

A TARTALOMBÓL:

A MOL Nyrt. két évtizedes
fejlődéstörténete

45. Komplexkémiái
Kollokvium

Szintetizálnak-e
a növények Viagrát?

EuCheMS Newsletter,
2011. február



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA LXVI. ÉVFOLYAM 2011. FEBRUÁR ÁRA: 850 FT

2011



A Kémia
Nemzetközi
Éve





A TSQ Quantum XLS GC/MS/MS

Kiváló szelektivitás és érzékenység

- Femtogramm szintű kimutatási határok környezetvédelmi, élelmiszerbiztonsági, igazságügyi, gyógyszeripari komplex célvegyület analízisre
- Szimultán kvantitatív meghatározás és szerkezeti megerősítés QED-MS/MS-sel
- Kiemelkedő szelektivitás a megnövelt tömegfelbontás révén
- 90°-ban hajlított ütközési cella a hamis pozitív eredmények elkerülésére
- LC/MS/MS átalakítás lehetősége

AAS

ICP-OES

ICP-MS

UV

FTIR/Raman

GC

GC/MSⁿ

HPLC

UHPLC

LC/MSⁿ

Kizárólagos képviselő:

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

Telefon: 1-221-5536 • Fax: 1-221-5543

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

Thermo
SCIENTIFIC



MAGYAR KÉMİKUSOK LAPJA

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LVXI. évf., 2. szám, 2011. február



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

Szerkesztőség:

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

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
[SZÉKERES 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 10 200 Ft

Egy szám ára: 850 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)

A lap megjelenését a Nemzeti Kulturális Alap
támogatja

nka
Nemzeti Kulturális Alap



Annyi meg annyi jogos panasz, sőt kétségbeesett segélykiáltás után (amelyeket e lap hasábjain is számos alkalommal közvetítettünk), végre jó hír érkezett a kémiafinanszírozás területéről! Nem, sajnos még nem az, hogy most már van elég vegyszer, eszköz és idő arra, hogy minden egyes kémiaórát érdekes (tanuló)kísérletekkel lehessen fűszerezni, és nem is az, hogy tanárainknak a kitartó minőségi munkáért méltányos bérezés jár... Mégis, igazi jó hír az, hogy minden mellőzöttség és kedvszegő rossz tapasztalat után is rengeteg kémiafinanczírozási kolléga maradt még szerte az országban, akik kitartanak eredeti hivatásuk és régi álmaik mellett. Akik az első hívó szóra készen állnak arra, hogy látványosabbnál látványosabb kísérletekkel hívják fel a figyelmet a kémia fontosságára, s egyben vonzó lehetőségként mutassák be diákjaiknak a kémikus pályát.

Minderre az a bizonyíték, hogy a Magyar Kémikusok Egyesülete által a Kémia Nemzetközi Éve magyar nyitórendezvényeként 2011. január 26-ra meghirdetett „VÍZZEL TÜZET – TÜZZEL VIZET!” iskolaikísérlet-akcióra már a kísérletleírások MKE-honlapra való feltöltése utáni második hét végéig 134 iskola jelentkezett. Lapzártánk idején még nem tudjuk, hogy végül az országban hány helyszínen zajlanak ezen a napon az események, de sejtethető, hogy a végső szám ennél is jóval nagyobb lesz. Reméljük, hogy a benevező iskolák és tanárok által küldött (és az MKE honlapján látható) fényképek nézegetése révén mindnyájan (azok is, akik személyesen egyik iskolában sem lehetnek jelen) részeseivé válhatunk ennek az országos ünnepnek. Az MKE honlapjára (<http://www.mke.org.hu/>) ellátogatók azzal járulhatnak hozzá az akció sikeréhez, hogy 2011. február 28-ig leadják a szavazataikat arra a fotóra, amelyik számukra a legtöbbet jelenti, a legpozitívabb üzenetet hordozza. Közben pedig mindnyájan hitet és erőt meríthetünk a csodálkozó, lelkes vagy büszke gyermekarcok láttán. Hiszen lesz, mert kell legyen folytatódás, mivel kémia nélkül valóban nincs élet, és nincs jövő...

Kémiafinanczírozásunk pedig az összefogás érzésétől megerősödve bekapcsolódhatnak a világméretű kísérletsorozatba („Global experiment”, <http://www.chemistry2011.org/>), amire ez az országos iskolaikísérlet-akció is ráirányítja a figyelmet. A négyféle kísérlet közös témája a víz, és a címe „Water: A Chemical Solution”, ami magyar nyelvre lefordíthatatlan szójáték. Az egyszerű eszközökkel és kis anyagigénnyel kivitelezhető kísérletek a különféle vízminták és a bennük oldott anyagok tulajdonságainak vizsgálatán, valamint a víztisztítás modellezésén keresztül a kémia nélkülözhetetlenségére is felhívják a figyelmet. Ezúton is jó munkát és sok sikert kívánunk hozzá mindenkinek!

Szalay Luca
Szalay Luca

TARTALOM

A KÉMIA KIVÁLÓSÁGAI

Mosonyi György: Egy magyarországi állami nagyvállalat regionális multivá vált.
A MOL Nyrt. két évtizedes fejlődéstörténete

34

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

Gajda Tamás: Beszámoló a 45. Komplexkémiai Kollokviumról

37

Buglyó Péter: Új, félszendvics ruténium(II)komplexek: szilárd fázisú és oldategyensúlyi vizsgálatok

37

Jakusch Tamás, Kiss Tamás: Vanádium biospeciációja a vérszérumban

40

Lente Gábor: Abszolút aszimmetrikus reakciók értelmezése

41

Valicsek Zsolt, Huszánk Róbert, Harrach Gergely, Horváth Ottó:

Síkon kívüli fém-porfirinek egyensúlyi, fotofizikai, fotokémiai és kvantum-kémiai vizsgálata

42

Csupor Dezső, Szekeres András, Tatsimo N. Simplice Joel,

Kecskeméti Anita, Vékes Erika, Veres Katalin, Sulyok Edvárd,

Szendrei Kálmán, Hohmann Judit: Szintetizálnak-e a növények Viagrát?

Szintetikus hatóanyagokkal hamisított „növényi” étrend-kiegészítők

45

Bruckner-termi előadások

Kele Péter: (Bio)ortogonális jelölésre alkalmas fluoreszcens vegyületek

50

Pham Truong Son, Gönczi Katalin, Czirok János Balázs,

Mátravölgyi Béla, Solyom Szabolcs: Új királis katalizátorok alkalmazása aminofoszfonsavak sztereoszелеktív szintézisében

51

EuChemMS Newsletter, 2011. február

53

Braun Tibor: Európai Feltalálói Díj, 2010. Wolfgang Krätschmer

és a fullerénkutatás járványszerű terjedése

57

VEGYÉSZLELETEK

Lente Gábor rovata

60

KÖSZÖNTÉS

Bazsa György 70 éves (Rábai Gyula írása)

62

EGYESÜLETI ÉLET

63

A HÓNAP HÍREI

64



Mosonyi György

■ MOL-csoport

Egy magyarországi állami nagyvállalat regionális multivá vált

A MOL Nyrt. két évtizedes fejlődéstörténete

Tevékenység, jellemző adatok

A MOL-csoport Közép-Kelet-Európa egyik vezető integrált olaj- és gázipari csoportja, mely jelentős szénhidrogén-kutatási és termelési portfólióval rendelkezik külföldön.

A MOL az alábbi tevékenységeket végzi:

- Kőolaj- és földgázkutatás és -kitermelés (angol elnevezéssel „upstream”)
- Kőolajtermékek finomítása, szállítása, tárolása, nagy- és kiskereskedelmi értékesítése (angol elnevezéssel „downstream”)
- Földgázszállítás
- Olefin- és polimergyártás és -kereskedelem (petrolkémia)
- Elektromos áram és hőenergia előállítása földgázból és megújuló erőforrásokból

A MOL valamennyi alaptevékenységében piacvezető Magyarországon, Szlovákiában és Horvátországban.

A MOL-csoport fő adatai a következők (2009):

- Árbevétel: 3226 milliárd Ft
- Piaci kapitalizáció: 9,4 milliárd USD (december 31.)
- Foglalkoztatottak száma: 34 267 (december 31.)
- Töltőállomások száma: 1658
- Kőolajkészlet: 293,4 millió hordó
- Földgázkészlet: 371,7 millió boe (hordó olajegyenérték)
- Kőolaj-feldolgozás: 19 700 kt
- Kőolajtermék-értékesítés: 19 365 kt
- Vegyipari termék értékesítése: 1346 kt

A MOL fejlődési szakaszai

Alapítás és a kezdetek (1991–1994)

A MOL Rt. 1991. október 1-jén alakult meg kilenc, korábban az Országos Kőolaj- és Gázipari Tröszt-höz tartozó vállalat fúziójával. Részvényeinek túlnyomó hányada az ÁPV Rt. jogelődjének tulajdonában volt. A MOL szervezeti felépítésének kialakítását nagy viták előzték meg. Egyesek két-szintű holding típusú struktúra létrehozását, mások erősen centralizált integrált társaság kialakítását javasolták. A piaci fejlemények és a regionális versenyben való helytállás azt bizonyították, hogy a MOL integrált jellegének megtartása és erősítése helyes döntés volt: a szervezeti és vállalatvezetési modernizációt követően, a konszolidáció után az integrált működés a vállalat egyik legjelentősebb versenyelőnyévé és számottevő profitpotenciál forrásává vált.

Az 1990-es évek elején a piaci liberalizációt követően a MOL nem volt felkészülve a versenyre. Problémák voltak a termékek minőségével és kiszolgálásával, továbbá a kereskedelmi munkával. Ezen gyengeségek mellett a jelentős szabályozásbeli hiányosságok, a „fekete” és a „szürke” piac virágzása is szerepet játszottak abban, hogy a MOL hazai piaci részesedése a piacnyitást megelőző közel 100%-ról rövid idő alatt 60% alá esett vissza.

Privatizáció, konszolidáció (1995–1999)

A MOL szervezeti integrációjának befejeződésével a társaság készen állt a tőzsdei bevezetésre és a privatizációs folyamat elindítására.

1995 novemberétől a MOL részvényeit a





budapesti, a luxemburgi, 2004-től a varsói értéktőzsdén is jegyzik. A MOL értékpapírjaival az egyesült államokbeli OtC (Over the Counter – tőzsdén kívüli piac), illetve a londoni International Order Book rendszerekben is kereskednek.

A MOL Rt. privatizációja 1995-ben kezdődött. 1995 decemberében a részvények kb. 30%-át értékesítették a tőzsdén. 1997 májusában újabb 19%-nyi részvényt csomagot értékesítettek, majd 1998 áprilisában az ÁPV Rt. 25% + 1 részvény felett valamennyi általa birtokolt részvényt a piacra dobta. (2004 februárjában 10,9%-nyi állami tulajdonban lévő részvényt értékesítettek a tőzsdén, majd 2006 májusában 10%-nyi részvényt mennyiséget a MOL-nak adtak el. Ugyanazon év végén a maradék 1,7%-nyi részvényt csomagot a tőzsdére vitték. Később az állam speciális kérdésekben vétőjogot biztosító „aranyrészvény”-tulajdon is megszűnt.)

Az olajtermékek minőségével és forgalmazásával kapcsolatos szabályozás szigorodása, a joghézagok megszűnése jelentős mértékben hozzájárult a piac 1990-es évek közepén megindult konszolidálódásához. A MOL jelentős erőfeszítéseket tett termékminőségének, logisztikai szolgáltatásainak javítására, továbbá marketing és kereskedelmi módszereinek fejlesztésére. Ennek következtében piaci részesedését növelte, majd megszilárdította, továbbá számottevően javította tevékenységei hatékonyságát, profittermelő képességét.

Regionális töltőállomás-hálózat fejlesztés

Az 1990-es évek közepére Magyarországon már nagy számban jelen voltak a műszaki-környezetvédelmi szempontból, illetve a vizuális megjelenést tekintve korszerű töltőállomások, melyek jó minőségű üzemanyagokat értékesítettek és magas kiszolgálási színvonalat képviseltek. Mindez a régió többi rendszerváltó országában hiányzott, vagy csak igen kis arányban volt jelen. A MOL ezen piaci lehetőségéből kiindulva alakította ki regionális terjeszkedési stratégiáját, és kezdte meg a MOL-logó alatt üzemelő külföldi töltőállomások létrehozását, melyek ebben az időszakban túlnyomó hányadban zöldmezős létesítmények voltak. 2000 végére a MOL külföldi töltőállomásainak száma 64 volt (Románia: 41, Szlovákia: 17, Ukrajna: 3, Horvátország: 1, Szlovénia: 2).

Az általa létesített külföldi töltőállomásoknak köszönhetően növekedett a MOL régióbeli elismertsége és erősödtek piaci pozíciói. Az 1990-es évek második felében megvalósított regionális terjeszkedés fon-

tos lépés volt ahhoz, hogy a MOL az 1999-ben megfogalmazott stratégiájában már a „regionális olajtársaság” státusz elérését jelölje meg fő céljaként.

Regionális növekedés (1999–2008)

Megalakítása óta a MOL elsősorban hazai piacára koncentrált tevékenységét. Ennek során jelentős előrelépést tett a magyarországi kőolaj-feldolgozás és -kereskedelem fejlesztésében, ugyanakkor a kelet-közép-európai régióban csak kismértékű organikus fejlődést ért el. 1999-ben a társaság vezetése úgy ítélte meg, hogy az üzleti tevékenység átszervezésével szerzett tapasztalatok révén regionális együttműködési és akvizíciós lehetőségek nyíltak a társaság számára. A stratégia felülvizsgálata során az Igazgatóság a MOL alaptevékenységei területén a korábbinál aktívabb regionális szerepvállalás mellett döntött.

Slovnaft

A 2000. év mérföldkő volt a MOL történetében: a szlovák nemzeti olajvállalat, a Slovnaft 36,2%-os részvényt csomagjának megszerzésével a MOL tette meg az első fontos lépést a közép-kelet-európai olajipar konszolidálására. A nemzetközi pályázati eljárást követően 2000 márciusában a MOL és a Slovnaft megállapodást írtak alá a jövőbeni együttműködés és a társaság tulajdonosi szerkezetének meghatározására. A stratégiai partnerség több szempontból is egyedülálló volt a régióban. Mindkét társaság már akkor is a legmodernebb finomítói eszközökkel és technológiákkal és erős piaci pozíciókkal rendelkezett.

2002 novemberében a MOL Slovnaftban meglévő tulajdoni részesedése 67,8%-ra, 2003-ra 98,4%-ra emelkedett.

2005 végéig a MOL és a Slovnaft 250 millió US dollárnyi többleteredményt realizált az alábbi területeken feltárt szinergiák kiaknázása révén:

- közös kőolajbeszerzés,
- a piacok és a kereskedelmi rendszerek integrációja, közös vevőkiszolgálás,
- közös optimalizálás, ebbe a petrokémiát is beleértve,
- finomítói nagyleállások harmonizálása,
- a kiskereskedelmi és kenőanyaggal kapcsolatos tevékenységek integrálása,
- a beszerzés és egyéb tevékenységek integrálása, az üzleti folyamatok harmonizálása.

TVK

2000-ben a MOL 32,9%-os részesedést szerzett a TVK-ban, Magyarország egyik

vezető petrokémiai vállalatában. Számos lépést követően tulajdoni részesedését 86%-ra növelte. Egy olajipari cég számára a vegyipari jelenlét számos értéket teremtő növekedési lehetőséget kínál. Elsősorban vegyipari alapanyag piacot biztosít a társaság finomítói termelésének jelentős hányada – mintegy 15%-a – számára. Ezen túlmenően a finomítói és petrokémiai tevékenységek közös optimalizálása – beleértve a vegyipari melléktermékek finomítói felhasználását is – jelentős szinergiapotenciállal rendelkezik.

INA

A „nem organikus” növekedés területén a következő jelentős lépés a horvátországi nemzeti olajtársaság, az INA 25% + 1 részvény tulajdonjogának megszerzése volt 2003-ban. A társaság erős piaci pozíciókkal rendelkezik a délszláv térségben, elsősorban Horvátországban és Boszniában. A MOL az INA stratégiai partnerévé válva vállalta, hogy az INA-finomítók modernizációs programját támogatja. A stratégiai együttműködés aláírásától az irányítási jogok 2008 végéig történt (47,2% tulajdonjog mellett) megszerzéséig eltelt időszakban a MOL szakemberei részletesen feltérképezték az INA eszközeit és üzleti folyamatait, és a partner szervezetekkel együttműködve számos területen javító-fejlesztő célú akciót indítottak meg. Míg az INA downstream-ágazata jelenleg elmarad a nemzetközi élvonaltól, upstream-üzlete nemzetközi mércével mérve is versenyképes. Az INA konszolidációjával a MOL-csoport upstream-portfóliója jelentősen erősödött.

Ausztriai és romániai akvizíciók

A MOL regionális downstream-pozícióját tovább erősítette az ausztriai korneuburgi üzemanyag-tároló 2003-as megszerzésével, továbbá az osztrák piacon tevékenykedő Roth kereskedelmi vállalkozás 2004-beli megvásárlásával. Ugyanazon évben a MOL megvette a Shell romániai kereskedelmi hálózatát, jelentősen növelve ezzel piaci lefedettségét.

Upstream-fejlesztések

A 2000-es évek elején, a kőolajpiaci kilátások javulásával a MOL erősítette külföldi üzletfejlesztő tevékenységét az upstream területén. Ez a folyamat 2002-ben, a nyugat-szibériai Zapadno Malobalik olajmező fejlesztésével kezdődött, ahol a termelés 2004-re futott fel. Ugyanazon évben a portfólió a kazahsztáni federovszki blokk 22,5%-os részesedésének megvásárlásával bővült. Pakisztánban a MOL sikeres kuta-



tási tevékenységének eredményeként megkezdte a földgáztermelést.

Az elmúlt időszak üzletfejlesztési tevékenységének néhány eredménye:

- 2006: 100% tulajdonszerzés a Surgut7-&BaïTex (Oroszország) lelőhelyekben
Kutatási jogok Ománban és Pakisztánban
- 2007: 40% tulajdonszerzés egy kameruni offshore (tengeri) lelőhelyben
100% tulajdonszerzés a Matyusinszkaja (Oroszország) mezőben
Termelésmegosztási megállapodás a Kurdisztáni Regionális Kormányval
- 2008: Stratégiai együttműködés egy ománi céggel
Termelésmegosztási megállapodás egy indiai lelőhelyre
Szándéknyilatkozatok katari, líbiai és indiai cégekkel
- 2009: 10%-os tulajdonszerzés a Pearl Companyban (Irak, Kurdisztán régió; lehetséges forrás a Nabucco gázvezetékhez)

Az OMV-támadás

Az osztrák OMV 2007 nyarán a szabad piacon nagyarányú MOL-részvényvásárlásba kezdett, aminek következtében a társaságban való részesedését rövid időn belül 10%-ról 20% fölé növelte. A MOL ezt a lépéssorozatot ellenséges felvásárlási szándékknak minősítette.

Miért volt vonzó a MOL az OMV számára? Több ok is lehetett erre:

- A MOL dinamikus növekedésével már csaknem elérte az OMV nagyságát.
- A MOL „túl sok gondot okozott” az OMV-nek a Slovnaft megvásárlásával és az INA 25%-os tulajdoni hányadának megszerzésével.
- A közép-kelet-európai régióban jelentősen beszűkültek a downstream-aktivációs lehetőségek.
- A MOL elismertsége fenyegetést jelentett az OMV számára.

Az OMV formálisan „összeolvadási” kérelmet jelentett be az Európai Uniónál. Az EU versenyhatósága részletes vizsgálatot indított el, melynek célja annak feltárása volt, hogy az OMV és a MOL esetleges összeolvadása milyen hatással lenne a versenyre az érintett piacokon. Az OMV a döntést nem várta be: 2008. augusztus elején visszavonta kérelmét.

Az OMV-támadás is közrejátszott abban, hogy a MOL erőteljes lépéseket tett



tevékenysége diverzifikációjára, illetve új stratégiai partneri kapcsolatok létrehozására:

- A cseh CEZ energetikai nagyvállalattal kötött stratégiai együttműködési megállapodás alapján a MOL belépett egy új üzletbe, a villamosenergia-előállításba. A közreműködésével Százhalombattán és Pozsonyban (Bratislavában) megépítendő gáztüzelésű erőművek egyrészt a finomítók energiaigényeit elégítik ki, másrészt jelentős mennyiséget a piacon fognak értékesíteni.
- Az észak-olaszországi (mantovai) IES finomító megvásárlásával a MOL kilépett hagyományos („core”) piacairól, ezzel további lehetőséget biztosítva a downstream üzleti szegmens számára.
- Egyes üzleti területeken a nagy projektek megvalósítását a MOL stratégiai partnerségben, illetve új együttműködési megállapodások keretében kívánja elérni (CEZ, illetve az upstream területén Omán, India, Qatar).
- A MOL regionális együttműködésre tett kezdeményezést a földgázellátás területén (NETS – New European Transmission System), aminek célja a közép-kelet-európai országok ellátási biztonságának növelése.

A MOL a gazdasági válságban

A globális pénzügyi és gazdasági recesszió legfőbb hatásai a következők voltak:

- A válságot megelőző időszak dinamikus keresletnövekedése megállt. 2009-ben még viszonylag kevésbé, 2010-ben már jelentősen csökkent az olajtermékek fogyasztása.

- 2008 végén zuhanásszerűen esett a kőolajár és nagymértékben csökkentek a finomítói marginok (haszonkulcsok). Az azóta eltelt időszakban a kőolajárak számottevően nőttek, illetve stabilizálódtak, a finomítói marginok viszont továbbra is nyomottak.
- A válság előtti időszakhoz viszonyítva beszűkültek a finanszírozási források és szigorúbbá váltak a hitelfeltételek.
- A MOL vezetése megfelelő és gyors megoldásokat keresett a válság erőpróbáira. Felülvizsgálta fejlesztési projektjeit, és azonnal leállította azokat a beruházásokat, melyekre akkor nem volt feltétlenül szükség. Számos költségcsökkentő intézkedésre is sor került. Legfontosabb cél a megfelelő cash flow (készpénzforgalom) megteremtése, a működőképesség fenntartása volt, mind az eszközök, mind pedig a piacok szempontjából. A MOL nemcsak túlélte a gazdasági válságot, de növekedést is el tudott érni.

Az elkövetkező időszak fő kihívásai, növekedési lehetőségek

A MOL tevékenységét érintő általános kihívások:

- A válságból való kilábalás egyelőre bizonytalan, visszaesésektől sem mentes folyamat. Míg az OECD-n kívüli területek dinamikus növekedést érnek el, az OECD-térség összességében stagnál, s Európa egyes gazdaságai súlyos pénzügyi problémákkal küzdenek.
- Az éghajlatváltozás elleni küzdelemben esetleg túl szigorúvá váló szabályozásnak (emissziókereskedelmi sémának) számottevő költségnövelő ha-



tása lehet, elsősorban a kőolaj-feldolgozó és petrokémiai ágazatokban.

- A megemelt társasági adók hosszabb ideig történő fennmaradása korlátot jelenthet a MOL beruházási tevékenységének.

Az upstream területén jelentkező kihívások:

- Egyre drágábban feltárható és kitermelhető kőolajkészletek, növekvő geológiai és politikai kockázatokkal.
- A részvényesek korlátozott kockázattűrő képessége.

Legfőbb kihívások a downstream területén:

- Elhúzódó finomítói konszolidáció (elsősorban: többletkapacitások fennmaradása Európában), csak igen lassan javuló finomítói marginok.
- Alternatív üzemanyagok térnyerése (főként azok túlzott állami támogatása miatt).

