Felek* törekednek arra, hogy a tagjaiknak nyújtott szolgáltatásokat, ahol lehetséges, összehangolják.
8. A *Felek* a honlapjukon ([www.mgyt.hu](http://www.mgyt.hu), illetve [www.mke.org.hu](http://www.mke.org.hu)) kölcsönösen megjelentetik a másik fél webcímét, amelyek révén a *Felek* tagsága kölcsönösen és naprakészen tájékozódhat a másik fél híreiről, eseményeiről és rendezvényeiről.
9. A *Felek* együttműködve javaslatokat dolgozhatnak ki a hazai gyógyszerkutatás és gyógyszerellátás hatékonyságának növelésére, a kémikus és gyógyszerész graduális, valamint posztgraduális képzések korszerűsítésére, illetve fejlesztésére.
10. A *Felek* együttműködve közös pályázatokat dolgozhatnak ki, illetve adhatnak be a hazai gyógyszerkutatás különböző területein, valamint a graduális és a posztgraduális oktatást érintő területeken, de egyéb kölcsönös érdekeltségű konkrét programok esetében is.
11. A *Felek* együttműködve törekednek a magyar szakmai nyelv ápolására és fejlesztésére.

#### Záró rendelkezések

1. Jelen együttműködési megállapodás a *Felek* közötti együttműködés céljait és általános kereteit tartalmazza.
2. Az együttműködés során felmerülő költségeket a *Felek* a külön megállapodások szerint vállalják és biztosítják.
3. A *Felek* évente legalább egyszer áttekintik az együttműködés helyzetét és szükséges esetekben az intézkedést megteszik.
4. Jelen együttműködési megállapodást a *Felek* a honlapjukon, valamint a *Gyógyszerészet* és a *Magyar Kémikusok Lapja* kiadványokban megjelentetik.
5. Jelen együttműködési megállapodás határozatlan időre szól és a *Felek* képviselőinek aláírásával lép hatályba.

Siófok, 2010. október 20.

**Prof. Dr. Mátyus Péter**

a Magyar Kémikusok Egyesületének  
elnöke

**Prof. Dr. Botz Lajos**

a Magyar Gyógyszerésztudományi  
Társaság elnöke

## Átadták a Magyar Kémia Oktatásért-díjakat

2010. október 12-én négy kémiatanár vehette át kiemelkedő szakmai munkásságáért „A Magyar Kémia Oktatásért-díjat” az MTA Vörösmarty-termében. A rangos elismerést a Richter Geodeon Alapítvány a Magyar Kémia Oktatásért kuratóriuma évente ítéli oda olyan kémiatanároknak, akik évtizedeken át tartó áldozatos munkájukkal jelentősen járulnak hozzá a kémia magas színvonalú oktatásához, a tehetséges diákok felkarolásához és ezáltal az utánpótlás-neveléshez. A díj átadására ebben az esztendőben immár tizenkettedik alkalommal került sor.



A díjazottak: Mostbacher Éva, Elekné Becz Beatrix, Veres Ildikó és Szórád Endre

Az okleveleket Dr. Pellioniszné dr. Paróczai Margit, a Richter-Gyár emberi erőforrás igazgatója adta át. Kedves, bensőséges mozzanat volt, amikor a díjazottakat a mostani vagy volt diákjaik köszöntötték felidézve tanáruk személyiségét, szakmai és pedagógiai erényeit, sőt egy-egy nehéz percet, baklövést is. Az ünnepélyes szép hangulat megteremtéséhez

Farkas Róbert virtuóz hegedűjátéka és Kubik Anna megragadó Karinty-interpretációja járult hozzá, amelynél ismét el-töprengöttünk, hogy hány kályhában hány nap alatt tulajdonképpen hány köbméter bükkfa ég is el.

A 2010. évi díjazottak közül *Mostbacher Éva*, a pécsi Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnázium tanára sok-sok kiváló diákot indított útjára, egyik tanítványa az OKTV kémiadöntőjének megnyerése után a tokiói Nemzetközi Diákolimpián aranyérmert szerzett kémiából. *Elekné Becz Beatrix* (Jedlik Ányos Gimnázium, Csepel) nemcsak közel 50 díjat nyert diák tanára volt, hanem több évig vett részt az írásbeli felvételi vizsga feladatkidolgozó bizottságában, illetve az OKTV versenybizottságában is. *Veres Ildikó* (Erdey-Grúz Vegyipari Szakközépiskola, Debrecen) a vegyipari szakképzés egyik legeredményesebb tanára, a hazai diáksikerek mellett két tanítványa a Grand Prix Chimique nemzetközi vegyésztechnikusi verseny csapatának is tagja volt. Külön öröm, ha határon túli magyar kémiatanár is részesül a Magyar Kémia Oktatásért-díjban. Ebben az évben *Szórád Endrét*, a zentai Bolyai Tehetséggondozó Gimnázium tanárát köszönhetjük a díjazottak körében. A tanár úr vállalja a tehetséggondozással járó kihívásokat, szinte vonzza magához a diákokat korszerű gondolkodásával és végtelen lelkesedésével.