A legfontosabb globális gazdasági és ipari trendek figyelembevételével, továbbá meglévő eszközbázisa, piaci pozíciói és képességei alapján a MOL fő tevékenységi területein az alábbi növekedési lehetőségeket látja:

- Upstream: a nemzetközi kutatási portfólió fejlesztésével a termelés és a készletek növelése.
- Downstream: elsősorban az INA finomítóiban és az IES-nél megvalósított célirányos beruházásokkal és hatékonyságjavító akciókkal a downstream-tevékenységek egy szintre hozása, ezáltal a MOL-csoportszintű profitabilitás javítása.
- Földgáz és villamos energia: az értéklánc mentén megszerzett pozíciók révén új értékteremtő üzlet kiépítése. ●●●

ÖSSZEFOGLALÁS

Mosonyi György: Egy magyarországi állami nagyvállalat regionális multivá vált. A MOL Nyrt. két évtizedes fejlődéstörténete
A közlemény a MOL-csoport néhány jellemzőjének bemutatása után áttekinti a MOL fejlődésének szakaszait az alapítástól a privatizáción át a regionális terjeszkedésig. Betekintést ad a 2007. évi OMV-támadás eseményeibe és valószínűsíthető hátterébe. Kitér a legutóbbi gazdasági válság hatásaira és a MOL válaszlépéseire. Foglalkozik a közeljövő várható általános és a MOL szakterületeit érintő kihívásaival és a növekedés további lehetőségeivel.

Beszámoló a 45. Komplexkémiai Kollokviumról

2010. május 26–28. között Mátraházán került sor a 45. Komplexkémiai Kollokviumra, amely az 1960-as évek óta fogja össze a hazai koordinációs kémia és rokon területeinek művelőit. A konferencia tematikája az évek során természetesen jelentősen megváltozott, a klasszikus koordinációs kémia mellett ma már meghatározó terület a homogén katalízis, a fémorganikus és bioszervetlen kémia is. Az elmúlt néhány év gyakorlatának megfelelően a kollokvium adott helyet az MTA Koordinációs Kémiai Munkabizottság tavaszi ülésének is, melynek keretében négy hosszabb előadást hallhattunk. Ezek összefoglalói alább olvashatók. Jelen beszámoló a konferencián elhangzott többi előadásról kíván rövid áttekintést adni.

A kollokviumon összesen 31+4 előadás hangzott el (három angol nyelven). A konferenciasorozat egyik fő célja – már a kezdetektől – lehetőséget adni a fiataloknak, hogy előadás formájában mutathassák be eredményeiket. Ennek megfelelően 2010-ben 22 PhD-hallgató vagy posztdok szerepelt előadóként a programban. Természetesen a kollokviumot több témavezető, idősebb kolléga is megtisztelte, így a résztvevők száma 54 volt.

E sorok írójának szubjektív besorolása szerint a legtöbb előadás, szám szerint nyolc, a fémtartalmú gyógyszerek, valamint orvosdiagnosztikai anyagok kutatásával kapcsolatos legújabb eredményeket mutatta be. Hallhattunk a potenciálisan gyógyhatású V- és Ru-tartalmú komplexekről, valamint MRI-kontrasztanyagok vizsgálatáról. Hat előadás hangzott el a homogén katalízis területéről. Ezen belül hallhattunk Rh-, Ru-, Pd- és Fe-fémionokat tartalmazó, C–C-kapcsolást, dehidrohalogénezést, hidrogénezést vagy oxidációt elősegíteni képes, döntően vizes közegű katalizátorokról. Öt előadás témája volt a különböző, savas oldalláncokat vagy hisztidint tartalmazó peptidok fémion-koordinációjának vizsgálata. A klasszikus oldatkémiai vizsgálatok mellett a komplexképződési mikrofolyamatok, a szerkezeti és redoxisajátságok is a vizsgálatok tárgyát képezték. Négy előadásban hallhattunk fémionkötő peptidok/fehérjék (Ab-peptid, amilin, a humán ZnT3 és a MerR fémion-transzporter) fémkötő sajátságainak vizsgálatáról. További három előadás foglalkozott vas- (ACC-oxidáz, Fe-SOD) és mangán- (Mn-SOD) tartalmú enzimmodellek tervezésével és vizsgálatával. Végül néhány további, a fenti csoportokba be nem sorolható előadást hallhattunk a ciklodextrin-aminosav kölcsönhatásról, a szeléntartalmú vegyületek antioxidáns sajátságairól, valamint az Sn(IV)/Sn(II) standard redoxipotenciál értékének első megbízható meghatározásáról.

A résztvevők egyöntetű véleménye szerint magas színvonalú, sikeres konferencián vettünk részt.

Gajda Tamás

MKE Komplexkémiai Szakcsoport, elnök

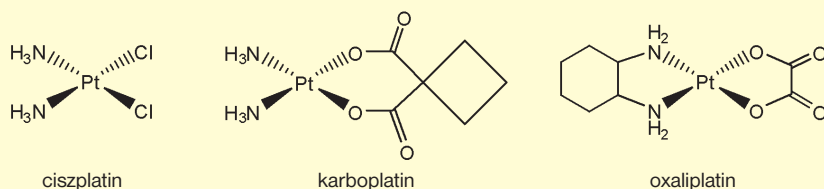
Buglyó Péter

■ Debreceni Egyetem, Tudományegyetemi Karok, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék | buglyo@science.unideb.hu

Új, félszendvics ruténium(II)-komplexek: szilárd fázisú és oldategyensúlyi vizsgálatok [1]

A ciszplatina és néhány újabb platina(II)-komplex (**1. ábra**) a legnagyobb mennyiségben használt fémvegyület egyes da-

ganattípusok kezelésében. Ugyanakkor a terápia során gyakran jelentkező mellékhatások és a fellépő sejtrezisztencia miatt



1. ábra. Néhány platinatartalmú rákellenes gyógyszer szerkezeti képlete

az utóbbi években egyéb, potenciálisan rákellenes hatású fémvegyületek előállítására és vizsgálata került a kutatómunka homlokterébe. Egyebek mellett ígéresek bizonyos ruténiumvegyületek, melyek közül két oktaédes Ru(III)komplex, a NAMI-A és a KP1019 (2. ábra) jelenleg a klinikai kipróbálás első fázisában van. Kimutatták, hogy a szerkezetben a Ru(II) az aktív forma; az is ismert, hogy ez az oxidációs állapot félszendvics fémorganikus vegyületekben is stabilizálható. Ezen utóbbi komplexeknek jellegzetes, ún. „zongoraszek” geometriájuk van; a hexahaptokoordinációjú arénligandum mellett még három koordinációs helyre köthetnek donoratomok (2. ábra). A π -donor arénligandum egyrészt stabilizálja a fémion +2 oxidációs állapotát, másrészt felelős a komplex hidrofób jellegéért, ami megfelelő molekuláris felismerést és így nagyobb biológiai hatékonyságot eredményezhet. A három koordinációs helyből kettőt általában egy (N,N), (N,O) vagy (O,O) donor kelátképző ligandum foglal el és a komplex biológiai hatásáért lehet felelős, míg a harmadik helyen egy egyfogó ligandum, például kloridion lehet. Utóbbi könnyen vízmolekulára cserélődhet oldatban, így ez tekinthető a komplex reaktív helyének.

Az $R^1C(O)N(R^2)OH$ általános összetételű hidroxámsavak régóta ismert, fontos biológiai hatású vegyületcsalád. Ezek a vegyületek fontos szerepet játszanak az alacsonyabb rendű élőlények fémion- (Fe^{3+}) felvételében és szállításában, így a szideroforok egyik családját is alkotják. A hidroxámsavak hatékony inhibitorai számos fémiontartalmú biokatalizátornak, ún. metalloenzimnek is. Mindkét említett biológiai hatás kiváló fémionmegkötő képességüknek köszönhető. A hisztion-dezacetiláz enzimek gátlására képes hidroxámsavak közül például a szuberoilánilid-hidroxámsav (SAHA, 3. ábra) ígéretes rákellenes szerként jelenleg ugyancsak a klinikai kipróbálás fázisában van.

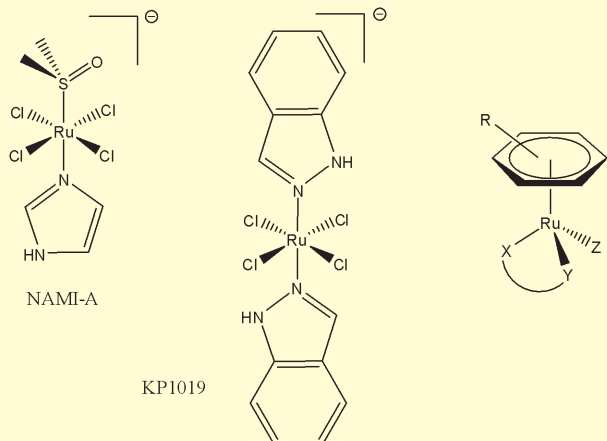
A Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékén a hidroxámsavak fémionmegkötő képességének tanulmányozása során szerzett tapasztalatokra, továbbá az utóbbi években kiépült és inert körülményeket is lehetővé tevő szintetikus kémiai háttérre támaszkodva, a fenti előzmények alapján indítottuk azt a kutatómunkát, amelynek célja egy molekulán belül két jelentős biológiai aktivitású molekularészlet kombinálásával új, $[Ru(\eta^6\text{-arén})(O,O)]^+$ típusú hidroxamát-komplexek előállítása, azok szilárd formá-

ban való jellemzése (IR, ESI-MS, NMR, röntgendiffrakció) és biológiai tesztje. A szerkezetbe kerülve a fenti vegyületek (ugyanúgy, mint a biofolyadékokban található, illetve kelátképzőként használt $[O,O]$ donorligandumokkal alkotott Ru(II)-komplexek) disszociálnak, így a biológiai hatásuk pontosabb megértéséhez pH-függő részecskeeloszlásuk felderítése is nélkülözhetetlen.

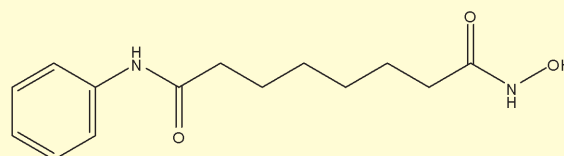
Szilárd komplexek és jellemzésük

A félszendvics Ru(II)-hidroxamát-komplexeket a 4. ábrán bemutatott általános reakcióegyenlet szerint állítottuk elő szilárd formában. A különböző mono- és dihidroxámsavakkal képződő szilárd anyagokat IR, ¹H-NMR és ESI-MS módszerekkel jellemeztük. Néhány esetben az egykristályok röntgendiffrakciós vizsgálatával sikerült meghatározni a szerkezetet. Megállapítottuk, hogy kloridionok jelenlétében egymagvú, a fémion három koordinációs helyén egy hidroxamát- (O,O) kelátot és egy kloridiont tartalmazó komplexek képződnek (5.a ábra). [3] Ugyanakkor a csak gyenge koordinációra képes trifluormetán-szulfonát-elleniont tartalmazó reakcióelegyekből kétmagvú komplexek kristályosodnak. [4] Ezekben a vegyületekben két félszendvics Ru(II)egységet két monohidroxamát kapcsol össze olyan módon, hogy a ligandumok karbonil-oxigénjeikkel csak egy-egy fémionhoz koordinálódnak, míg hidroxamát-oxigénjeik hídligandumként kötik össze a fémcentrumokat (5.b ábra), telítve a fémionok koordinációs szféráit. A COST D39 keretében lehetőségünk

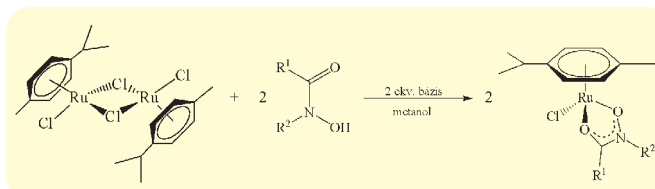
2. ábra. Rákellenes hatású oktaédes ruténium(III)- (NAMI-A, KP1019), illetve félszendvics, „zongoraszek” geometriájú ruténium(II)komplexek (XY: NN, NO vagy OO donor kelátképző, Z: egyfogó ligandum)



3. ábra. A szuberoilánilid-hidroxámsav (SAHA) szerkezeti képlete



4. ábra. Félszendvics Ru(II)-hidroxamát-komplexek előállításának általános reakciósémája





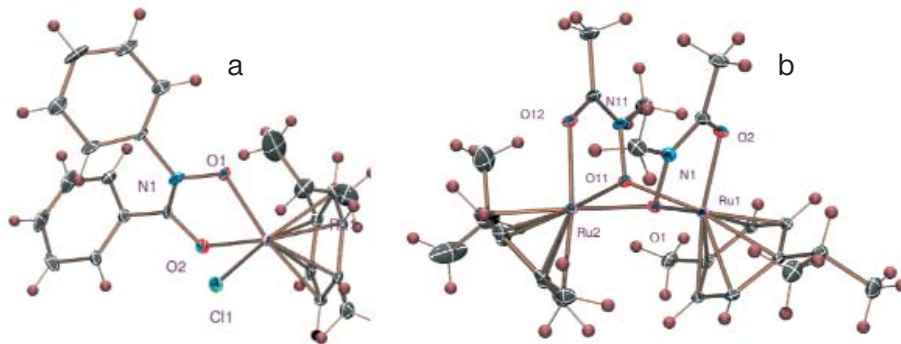
nyílt az előállított vegyületek előzetes citotoxikológiai vizsgálatára. Az A2780 és a ciszplatin-rezisztens A2780 cPt petefészekrák-sejttenyészetekkel végzett *in vitro* vizsgálatok azt mutatták, hogy a hidroxamát-komplexek közepes citotoxicitást mutatnak.

Oldategyensúlyi vizsgálatok

A potenciálisan rákellenes hatású fémkomplexek a szervezetbe kerülve disszociálhatnak és a szabaddá váló fémion a biológiai hatóanyagok kis vagy nagy molekulatömegű komponenseivel kerülhet kölcsönhatásba. Ezen kölcsönhatások erőssége, illetve a ligandumcsere-folyamatok sebessége jelentősen befolyásolhatja egy adott komplex biológiai hatósságát. A fenti jellemzők részletes feltérképezése tehát alapvető jelentőségű ilyen típusú vegyületek tervezésekor.

Kutatómunkánk során részletesen megvizsgáltuk a fél-szendvics ruténium(II)-ionok közül a gyakran vizsgált $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cym})(H_2O)_3]^{2+}$ ($p\text{-cym}$ = 1-izopropil-4-metil-benzol) (6.a ábra) viselkedését vizes oldatban. pH-potenciometriás, 1H -NMR, UV-VIS és ESI-MS módszerek kombinált alkalmazásával megállapítottuk, hogy a fémion hidrolízisekor a 4,0–6,0 pH-tartományban egy kétmagvú dihidroxohidas, $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cym})_2(\mu^2\text{-OH})_2]^{2+}$ (6.b ábra), afelett pedig egy kétmagvú trihidroxohidas komplex, $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cym})_2(\mu^2\text{-OH})_3]^+$ (6.c ábra), képződik reverzibilis folyamatokban. [4]

A hidroxokomplexek összetételének és stabilitási állandóinak ismeretében tanulmányoztuk az (O,O) kelát kialakítására képes hidroxámsavak, valamint egyéb olyan (O,O) donor kismolekulák $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cym})(H_2O)_3]^{2+}$ -ionnal való kölcsönhatását, amelyek vagy vérsérum-komponensek (laktát), vagy rákellenes hatású komplexeiket szilárd formában már előállították és jellemezték (7. ábra). Megállapítottuk, hogy valamennyi vizsgált vegyülettel 1:1 összetételű komplexek képződnek, amelyekben a ligandum két koordinációs helyet foglal el, kelátot képezve. A pH emelésével a har-



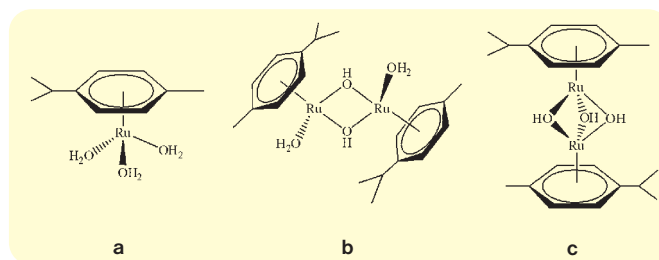
5. ábra. A $[Ru(\eta^6\text{-}cym)(PheBHA)Cl]$ (a) és a $[Ru(\eta^6\text{-}cym)_2(MeAHA)_2]^{2+}$ (b) szerkezete (cym = 1-izopropil-4-metil-benzol; PheBHA = N-fenil-benzohidroxamát, MeAHA = N-metil-acetohidroxamát)

madik helyen levő vízmolekula deprotonálódik és vegyes hidroxokomplexek képződnek. Az azonos típusú ligandumok fémion-megkötésének összehasonlítása azt

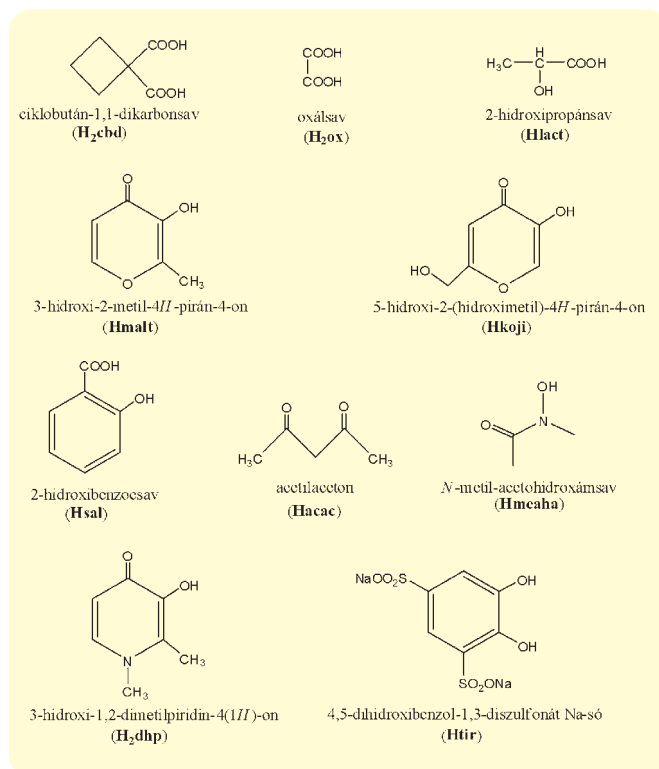
mutatta, hogy – a várakozásnak megfelelően – az öttagú (O,O) kelátok stabilabbak, mint a hattagúak. Azt találtuk, hogy azokban a komplexekben, amelyekben a ligandum

kötődése után a két koordinálódó O-donoratom mentén delokalizáció történhet (acac, dhp), extrastabilitás jelentkezik. A kis bázicitású donoratomokat tartalmazó ligandumok (ox, cbd) már erősebben savas pH-n is képesek a fémion megkötésére, de nagyobb pH-n nem tudják annak hidrolízisét meggátolni. Ugyanakkor, a nagy bázicitású O-donoratomokat tartalmazó tir (7. ábra) csak gyengén savas pH-n lép kölcsönhatásra a fémionnal, de még erősen lúgos körülmények között is visszaszorítja a $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cym})_2(\mu^2\text{-OH})_3]^+$ hidroxokomplex képződését. Eredményeink alapján megállapítható, hogy a vizsgált komplexképzők közül a hidroxámsavak, a dhp és a maltol a leghatékonyabb fémion-megkötő molekulák fiziológiai körülmények között. [5]

6. ábra. A $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cym})(H_2O)_3]^{2+}$ (a), valamint a hidrolízisekor képződő $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cym})_2(\mu^2\text{-OH})_2]^{2+}$ (b) és a $[Ru(\eta^6\text{-}p\text{-cym})_2(\mu^2\text{-OH})_3]^+$ (c) feltételezett oldatszerkezete



7. ábra. A vizsgált (O,O) donor ligandumok szerkezeti képletei



KÖSZÖNETNYILVÁNTÁS
A munka az OTKA (K76142) és a COST D39 anyagi támogatásával készült.

IRODALOM

- [1] A közlemény a 2010. május 27-én Mátaházán, a 45. Komplexkémiák Kollokviumon, a Koordinációs Kémiai Munkabizottság ülésén elhangzott előadás rövidített változata.
- [2] P. C. A. Bruijninx and P. J. Sadler, Adv. Inorg. Chem. (2009) 61, 1–62.
- [3] Balázs N. és Buglyó P., még nem közölt eredmények.
- [4] P. Buglyó and E. Farkas, Dalton Trans. (2009) 8063–8070.
- [5] L. Bíró, E. Farkas and P. Buglyó, Dalton Trans. (2010) 39, 10 272–10 278.



Jakusch Tamás–Kiss Tamás

■ SZTE Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Vanádium biospeciációja a vérérszérumban

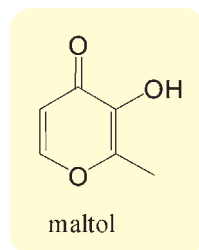
Vanádiumsók alkalmazását a krónikus cukorbetegség elsődleges tünete, a magas vércukorszint kezelésében már a 19. század végén kipróbálták [1]. Több mint száz évnél kellett azonban elteltie ahhoz, hogy a kísérletek a klinikai fázisba [2] jussanak. A vanadátsók szájon át történő bevitelkor sajnálatosan gyomor- és nyelőcsőbántalmakat okoz(hat)nak, az oxovanádium(IV)ionok pedig – amelyek mellesleg hajlamosak az oxidálódásra is – csak igen kis mértékben, csupán kb. 5%-ban szívódnak fel. Komplexképzéssel ezt az értéket sikerült kb. 15%-ra javítani a mai napig a legalaposabban tanulmányozott biszmalto-látó- $V^{IV}O$ -komplex esetében. A legáltalánosabban tesztelt komplextípus liganduma kétfogú és ezek egy negatív töltésű formában koordinálódnak a két pozitív töltésű fémionhoz. A képződött biszkomplex ezáltal semleges, utóbbi paraméter kulcsfontosságú a felszívódás mértékének szempontjából. Az eltérő komplexképzők alkalmazása természetesen felvetette a kérdést, vajon növelhető-e a terápiás hatás, és ha igen, milyen tulajdonságú ligandumok segítségével.

Az antidiabetikus hatású vanádiumkomplexek vérérszérumbeli speciációjának ismerete elengedhetetlen a potenciális gyógyszer-molekulák szerkezetén belüli „útjának”, átalakulásainak megértéséhez. Az eloszlás meghatározása azonban egyáltalán nem egyszerű feladat, hiszen a vérérszérum meglehetősen összetett rendszer, a terápia során a vanádiumkoncentráció ($<10 \mu M$) is elég alacsony ahhoz, hogy a legtöbb közvetlenül használható spektroszkópia (NMR, ESR, CD) csődöt mondjon. A probléma megoldására két, egymástól gyökeresen eltérő módszer alkalmazható:

- Töményebb oldatokban meghatározott stabilitási állandókon alapuló modellszámítás.
- Kromatográfiás elválasztás, majd mikroanalízis.

A modellszámításokra azért esett a választásunk, mivel a többfázisú megoszláson alapuló technikák általában nem jól használhatóak dinami-

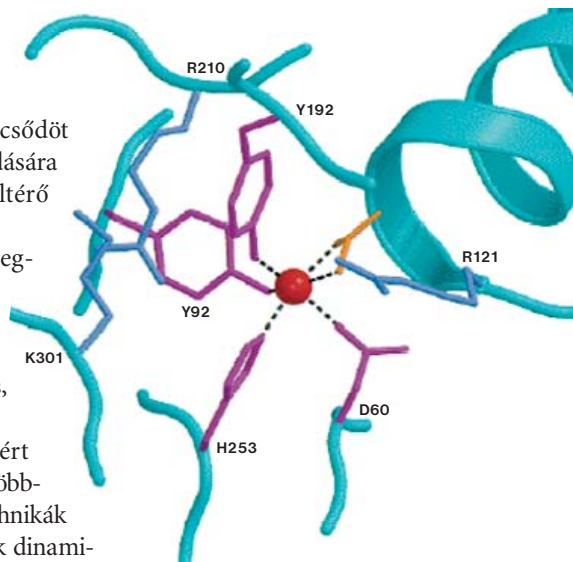
kus egyensúlyok tanulmányozására. A modellalkotáshoz ismernünk kellett a vanádium oxidációs számát a vérérszérumban, ki kellett válogatnunk a nagyszámú szérumalkotó közül azokat, melyek a legnagyobb valószínűséggel kötik a vanádiumot, és független mérések segítségével meg kellett határoznunk e vegyületek vanádiummal képzett komplexek egyensúlyi állapotát.



Az irodalomból, elsősorban ESR-mérések eredményeként ismert, hogy még abban az esetben is, ha vanadátot (V^V) adunk friss vérérszérumhoz, annak teljes mennyisége rövid időn belül IV-es oxidációs állapotba kerül, köszönhetően a vérben található redukálószernek, aszkorbinsavnak és ciszteinnak. A kis molekulatömegű szérumalkotó komponensek közül méréseink és számításaink alapján leginkább a tejsav, a citromsav és a foszfát játszhat szerepet, részben viszonylag magas koncentrációjuknak köszönhetően.

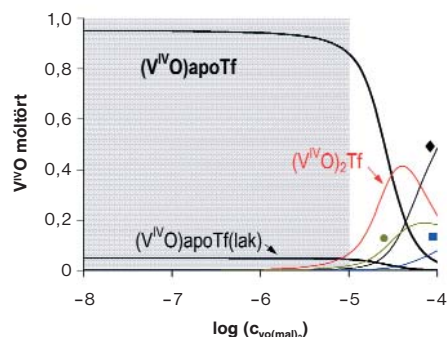
Az oxovanádium(IV) megkötése szempontjából sokkal fontosabbak azonban a fehérjék, elsősorban az apotranszferrin (apoTf) és egy korábbi – véleményünk szerint hibás spektrumértelmezésen ala-

A fémion környezete az apotranszferrinben



puló – közlemény [3] szerint a humán szérum albumin (HSA). Utóbbi peptid N-terminális végén található specifikus $Cu(II)$ -kötőhely azonban nem képes komplexálni az oxovanádium(IV)-et, mivel megfelelő horgony donorcsoportok hiányában a fémion nem indukálja az amidnitrogének deprotonálódását. Az apotranszferrin két, megközelítőleg azonosnak mondható kötőhelye azonban sokkal alkalmasabb a nitrogéntartalmú donorcsoportokat kevésbé preferáló, inkább hard oxovanádium(IV) koordinálására.

A fehérje stabilitási állandóit ligandumkiszorításos módszerrel határoztuk meg, a folyamatot CD- és szobahőmérsékleten kivitelezett ESR-spektroszkópiás mérésekkel együttesen követtük. Az adatokból kiderült, hogy a potenciális gyógyszerhatóanyag ligandumai, például a korábban már említett maltol 1:1 és 1:2 (apoTf : $V^{IV}O$: maltol) összetételű vegyes komplexet is képezhetnek [4].



A $V^{IV}O$ eloszlásgörbéje az a $V^{IV}O(mal)_2$ koncentrációjának függvényében

- ◆ : Kis molekulatömegű szérumalkotók, illetve az eredeti maltolligandum $V^{IV}O$ -komplexei
- : HSA- $V^{IV}O$, valamint HSA- $V^{IV}O$ -maltol vegyes komplexek
- : ApoTf- $V^{IV}O$ -maltol vegyes komplexek

A szérumalbumin ($V^{IV}O$) $_2$ HSA és ($V^{IV}O$)-HSA komplexeinek stabilitási állandóit szobahőmérsékleten kivitelezett kvantitatív ESR-mérések segítségével határoztuk meg; eredményeink a hibahatárokat is figyelembe véve nem különböznek jelentősen az irodalomban közltekől [5]. A mérések során hasonlóan az apoTf-hez a HSA esetében is megfigyelhető vegyes ligandumú komplexek képződése.



Az itt felsorolt ismereteink alapján elvégzett modellszámítások az mutatják, hogy az oxovanádium(IV) – a vanádiumterápia esetén elképzelhető koncentrációtartományban (<10 μM) – kizárólag az apotranszferrinhez köt, adott körülmények között az eredeti ligandumok teljes mértékben kiszorulnak a fémion koordinációs szférájából, azokkal vegyes ligandumú komplex sem apoTf-nel, sem HSA-nal nem képződik. (Nagy valószínűséggel kismértékben apoTf-laktát vegyes komplexek ellenben létrejönnek.)

ApoTf-t nem tartalmazó egyéb részecskék mennyisége csak akkor válik számottevővé, ha az oxovanádium(IV) koncentrációja eléri, illetve meghaladja a fehérjét (37 μM). Hasonló mérések és számítások

alapján kijelenthető, hogy a V^V esetében is – a szabad vanadátot leszámítva – csak az apoTf komplexeinek lehet szerepe a fémion szállításában és a célsejtekbe juttatásában.

Bár termodinamikai alapokon végzett számítások nyilvánvalóan nem tökéletesek egy nemegyensúlyi rendszer leírására, számításaink egyértelműsítik, hogy az anti-diabetikus oxovanádium(IV)-komplexek ligandumainak nincs köze a terápiás hatásához, maga a fémion az aktív metabolit. Eredményeinket farmakokinetikai mérések is alátámasztották [6]. Mindezek alapján kijelenthető, hogy csak olyan új ligandumok tervezése és tesztelése célszerű, amelyek a vanádium felszívódásának mértékét kívánják növelni.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

Kutatómunkánkhöz a TÁMOP 4.2.1.B, az OTKA (K77833), a Magyar–Portugál Bilateralis Együttműködési Alap (TÉT 09/2008) és az MTA Bolyai János ösztöndíja nyújtott anyagi támogatást.

IRODALOM

- [1] B. M. Lyonnet, E. Martz Martin, La Presse Med. 7 (1899) 191–192; M. Laran, La Presse Med. (1899) 7, 190–191.
- [2] K. H. Thompson, C. Orvig, J. Inorg. Biochem. (2006) 100, 1925.
- [3] N. D. Chasteen, J.K. Grady, C.E. Holloway, Inorg. Chem. (1986) 25, 2754.
- [4] T. Kiss, T. Jakusch, D. Hollender, Á. Dörnyei, É.A. Enyedy, J. Costa Pessoa, H. Sakurai, A. Sanz-Medel, Coord. Chem. Rev. (2008) 252, 1153.
- [5] D. Sanna, P. Buglyó, G. Micera, E. Garribba, J. Biol. Inorg. Chem. (2010) 15, 825.
- [6] K. H. Thompson, B.D. Liboiron, Y. Sun, K.D.D. Bellman, I. A. Setyawati, B. O. Patrick, V. Karunaratne, G. Rawji, J. Wheeler, K. Sutton, S. Bhanot, C. Cassidy, J. H. McNeill, V.G. Yuen, C. Orvig, J. Biol. Inorg. Chem. (2003) 8, 66.

Lente Gábor

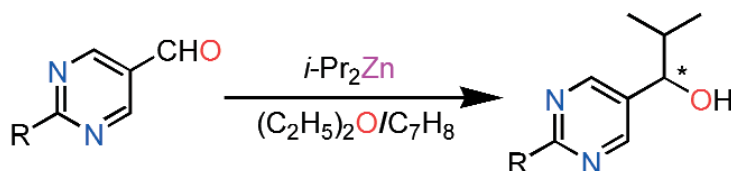
■ Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Abszolút aszimmetrikus reakciók értelmezése

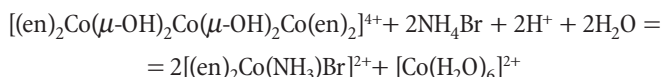
A biológiai kiralitás kialakulásának értelmezése a jelenség felismerése óta foglalkoztatja a tudományt. Az elmúlt évtizedben ebben a kérdéskörben nagy előrelépést jelentett, hogy kísérleti példákat találtak abszolút aszimmetrikus reakciókra, vagyis olyan folyamatokra, amelyekben egy királis termék jelentős enantiomerfe-

leslege keletkezik akirális kiindulási anyagból, aszimmetrikus külső hatások nélkül.

Az első – és részletesebben tanulmányozott – példa Soai-reakció néven vált közismertté [1–5]. Ebben a reakcióban egy pirimidilkarbaldehyd-származékból szerves cinkvegyület hatására királis alkohol keletkezik:



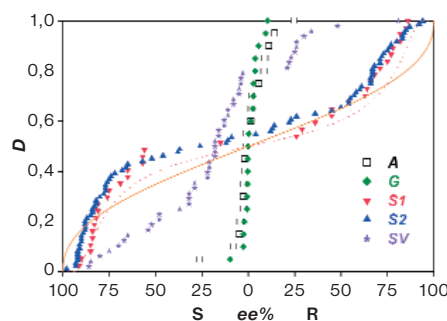
A másik példa inert kobalt(III)-komplexek ligandumszubsztitúciós reakciója [6], amely hidroxohidak felhasadásával jár:



Ezekben a rendszerekben a kísérleti tapasztalatok közös vonása, hogy a feleslegbe kerülő enantiomer véletlenszerűen változik a mai technológiával elérhető legszigorúbban azonos kezdeti kísérleti körülmények között is. Ezt érzékelteti az **1. ábra**, amely az enantiomerfeleslegek eloszlásfüggvényét mutatja be öt független kísérletsorban.

Az ilyen kísérleti eredmények elméleti értelmezése jelentős nehézségekbe ütközik, hiszen a hagyományos kinetikai meg-

közelítés a szimmetria miatt bármely mechanizmus esetében azt jósolja, hogy a termék két enantiomerje azonos koncentrációban keletkezik. A problémára megoldást a sztochasztikus kinetikai megközelítés jelent: ez a koncentráció-idő függvényt folytonosnak feltételező, determinisztikus egyenleteken alapuló, hagyományos kinetikával szemben figyelembe veszi az anyag részecsketermészetét, és így alkalmas például a természetes fluktuációk leírására is.



1. ábra. Kísérleti és elméletileg jósolt valószínűségi eloszlásfüggvények abszolút aszimmetrikus reakciókban. Adatsorok: A [6], G [4], S1 [3], S2 [5], SV [2].

A folytonos görbe elsőrendű, a szaggatott vonal másodrendű autokatalízis esetére számolt elméleti eloszlást mutat

Az elmúlt bő öt évben elméleti kutatásaink során a sztochasztikus kinetika eszköztárát, mindenekelőtt a folytonos idő – diszkrét állapot típusú megközelítést használtuk fel az abszolút aszimmetrikus reakciók értelmezésére [7–10]. Jelentős erőfeszítések történtek a kísérleti munkákban esetleg megjelenő reprodukálhatósági problémák és az eredmények sztochasztikus jellegének megkülönböztetésére. Erre a célra négy általános kritériumot javasoltunk [8]:

1. Egy reakció királis autokatalitikus jellegét bizonyítani kell az enantiomer-



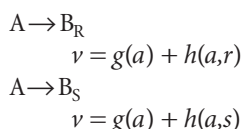
tiszta termék reakció előtti hozzáadásával. Egy ilyen kísérletben az indukcióhoz használt enantiomernek kell feleslegben keletkeznie.

2. A királis induktor nélküli (vagyis abszolút aszimmetrikus) kísérleteket legalább ötvenszer meg kell ismételni. A termékegyben mért enantiomer-eloszlásnak szimmetrikusnak kell lennie. (Láthatóan aszimmetrikus, tehát reprodukálhatatlanságra utaló példa az 1. ábrán az SV jelű adatsor).

3. Abszolút aszimmetrikus reakciók kinetikájának sztochasztikus ingadozásokat kell mutatnia.

4. A kísérleti eredményeknek térfogatfüggőknek kell lenniük akkor is, ha egyébként minden egyéb körülmény azonos (beleértve a kezdeti koncentrációkat is).

Több autokatalitikus rendszerben is végeztünk analitikus számításokat a kísérletekkel való összehasonlítás megkönnyítése végett. A legegyszerűbb ilyen kémiai modellben az akirális A reaktánsból királis B termék keletkezik két különböző (egy közvetlen és egy autokatalitikus) reakcióúton:



A képletekben a az A, r a B_R , s pedig a B_S molekulák számát jelenti. A két termék keletkezésének sebességi egyenlete mutatja a természeti törvények által megkövetelt szimmetriát. Egy ilyen rendszer szto-

chasztikus leírásának differenciálegyenlete a következő:

$$\frac{dP(r,s,t)}{dt} = -P(r,s,t)[g(a) + h(a,r) + h(a,s)]0,5 + P(r-1,s,t)[0,5g(a+1) + h(a+1,r-1)] + P(r,s-1,t)[0,5g(a+1) + h(a+1,s-1)]$$

Az egyenletekben $P(r,s,t)$ annak a valószínűsége, hogy a rendszer t időpillanatban éppen r B_R és s B_S molekulát tartalmaz. Az analitikus megoldás során jelentősége van még a $Q(r,s)$ mennyiségnek, amely annak a valószínűségét adja meg, hogy a rendszerben a teljes folyamat során bármikor előfordul az éppen r B_R és s B_S molekulával jellemezhető állapot. Elsőrendű autokatalízis, vagyis $h(a,r)/g(a) = \alpha r$ esetére a végállapotokra levezethető a következő összefüggés:

$$Q(r,s) = \left[\begin{matrix} r+s \\ r \end{matrix} \right] \frac{\prod_{j=0}^{r-1} (0,5 + \alpha j) \prod_{j=0}^{s-1} (0,5 + \alpha j)}{\prod_{j=0}^{r+s-1} (1 + \alpha j)}$$

Kellően nagy kiindulási molekulaszám esetében ez az egyenlet a matematikában jól ismert szimmetrikus gamma-eloszlásra egyszerűsödik:

$$P(x_R) = \frac{\Gamma(1/\alpha)}{\Gamma(0,5/\alpha)\Gamma(0,5/\alpha)} x_R^{0,5/\alpha-1} (1-x_R)^{0,5/\alpha-1}$$

Ebben a képletben x_R a B_R enantiomer végállapotban mért móltörtjét jelenti, Γ pedig a gamma-függvény. Az 1. ábrán látható folytonos vonal az S1 adatsorra legjobban illeszkedő gamma-eloszlást mutatja be.

Magasabb rendű autokatalízis, vagyis $h(a,r)/g(a) = \beta j^\xi$, $\xi > 1$ esetében a végállapotra analitikus képlet nem ismert, de a megfelelő eloszlások numerikus módszerekkel kiszámíthatók. Az 1. ábra szaggatott vonala az S1 adatsorra legjobban illeszkedő, másodrendű autokatalízisnek ($\xi = 2$) megfelelő görbét mutatja be.

Több különböző mechanizmus részletes vizsgálata alapján meg lehet ítélni, mikor vezet a hagyományos determinisztikus kinetikai megközelítés helytelen eredményekhez. Ilyen esetben csak a sztochasztikus megközelítés lehet helyes, amely azt mutatja, hogy enantioszelektív autokatalízist tartalmazó mechanizmusok esetében abszolút aszimmetrikus körülmények között is lehetséges jelentős enantiomerfelesleg kialakulása.

IRODALOM

- [1] K. Soai, T. Shibata, H. Morioka, K. Choji, K. Nature (1995) 378, 767.
- [2] D. A. Singleton, L.K. Vo, J. Am. Chem. Soc. (2002) 124, 10010.
- [3] K. Soai, I. Sato, T. Shibata, S. Komiya, M. Hayashi, Y. Matsueda, H. Imamura, T. Hayase, H. Morioka, H. Tabira, J. Yamamoto, Y. Kowata, Tetrahedron: Asymm. (2003) 14, 185.
- [4] I.D. Gridnev, J.M. Serafimov, H. Quiney, J.M. Brown, Org. Biomol. Chem. (2003) 1, 3811.
- [5] T. Kawasaki, K. Suzuki, M. Shimizu, K. Ishikawa, K. Soai, Chirality (2006) 18, 479.
- [6] K. Asakura, A. Ikumo, K. Kurihara, S. Osanai, D.K. Kondepudi, J. Phys. Chem. A (2000) 104, 2689.
- [7] G. Lente, J. Phys. Chem. A (2004) 108, 9475.
- [8] G. Lente, J. Phys. Chem. A (2005) 109, 11058.
- [9] G. Lente, Phys. Chem. Chem. Phys. (2007) 9, 6134.
- [10] G. Lente, Symmetry (2010) 2, 767.

Valicsek Zsolt–Huszánk Róbert–Harrach Gergely–Horváth Ottó

■ Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Kémia Intézet, Általános és Szerzetlen Kémia Intézeti Tanszék | valicsek@vegic.uni-pannon.hu

Síkon kívüli fém-porfirinek egyensúlyi, fotofizikai, fotokémiai és kvantumkémiai vizsgálata

A biokémia egyik legjelentősebb vegyületcsaládját képezik a porfirinszármazékok, melyekben négy pirrolgyűrű metilidinhidakon történő összekapcsolódásával jön létre a delokalizált elektronrendszer és a sík szerkezet. Ez utóbbi megváltozhat, és a deformáció fontos szerepet játszik a fém-porfirinek bioszintézisben és az enzimműködésben is [1]. A torzulás leggyakrabban előforduló fajtái a nyereg, a kupola, a fodor és a hullám, melyek együtt is megjelenhetnek. A deformációra nagyon

érzékeny a vegyület energiaeinyelése az elektromágneses spektrum több tartományában, így az UV-látható színekben is, továbbá a torzulás befolyásolja a ligandum redoxipotenciálját és bázicitását, utóbbival együtt a fémion beépülését, illetve axiális ligandummal szembeni affinitását [2]. Ezeket a deformációkat a legtöbb esetben a porfiringyűrű perifériájának szubsztitúciójával érték el, ám a fémion koordinációjának is lehet hasonló hatása. Túl rövid fém-nitrogén kötéstávolság ($< \sim 200$ pm)

esetén a koordinációs üreg kontrakciója léphet fel, ami fodor- vagy nyeregtorzuláshoz vezet. A kupolás torzulás legfőbb kiváltó oka viszont a túl nagy M-N távolság. Ha a fémion sugara meghaladja a kritikus 80–90 pm értéket, vagy ebbe a tartományba esik, de kevésbé hajlamos a síknégyzetes orientációra (pl. Mg^{2+} , Zn^{2+} , Fe^{2+} , Mn^{2+}), akkor – a koordinációs üreg korlátozott mérete miatt – csak a ligandum síkja felett tud elhelyezkedni, benyúlva a pirrol-nitrogének közötti térbe, létre-

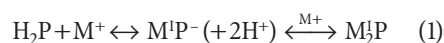


hozva a síkon kívüli (out-of-plane = OOP vagy sitting-atop = SAT) komplexet (1. ábra). Eközben torzítja a ligandumot, így erősebben kötődik két átlósan elhelyezkedő nitrogénatomhoz, míg a másik átló mentiek a felület ellentétes oldalán támadhatóbbá válnak [3–10]. Ezáltal nyomnyi mennyiségű nagyméretű fémion jelenléte nagyságrendileg meggyorsítja a közepes méretű fémion beépülését a vázba [11].

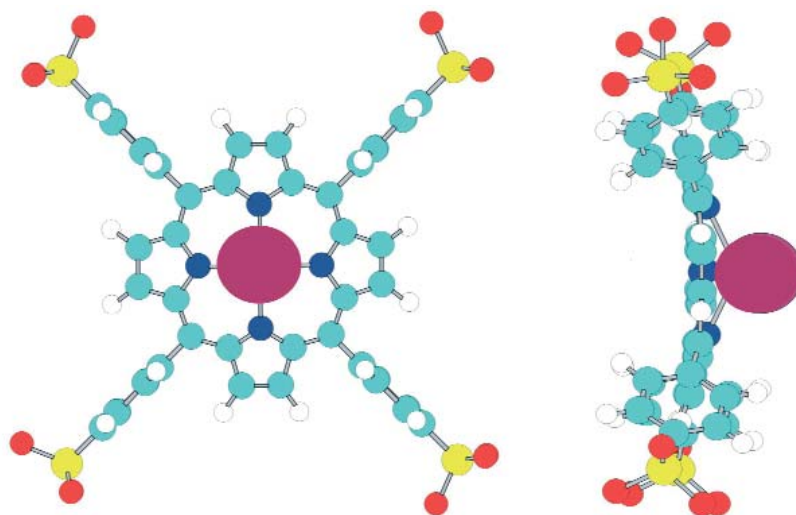
A komplexképződés

A fémion porfirinbe épülését legegyszerűbben spektrofotometriai módszerekkel követhetjük nyomon a ligandum intenzív fényelnyelési tulajdonságainak változásán keresztül, akár már 10^{-7} M koncentrációk esetén is, ezért a koordinációs kémiában megszokott módszerekkel ellentétben a fémion oldatával érdemes titrálni. Az így meghatározott komplexstabilitási állandók és a központi atom sugara, illetve ebből következően a koordinációs üregtől mért távolsága között fordított arányosságot mutattunk ki, igazolva ezzel is a síkon kívüli komplexek instabilitásának növekedését a monoporfirinek körében 1:1 és 2:1 (fémion:porfirin) összetétel esetén is. A 2:2-es összetételű biszporfirinek esetén ez a szabályszerűség megszűnhet: a $(\text{Hg}^{\text{I}}_2)_2\text{P}_2^{8-}$ aszimmetrikus szendvicssel (M-P-M-P kötési sorrenddel) [10] ellentétben a $\text{Hg}^{\text{II}}_2\text{P}_2^{8-}$ szimmetrikus felépítésű (M-P – P-M), így előbbivel szemben csak a ligandumok között fellépő gyenge stacking jellegű kölcsönhatás tarthatja össze a monomereket [9]. A síkon kívüli fémion ennek a π – π kölcsönhatásnak az esélyét azzal is növeli, hogy a porfirint torzítja, ezáltal az eredetileg a gyűrű síkjára szinte merőleges helyzetű arilszubsztituensek a sík felé fordulnak. A ritkaföldfémionok biszporfirinjei különösen érdekesek, mivel nagyon hasonlítanak a fotoszintetikus baktériumok speciális páros reakciócentrumára [12].

Hasonló okkal magyarázható a síkon kívüli komplexek azon különlegessége is, hogy egy porfirin koordinációs üregéhez két azonos, általában nagyméretű és egyszeres pozitív töltésű (kis töltéssűrűségű) fémion is (pl. $\text{M}=\text{Tl}^+$, Hg_2^{2+} , Ag^+ , de a 76 pm sugarú Li^+ is) koordinálódhat az 1:1 összetételt szinte átugorva, egyből a 2:1-es komplexet képezve (kvázi-autokatalitikusan) (1) [10].



Kinetikai vizsgálataink alapján a nagyméretű fémionok síkon kívüli komplexei-



1. ábra. A síkon kívüli koordináció megvalósulása az általunk alkalmazott 5,10,15,20-tetrakis(4-szulfonátofenil)-porfirin-anion esetén (jelölése a továbbiakban H_2P^{4-})

nek képződése legalább két nagyságrenddel gyorsabb, mint általában a kisebb méretűek síkon belüli (vagy kérdéses típusú) fémporfirinjeinek kialakulása. Ez azzal magyarázható, hogy a fémiont és a protonokat is a koordinációs üregben tartalmazó köztitermékben (M-P-H_2) – melyre különben először alkalmazták a(z) intermediér SAT jelzőt [13] – a nagyobb sugarú, Pearson-féle értelemben lágyabb fémionok mind a négy pirrol-nitrogénhez, és erősebben is kötődve, az üreghez jobban is illeszkedve sokkal valószínűbben okozzák a végső komplex kialakulását. Míg a kisebb sugarú, keményebb fémionok a köztitermékben aszimmetrikusan, cisz-megkötődéssel inkább csak két, egymás melletti pirrol-nitrogénhez, és gyengébben képesek koordinálódni, így a kiindulási anyagok felé vezető disszociáció az esélyesebb.

A fémion beépülésének mechanizmusa még most sem teljesen tisztázott, hiszen a reakciót a porfirin határozza meg gyűrűs négyfogú ligandumként, mely folyamatban a koordinációs üregének mérete és szerkezetének flexibilitása nagyon jelentős szerepet játszik. Továbbá a szabad porfirin két átellenes pirrol-nitrogénje hidrogént is tartalmaz, így a deprotonálódásának és a szerkezeti változásának, valamint a fémion többszörös ligandum- vagy oldószervesztésének is be kell következnie. A legelfogadottabb mechanizmus-javaslat 6 lépést feltételez [14], de az 1:1-es összetételű komplexek képződésének sebességmeghatározó lépése legtöbbször asszociatív, mindkét reagensre nézve elsőrendű. Az összetettebb fém-porfirinek konsekutív képződésének sebességmeghatározó lépése is legtöbbször bimolekuláris, kivéve a higany(I)ion 2:1-es

komplexének pszeudo-harmadrendű [10], illetve a higany(II) 2:2-es komplexének pszeudo-elsőrendű kinetikát követő kialakulása [9].