Tisztelettel gondoltunk arra a sok-sok általános iskolai kémiatanárra, akik – hogy úgy mondjuk – „a végeken” nagy-nagy erőfeszítéssel dolgoznak a kémia megszerettetéséért, nem egyszer akár méltatlan körülmények között is. Áldozatos munkájuk a jéghegy alja, ebből nőnek ki évekkel később a csillogó versenyeredmények. Közülük valószínűleg több is megérdemelné az Alapítvány díját, ha diákjaik meg-megcsillogtatják az általuk kibontakoztatott tehetségüket már a kisiskolás korban is. Sajnáljuk, hogy most nem találkoztunk velük. Talán majd jövőre...

Riedel Miklós

A Magyar Kémikusok Egyesülete Intézőbizottsága és területi csoportjai  
2011 A KÉMIA NEMZETKÖZI ÉVE ALKALMÁBÓL  
rajzpályázatot hirdet a 10–16 éves korosztály számára.  
2011 egyben az Erdő éve is, így a pályázat témája kettős:

### A KÉMIA NEMZETKÖZISÉGE, KÉMIA és az ERDŐ

A pályázatokat A4 méretben kell elkészíteni papíron, és legkésőbb 2011. január 31-ig eljuttatni a területi szervezetekhez. (Ezek címlistája megtalálható az MKE honlapján: [www.mke.org.hu](http://www.mke.org.hu)). A rajzok kiértékelését felkért szakmai zsűri végzi, és döntését legkésőbb 2011. március 1-jéig meghozza. A pályázat kétfordulós. A területi csoportok három legjobb pályázata jut az országos döntőbe. Az országos döntőbe került rajzokat az egyesület honlapján közszemlére bocsátjuk; a rajzok 2011. április 1. és 30. között a honlapon láthatóak lesznek, amikor a közönség is szavazhat az általa legjobbnak ítélt rajzra. Emellett a rajzokat egy öttagú oktatási-ipari- és tanulói körből álló zsűri is értékeli. A pályázatok elbírálási határideje 2011. május 20. A díjak ünnepélyes átadására az MKE I. Nemzeti Konferenciáján kerül sor május 22-én Sopronban.

A zsűri összesen három, a közönség pedig két pályázatot díjazhat 5000 Ft értékű könyvutalvánnyal. A nyertes rajzok megjelennek a Magyar Kémikusok Lapjában.

2010. december

MKE Intézőbizottság

## Az Európai Kutatási Tanács pályázati lehetőségei fiatal és tapasztalt kutatók számára

Az Európai Kutatási Tanács (ERC) az Európai Unió 7. Kutatási és Technológiafejlesztési Keretprogramjának égisze alatt működik. Az ERC által meghirdetett „Ötletek” program leg-főbb célja az európai tudományos kiválóság fejlesztése. Ezt a célt az ERC a tevékenységi területükön legjobbnak számító, kreatív tudósok, kutatók és mérnökök ösztönzése, támogatása révén igyekszik elérni. Az ERC a tudomány minden területéről várja e szakemberek egyéni pályázatait. Az értékelés során független nemzetközi zsűri biztosítja a világszínvonalú projektötletek értékelését. A legjobbak ötleteik megvalósításához évi 100–400 ezer eurós támogatást nyerhetnek. Az Európában egyedülállóan magas költségvetésű projektek vezetése nagy kihívást és kiemelkedő lehetőséget jelent a kutatók számára.

A pályázati felhívás megtalálható az NKTH honlapján: <http://www.nkth.gov.hu/nemzetkozi-tevekenyseg/eu-7-keretprogram/>  
naptar-7-keretprogram



# Macherey-Nagel GmbH. Tradíciókra és tapasztalatokra építkezve. Csaknem egy évszázada az Önök és a minőség szolgálatában!



**AKTIVIT Kft.**  
 1145 Budapest, Pétervárad u. 14.  
 Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865.  
 Levél: 1581 Budapest 146, PF.: 104.  
 Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web:www.aktivit.hu  
 Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök



**MACHEREY-NAGEL**

www.mn-net.com