A komplexek labilitása, melyet disszociációjuk pszeudo-elsőrendű sebességi állandója jellemez, nemcsak a központi atom sugarától, hanem a szerkezet összetettségétől is függ. Síkon kívüli fém-porfirinek esetén az instabilitásuk és labilitásuk miatt már hígítással is el lehet érni a disszociációt, míg a stabilabb és inertebb síkon belüli komplexek esetén ehhez savas kezelés szükséges. Ez a disszociációs hajlam szolgáltat alapul a fém-porfirinek Hambright-féle [11], míg a központi atomnak egy másik fémionra történő cseréje a Barnes és Dorough-féle kategorizálásához [15]:

1) kis fémionok nagyon stabil, síkszerűkezetű komplexei kovalens kötéssel, melyek nem cserélődnek;

2) nagy fémionok síkon kívüli, instabil komplexei ionos jellegű kötéssel, könnyen cserélődnek, ami visszafelé még nagy feleslegük esetén sem következik be;

3) átmenetként a két kategória között: a Mg^{2+} és a Zn^{2+} a síkban, de ionos jelleggel, tehát könnyen cserélhetők.

Ebbe a kategóriába tartoznak az általunk kérdéses típusúnak nevezett fém-porfirinek, melyek közé kísérleti tapasztalataink alapján a Fe^{2+} (és Mn^{2+}) ionokat is besoroltuk, melyek a nagyobb sugarú fémionokhoz hasonlóan katalizálják a Fe^{3+} -ionok porfirinbe épülését, s nélkülük a komplexképződés egyáltalán nem megy végbe normál körülmények között [5, 6, 8].

Némely fémion esetén többféle szerkezetű komplex is kialakulhat: hidroxó axiális ligandum révén Cd^{2+} esetében, míg a víz oldószer polaritása és koordinálókész-

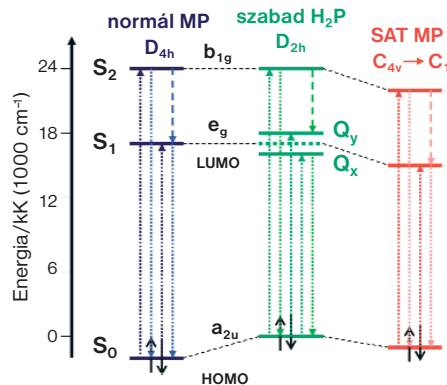


sége, valamint a porfirin ionos szubsztituense által módosított koordinációs saját-sága következtében Pb^{2+} , Bi^{3+} , Tl^{+} és Ag^{+} -ionoknál [4]. Újabb komplex megjelenését okozhatja a koordinálódó pirrol-nitrogének nagy negatív töltése és extrém polarizáló hatása: Fe^{2+} , Mn^{2+} , Co^{2+} -ionok spontán feloxidálódhatnak háromértékű központi atommá [8], míg Ag^{+} , Au^{+} átmenetileg képződő 2:1-es komplexében diszproporció játszódik le ezüst(II)-, illetve arany(III)-porfirint, valamint kolloidális fémet eredményezve. A makrociklus hat a központi atom spinállapotára is, ami lehetőséget biztosíthat többféle szerkezetű komplex megjelenésére: a nagyspinszámú, kvintett Fe^{2+} -ion (sugara 78 pm) a kérdéses típusúnak tekintett, ám gyakorlatilag síkon kívüli komplexet alakítja ki, míg kis-spinszámú, szingulett (61 pm) ionná válva a síkba süllyed, ahogy ez a hemoglobin működése közben meg is történik [5, 6, 8]. Hasonlóan viselkedik a Mn^{2+} is, míg a Mn^{3+} nagyspinszámú (65 pm) okozza normál, sík komplexet eredményezve az elektron-gerjesztési színeképeknek a szabad ligandumhoz képesti kékeltolódását, kis-spinszámú (58 pm) pedig a koordinációs üreg kontrakcióján keresztül a ligandum periferiáját fodrosan torzítja, ezáltal az elnyelési sávok jelentős vöröseltolódást szenvednek. A két spin- és egyben szerkezeti izomer között az energiagát nagyon alacsony, így akár kristályban és oldatban is egyszerre jelen lehetnek [2].

Spektrofotometriai és fotofizikai tulajdonságok

A porfirinek a természetben megtalálható vegyületek közül az egyik legnagyobb fényelnyeléssel rendelkeznek. A legintenzívebb (B- vagy Soret-) sávjuk 350–500 nm között jelentkezik, többször $10^5 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$ moláris elnyelési együtthatóval, míg a Q-sávok 500 és 750 nm között néhányszor $10^4 \text{ M}^{-1}\text{cm}^{-1}$ értékkel. Utóbbiak a kétszeresen elfajult LUMO-ra történő elektrongerjesztés következményei, mely átmenetek a szabad porfirinben (H_2P) a pirrol-nitrogénekhez kötődő két proton miatt felhasadnak. Fémionok koordinációja a Q-sávok összeolvadását – az elfajultság, vagyis a négyértékű forgási szimmetria helyreáll a protonok leszorulása következtében –, illetve az elnyelési sávoknak a fémion méretétől, koordinációs helyzetétől függő eltolódását okozza (2. ábra).

A deformáció az elektrongerjesztési energiát csökkenti, vagyis az UV-látható sávok vöröseltolódását eredményezi [2].



2. ábra. A Soret- és a Q-sávokért felelős molekulapályák alakulása a különböző típusú komplexekben (a D_{4h} ideális szerkezethez tartozó pályaszimmetriákkal)

Ennek megfelelően, ám a fém-porfirinek körében ez idáig nem tisztázott módon a szabad ligandumhoz képest a síkon kívüli komplexek elnyelési sávjai a vörösbe tolódnak, míg a normál komplexek sávjai kékeltolódást szenvednek, kivéve ha a síkon belül elhelyezkedő központi atom a túl rövid fém-nitrogén kötéstávolság miatt szintén torzult szerkezettel rendelkezik – mint ahogy a mangán(III)ion kapcsán már tárgyaltuk. Ez a megfigyelésünk azt erősítette meg, hogy a színekpi sajátságokért felelős π -elektronrendszert a fémion az elektronkonfigurációja révén nem nagyon befolyásolja, főleg ha a síkon kívül helyezkedik el, ami a deprotonált ligandumhoz hasonló, a torzulás módjától, mértékétől függő, általános SAT jelleget eredményez a spektrofotometriai sajátságokban.

A fotofizikai tulajdonságokban (gerjesztett állapotok élettartama, kisugárzási kvantumhasznosítási tényezők) sem igazán érvényesül a síkon kívüli központi atom elektronikus (nehézatomban) hatása, hanem főként a sztérikus (a ligandumot torzító) effektusa, hiszen a vizsgált, paramágneses SAT {ezüst(II)-, illetve lantanoida(III)-}, valamint kérdéses típusú {nagyspinszámú vas(II)- és mangán(II)-} komplexek is a diamágneses síkon kívüliekhez hasonló lumineszcenciás sajátságokat mutattak. Viszont az első szingulett gerjesztett állapotról bekövetkező fluoreszcencia esetén a különböző komplexek szerkezetüktől függetlenül kékeltolódással rendelkeztek a szabad porfirinhez képest az említett degeneráció megszűnése miatt (2. ábra). A porfirinek körében előfordul az eléggé ritka jelenségnek számító, szingulett-2 fluoreszcencia is a kiterjedt delokalizációnak és a két gerjesztett állapot közötti, viszonylag nagy energiárésnek köszönhetően. Erre a kisugárzásra a központi atom szintén sztér-

rikusan hat (a Stokes-eltolódáson keresztül), a Soret-elnyelésben tapasztalt eltolódási irányok megfordulását eredményezve.

Fotokémiai sajátságok

Szabad porfirineket elterjedten alkalmaznak fényérzékenyítési reakciókban, viszont a komplexeikben látható fény hatására bekövetkező töltésvitelek katalitikus ciklusok tervezését teszik lehetővé. A síkon kívüli fém-porfirinekben a fotoindukált, akár közvetett, ligandumról fémionra irányuló elektronátmenet irreverzibilizációja megnövekszik, mivel a ligandumtól kapott elektron révén a felületen kívül elhelyezkedő fémionnak a töltése csökken, a mérete növekszik jelentősen kisebb töltéssűrűséget eredményezve, ami a koordinációs kötés nagymértékű meggyengüléséhez, akár a felbomlásához is vezethet. Előbbi esetben az elektron a központi atomhoz axiálisan koordinálódó ligandumnak adódhat, utóbbi esetben pedig a redukált fémion a körülvevő közegbe kilépve redoxifolyamatot indíthat be, ha instabil oxidációs állapotba került az elektron felvétele révén. A porfiringyűrűből visszamaradó hosszú élettartamú és erősen oxidáló gyökion is nagyon reakcióképes, így a fotoindukált reakció olyan enyhe reagensek jelenlétében is ciklizálható, melyek alapállapotban egymással nem lépnek reakcióba, így pedig a fényenergiának kémiai formában történő tárolására alkalmas, értékes terméké alakulhatnak.

A képződő porfirin gyökion regenerálására alkalmas enyhe redukálószer hiányában a gyűrű tovább oxidálódhat, aminek végén nyíltláncú dioxo-tetrapirrol-származék (bilinon) keletkezhet. Így vizsgálhatók az elsődleges fotokémiai reakciók, melyek hatékonyságában ténylegesen nagyságrendnyi ugrást mutattunk ki a fémion síkon kívülre kerülésének következményeként, és a tárgyalt kérdéses típusú komplexek esetén is [3–10]. Igazoltuk, hogy az elsődleges fotokémiai bomlásért a központi atom redoxipotenciálja helyett a koordinációs üreghöz viszonyított helyzete a felelős. Továbbá ezen labilis komplexek esetén – ellentétben a síkon belüli komplexekkel – fotoindukált disszociációt és némi esetben a már említett szerkezeti átalakulásokat is tapasztaltuk.

Kvantumkémiai számítások

Számos metallo-porfirin szerkezetére elvégzett DFT-számításaink szerint a 85 pm-nél kisebb rádiuszú fémionok a ligandum



síkján belül helyezkednek el, míg a 100 pm-t meghaladó ionsugarúak emelkednek ki csak egyértelműen abból. Tehát a kérdéses típusú komplexek köre tovább bővült, mivel a számításokban a tallium(III)-, ezüst(II)- és kadmium(II)ion (89, 94, illetve 95 pm-es sugárral) is koplanárisan tudott illeszkedni a porfirin koordinációs üregébe, amihez viszont annak jelentős mértékű expanziót kellett szenvednie. Ez a feszített sík szerkezet axiális ligandum hatására megszűnt, mely tapasztalatból a kísérletekben megnyilvánuló, általános SAT-jelleget újabb nézőpontból közelíthettük meg: a központi atom és a koordinációs üreg közötti feszült állapotnál az axiális ligandum kötődéséhez hasonlóan kis perturbáció, akár elektrongerjesztés is okozhatja a SAT-jellemzők megnyilvánulását. Másrészt felmerülhet az a kétely is, hogy az expanzió keresztül megvalósuló koplanáris illeszkedés a számítási módszer hibája.

Az elektrongerjesztési színeképek számításával viszont nagyjából alátámasztottuk a különböző típusú (síkon belüli, ill. kívüli) komplexekhez kísérletileg kapott eltolódási irányokat, de a Soret-sávhoz kapott eredmények (a kísérlettől eltérően felhasadt elektronállapotra irányuló átmenet), a kísérleti tapasztalataink és szakirodalmi kételyek alapján az elektronállapotok leírásához általánosan használatos 4 MO-modell [16] érvényességét megkérdőjeleztük, helyette egy kísérleti alapon felállítottat javasoltunk. ●●●

Köszönetünket fejezzük ki az anyagi támogatásért a Nemzeti Fejlesztési Ügynökségnek (TÁMOP 4.2.2.-08/1/2008-0018) és a Foton Alapítványnak; valamint a kvantumkémiái számításokban nyújtott segítségért Dr. Lendvai Györgynek (MTA KKKI).

IRODALOM

- [1] S. Al-Karadaghi, R. Franco, M. Hansson, J. A. Shelnutt, G. Isaya, G. C. Ferreira, Trends Biochem. Sci. (2006) 31, 135.
- [2] J. A. Shelnutt, X.-Z. Song, J.-G. Ma, S.-L. Jia, W. Jentzen, C. J. Medforth, Chem. Soc. Rev. (1998) 27, 31.
- [3] O. Horváth, Zs. Valicsek, A. Vogler, Inorg. Chem. Commun. (2004) 7, 854.
- [4] Zs. Valicsek, O. Horváth, K. L. Stevenson, Photochem. Photobiol. Sci. (2004) 3, 669.
- [5] R. Huszánk, O. Horváth, Chem. Commun. (2005) 224.
- [6] O. Horváth, R. Huszánk, Zs. Valicsek, G. Lendvai, Coord. Chem. Rev. (2006) 250, 1792.
- [7] Zs. Valicsek, O. Horváth, J. Photochem. Photobiol. A. (2007) 186, 1.
- [8] R. Huszánk, G. Lendvai, O. Horváth, J. Biol. Inorg. Chem. (2007) 12, 681.
- [9] Zs. Valicsek, G. Lendvai, O. Horváth, J. Phys. Chem. B. (2008) 112, 14509.
- [10] Zs. Valicsek, G. Lendvai, O. Horváth, J. Porph. Phthal. (2009) 13, 910.
- [11] P. Hambright, Coord. Chem. Rev. (1971) 6, 247.
- [12] G. Ricciardi, A. Rosa, E. J. Baerends, S. A. J. van Gisbergen, J. Am. Chem. Soc. (2002) 124, 12319.
- [13] E. B. Fleischer, J. H. Wang, J. Am. Chem. Soc. (1960) 82, 3498.
- [14] S. Funahashi, Y. Inada, M. Inamo, Anal. Sci. (2001) 17, 917.
- [15] J. Barnes, G. Dorough, J. Am. Chem. Soc. (1950) 72, 4045.
- [16] M. Gouterman, J. Mol. Spect. (1961) 6, 138.

Csupor Dezső¹ – Szekeres András³ – Tatsimo N. Simplicio Joel^{1,2} – Kecskeméti Anita³ – Vékes Erika³ – Veres Katalin¹ – Sulyok Edvárd¹ – Szendrei Kálmán¹ – Hohmann Judit¹

¹ Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Farmakognózi Intézet, Szeged

² University of Maroua, Higher Teacher's Training College, Department of Chemistry, Maroua, Kamerun

³ Fumoprep Kft., Mórahalom

Szintetizálnak-e a növények Viagrát?

Szintetikus hatóanyagokkal hamisított „növényi” étrend-kiegészítők

Bevezetés

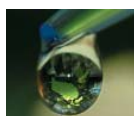
Az étrend-kiegészítők 2004-től jelentek meg tömegesen hazánkban. Az azóta eltelt hat évben közel 7000 tagúra bővült a korábban szinte ismeretlen készítménycsoport, amelynek zöme gyógynövénykivonatokat tartalmaz, de megtalálhatóak közöttük multivitamin- és ásványianyag-készítmények is, olyanok is, amelyek korábban gyógyszerként voltak forgalomban.

Bár a készítmények számának ilyen mértékű növekedése korábban soha nem létező lehetőségeket kínál a gyógynövények alkalmazásának, a jelenség nem feltétlenül tölti el örömmel azokat, akik az étrend-kiegészítők térhódításának okait is ismerik. Vajon mi lehet az oka annak, hogy ilyen gyorsan ekkora számú termék kerülhetett a forgalomba? Milyen engedélyezési metódus eredményeként kapott ilyen gyorsan forgalmazási engedélyt ez a hatalmas terméktömeg? Mi a lényegi különbség a gyógyszer és az étrend-kiegészítő között, és mi lehet az oka annak, hogy gyógyszerek is átkerülnek az étrend-kiegészítők közé? A fogyasztó számára előny vagy hátrány az új termékkategória megjelenése?

A kérdések könnyen megválaszolhatók a gyógyszereket és étrend-kiegészítőket szabályozó jogszabályok és a nemzetközi előzmények ismeretében. A gyógyszerek forgalomba hozatalát nemzetközileg és hazánkban is nagyon szigorú gyógyszertervény szabályozza, amely garantálja, hogy csak biztonságos, hatásos és jó minőségű termékek kerülhessenek forgalomba. A gyógyszerfejlesztés több százmillió eurós

költsége részben épp a szigorú szabállyal magyarázható, de a befektetett összeg megtérülését a szabadalmi időszak alatt elérhető profit biztosítja. Mindezen előnyök nehezen, vagy egyáltalán nem érhetőek el azok számára, akik növényi kivonatokból akarnak gyógyszert előállítani, ugyanis az új gyógyszer-molekulákkal ellentétben az ismert vegyületeket tartalmazó növényi készítményeket nehéz szabadalmaztatni. Ez is a magyarázata annak, hogy a többeszes magyar gyógyszerkincsben mindössze kb. 100 növényi gyógyszer található – ezek mindegyike nagy tőkeerejű külföldi cégek terméke. Mivel azonban szakmai szempontból és a fogyasztói igényeket figyelembe véve is több gyógyszer jellegű gyógynövénykészítményre van szükség, a legtöbb európai ország módot talált arra, hogy egyszerűsített feltételekkel forgalomba kerüljenek a növényi eredetű, gyógyászati célokra alkalmazható termékek. Magyarországon erre a célra hozták létre a gyógytermékek kategóriáját, amely biztosította, hogy a hatásosság bizonyítását illetően könnyítve, minőségileg a gyógyszerekéhez hasonló színvonalú készítmények legyenek forgalomban. Így összesen kb. 500 gyógytermék kapott forgalomba hozatali engedélyt 1986-tól, és a tapasztalatok azt bizonyítják, hogy ezek a termékek közmegegedésre, biztonságosan szolgálták a betegek gyógyulását.

Hatalmas változást és átrendeződést hozott a piacon az étrend-kiegészítők megjelenése, amelyek forgalmazását egy 2002-ben született európai uniós irányelv szabályozta. A tagállamokra is kötelező jelle-



gű jogszabály megjelenésével párhuzamosan arról is döntés született, hogy a harmonizáció jegyében az Unión belül meg kell szüntetni a gyógyhatású termékeket magában foglaló „egyéb” kategóriákat, ennek következtében hazánkban hamarosan megszűnik a gyógytermékek forgalmazása. A meglévő készítmények vagy gyógyszerként, vagy étrend-kiegészítőként élhetnek tovább. A reális forgatókönyv kiolvasható abból a szikár tényből, hogy az átminősítési határidő végéhez közeledve csupán egy gyógytermék vált gyógyszerre, annál több viszont étrend-kiegészítőként található meg a polcokon.

A jelenség magyarázata az, hogy az étrend-kiegészítők forgalmazásának szabályozása sokkal liberálisabb, mint a gyógyszereké vagy gyógytermékeké. Ezeket a készítményeket ugyanis – a gyógyszerekkel és gyógytermékekkel ellentétben – nem kell engedélyeztetni, és gyártásuk során sem érvényesek a gyógyszergyártás szigorú szabályai és követelményei. Összetételüket, adagolásukat gyakorlatilag nem szabályozzák szakmai és törvényi megkötelések, ennek következtében sokkal több növénytel találkozhatunk összetevőik között, mint a gyógyszerek esetén. A termékek jogszabályi megfelelőségéért, biztonságosságáért és hatásosságáért a gyártó a felelős. Piacra kerülésük egyetlen feltétele, hogy a forgalmazó bejelentse a forgalomba hozás tényét az Országos Élelmezés- és Táplálkozástudományi Intézetnek (OÉTI). A termék összetételét, minőségét nem ellenőrzi hatósági laboratóriumban a forgalomba kerülést megelőzően, és a jogszabály a rendszeres, rutinszerű piacellenőrzés kereteit sem szabja meg – mindez elképzelhetetlen a gyógyszerek, gyógytermékek esetén. A nyilvántartásba vétel nem jóváhagyás, nem gyártási, illetve forgalomba hozatali engedély, és nem jelenti a készítmény minőségi megfelelőségét, csupán annak dokumentálása, hogy a termék eleget tesz a nem túl szigorú (formai) követelményeknek.

Az elégtelen törvényi háttér és az áttekinthetetlenül széles termékkínálat magában hordozza a visszaélések lehetőségét. Nagyon gyakori, hogy a termékeket nem jelentik be az OÉTI-nél, és külföldi honlapokon keresztül vagy ügynökök útján forgalmazzák – ebben az esetben nem is étrend-kiegészítőkről, hanem definiálatlan illegális szerekről van szó. Sajnos, a hatóságok nemcsak az illegális, hanem a legálisan forgalomba hozott termékek minőségét sem képesek szavatolni. Az Egyesült Államokban, ahol már több mint 15 éve az

európai szabályozáshoz hasonló keretek között folyik a termékek forgalmazása, számos szakmai cikk számolt be arról, hogy a termékek egy részének összetétele nem felel meg annak, ami a csomagoláson szerepel. Ennek legegyszerűbb esete, ha a készítményből kihagyják a drágább összetevőket, ami a várt hatás elmaradásához vezethet. Súlyos következményekkel is járhat, ha a termékben valamely alkotóanyagot túldozíroznak, vagy ha a készítmény a címkén fel nem tüntetett „szennyezést” tartalmaz. A szennyezés lehet a nem körültekintő gyártás, de szándékos beavatkozás eredménye is.

A hamisítás egyik igen veszélyes módja, ha a növényi eredetűnek mondott készítményt a hatás fokozása céljából szintetikus gyógyszerhatóanyaggal egészítik ki. Ez, mindazon túl, hogy illegális, szakmai szempontból is aggályos. Az étrend-kiegészítők a jogszabály szerint nem alkalmazhatók gyógyászati célra, a hamisítás eredményeként viszont garantált gyógyhatással rendelkező készítményhez jut a fogyasztó – tudtán kívül. A hamisításra felhasznált vegyületek egy része erős hatású, szándékolatlan alkalmazása nemkívánatos hatások, interakciók kialakulásához, mérgezéshez vezethet.

Az első szintetikus szennyezések a hagyományos kínai gyógynövénytermékként hirdetett készítményekben jelentek meg. Egy 1997-es közlés szerint 2609, tajvani klinikákon begyűjtött kínai növényi készítmény 23,7%-ából mutattak ki a termék alkalmazási céljával összhangban lévő szintetikus hatóanyagot. A hamisított termékek 52,8%-a legalább 2 szintetikus hatóanyagot tartalmazott [1]. Egy friss, 2010-es közleményben kínai szerzők 105 növényi étrend-kiegészítő vizsgálatáról számolnak be, amelyek közül 35 tartalmazott szintetikus gyógyszervegyületeket [2]. Ez a közlés átvezet ahhoz a problémához, amellyel napjainkban már hazánkban is szembesülünk. A hamisítás már nem lokális, Ázsiára jellemző probléma, mivel a kínai és indiai termékek százával-ezrével jelen vannak étrend-kiegészítőként az európai piacon is, és semmi (legalábbis jog-

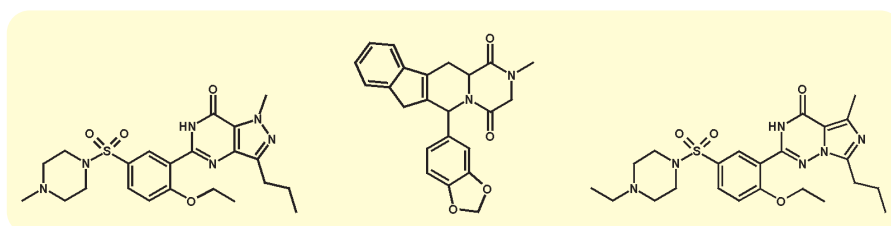
szabály) nem garantálja, hogy a bekerülő készítmények mentesek a szintetikus gyógyszer-szennyezéstől. A hamisított termékek a globális piac bármely pontján, így az Európai Unióban is megjelenhetnek. Ezt támasztja alá az a nemrég publikált cikk, amely szerint francia kutatók 20 növényi, fogyasztó hatással reklámozott étrend-kiegészítőből 16-ban mutattak ki szintetikus hatóanyagot [3].

A szakmai körökben ismert hamisítási esetek azonban csak akkor jutnak el a szélesebb közvéleményhez, ha a hamisítás emberéleteket követel, vagy ha pozitív doppingesethez vezet [4]. Sajnos, mindkettőre volt példa az elmúlt időszakban: hazánkban is sajtónyilvánosságot kaptak a nem szteroid gyulladásgátlóval szennyezett étrend-kiegészítő fogyasztása miatti észak-európai halálesetek [5], az utóbbi hónapok máig nem tisztázott híre szerint pedig egy magyar sportoló doppingvétsége egy étrendkiegészítő fogyasztásával függ össze [6].

A szakirodalomban megjelent cikkek alapján körvonalazhatók a hamisítástól leginkább érintett termékcsoportok és a hamisításra felhasznált anyagok köre. A leggyakoribb, legjellegzetesebb példák a teljesítményfokozók, izomtömeg-növelők anabolikus szteroidokkal, efedrinnel, koffeinnel [7,8]; a fogyasztószeresek pajzsmirigykivonattal, fenfluraminnal, szibutraminnal, szinefrinnel, fenolftealeinnel, N-mono-dezmetil-szibutraminnal [9–14]; a vércukorszint-csökkentők glibenklamiddal szennyezve [15]. A felsorolt termékek mindegyike növényi eredetű készítményként volt forgalomban, és egyiken sem tüntették fel, hogy szintetikus gyógyszerhatóanyagot is tartalmaz.

Az utóbbi években számos közlemény jelent meg a férfi szexuális teljesítményfokozóként (potenciafokozóként) reklámozott növényi készítmények, étrend-kiegészítők szintetikus foszfodiészteráz-gátlókkal történő hamisításáról. A legkorábbi cikkek az ezredforduló táján jelentek meg, nem sokkal az első foszfodiészteráz-gátló, a szildenafil (Viagra®) (1. ábra) 1998-as piacra kerülése után [16]. Ezt követően az események felgyorsultak, és sorra jelentek

1. ábra. A szildenafil, tadalafil és vardenafil szerkezeti képlete





meg azok a közlések is, amelyek a szildenafil vagy illegálisan előállított, gyógyszerként forgalomban nem lévő analógjainak jelenlétéről számoltak be növényi eredetűnek hirdetett készítményekből [17–24].

Az újabb foszfodiészteráz-gátlók (1. ábra) gyógyszerként történő forgalomba kerülése után nem sokkal a vegyületek az illegális piacon is megjelentek. A tadalafil 2002-ben kapott forgalomba hozatali engedélyt az Egyesült Államokban. Három évvel később kanadai szerzők hét megvizsgált „növényi” készítményből kettőben találtak szildenafil, illetve tadalafil [25]. A vegyületcsoport harmadik tagja, a vardenafil 2005-ben kapott forgalomba hozatali engedélyt. Az első vardenafil-analóg, a piperidenafil kimutatásáról 2006-ban számolt be egy amerikai csoport [26].

A potenciáfokozóként propagált étrend-kiegészítők hamisítás szempontjából fokozottan kockázatos termékcsoportnak számítanak. Egy 2004-es amerikai közlemény szerint 40 vizsgált potenciáfokozó étrend-kiegészítő fele tartalmazott szildenafil, tadalafil vagy vardenafil. A vegyületek mennyisége számos esetben elérte, sőt meg is haladta a hatóanyagok terápiás dózist [27]. Egy tavaly közzétett amerikai vizsgálat 26 tesztelt készítményből 15 esetén igazolta a hamisítást [28]. Egy holland vizsgálatba bevont 17 étrend-kiegészítőből 8 volt szennyezett különböző szintetikus foszfodiészteráz-gátlókkal [29].

Bár hazánkat eddig elkerülték (vagy rejtve maradtak) a hamisításból eredő balesetek, halálesetek és botrányok, figyelmeztető jelek azért vannak. Az internetes kereskedelem terjedése miatt ma már egyébként sem lehet lokális problémaként interpretálni, ha egy EU-s tagállamban, vagy akár az Egyesült Államokban hamisított étrend-kiegészítőt találnak. A fogyasztók és a jó minőségű készítményeket forgalmazó vállalkozások érdeke egyaránt az, hogy hazánkban csak biztonságos, magas színvonalú termékek legyenek forgalomban. Ezt felismerve a Szegedi Tudományegyetem Farmakognóziai Intézete és a Magyar Étrend-kiegészítő Gyártók és Forgalmazók Egye-

sülete (MÉKISZ) együttműködést kezdeményezett egyes étrendkiegészítő-csoportok szisztematikus minőségi vizsgálatára. Első célcsoportként a külföldi adatok szerint viszonylag gyakran hamisított növényi potenciáfokozókkal foglalkoztunk.

Módszerek

Az étrend-kiegészítőket forgalmazó boltok és internetes oldalak nem reprezentatív felmérése és elemzése után 10 terméket (mindegyik kapszula) szereztünk be kémiai vizsgálatra. Ezek közül 9 termék rendelkezett OÉTI-notifikációval, amelyek mindegyike az OÉTI zöld pipa jelölést is elnyerte.* A készítmények deklarált összetétele rendkívül sokszínű, az összetevők túlnyomó többsége növényi eredetű. A felhasznált növények egy részét a népi gyógyászatban használták afrodiziákumként, és számos olyan növény is található közöttük, amelynek felhasználásáról, összetételéről, biztonságosságáról egyáltalán nem állnak rendelkezésre ismeretek a tudományos szakirodalomban és szakkönyvekben.

A termékek makroszkópos vizsgálata arra utalt, hogy a legtöbb esetben az elemzés középpontjában nem a növényi komponenseknek kell állniuk. A kapszulák tartalmában ugyanis esetenként szabad szemmel azonosítható fehér szemcsék voltak, a belőlük készített kivonat színe pedig több esetben színtelen vagy halvány-sárga volt – mindez arra engedett következtetni, hogy az adott termék nem, vagy csak nagyon kis mennyiségű növényi kivonatot tartalmaz.

Célul tűztük ki az étrend-kiegészítőkben található foszfodiészteráz-gátlók kimutatására alkalmas gyors, megbízható analitikai protokoll kidolgozását. A gyors szűrővizsgálatok elvégzését vékonyréteg-kromatográfia (TLC), a megbízható kvalitatív analízist GC-MS, a minőségi és mennyiségi méréseket HPLC-DAD módszer kifejlesztésével céloztuk. A három független módszer alkalmazásának előnye, hogy együttes elvégzésük fokozza a megbízhatóságot, és a mérések kiegészítik egymást (pl. a HPLC-DAD is lehetőséget ad kvalitatív elemzésre, a GC-MS pedig mennyiségi mérésre).

A TLC, HPLC-DAD és GC-MS vizsgálatokhoz a készítmények frakcionálás, tisztítás nélküli nyers kivonatát alkalmaztuk. 1 kapszula tartalmát 25 ml metanollal ultrahangos vízfürdőn szobahőmérsékleten 10 percig extrahálunk, majd a kivonatot 5 percig 4000 rpm-en centrifugáljuk. Referenciaként egy-egy Viagra (hatóanyag: szil-

denafil), Cialis (tadalafil) és Levitra (vardenafil) hasonló módon elkészített kivonatait használtuk.

A TLC vizsgálatot szilikagél 60 20×20 cm-es alumínium vékonyréteg-kromatográfiás lapon (Merck 105553), toluol-aceton-etanol-28% NH₃-oldat 70:50:10:3 futatóelegy alkalmazásával végeztük. A kifejlesztett lemezeket 254 és 366 nm-en, vanillin-kénsavval, illetve Dragendorff-reagenssel előhívva detektáltuk.

A HPLC-DAD vizsgálatot diódasoros detektorral ellátott Waters HPLC-rendszeren, Kinetex 2.6u C18 100A, 100×4,6 mm oszlopon, izokratikus elúcióval végeztük (mozgó fázis: A: NH₄HCO₃ 10 mM pH = 10,00±0,2; B: acetonitril; áramlási sebesség: 1 ml/min, A : B = 70 : 30).

A GC-MS vizsgálatot Agilent 5975C inert MSD tömegspektrométerrel csatolt Agilent 7890A GC gázkromatográfia, Agilent HP-5MS 30m×0,25 mm i.d., 0,25 µm kolonnán végeztük.

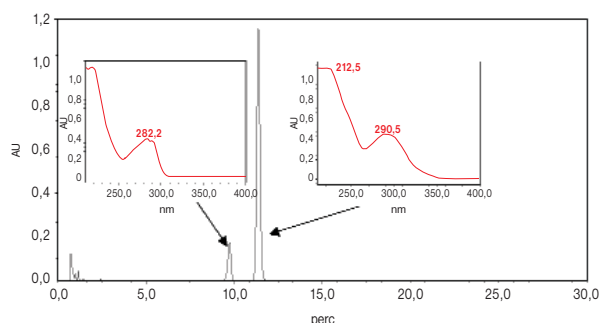
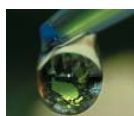
Az NMR-spektrumokat DMSO-ban, Bruker Avance DRX 500 spektrométerrel, 500 MHz (¹H) és 125 MHz (¹³C) térerőn vettük fel.

Eredmények

Bár számos készítmény összetevői között megtalálhatók föld feletti növényi részek, egyik termék vékonyréteg-kromatogramján sem volt észlelhető klorofilla jellemző, vörös színnel jelentkező komponens az UV-detektálás során. További megfigyelés, hogy néhány kivétellel nem volt detektálható a kromatogramon a termékek előállítására jellemzően felhasznált, összetett vízes-alkoholos növényi kivonatokra karakterisztikus komponensek jelenléte kénsavas előhívást követően. Mindez kétségeket támasztott azzal kapcsolatban, hogy az adott termékekben valóban jelen van-e a feltüntetett számos növényi komponens. A vizsgált termékek közül 4-ben volt kimutatható szildenafil és/vagy tadalafil; ezeket retenciós faktoruk és az UV-detektálás, előhívás során tapasztalt jellegzetes színük alapján azonosítottuk. Három készítményben (UP, Pote-Mix Bumm, Golden Night) egy további Dragendorff-pozitív, a szildenafilhoz hasonló, azonban attól eltérő retenciós faktorú anyagot észleltünk.

A HPLC-DAD vizsgálatok során a standard anyagok (szildenafil, tadalafil) és a kivonatokban detektálható vegyületek retenciós időinek és UV-spektrumainak összehasonlításával megerősítést nyert a szildenafil és/vagy tadalafil jelenléte a Dragon Power, Golden Night, Hard Night, Satibo készítményekben (2. ábra). Az ismeret-

* A nyilvántartásba vett, zöld pipával jelölt étrend-kiegészítők esetében a bejelentő által benyújtott dokumentumok, valamint a rendelkezésre álló, releváns tudományos információk, adatok alapján nem merültek fel olyan súlyos hibák az összetétellel, a termék várható hatásával, a jelöléssel és a címkén alkalmazott egészségre vonatkozó állításokkal kapcsolatban, amelyek alapján feltételezni lehetne, hogy a termék fogyasztása kockázatos lenne a fogyasztó egészsége szempontjából, valamint hogy a termék nem felel meg az étrend-kiegészítőkről szóló 37/2004. (IV. 26.) ESZCM rendelet, és a 1924/2006/EK rendelet előírásainak. (Forrás: <http://www.oeti.hu/?mlid=l8m2id=57>)



2. ábra. A Satibo termék HPLC-kromatogramja (254 nm) és a 9,5, valamint a 11,5 percnél eluálódó komponensek UV-spektruma (a két csúcs retenciós ideje és UV-spektruma megegyezik a tadalafiléval, illetve a szildenafiléval)

len, de TLC-kromatográfiás viselkedésük alapján foszfodiésterázgátló-analógnak vélt vegyületek közül az UP nevű termék esetén az UV-spektrum elemzése az acetildenafil [21] és nor-acetildenafil [30] spektrumával mutatott jó egyezést. A Sexperience esetén a HPLC-kromatogramon detektálható egyik fő csúcsot UV-spektruma alapján koffeinnek azonosítottunk.

A GC-MS vizsgálatok igazolták a TLC és HPLC-DAD módszerek alapján tett megállapítások helyességét, és további hasznos információkkal is szolgáltak. Az UP minta GC-kromatogramján a 21,904 percél eluálódó csúcs tömegspektruma jó egyezést mutatott a szakirodalomban nor-acetildenafilra közölt adatokkal [30], így a készítmény kivonatában található fő komponenst nor-acetildenafilként azonosítottuk. A Stamina Squared minta értékeléséhez a gázkromatogramot a johimbin fő tömegeinek megfelelően extraháltuk. A 13,372 percénél levő csúcs tömegspektrumát a johimbin tömegspektrumával összehasonlítva megállapítottuk, hogy a vegyület nagy valószínűséggel azonos a johimbinnel. A Pote-Mix Bumm szennyezésének meghatározásához a vegyület NMR-vizsgálatát terveztük. Ehhez a termék 1 kapszulájának tartalmát metanollal ultrahangos vízfürdőn szobahőmérsékleten extraháltuk, majd a kivonatot centrifugáltuk. A felülúszót bepároltuk, majd Sephadex LH-20 gélen végzett tisztítást követően sárgásfehér szilárd vegyületként nagy tisztaságban kinyertük a termékben található fő komponenst (26 mg), amelynek ezt követően felvettük ^1H - és JMOD NMR-spektrumát. A vegyület ^1H - és ^{13}C -NMR-spektrumadatai teljes egyezést mutattak az irodalomban már korábban potenciálfokozó növényi termékek hamisítására felhasznált anyagként leírt pszeudovardenafil (szinonim néven piperidenafil) adataival [31], ennek alapján a Pote-Mix Bumbban található fő kompo-

nenst pszeudovardenafilként azonosítottuk. A pszeudovardenafil a vardenafil analógja, amely a vardenafilban található *N*-etilpiperazin helyett piperidingyűrűt tartalmaz.

Vizsgálataink eredményeként 10 étrend-kiegészítő közül 6-ban szintetikus foszfodiésterázgátló, egy termékben nagy mennyiségű koffein, egy készítményben pedig johimbin jelenlétét mutattuk ki. Mindössze két étrend-kiegészítő esetén nem detektáltunk potenciálisan egészségre veszélyes (szintetikus) anyagot.

1. táblázat. Potenciálfokozó étrend-kiegészítők vizsgálatának eredménye

Név	Szintetikus foszfodiésterázgátlók és egyéb vegyületek kimutatása				Azonosított vegyület
	TLC	HPLC-DAD	GC-MS	NMR	
Dragon POWER gyógynövénytartalmú étrend-kiegészítő vitalitás kapszula	•	•	•		szildenafil
Golden Night növényi kivonatot tartalmazó étrend-kiegészítő kapszula	•	•	•		szildenafil, tadalafil, azonosítatlan foszfodiésterázgátló
Hard Night növényi kivonatot tartalmazó étrend-kiegészítő kapszula férfiaknak	•	•	•		szildenafil
POTE-MIX BUMM Növényi összetevőket tartalmazó étrend-kiegészítő kapszula férfiak részére	○	○	○	•	pszeudo-vardenafil
SATIBO ALTERNATIVE CAPSULE étrend-kiegészítő kapszula gyógynövénykivonatokkal	•	•	•		szildenafil, tadalafil
SEXPEARIENCE étrend-kiegészítő	–	–	*		koffein
Stamina Squared	–	–	†		johimbin
UP-növényi kivonatok és C-vitamint tartalmazó étrend-kiegészítő kapszula	○	○	•		nor-acetildenafil
Viamaximum növényi komponenseket tartalmazó étrend-kiegészítő	–	–	–		–
VIAPRO EXTRA növényi komponenseket tartalmazó étrend-kiegészítő	–	–	–		–

JELMAGYARÁZAT:

○ kimutatott foszfodiésterázgátló, • azonosított foszfodiésterázgátló, * azonosított koffein, † azonosított johimbin

Következmények

- Az étrend-kiegészítővel kapcsolatos jogi szabályozás gyengesége és az elérhető jelentős haszon következtében a nemzetközi szakirodalom tanúsága szerint viszonylag gyakran fordulnak elő a termékcsoporthal kapcsolatban szabálytalanságok, visszaélések, hamisítások.
- Az itt bemutatott vizsgálatban 10 növényi eredetűnek deklarált étrend-kiegészítőt (köztük 1 illegálisan forgalmazott készítményt) vizsgáltunk elsősorban a szintetikus potenciálfokozókkal végzett hamisítás kiszűrésére. A 10 termékből 6 esetben foszfodiésterázgátlóval történt hamisítást tapasztaltunk. A foszfodiésterázgátlókkal végzett hamisítás azért je-



lent kiemelt veszélyt, mert a hatóanyag-csoport alkalmazása egyes betegcsoportokban fokozhatja a szív-érrendszeri események kockázatát. Egy termék nagy mennyiségű, a csomagoláson fel nem tüntetett koffeint, egy pedig johimbint tartalmazott. Azt is megállapítottuk, hogy számos esetben a készítmények nem tartalmaztak kimutatható mennyiségű növényi anyagot/kivonatot.

- Az általunk kidolgozott négylépcsős vizsgálati stratégia alkalmas az étrend-kiegészítők foszfodiészteráz-gátló szennyezésének gyors és költséghatékony vizsgálatára. Az egymásra épülő, de egymástól független módszerek alkalmazása növeli a meghatározás megbízhatóságát és az eredmények hitelét.
- Az étrend-kiegészítők definíciója szerint a termékek az egészséges étrend kiegészítését szolgálják, gyógyhatással nem rendelkeznek. A gyógyszerhatóanyagokkal hamisított termékek egyik kitételnek sem felelnek meg. Alkalmazásuk során a gyógyszerhatóanyaggal kapcsolatos nemkívánatos hatások, kölcsönhatások, túladagolási tünetek jelentkezhetnek anélkül, hogy a kiváltó ok a fogyasztó és az egészségügyi szakember számára ismert lenne.
- Az interakciók, mellékhatások kialakulásának veszélyét rendkívüli mértékben fokozza, hogy a fogyasztó ártalmatlannak, növényi eredetűnek vélt termékeket fogyaszt, a farmakonokat szándékolatlanul, tudomásán kívül alkalmazza anélkül, hogy figyelembe venné az adott gyógyszer használatára érvényes idő- és dózissbeli korlátokat.
- A hamisított készítmények egy része igen jelentős mennyiségű szildenafilfil tartalmazott. Ezek önmagukban is nagy veszélyt jelentenek, ami még fokozottabb, ha a fogyasztó a számára már felírt gyógyszerkészítmények hatásának erősítésére használja. Ilyen esetben a hatásosságon kívül az egészségi kockázat is nagymértékben nő.
- A készítmények egy része a gyógyszerként forgalomban lévő vegyületek analógjait tartalmazza. Ezek az eredetire szerkezetileg nagymértékben hasonló vegyületek feltehetőleg szintén rendelkeznek potenciafokozó hatással, de hatás- és biztonságossági profiljuk ismeretlen.
- További kockázatot jelent, hogy a termékek a szintetikus hatóanyag illegális előállításánál során keletkező, kémiaiilag és hatását tekintve is ismeretlen anyagokat tartalmazhatnak.
- A hamisított étrend-kiegészítők nemcsak a fogyasztók egészségét veszélyeztetik,

hanem jelentős anyagi kárt okoznak a szintetikus foszfodiészteráz-gátlókat előállító gyógyszergyáraknak, a tisztességes, jó minőségű étrend-kiegészítőket forgalmazó cégeknek, és hosszú távon a termékcsoport és a gyógynövény-készítmények hitelvesztéséhez is vezethetnek.

- Vizsgálati eredményeink felhívják a figyelmet arra, hogy a hatályos jogi szabályozás nem garantálja, hogy a fogyasztóhoz csak megbízható termékek jussanak.
- Az étrend-kiegészítők kvalitatív és kvantitatív analízise elengedhetetlenül szükséges annak biztosítására, hogy csak jó minőségű termékek kerüljenek kereskedelmi forgalomba. Ez nemzeti és európai szinten is megoldatlan és sürgető feladat.
- A fel nem tüntetett, ismeretlen szerkezetű szintetikus vegyület növényi kivonatok is tartalmazó mátrixból történő kimutatása magas szintű szakmai és infrastrukturális háttérrel kíván meg. Megfontolást igényel, reális célkitűzés-e a több ezer étrend-kiegészítő (piacra kerülés előtti vagy azt követő szűrőpróbaszerű) analitikai vizsgálata, és kinek a feladata a gyógynövény/gyógyszer-analitikai felkészültséget feltételező analízisek elvégzése.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerzők köszönetet mondanak a vizsgálatok elvégzésének támogatásáért a Magyar Étrend-kiegészítő Gyártók és Forgalmazók Egyesületének.

IRODALOM

- [1] W. F. Huang, K. C. Wen, M. L. Hsiao, J. Clin. Pharmacol. (1997) 37, 344.
- [2] Y. Chen, L. Zhao, F. Lu, Y. Yu, Y. Chai, Y. Wu, Food Addit. Contam. Part A Chem. Anal. Control Expo. Risk Assess. (2009) 26, 595.
- [3] J. Vaysse, S. Balayssac, V. Gilard, D. Desoubdanne, M. Malet-Martino, R. Martino, Food Addit. Contam. Part A Chem. Anal. Control Expo. Risk Assess. (2010) 29, 1.
- [4] J. J. Ros, M. G. Pelders, P. A. De Smet, Pharm. World Sci. (1999) 21, 44.
- [5] S. Kechagias, S. Hägg, K. Lotfi, Lakartidningen. (2010) 107, 186.
- [6] <http://www.mri-kossuth.hu/hirek/sport-100411/az-ujabb-teszt-szerint-is-doppingolt-kiss-balazs-birkozo.html> (2010. május 20)
- [7] R. J. Maughan, J. Sports Sci. (2005) 23, 883.
- [8] B. Jasiurkowski, J. Raj, D. Wisinger, R. Carlson, L. Zou, A. Nadir, Am. J. Gastroenterol. (2006) 101, 2659.
- [9] W. T. Poon, S. W. Ng, C. K. Lai, Y. W. Chan, W. L. Mak, Clin. Toxicol. (Phila). (2008) 46, 290.
- [10] S. H. Kim, J. Lee, T. Yoon, J. Choi, D. Choi, D. Kim, S. W. Kwon, Biomed. Chromatogr. (2009) 23, 1259.
- [11] J. Vaysse, S. Balayssac, V. Gilard, D. Desoubdanne, M. Malet-Martino, R. Martino, Food Addit. Contam. Part A Chem. Anal. Control Expo. Risk Assess. (2010) 29, 1.
- [12] C. Corns, K. Metcalfe, J. R. Soc. Promot. Health. (2002) 122, 213.
- [13] M. Wierowski, K. Galer-Tatarowicz, L. Nowak-Banasik, J. Rutkowska, G. Kucubyma, W. Waldman, Z. Chodorowski, Z. Jankowski, J. Sein Anand, Przegl. Lek. (2007) 64, 268.
- [14] J. Wang, B. Chen, S. Yao, Food Addit. Contam. Part A Chem. Anal. Control Expo. Risk Assess. (2008) 25, 822.
- [15] R. N. Kulambil Padinjakara, K. Ashawesh, S. Butt, R. Nair, V. Patel, Exp. Clin. Endocrinol. Diabetes. (2009) 117, 3.

- [16] E. Wooltorton, CMAJ. (2002) 166, 1568.
- [17] L. Blok-Tip, B. Zomer, F. Bakker, K. D. Hartog, M. Hamzink, J. Ten Hove, M. Vredendregt, D. De Kaste D, Food Addit. Contam. (2004) 21, 737.
- [18] S. S. Oh, P. Zou, M. Y. Low, H. L. Koh, J. Toxicol. Environ. Health A. (2006) 69, 1951.
- [19] A. A. Savaliya, R. P. Shah, B. Prasad, S. Singh, J. Pharm. Biomed. Anal. (2010) 52, 406.
- [20] J. C. Reepmeyer, J. T. Woodruff, D. A. d'Avignon, J. Pharm. Biomed. Anal. (2007) 43, 1615.
- [21] J. C. Reepmeyer, J. T. Woodruff, J. Pharm. Biomed. Anal. (2007) 44, 887.
- [22] B. J. Venhuis, G. Zomer, D. de Kaste, J. Pharm. Biomed. Anal. (2008) 46, 814.
- [23] J. C. Reepmeyer, D. A. d'Avignon, J. Pharm. Biomed. Anal. (2009) 49, 145.
- [24] J. C. Reepmeyer, D. A. d'Avignon, J. AOAC Int. (2009) 92, 1336.
- [25] N. Fleshner, M. Harvey, H. Adomat, C. Wood, A. Eberding, K. Hersey, E. Guns, J. Urol. (2005) 174, 636.
- [26] J. C. Reepmeyer, J. T. Woodruff, J. Chromatogr. A. (2006) 1125, 67.
- [27] S. R. Gratz, C. L. Flurer, K. A. Wolnik, J. Pharm. Biomed. Anal. (2004) 36, 525.
- [28] C. M. Gryniowicz, J. C. Reepmeyer, J. E. Kauffman, L. E. Buhse, J. Pharm. Biomed. Anal. (2009) 49, 601.
- [29] S. Balayssac, S. Trefi, V. Gilard, M. Malet-Martino, R. Martino, M. A. Delsuc, J. Pharm. Biomed. Anal. (2009) 50, 602.
- [30] Instrumental Analysis Data of Illegal Compounds in Food (<http://www.kfda.go.kr/index.jsp>, 2010. június 16.)
- [31] H. J. Park, H. K. Jeong, M. I. Chang, M. H. Im, J. Y. Jeong, D. M. Choi, K. Park, M. K. Hong, J. Youm, S. B. Han, D. J. Kim, J. H. Park, S. W. Kwon, Food. Addit. Contam. (2007) 24, 122.

ÖSSZEFOGLALÁS

Csupor Dezső, Szekeres András, Tatsimo N. Simplicio Joel, Kecskeméti Anita, Vékes Erika, Veres Katalin, Sulyok Edvárd, Szendrei Kálmán és Hohmann Judit: **Szintetizálnak-e a növények Viagrát? Szintetikus hatóanyagokkal hamisított „növényi” étrend-kiegészítők**

Az étrend-kiegészítők száma az elmúlt években megközelítette a hétezeret. Bár az étrend-kiegészítők és a gyógyszerek között sok a hasonlóság a fogyasztó szempontjából, szakmai szempontból jelentősen különböznek. A fő eltérés az alkalmazás célja (a gyógyszerek gyógyításra, az étrend-kiegészítők a kiegyensúlyozott étrend kiegészítésére használhatók), de jelentős a különbség a termékcsoportok minőségével kapcsolatos garanciában is. Az étrend-kiegészítők gyártását és forgalmazását nem garantálják a gyógyszer szabályozáshoz hasonlóan szigorú törvények. Ennek következménye, hogy a piacon a jó minőségű készítmények mellett rossz minőségű és hamisított termékek is jelen vannak. A hamisítás egyik módja a szintetikus gyógyszerhatóanyagok felhasználása a hatás fokozására. Vizsgálatunkban potenciafokozóként (vagy ezt a hatást sugallva) reklámozott étrend-kiegészítőket vontunk kémiai elemzés alá. A cikkben bemutatjuk a foszfodiészteráz-gátlók növényi mátrixból történő kimutatásának stratégiáját, amely alkalmas a hamisított termékek gyors és megbízható azonosítására.



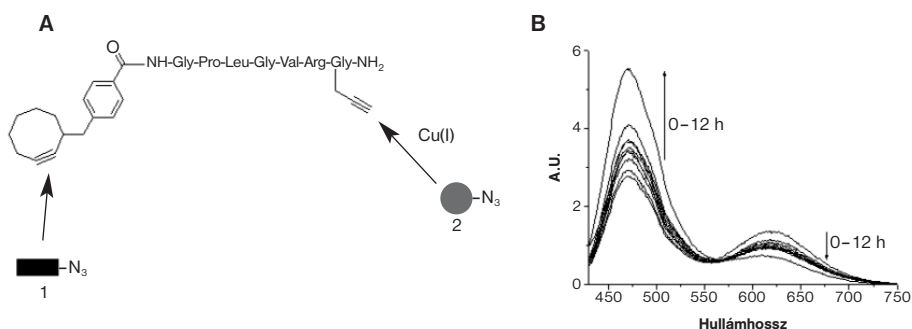
Bruckner-termi előadások

Kele Péter

■ ELTE Kémiai Intézet

(Bio)ortogonális jelölésre alkalmas fluoreszcens vegyületek

A kémiai biológiai kutatások egyik fő iránya az élő szervezetekben jelen levő biomolekulák kisméretű, szintetikus vegyületekkel való módosítása. Ezen módosítások célja a bioszenzorikai fejlesztésektől a szervezetekben lejátszódó folyamatok megértésére irányuló kutatásokig bezárólag igen sokrétű lehet. Ez utóbbi terület egyik fontos alkalmazása az érdeklődés középpontjában álló biomolekulák fluoreszcens jelzéssel való módosítása. A fluoreszcenciával történő detektálás ugyanis rendkívüli érzékenysége mellett igen jó tér- és időbeli felbontóképeséggel jellemezhető. Az érzékeny és viszonylag olcsó detektálás miatt a képalkotó módszerek előszeretettel alkalmaznak fluoreszcens jelzővegyületeket mind *in vivo*, mind *in vitro* kísérletekben. A jelzővegyületek természete alapján elkülöníthetjük a fehérjék jelzésében igen széles körben alkalmazott fluoreszcens fehérjéket és az alkalmazhatósági területüket tekintve jóval szélesebb körben felhasználható mesterséges fluoroforok csoportját. Ezen mesterséges jelkibocsátó kismolekulák bevitelére a célvegyületbe célszerű, ha ún. *bioortogonális* úton történik. A bioortogonalitás elve alapján a felhasznált reagensek biokompatibilisek, a módosítás (ligáció) során alkalmazott reakciótípusok pedig olyan szervezetidegen funkciók csoportokkal való manipulálást jelentenek, amely lehetővé teszi a biomolekulákban jelen levő számos funkciók csoport mellett is a specifikus, kvázi-kvantitatív módon és gyorsan lejátszódó reakciót. [1] Ilyen reakciótípus például a) az olefin és tetrazolok közötti fotoindukált cikloaddíció, [2] b) az azidok és foszfinszármazékok közötti Staudinger-ligáció, [2] c) az



2. ábra. Egymás utáni klikk-reakcióval kettősen jelzett enzimszubsztrát (A), valamint az enzim hatására bekövetkező változások (B)

azidok és terminális acetilének közti, Cu(I)-ionok által katalizált cikloaddíció (a leggyakrabban klikk-reakciónak nevezett reakció), [3] d) a ciklooktinok és azidok közötti gyűrűfeszültség által hajtott cikloaddíció [4] és e) a tetrazinok és olefinek inverz elektronigényű Diels–Alder-reakciója. [2] A bioortogonális modulok közül a módosítani kívánt biomolekula, illetve az alkalmazott fluoreszcens jelzővegyület mellett kulcsfontosságú az úgynevezett *kémiai hírvivő*. E vegyület, melyet többféle módon is a célmolekulához kapcsolhatunk (metabolizmus, géntechnológia, kémiai reakció) olyan bioortogonális funkcióval rendelkezik, amely a továbbiakban egy komplementer funkciók csoporttal rendelkező jelzővegyülettel módosítható.

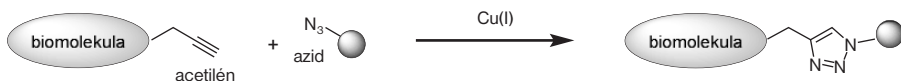
Munkánk első részében előállítottunk egy olyan azid, (ciklo)alkin funkcióval rendelkező fluoreszcens jelzővegyület-készletet, amelynek emissziós spektruma az egész látható (kék-zöld-sárga-narancs-vörös) és közeli infravörös tartományt lefedi. [5] Amint ezt modellkísérletekben igazoltuk, ez a jelzővegyület-készlet alkalmas azidok

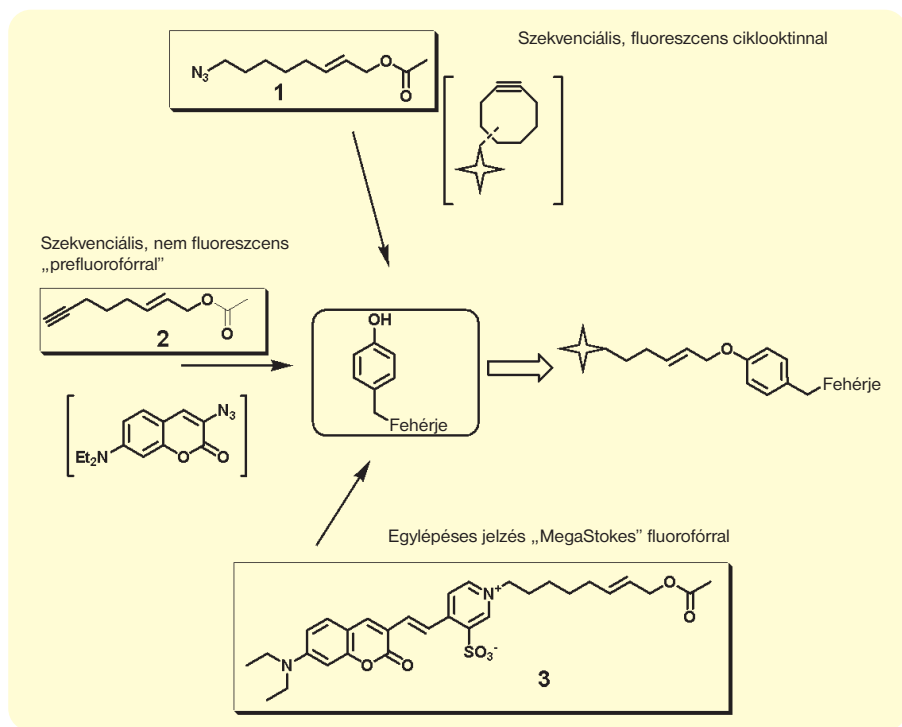
és alkinok közötti Cu(I)-ionok, vagy gyűrűfeszültség által hajtott cikloaddíciós reakcióban a megfelelő kémiai hírvivővel módosított biomolekulák fluoreszcens módosítására (1. ábra). Ugyancsak teszteltük vegyületeink alkalmazhatóságát sejtek sejt-felületi glikoproteidjeinek *in vivo* és *in vitro* jelzésében. [5]

Vizsgáltuk azt is, hogy megfelelően megválasztott kémiai hírvivők segítségével lehetséges-e biomolekulák többszörös jelzése. Kísérleteink során a terminális acetilének és a ciklooktinok azidokkal szembeni reaktivitásában rejlő különbséget használtuk ki. Modellvegyületeinket előzetesen ciklooktin, illetve terminális acetilént tartalmazó kémiai hírvivőkkel módosítottuk, majd először gyűrűfeszültség által hajtott, ezt követően pedig Cu(I)-ionok által katalizált reakcióban egy-egy jelzővegyülettel módosítottuk azokat (2. ábra). [6]

A módszer alkalmazhatóságát vizsgáltuk peptideken, nanorészecskéken [7] és fehérje modellrendszeren is. [6] Ezen kettős jel bevitelére alkalmas festési módszer különösen alkalmas például energiatranszfer-rendszerek kiépítésére, így kísérleteinkben is olyan fluoreszcens jelzővegyület-párosokat használtunk fel, melyek alkalmasak ilyen energiatranszfer-rendszerek előállítására.

1. ábra. Rézionnal katalizált acetilén-azid reakció biomolekulák fluoreszcens jelölésére





3. ábra. Bifunkciós kémiai hírvivők

Kutatásaink során tirozin szelektív kémiai módosítását lehetővé tevő bifunkciós kémiai hírvivők előállításával is foglalkoztunk. Ezen vegyületek mind tartalmaznak a palládium jelenlétében a Tyr fenolos –OH-jával reakcióba lépő allil-acetát mo-

tívumot, [8] mind pedig a későbbi, klikk-reakcióval fluoreszcens jel bevitelére alkalmas azid (1)/terminális acetilén (2) funkciós csoportot (3. ábra).

Ugyancsak előállítottunk olyan Tyr-specifikus jelzővegyületet, amelyik ún. mega-

Stokes típusú (a gerjesztési és emissziós maximum közötti különbség több, mint 100 nm) fluorofórt tartalmaz, ami a közeli IR-tartományban fluoreszkál. Ezeknek a kémiai hírvivőknek az alkalmazásával lehetőség nyílik Tyr-tartalmú fehérjék jelzésére akár két egymást követő lépésben szekvenciálisan, akár egy lépésben, közvetlenül.

IRODALOM

- [1] J. A. Prescher, C. R. Bertozzi, *Nature Chem. Biol.* (2005) 1, 13–21.
- [2] C. R. Becer, R. Hoogenboom, U. S. Schubert, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2009) 48, 4900–4908. (az említett reakciókról összefoglaló cikk)
- [3] (a) V. V. Rostovtsev, L. G. Green, V. V. Fokin, K. B. Sharpless, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2002) 41, 2596–2599; (b) C. W. Tornøe, C. Christensen, M. Meldal, *Journal of Organic Chemistry* (2002) 67, 3057–3064.
- [4] (a) N. J. Agard, J. A. Prescher, C. R. Bertozzi, *J. Am. Chem. Soc.* (2004) 126, 15046–15047; (b) N. J. Agard, J. M. Baskin, J. A. Prescher, A. Lo, C. R. Bertozzi, *ACS Chem. Biol.* (2006) 1, 644–648; (c) J. M. Baskin, J. A. Prescher, S. T. Laughlin, N. J. Agard, P. V. Chang, I. A. Miller, A. Lo, J. A. Codelli, C. R. Bertozzi, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* (2007) 104, 16793–16797.
- [5] (a) P. Kele, X. Li, M. Link, K. Nagy, A. Herner, K. Lőrincz, Sz. Béni, O. S. Wolfbeis, *Org. Biomol. Chem.* (2009) 7, 3486; (b) K. Nagy, E. Orbán, Sz. Bősze, P. Kele, *Chem. Asian J.* (2010), 5, 773–777; (c) T. Ehrenschwender, B. R. Varga, P. Kele, H.-A. Wagenknecht, *Chem. Asian J.* (2010) 8, 1761–1764.
- [6] (a) P. Kele, G. Mező, D. E. Achatz, O. S. Wolfbeis, *Angew. Chem. Int. Ed.* (2009) 48, 344–347.
- [7] D. E. Achatz, G. Mező, P. Kele, O. S. Wolfbeis, *ChemBioChem* (2009) 10, 2316–2320.
- [8] S. D. Tilley, M. B. Francis, *J. Am. Chem. Soc.* (2006) 128, 1080–1081.

Pham Truong Son–Gönczi Katalin–Czirok János Balázs–Mátravölgyi Béla–Sólyom Szabolcs

■ BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék, MTA–BME Szerves Kémiai Technológiai Kutatócsoport

Új királis katalizátorok alkalmazása aminofoszfonsavak sztereoselektív szintézisében

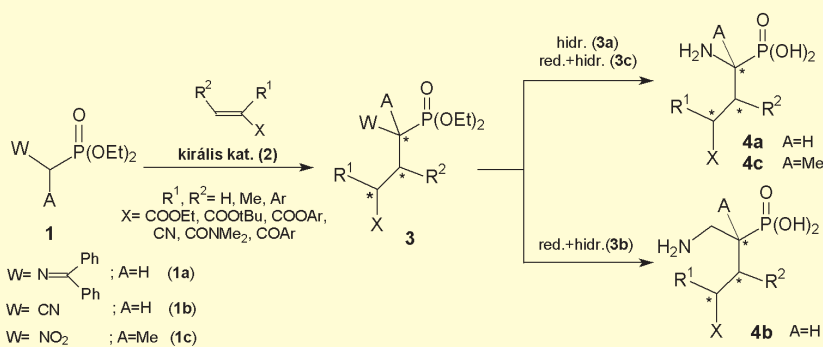
Az aminofoszfonsavak az aminosavak foszfor-analagonjainak tekinthetők, ezért mind önmagukban, mind peptidláncba építve számos biológiai felhasználási területtel rendelkeznek [1]. A foszfonsavakban azonban a foszforatom térbeli elrendezése tetraédres, szemben a karbonilcsoport planáris elrendezésével, hasonló viszont az észterkötés, illetve a savamidkötés keletkezésekor, illetve hidrolízisekor fellépő tetraédres átmeneti állapothoz. Ezért hívják ezeket a vegyületeket „átmeneti állapot analagonoknak”. Nagy különbség van a foszfonsav- és a karbonsavcsoport, valamint az α -helyzetű CH savaságában is. Ezekből adódóan számos aminofoszfonsav, illetve aminofoszfonsavat

tartalmazó peptidszármazék inhibitora az észteráz és peptidáz enzimeknek. A gátolt enzimtől függően ismerünk vérnyomáscsökkentő [2a,b], az agyi funkciókat (emlékezetet) befolyásoló [2c], antibakteriális [2d], vagy éppen herbicidhatású [2e] aminofoszfonsav-származékokat.

Kutatócsoportunk célja az volt, hogy az irodalomban aminofoszfonsavak aszimmetrikus szintézisében még nem leírt új elvet alkalmazva, akirális kiindulási anyagokból királis katalizátorok jelenlétében alakítsunk ki szén-szén kötést. Modellvegyületként prokirális védett foszfoglicin-észtert (1a), cianometil-foszfónátot (1b) és racém nitrometil-foszfónátot (1c) alkalmaztunk. Ezen vegyületek α -helyzetű szén-

atomjára bázis jelenlétében Michael-akceptorokat addicionáltattunk királis katalizátorok (2) jelenlétében. A 3 adduktokból hidrolízissel (3a- és 3b-ből), illetve redukcióval és azt követő hidrolízissel (3c-ből) enantiomertisztta, illetve egyik enantiomerben gazdagabb, új szubsztituált α - (4a és 4c) és β -aminofoszfonsavak (4b) nyerhetők (1. ábra).

A Michael-addícióban az aszimmetrikus indukciót három különböző elven működő katalizátorcsaláddal: királis diolokkal (2a–c), királis aza-koronaéterekkel (2d, e) és bifunkciós organokatalizátorokkal (2f–h) hoztuk létre. A katalizátorokban a kiralitást hordozó csoport egyrészt a természetben előforduló L-borkósav (és az abból



1. ábra. α - és β -aminofoszonsavak előállítása katalitikus aszimmetrikus Michael-addícióval és azt követő hidrolizissal

előállítható *R,R*-TADDOL), a D-glukóz és a cinkona alkaloidok családjába tartozó kinin, másrészt szintetikus atropizomerek, mint az N-fenil-pirrol-származékok és az R-binaftol volt (2. ábra).

a) α -Aminofoszfonátok előállítása védett foszfoglicinből (1a): A kiindulási anyag csekély CH-savassága (pK_a : 23) miatt a deprotonáláshoz erős bázis (NaO^tBu) szükséges. A képződő 1a anionja a királis diol-katalizátorok jelenlétében csak akril-észterekkel reagál jó/közepes szelektivitással. A legszelektívebb katalizátor a 3,4-dihidroxitetrahydrofuran-származék (2b) (enantio-merfelesleg (ee): 96%) volt, kevésbé szelektív volt a TADDOL (2a) (ee: 72%) és az N-fenil-pirrol-származék (2c) (ee: 58%). Ezekben a kísérletekben a legjobb Michael-akceptor a 'butil-akrilát volt [3]. A bemutatott koronaéterek mindegyik Michael-akceptor reakcióját támogatják, de jó diasztereo- és enantioszelektivitás csak nit-

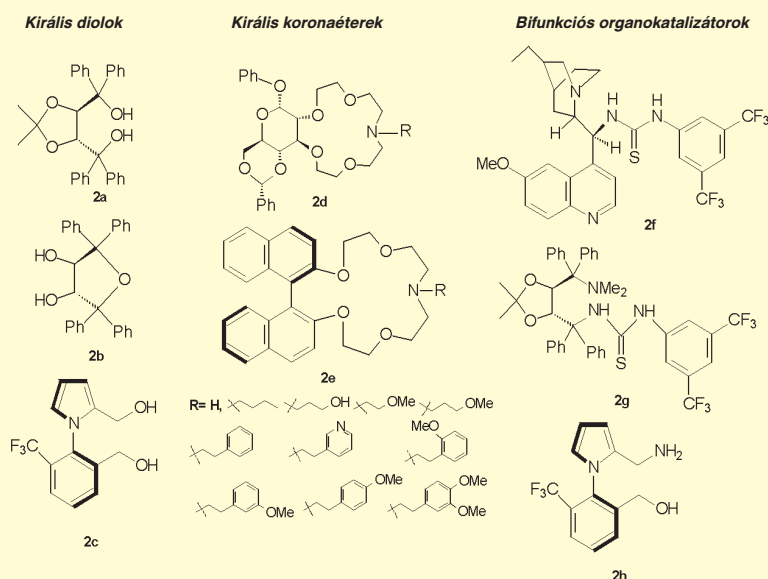
reilekkel érhető el (legjobb eredmény: 2d: R=2-MeO-fenilet, akril-nitrillel: ee: 75%, metakril-nitrillel: diasztereomer arány (da): 86/14, ee: 86/60; 2e: R=3,4-dimetoxi-fenilet, akril-nitrillel: ee: 95%, metakril-nitrillel: da: 99/1, ee: 96/46, fahéj-nitrillel: da: 89/11, ee: 71/38) [4]. Számos koronaéter szelektivitásának vizsgálata után az a következtetés vonható le, hogy a szelektivitást elsősorban a koronaéter oldalkarjának hosszúsága és a lánc végén lévő csoportok jellege határozza meg. Azt tapasztaltuk, hogy a gyűrű N-atomjától 5–6 szénatom távolságra lévő metoxicsoprot a legkedvezőbb – feltehetően azért, mert a kar ezekben az esetekben visszahajlik a koronaéter „főle” és az oxigénatom stabilizálni tudja a komplexet. Azonos oldallánc esetében a D-glukóz- és a binolalapú koronaéter által kifejtett királis indukció csaknem megegyezik.

b) β -Aminofoszfonátok előállítása cianometil-foszfonátból (1b): Ennek a mo-

dellvegyületnek a reakcióit mind a TADDOL, mind a koronaéterek katalizálták, de TADDOL esetében csak diasztereoselektivitást, koronaéterek esetében sem diasztereoselektivitást, sem enantioszelektivitást nem tapasztaltunk. A kiindulási vegyület CH-savassága (pK_a : 17) azonban lehetővé teszi, hogy a gyengébb bázicitással bíró bifunkciós organokatalizátorok jelenlétében hajtsuk végre a Michael-addíciót. A cinkona-alkaloid család tesztelése során azt tapasztaltuk, hogy a legjobb eredmény benzilidén-acetofenonokra (kalkonokra) történő addícióban a kininalapú tiokarbamid-katalizátorral (2f) érhető el. Ez a vegyület a kinin nagy térkitöltésének, a nitrogénatom bázicitásának és a savamidprotonok savasságának köszönhetően egyre több Michael-addícióban bizonyul kiváló katalizátornak [5]. Érdekes, hogy az általunk vizsgált modellreakciókban a diasztereoselektivitás igen gyenge (da: 55/45), az enantioszelektivitás azonban jó (ee: 85/85). Az eredményeken sikerült javítani a kutatócsoportban közelmúltban szintetizált TADDOL-alapú tiokarbamid-katalizátorral (2g), amely ugyanebben a Michael-addícióban kiváló diasztereoselektivitás mellett (da: 94/1) igen magas enantio-merfeleslegű produkált (ee: 91%).

c) α -Amino- α -metil-foszfonátok előállítása α -nitro-etilfoszfonátból (1c): A nitrocsoprot elektronszívó hatása következtében (pK_a : 12) 1c gyenge bázisokkal deprotonálható, így várakozásunknak megfelelően ezekben a Michael-addíciókban is az organokatalizátorok bizonyultak a leg-sikeresebbeknek. Jó enantioszelektivitást aril-akrilátok addíciójában (Ar: 4-MeOPh, ee: 90%) 2f cinkonaalapú katalizátorral sikerült elérni. Az N-fenil-pirrol-származék (2h) közepes királis indukciót eredményezett (ee: 58%), míg a 2g TADDOL-származék nem katalizálta a reakciót.

2. ábra. A Michael-addícióban alkalmazott királis katalizátorok



IRODALOM

- [1] P. Kafarski, B. Lejczak, Phosphorus, Sulfur Silicon Relat. Elem. (1991) 63, 193–215.
- [2] a) M. C. Allen, W. Fuhrer, B. Tuck, R. Wade, J. M. Wood, J. Med. Chem. (1989) 32, 1652–1661. b) R. Rozenfeld, X. Iturrioz, M. Okada, B. Maigret, C. Llorens-Cortes, Biochemistry (2003) 42, 14785–14793. c) B. Aebischer, P. Frey, H. Haerter, P. L. Herrling, W. Mueller, H. J. Olverman, J. C. Watkins, Helv. Chim. Acta (1989) 72, 1043–1051. d) F. R. Atherton, C. H. Hassall, R. W. Lambert, J. Med. Chem. (1986) 29, 29–40. e) E. Grossbard, D. Atkinson, (Eds.): The Herbicide Glyphosate, Butterworth, London, 1985.
- [3] Jászay Zs., Németh G., Pham T. S., Petneháza I., Grűn A., Tőke L., Tetrahedron: Asymmetry (2005) 16, 3837–3840.
- [4] Jászay Zs., Pham T. S., Németh G., Bakó P., Petneháza I., Tőke L., Synlett (2009) 1429–1432.
- [5] Vakulya B., Varga Sz., Csámpai A., Soós T., Organic letters (2005) 7, 1967–1969.
- [6] Pham T. S., Balázs L., Petneháza I., Jászay Zs., Tetrahedron: Asymmetry (2010) 21, 346–351.



EuCheMS

NEWSLETTER

February 2011

General Assembly 2010 in Bled



From left: Franco De Angelis (EuCheMS Treasurer), Evelyn McEwan (EuCheMS General Secretary), Luis Oro (EuCheMS President), Nicole Moreau (IUPAC President), Long Lu (General Secretary of the Federation of Asian Chemical Societies).

Luis Oro, EuCheMS President, chaired the EuCheMS General Assembly hosted by the Slovenian Chemical Society in Bled, Slovenia, on 14 to 15 October. The 60 participants included the Presidents and other representatives of EuCheMS member societies, the Chairs of the EuCheMS Divisions and Working Parties and representatives of Associated Organisations and sister federations. Guests included Long Lu, General Secretary of the Federation of Asian Chemical Societies, Nicole Moreau, President of IUPAC, Henryk Koroniak, President of ECTN, Ger Spork from CERIC and Johanna Kowol-Santen from ERA-Chemistry, all of whom gave interesting presentations on current and future activities.

Luis Oro drew attention to the significant EuCheMS achievements during the year, in addressing the vision of being a single voice for chemical and molecular sciences in Europe presenting chemistry as an essential and indispensable provider of solutions to global challenges. He reported on the success of EuCheMS strategic objectives

- to enhance communication and recognition through the launch of the European Sustainable Chemistry Award and the opportunities presented by the International Year of Chemistry 2011,
- to promote effective partnerships, including working with the European Physical Society to co-organise the first European Energy Conference,

- to encourage professional development and networking, supporting the European Young Chemist Network activities,
- to build a sustainable policy development activity and influence European Commission activity with the help of Catherine Feore, EuCheMS Policy Development Manager,
- to strengthen the EuCheMS science base through another very successful EuCheMS Chemistry Congress and 27 sponsored events,
- to improve decision making in governance and finance through the re-constituted Executive Board.

Topical issues were debated:

- International Year of Chemistry 2011, led by David Phillips and Livia Sarkadi
- EU research funding, led by Henryk Koroniak and Catherine Feore
- EuCheMS Congresses, led by Wolfram Koch and Herbert Ipser
- Communication among EuCheMS member societies, led by Richard Pike and Helena Grennberg

At the end of the meeting Giovanni Natile, Societa Chimica Italiana, retired as Immediate Past President and Ulrich Schubert, Gesellschaft Österreichischer Chemiker, was welcomed as the new President Elect.

Evelyn McEwan, McEwanE@rsc.org

Ulrich Schubert is new President Elect of EuCheMS

Ulrich Schubert will succeed Luis Oro as President of EuCheMS in October 2011, following a vote by the EuCheMS General Assembly in Bled, Slovenia. Ulrich Schubert has served the scientific community as Vice President of the Gesellschaft Österreichischer Chemiker (GÖCH, Austrian Chemical Society) from 1998 to 2000 and as President from 2000 to 2004. During this period he initiated the first Austrian Chemistry Week. He is the head of the National Adhering Organisation of IUPAC in Austria. In recent years, he served in several review and evaluation panels of the EU, European Research Council, ERA-Chemistry and several European countries. He is currently a member of the Executive Board of the Austrian Science Funds (FWF), the Senate of the Austrian Christian Doppler Research Society (CDG) and the decision committee of the German Excellence Initiative.

Ulrich Schubert is Professor of Inorganic Chemistry at the Materials Chemistry Institute of Vienna University of Technology. His research interests are focused on inorganic-organic hybrid materials, ranging from precursor chemistry to applications-related issues. He also has a strong background in silicon and organometallic chemistry. He has supervised about 75 PhD students with eleven different nationalities; the scientific results of the group are documented in more than 450 articles, including several seminal reviews, and some books. He is member of the Austrian Academy of Sciences and the German Academy Leopoldina.

Further information at http://info.tuwien.ac.at/inorganic/staff/pers_schubert_e.php.



Ulrich Schubert.



Giovanni Natile retires from EuCheMS Executive

The EuCheMS General Assembly 2010 in Slovenia acknowledged the contribution of Giovanni Natile, President Elect 2004/2005, President 2005 to 2008 and Immediate Past President until 2010. Giovanni Natile steered EuCheMS through the challenge of becoming a legal entity registered in Belgium and funded by its member societies. His Presidency marked a period during which EuCheMS gained recognition as a voice for chemical and molecular sciences.

Natile chaired the EuCheMS launch event at the European Parliament in 2006 bringing together representatives of the Parliament and the Commission with guests from the key European organisations involved in chemical sciences. With his support EuCheMS, having signed a declaration on sustainable development, played a prominent role in developing policy, holding meetings in Brussels to publicise reports on energy and sustainable water. Natile presided over the first two EuCheMS Congresses, building on the strengths of EuCheMS scientific Divisions. With his encouragement the Divisions broadened their scope to embrace organic and inorganic chemistry, sustainable chemistry and chemistry and energy. He supported the creation of the European Young Chemists Network and the launch of the European Young Chemist Award. He led EuCheMS in strengthening links with sister organisations, including CERIC and the European Physical Society. As Immediate Past President, he chaired the task group on governance which led to a more effective EuCheMS governance structure.

Evelyn McEwan, McEwanE@rsc.org

New Executive Board members

Four new members were appointed to the EuCheMS Executive Board: Livia Simon Sarkadi (Hungarian Chemical Society, Chair of the Division of Food Chemistry), Helena Grennberg (Swedish Chemical Society, Chair of the Division of Organometallic Chemistry), Sergio Facchetti (Consiglio Nazionale dei Chimici), Carlos Negro Álvarez (Asociación Nacional de Químicos de España).

eme

FP 7 evaluation: EuCheMS response

EuCheMS has submitted a response to the mid-term evaluation on the performance of the Seventh Framework Programme (FP7). The evaluation allows the Commission to make proposals for adaptation and changes in FP7. EuCheMS emphasised that in order to compete at a global level, the chemical sciences must be of the highest level. EuCheMS welcomed the Commission's recognition of the need for simplification and outlined three broad principles:

- Simplification must be allowed for the end users (industry, SMEs, researchers). Ideas such as 'lump sum' grants should be verified with potential end users before introducing them.
- EuCheMS strongly advocates a science-based, not a results-centred approach. The most inventive and cutting edge research is usually the most unpredictable and ultimately also the most enduring.
- A reduction in bureaucracy and a decision to take a trust-based and risk-tolerant approach is needed. The usual accounting and management principles and practi-

ces of the beneficiary should be accepted.

EuCheMS also called for greater harmonisation between different instruments, clearer terminology as well as simplified application and payment procedures. EuCheMS underlined the importance of supporting excellence in basic research and welcomed the creation of the European Research Council under FP7. However, more chemistry-related panels and more chemistry expertise involved in evaluation of proposals is needed.

A communication on FP8 is expected in February 2011, an official stakeholder consultation will be launched in March 2011, closing in June. The Financial Perspectives are expected mid-2011 with a full proposal for FP8 being launched in December 2011. The Brussels office will closely monitor all developments in FP8, EuCheMS partners can follow these developments through the Brussels News Updates. A full version of the EuCheMS response to the FP7 mid-term evaluation is available at www.euchems.org.

Catherine Feore

catherine.feore@chemistryeurope.eu

Young Investigator's workshop

The 2nd Young Investigator's workshop took place on 27 to 29 August at the Institute of Organic Chemistry of Regensburg University, Germany. This European network meeting was sponsored by the Organic Division of EuCheMS, and 28 young investigators from 17 different countries participated. The workshop was organised in eight sessions focused on different topics that spanned all areas of organic chemistry including bioorganic and medicinal chemistry, catalysis, natural products, oxidation and aspects of green chemistry, supramolecular chemistry and ligand design.

During this workshop it became clear that organic chemistry is a fascinating and continually rising area of research for young European scientists. The lectures presented showed that organic chemistry has an important role to play in combination with



Young chemists from 17 countries met in Regensburg.

computational and theoretical chemistry, biology and material science. The meeting provided an exceptional opportunity for young scientists to interact with each other, and exceeded their expectations.

The final evaluation was very positive. All participants acknowledged the financial support provided by the Organic Division of EuCheMS and the Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh, Liebig Vereinigung), and thank Sabine Amslinger and Kirsten Zeitler for the perfect organisation of the event.

Maria Manuel Marques

mmbmarques@dq.fct.unl.pt

Conference on women chemists

The contribution of women to the development of chemical science has always been significant since Marie Skłodowska Curie, as the first woman, was awarded the Nobel Prize for Chemistry in 1911. A EuCheMS Conference on women chemists and innovation organised by Livia Simon Sarkadi (Division on Food Chemistry) and Éva Vámos (Working Party on the History of Chemistry) was held in Hungary in October 2010 in connection with the International Year of Chemistry 2011. It aimed to overview the role of women chemists in Europe focusing on the Czech Republic, Hungary, Poland and Slovakia. It also celebrated the first doctoral diploma in chemistry issued to Laura Kovács in 1910 in Hungary.

The conference was supported by the Visegrád Fund, EuCheMS, MOL-TVK Hunga-

ry, L'Oréal Foundation for Women and Science and the publishing house Wiley VCH. More than 70 participants from eight countries from academe and industry gathered to give a historical overview and present recent results achieved by women with a special session to young scientists. Six presentations were selected to receive special awards from the best oral lectures and poster presentations in this special session.

During the conference, not only the past and the present were discussed but also it gave a unique opportunity to exchange scientific ideas, inspire new research, and establish new contacts for closer cooperation. In the round table discussion there was no doubt that this forum should be continued.

Agota Toth

atoth@chem.u-szeged.hu



Traditional celebration: The first graduates of the Euromaster "Measurement Science in Chemistry". (photo: JRC-IRMM)

First graduates of Euromaster in Measurement Science

In October 2010, the first group of 32 students received their European Diploma Supplements (EDS) linked to the Euromaster "Measurement Science in Chemistry" at the Joint Research Center's Institute for Reference Materials and Measurements (JRC-IRMM) in Geel, Belgium. Chemical and bio-analytical measurements set the foundations for critical decisions throughout society. Nevertheless, most students in Europe graduating in chemistry enter the job market lacking appropriate knowledge and competence about quality assurance in this area. For this reason the JRC-IRMM, whose mission it is to promote a common and reliable European measurement system in support of EU policies, has fostered since 2005 the creation of such a consortium. It is currently composed of nine universities located in seven European countries and new members may apply. It was awarded the Euromaster quality label in 2008 by the European Chemistry Thematic Network Association.

The consortium members also systematically exchange experience on how to improve the way they teach analytical sciences. Active learning and project based learning play an important role in this context especially during the student summer schools and during the "winter gathering" when lecturers meet.

The consortium contributes to invigorating and innovating analytical sciences in Europe. Any contributions are welcome.

Ewa Bulska, ebulska@chem.uw.edu.pl

Philip D. P. Taylor, Philip.taylor@ec.europa.eu

www.euromaster-msc.eu

Activities of the Division of Computational Chemistry

In 2010 the main event of the Division of Computational Chemistry (DCC) was the biennial meeting, the European Conference on Computational Chemistry (EUCCO-CC), which took place in Lund, Sweden, in August and attracted more than 170 participants from 24 countries. The conference as a tribute to the increasing importance of computational chemistry was co-organised with the Swedish Chemical Society and the University of Lund.

Only recently the Computational Chemistry Working Party has become the EuCheMS Division of Computational Chemistry (DCC). Gratitude goes to Gábor Naray-Szabó, Fernando Fernandes, Tore Brinck and other members, whose continuous effort to organise the computational chemistry community led to this acknowledgement by EuCheMS. By becoming a Division the possibility (and obligation) has now been offered to extend the activities to the full breadth of a formal branch of the European Society and to multiply its actions.

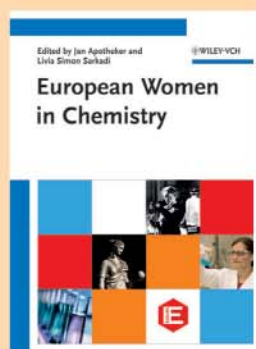
As a matter of fact, computational chemistry, like other computational disciplines, is nowadays prompted by the European

union, see for example the INFRA 2011 call, to develop a strategy aimed at implementing computing infrastructures and E-science environments dealing not only with scientific progress but also with its application to social and economical activities.

Taking first the field of education, a clear example of these activities is the case of the Eurolabels promoted by the European Chemistry Thematic Network Association. The establishment of a consortial Master in Theoretical Chemistry and Computational Modeling (TCCM) has been promoted and advocated by the DCC. The importance of this is underlined by the fact that the same Master, though in a form restricted to seven partners, has been awarded an Erasmus Mundus Grant and is in the process of being extended to the Doctoral level. Other initiatives being carried out by members of the ECTN association and relevant to the activities of the DCC are those addressed to the development of virtual campuses and electronic self assessment test in chemistry.

Antonio Lagana, Chairman DCC

lagana05@gmail.com



New book pays tribute to women in chemistry

A book on European women in chemistry is one of EuCheMS' contributions to the International Year of Chemistry (IYC) 2011. The aim of the book, published by Wiley VCH publishing house is to celebrate the role of women in chemistry and is a tribute to all European women in chemistry. The book is edited by Jan Apotheker (Royal Dutch Chemical Society) and Livia Simon Sarkadi (Hungary, EuCheMS Executive Board Member and Chair of Food Chemistry Division of EuCheMS).

The editorial panel comprised 14 writers proposed by the Working Party on the History of Chemistry and Presidents of EuCheMS Member Societies. The panel members were Brigitte Bischof (Austria), Brigitte van Tiggelen (Belgium), Pekka Pyykkö (Finland), Danielle Fauque (France), Sally Horrocks (UK), Maria Rentetzi (Greece), Renate Strohmeier, Katharina Al-Shamery and Annette Vogt (Germany), Éva Vámos (Hungary), Miriam Focaccia and Marco Ciardi (Italy), Marianne Offereins and Mineke Bosch (The Netherlands).

A series of 50 portraits of European female chemists active in many areas across the centuries have been produced following suggestions from Member Societies. These include Marie Skłodowska Curie, the first woman scientist to be awarded the Nobel Prize in 1911 (the centenary of this award being one of the reasons that 2011 was chosen for IYC). Nicole Moreau (IUPAC President) has written a preface to the book. The editors and publisher hope that all European chemists, male or female, young or not-so-young, will enjoy this important and exciting book.

Livia Simon Sarkadi, sarkadi@mail.bme.hu
 Ordering address: Wiley-VCH, Customer Service, Boschstr. 12, D-69469 Weinheim, E-Mail: service@wiley.com

Events

3 – 5 April 2011, Torun, Poland

Monitoring and analysis of water: Chromatographic methods for determination of ionic substances
www.chem.uni.torun.pl/~pinez/jon/jon2_eng.html

11 – 14 April 2011, Manchester, UK

EuCheMS Inorganic Chemistry Conference (EICC-1)
www.rsc.org/ConferencesAndEvents/RSCConferences/EICC1

28 – 30 April 2011, Modena, Italy

The Culture of Responsibility: Ethic, Chemistry and the Environment, www.mochim2011.unimore.it

1 – 6 May 2011, Brunnen, Switzerland

Burgenstock Conference
www.stereochemistry-burgenstock.ch

9 – 11 Mai 2011, Skanör-Falsterbo, Öresund, Sweden

Chemometrics' Epistemology in Systems Biology
www.systemsbiology.se

3 – 7 July 2011, Sussex, UK

6th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry, www.ISMSC2011.org

6 – 8 July 2011, Gdansk, Poland

Euro Food Chem XVI – Translating food chemistry to health benefits, www.eurofoodchemxvi.eu

10 – 15 July 2011, Crete, Greece

European Symposium of Organic Chemistry (ESOC 2011), www.esoc2011.com

31 August – 3 September 2011, Budapest, Hungary

4th European Conference on Chemistry for Life Sciences (4th ECCLS), www.4eccls.mke.org.hu

4 – 8 September 2011, Granada, Spain

5th EuCheMS Conference on Nitrogen Ligands
www.ugr.es/local/nligands

11 – 15 September 2011, Belgrade, Serbia

Euroanalysis XVI, www.euroanalysis2011.rs

4ECCLS in Budapest

The 4th European Conference on Chemistry for Life Sciences, a biennial EuCheMS Conference will be held between 31 August and 3 September 2011 at the Eötvös University in Budapest, Hungary. The scientific programme covers all aspects of chemistry in life sciences from artificial photosynthesis and bioinspired organocatalysis to bio-nanotechnology and metals in medicine. A tutorial course in biology will also be offered for non-specialists. *Agota Toth*
www.4eccls.mke.org.hu, 4eccls@mke.org.hu

Views on chemicals industry

EuCheMS has submitted its views on the implementation of the recommendations of the High Level Group on the European chemicals

industry. EuCheMS is uniquely positioned to provide insight, analysis, expertise and foresight in the creation of a roadmap, and help identify critical gaps in knowledge and research that are limiting technological progress. The EuCheMS submission also drew attention to the opportunities provided by the International Year of Chemistry and to the initiative European Sustainable Chemistry Award launched in 2010. www.euchems.org/News

IYC 2011 in Switzerland

The Swiss Chemical Society together with several partners has launched the Swiss website containing information about activities relevant to the International Year of Chemistry.

www.chemistry2011.ch

EuCheMS Newsletter



Newsletter coordinator: Karin Schmitz

Please send all correspondence and manuscripts to k.schmitz@gdch.de

Editors: Wolfram Koch (responsible), Uta Neubauer, Frankfurt am Main

Advisory board: Wolfram Koch (Chair, Germany), Luis Oro (Spain), Giovanni Natile (Italy), Evelyn McEwan (EuCheMS Secretariat), Marie-Claude Vitorge (France), Paola Turano (Italy), Viktor Milata (Slovakia).

Layout: Jürgen Bugler, Frankfurt am Main

Production: Nachrichten aus der Chemie

Publisher: Gesellschaft Deutscher Chemiker on behalf of EuCheMS

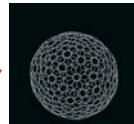
Postfach 900440, D-60444 Frankfurt am Main
euchems@gdch.de

EuCheMS General Secretary:

Evelyn McEwan, c/o RSC, Burlington House, Piccadilly, London W1J 0BA, UK
secretariat@euchems.org
www.euchems.org

EuCheMS is registered as "Association internationale sans but lucratif" (AISBL, international non-profit association)

AISBL-Registered office: Avenue E. Van Nieuwenhuysse 4, B-1160 Brussels



Braun Tibor

■ ELTE Kémiai Intézet

Európai Feltalálói Díj, 2010



WOLFGANG KRÄTSCHMER

Wolfgang Krätschmer és a fullerénkutatás járványszerű terjedése

Bevezetés

Az Európai Szabadalmi Hivatal (EPO: European Patent Office) az Európai Unió Bizottsága Vállalkozási és Ipari Főigazgatóságával közösen szabadalmi díjat létesített azok elismerésére, akik tevékenységükkel jelentősen hozzájárulnak az európai innovációs tevékenységhez. A díjakat négy kategóriában – ipar, kis- és közepes vállalkozások, Európán kívüli országok és életmű – osztják ki.

Az Európai Szabadalmi Hivatal évenként felkéri saját és más EPO-tagországok szabadalmi ügyvivőit és szakértőit, hogy jelöljenek feltalálókat és olyan szabadalmakat, amelyeket az EPO-nál szabadalmaztattak az utóbbi tíz évben, és jelentős hozzájárulást jelentettek az európai innovációs tevékenység fejlődéséhez. A 2009. és 2010. évi díjakra érdemes jelölésekhez a nemzetközi nagyközönséget is felkérték.

A jelöltekről rövidített lista készül, amit aztán nemzetközi zsűri elé terjesztenek. Első lépésként a zsűri három jelöltet választ minden kategóriából és ezután jelöli csak ki a díjazottakat. A díjak átadására rendkívül ünnepélyes körülmények között, az Európai Unió éppen elnöki feladatát ellátó ország fővárosában kerül sor.

Első alkalommal 2006. május 3-án adták át a díjakat a brüsszeli Autoworld múzeumban.

A 2010-beli díjat az életmű kategóriában Wolfgang Krätschmer asztrofizikusnak ítelték. A különlegesen elegáns eseményre 2010. április 28-án a madridi Eurostar Tower szállodában került sor, számos jelentős helyi és nemzetközi személyiség jelenlétében. A díjat a kitüntetett-

nek személyesen öccsellenciája Felipe herceg, spanyol trónörökös és neje, Leticia, Aszturia hercegnője adta át.

Életrajz és tevékenység

Wolfgang Krätschmer fizikát tanult Berlinben, majd 1971-ben PhD-címet szerzett a Heidelbergi Egyetemen a Max Planck Magfizikai Kutatóintézetben írt „Die anätzbaren Spuren Künstlich beschleunigter schwerer Ionen in Quartzglass” c. disszertációjával. Munkáját a Max Planck-intézetben tudományos főmunkatársként folytatta. 1977–78-ban Donald R. Huffmannal dolgozott az Arizonai, majd Roger F. Knake-vel a Stony Broke-i New York-i Állami Egyetemen. 1993-ban a Heidelbergi Egyetem tiszteletbeli egyetemi tanárává nevezte ki.

Kezdeti kutatásai a kozmikus sugarak vizsgálatára irányultak, egyúttal holdkőmintákat és meteoritokat is tanulmányozott. A hetvenes évek közepétől szilikátok, szénkód és víz-metán-jég keverékek spektroszkópiai vizsgálatát kezdeményezte annak érdekében, hogy jobban megértse a kozmikus ködök észlelt, de addig magyarázatlan infravörös abszorpcióit.

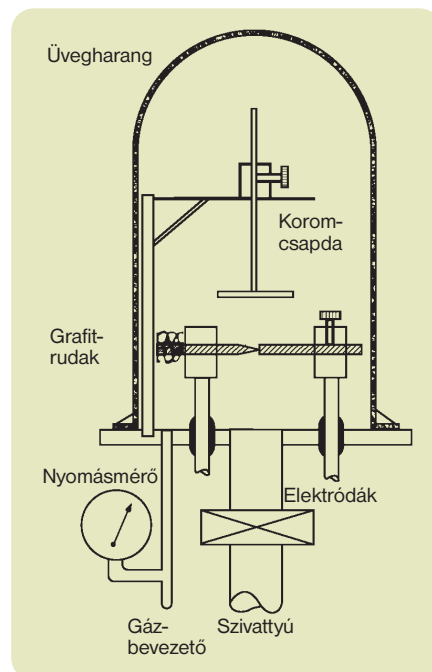
Kutatási területe mindmáig olyan 21 szénatomig terjedő kis szénmolekulák és oxidjaik infravörös spektrumainak tanulmányozása, amelyek csak nemesgáz közegben és nagyon alacsony hőmérsékleten stabilisak, és az úgynevezett „diffúz csillagközi sávok” értelmezésére is szolgálnak. Mindezek mellett részt vett az Európai Űrhivatal (ESA: European Space Agency) ISO infravörös űrteleszkópjához csatolt spektrométer kifejlesztésében.

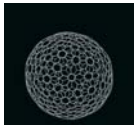
A kitüntetett teljesítmény

Wolfgang Krätschmer Donald Huffmannal és doktoranduszaival (L. D. Lamb és K. Fostiropoulos) a nyolcvanas évek végén megvalósította és kidolgozta a Max Planck Magfizikai Kutatóintézetben a fullerének makroszkopikus mennyiségű szintézisét egy általuk kifejlesztett és megépített készülékben.

Az 1. ábrán látható grafittelektrodákat Joule-hővel hevítettek 100 torr He-atmoszférában, és a grafitgőz kondenzálásával nyert kormot benzollal extrahálták. Az oldat színe a koncentrációtól függően a bor-

1. ábra. A Krätschmer–Huffman-féle fullerén-előállító berendezés [1]

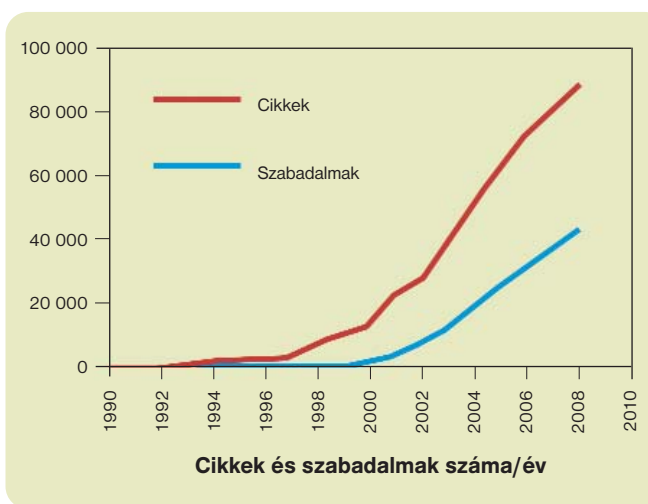




vöröstől a barnáig változott, beszáradása után áteső fényben vörösbarna, ráeső fényben fémesnek tűnő C_{60} - és körülbelül 5%-ban C_{70} -lemezek maradtak vissza. Tömegspektrometriás kísérletekkel megállapították, hogy az anyag túlnyomórészt C_{60} -ból áll, és még a következő fulleréneket tartalmazta: C_{70} , C_{58} , C_{56} , C_{54} , C_{52} . A C_{60} -nál kisebb tömegű molekulák a C_{60} fragmentációjából származtak. Röntgendiffrakcióval meghatározták a kristályok szerkezetét, valamint megmérték az IR-, UV- és látható tartományban mutatott spektrumukat. Az eredményeket összegző, viszonylag hosszú dolgozatot a *Nature* igen gyorsan közölte: a kézirat 1990. augusztus 7-én érkezett a szerkesztőségbe, szeptember 7-én fogadták el közlésre, és a szeptember 27-i számban jelent meg [1]. A *Nature* címlapján bemutatták a C_{60} -kristályokról készült mikroszkópos felvételt. Az említett eredmények publikálása előtt a fullerénket előállító, fent említett eljárást Krätschmer és Huffman szabadalmaztatta. Az azóta eltelt időszakban ez az eljárás képezte a fullerének ipari gyártásának jelentős részét. Az elhúzó jogi és egyéb adminisztratív okok következtében az európai és egyesült államokbeli szabadalmakat 1998-ban [2] és 2009-ben adták meg [3].

A makroszkopikus fullerénmennyiségekkel végzett kutatás járványszerű terjedése

Egy új tudományos felfedezés során az eredmények terjedése például a felfedezés témájával foglalkozó kutatók számának növekedésével követhető nyomon. Ha ezt a számot az idő függvényében ábrázoljuk, akkor általában S formájú görbét kapunk. Kezdetben a felfedezés alapötletének terjedése lassú, amit a görbén az alig emelkedő szakasz mutat. A gondolat későbbi gyors fejlődését egy meredeken emelkedő szakasz jellemzi, amely után végül egy „telítettség” periódus következik, amikor a felfedezés terjedése lelassul. A meredek terjedési szakaszt Goffman [4,5] a gondolatok „járványszerű” terjedési mechanizmusával értelmezte. Általában a járványok terjedését orvosi szempontból úgy jellemzik, hogy a fertőzhető állapotból a fertőzöttbe való átmenet szabályozza, a fertőző anyaggal való érintkezés következtében. Ez a folyamat Goffman szerint nemcsak a



2. ábra. A fulleréncikkek és -szabadalmak számának növekedése

fertőző betegségekre jellemző, hanem más folyamatokra, többek között az ötletek terjedésére is alkalmazható. Az egyetlen, ami ehhez szükséges, a folyamat összetevőinek megfelelő értelmezése, azaz annak meghatározása, hogy mit tekinthetünk fertőzhető, fertőzött és gyógyult populációnak, illetve mi a fertőzés hordozója, átvivője, mi a lappangás, mi maga a betegség stb. A népesség (kutatók) fogékony bizonyos ötletek befogadására, de ellenálló lehet más ötletekkel szemben. Miután valamely ötlet „megfertőzött” egyeseket, megnőnek az esélyek, hogy ők bizonyos idő elteltével másokat is megfertőzzenek. Ez a folyamat szellemi „járványt” eredményezhet. Annak érdekében, hogy a fullerénkutatás fejlődését elemezzük, 1992-ben megkíséreltük Goffman orvosi járványelméletét a fullerénkutatás esetére alkalmazni [6].

Kimutattuk, hogy 1989-ig tartó „lappangási idő” után a fullerénkutatás 1990-től valós fullerénkutatási (és -fejlesztési) „jár-

vány” kitörésének jellemző jegyeit viseli.

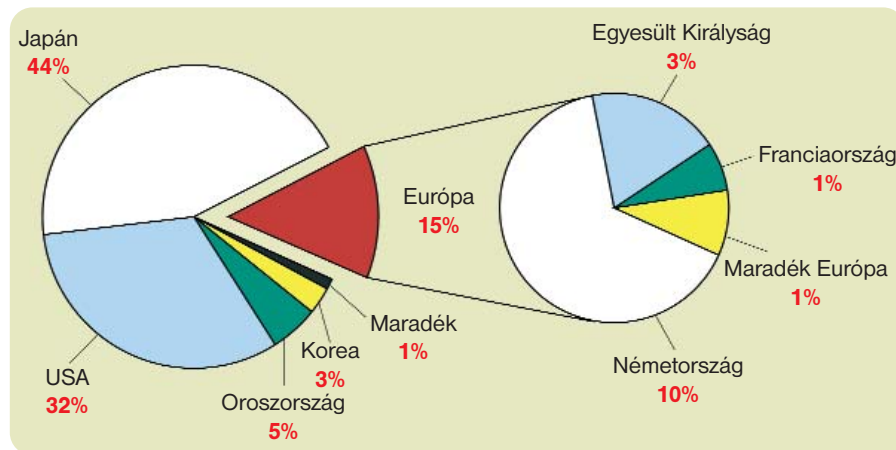
Annak eldöntése, hogy ki volt a járványszerű fullerénkutatási (és -fejlesztési) fertőzés terjedésének fő okozója, meglehetősen bonyolult. Valószínűnek látszik, hogy már a fullerénkutatást előkészítő szakaszban, 1984-től kezdődően szinergetikus kölcsönhatás állt fenn a főbb tényezők között. Mint köztudott, a C_{60} -at, azaz a „buckminsterfullerén”-t Kroto, Curl és Smalley fedezte fel [7] 1985-ben. Ez a vegyület, amelynek léte 1985-ben bizonyítást nyert, 1990-ig csak tömegspektrométeren mért testtelen jelként (spektrumként) volt bemutatható. Véleményünk szerint azonban

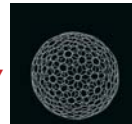
ban a kémiai szempontból tekintett fullerénjárvány és az azzal együtt járó alapkutatási tevékenység, valamint technológiai fejlesztések kitörésének időpontját a makroszkopikus mennyiségű szilárd C_{60} előállítását és jellemzését leíró Huffman-Krätschmer-szabadalom és -közlemény megjelenése rögzíti.

A Krätschmer-szabadalom által kiváltott gyakorlati alkalmazások

A fullerének makroszkopikus mennyiségekben való hozzáférhetősége a fullerénkel foglalkozó alapkutatási eredményeket leíró folyóiratcikkek számának jelentős növekedését mutatja. Ugyanez jellemző a fullerének alkalmazásával foglalkozó szabadalmak számának növekedésére is (2. ábra). A szabadalmakban tükröződő gyakorlati alkalmazással foglalkoztak „Quo vadis alkalmazott fullerénkémia?” és „Mire jók a fullerének? Szerény adalékok az

3. ábra. A világ országainak hozzájárulása a fullerén-szabadalmakhoz





alapkutatás haszna című örökzöld témához” című tanulmányaink is [8,9].

Talán nem meglepő, hogy a fullerének speciális tulajdonságai miatt az elektronikai szakterület áll a rangsor élén. Az egészségügyi alkalmazások viszonylag szerény száma bizonyos mértékben csalódást jelent, és ez részben a fullerének vízzoldhatatlanságának tudható be. Azonban ma már számos vízben oldható funkcionizált és szupramolekuláris gazda-vendég (host-guest) fullerénvegyületet állítottak elő, és nagyon valószínű, hogy ezek meg fogják találni az utat a közvetlen orvosi alkalmazásokhoz. A fullerének hasznosítása a felületkémiában, a biokémiában stb. szintén nagy valószínűséggel elvezethet az orvostudományi alkalmazáshoz. A vállalatok szabadalmaztatási és gyártási tevékenységében a legfontosabb érdeklődési területeket jól szemlélteti az 1. táblázat.

A fullerénpiac helyzete és lehetőségei

A fullerének és rokon termékeik világpiaci forgalma 2008-ig 30%-os évi növekedést mutatva elérte a 300 millió dollárt [10]. Ezután a piac a világválság következtében lelassult, de 2009 utolsó negyedében a félvezető-, elektronikai és energiapiaci igényeknek köszönhetően újfent élénkülni kezdett. Ezek képezik majd a főbb alkalmazási piacokat egészen 2015-ig, amikor a fullerénnanoanyagok becsült világpiaci forgalma eléri majd a 2912 millió dollárt. Jelenleg világszerte több mint 100 vállalat foglalkozik fulleréncentrikus termékek előállításával és forgalmazásával. A jelentősebbek: Arkema, Bayer, Showa Denko, NEC, Hyperson Catalysis, Mitsui, Nanocyl, Shezen Nanotech Port, Iljin Nanotech, Mitsui Chemical. Fontos alkalmazások várhatók többek között a repülőgépgyártásban és űriparban, az autóiiparban, az energiaiparban, a környezetvédelem és vízkezelés terén, a gyógyászatban, a hadiiparban, a műanyagiparban, a félvezetőiparban és elektronikában, a sporteszközök gyártásában és a telekommunikációban [10].

Jelentős fullerén körüli szabadalmi tevékenység folyik világszerte [11], mint a 2. és 3. ábra mutatja.

Utószó

A tudományozsziológia szakirodalma [12] új kifejezést kreált azok jelölésére, akik bár messzemenően méltók lettek volna a Nobel-díjra, mégsem kapták meg. Ők a „41.

Cég	Ország	Műszaki fókusz
1. sanofi-aventis	Francia/Német	Ipari fulleréngyártás
2. Hahn-Meitner Institut	Németország	Molekuláris elektronika, FET-ek, endohedrális fulleréngyártás
3. Asea Brown Boveri (ABB)	Svájc	Oszloptöltések elválasztásához magas konduktivitású kábelek, bevonatok, bomlásvédő szerves vegyületek
4. Centre national de la recherche scientifique (CNRS)	Franciaország	Nanokompozitok, gyémánszerű anyagok
5. Technische Universität Dresden	Németország	Szerves félvezető anyagok, szerves fotocellák, hőérzékelő NMR-anyagok
6. Cinvention	Németország	Biokompatibilis anyagok és felületek implantátumokhoz és gyógyszer-adagoláshoz, poros anyagok gáz-elválasztásához
7. Bosch	Németország	Hőálló kenőanyagok, tömítések gázszenzorokhoz
8. Commissariat à l'énergie atomique	Franciaország	Hőálló szinteranyagok, fotoaktív anyagok, funkcionizált felületek
9. Artur Fischer Werke	Németország	Polimer kompozitok
10. Koninklijke Philips Electronics	Hollandia	Fotocellák, fénykibocsátó diódák, gyémánszerű anyagok
11. L'Oréal	Franciaország	Hajkozmetikumok, make-up anyagok, napfényvédők
12. Bayer	Németország	Hidrogénző katalizátorok, katalitikusan aktív elektródok fűtőcellákhoz
13. BASF	Németország	Polimer kompozitok, termoplasztikus anyagok, merev poliuretánhabok
14. Patterning Technologies	Nagy-Britannia	Festőanyagok elektronikusan vezérelt nyomdagépekhez
15. Alcatel	Franciaország	Optikai szálak bevonata polimer kompozitokkal
16. Degussa	Németország	Oldószeralapú festékek, jet-festékek, xerox-festékek és bevonatok
17. Armines	Franciaország	Fullerének előállítása
18. Till Keesmann (Argus Holding)	Németország	Endohedrális fullerének előállítása
19. Fraunhofer-Gesellschaft	Németország	Rugalmas integrált áramkörű kártyák, elektromos polimer kompozitok

1. táblázat. Fullerénalapú szabadalmaztatott gyártásokban érdekelt európai vállalatok és intézmények

báronyszék” elfoglalói, szellemes utalással a francia akadémia tagságára, ahol közismerten csak a 40-re korlátozott számú „halhatatlan” foglalhatja el a báronyszékeket. A fulleréntudomány 41. báronyszékének egyaránt méltó jogosultjai vitathatatlanul Wolfgang Krätschmer és Donald Huffman.



IRODALOM

- [1] W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fastropoulos, D. R. Huffman, Nature (1990) 347, 336.
- [2] D. R. Huffman, W. Krätschmer, New form of carbon, patent EP 0 500 914 B1, 1998.

- [3] D. R. Huffman, W. Krätschmer, Form of carbon, US patent 7, 494, 638 B1, 2009.
- [4] W. Goffman, Nature (1964) 210, 786.
- [5] W. Goffman, Nature (1964) 204, 225.
- [6] T. Braun, Angew. Chem. Int. Ed. (1992) 31, 588.
- [7] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. E. Curl, R. E. Smalley, Nature (1985) 318, 162.
- [8] Braun Tibor, Magy. Kém. Lapja (2005) 63, 97.
- [9] Braun Tibor, Magyar Tudomány (1995) 40, 779.
- [10] R. Miller, http://www.reportlinker.com/p0189781/The-World-Market-for-Carbon-Nanotubes-Carbon-Nanofibers-Fullerenes-POSS-and-Graphene.html#utm_source=LivePR&utm_medium=pr&utm_campaign=LivePR
- [11] R. Mihalits, Chr. Kallinger, Y. Verbant, V. Veeffkind, S. R. Huebner, Nanotech. Law. Business (2008) 5, 85.
- [12] H. Zuckerman, The scientific elite, New York Free Press, 1977



TÚL A KÉMIÁN

Holovideó

A *Csillagok háborúja* sorozat rajongóinak már nem kell sokat várniuk arra, hogy élőben is hologram-mozgóképeket láthassanak, ugyanis nemrégiben elkészítették egy ilyen készülék prototípusát. A találmány lelke egy olyan kopolimer, amelynek fő összetevői a poliakril típusú alapváz tetrafenil-diaminobifenil és karbal-



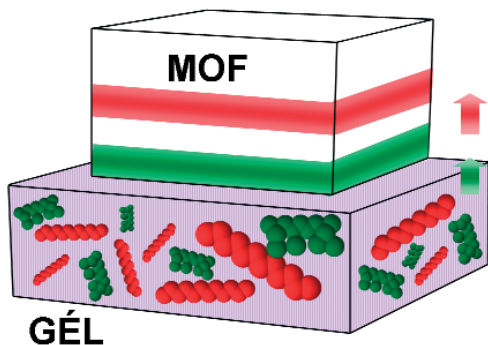
dehid-anilin oldallán-cokkal, a 9-etilkarbazol lágyító, a fluorozott dicianosztirol kromofór és a [6,6]-fenil- C_{61} -butánsav metil-észtere mint lézermimpulzus-érzékenyítő. Egy ilyen anyagból készült képernyő a teljes színskálát használó, minden szögből látható hologramokat képes megjeleníteni és frissíteni őket nagyjából 0,5 Hz frekvenciával, vagyis teljesítménye igen közel van a valódi mozgóképfelállításához. Az eszköznek a messzi-messzi galaxisokban élő lázadó hercegnők és kiöregedett Jedi-lovagok közötti kommunikáció elősegítésén túl adódnak földi felhasználásai is: a gyógyászatban például igen értékes segédeszköz lehet.

Nature 468, 80. (2010)

Nanokromatográfia

Minden bizonnyal a világ legkisebb kromatográfiaszlopát készítették el amerikai tudósok egy fémorganikus hálózat (MOF) segítségével. A szerkezet fémet tartalmazó része $Zn_4O(CO_2)_6$ klaszterekből áll, s ezeket egymással tereftálsav-láncok kötik össze. Ebből az anyagból milliméteres méretű egykristályokat lehet növesztetni, amelyeket szerves anyagból készített, dimetil-formamidban duzzasztott, két különböző fluoreszcens festéket is tartalmazó gél tetejére helyezve a festékmolekulák bejutnak a hálózat eléggé nagy méretű pórusaiba, és néhány száz mikrométer távolság alatt elválnak egymástól a két anyag eltérő szilárd fázisú diffúziósebességének hatására. A MOF szerkezet átlátszó, így a benne diffundáló molekulák detektálása sem jelent nehézséget.

J. Am. Chem. Soc. 132, 16358. (2010)



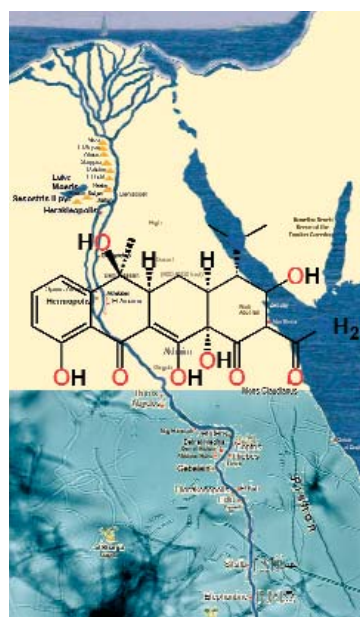
CENTENÁRIUM

L. W. Winkler: Schätzung des gelösten Sauerstoffs
Zeitschrift für Angewandte Chemie
Vol. 24, pp. 341–343 (1911. február 24.)

Winkler Lajos (1863–1939) magyar analitikus volt, nevét a vizes oldatok oldott oxigéntartalmának meghatározására doktori disszertációjában kidolgozott módszer tette nemzetközileg is ismertté. Negyvenhárom évig volt a Magyar Tudományos Akadémia tagja.

Sör egy sor betegség ellen

Régészek a közelmúltban igen meglepő megállapításra jutottak:



az i. sz. V. században Nubiában, a mai Szudán területén élt emberek csontvázaiban nagy mennyiséget mutattak ki a tetraciklin nevű antibiotikumból. Úgy tűnik, a korabeli „gyógyszeripar” a sört használta fel termékei népszerűsítésére és terjesztésére. A nubiak folyékony kenyerüket – a szakértők véleménye szerint tudatosan – olyan gabonából erjesztették, amely tetraciklint előállító, talajban élő *Streptomyces* baktériumfajokat tartalmazott. A felfedezések szerint az ókori Egyiptom és Jordánia területén más kultúrák is gyógy-

hatásának tartották a sört, a jelek szerint nem teljesen alaptalanul.

Am. J. Phys. Anthropol. 143, 151. (2010)



Trifluorszenoecetsav

Az egyszerű erős savak családjába újabb taggal gyarapodott a közelmúltban: egy nemzetközi kutatócsoportnak sikerült a már 1922 óta ismert trifluorecetsav szelénanalógját, a CF_3COSeH -molekulát előállítani. A kénanalóg (CF_3COSH) 1960 óta ismert, s a CF_3COOH -nál valamivel erősebb sav. A trifluorszenoecetsav szobahőmérsékleten szintelen folyadék, amely csak $-145\text{ }^\circ\text{C}$ -on fagy meg. Előállítására a CF_3COOH és a Woolins-reagens, vagyis $(C_6H_5)_2P_2Se_4$ közötti reakció bizonyult alkalmasnak. A CF_3COSeH a szerves kémia hasznos reagense lehet, mert fotolízise révén CF_3 -gyökök keletkeznek.

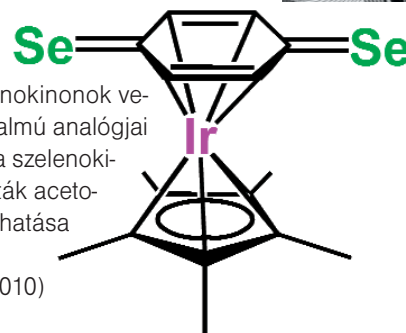
Inorg. Chem. 49, 9972. (2010)



A HÓNAP MOLEKULÁJA

Az ábrán látható szendvics típusú irídiumkomplexben ($C_{16}H_{19}IrSe_2$) kötve található a szelenokinonok vegyületcsaládjának elsőként előállított tagja. Az oxigéntartalmú kinonok kén- vagy szeléntartalmú analógjai nem fordulnak elő a természetben, mert nem elég stabilak. A szintézis egyetlen lépésében a szelenokinon helyén diklórbenzolt tartalmazó analóg irídiumkomplext nátrium-szeleniddel reagáltatták acetónitrilben, s a terméket narancsszínű kristályok formájában nyerték ki. A termék rákellenes hatása összemérhető a ciszplatínéval, így sikeres előállítása új fejezetet nyithat a kemoterápiában.

Angew. Chem. Int. Ed. 49, 7530. (2010)



Színváltó szövet

Hő vagy elektromos tér hatására színüket reverzibilisen változtató, vagyis termokrómos és elektrokrómos anyagokat már régóta ismer a tudomány. Egy kanadai tudós meglátása szerint azonban a divat világában még jelentős újdonságértékkel bírhatnak ezek a vegyületek. Korábban is történtek színváltó szövetanyagok előállítását célzó próbálkozások, de ezeknél jelentős hátrány volt a szálak szövésénél fellépő igénybevétel, a hatás eléréséhez pedig elektrolitrétegre is szükség volt. Az új eljárás során először egy szövetszerű templátot állítanak elő, amelyre aztán a 3,4-etiléndioxitiofén (EDOT) monomer gőzeit vezetik. Így elektromosan vezető sajátosságú polimer képződik, amelyen termokrómos vagy elektrokrómos festékanyagból újabb réteg alakítható ki. A színváltozást általában 100 mA-t meghaladó nagyságú áram hozhatja létre, ami meglehetősen nagy számítás, de további fejlesztéssel ez minden bizonnyal csökkenthető.

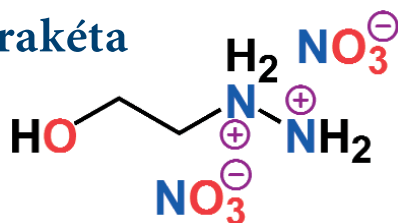


rint azonban a divat világában még jelentős újdonságértékkel bírhatnak ezek a vegyületek. Korábban is történtek színváltó szövetanyagok előállítását célzó próbálkozások, de ezeknél jelentős hátrány volt a szálak szövésénél fellépő igénybevétel, a hatás eléréséhez pedig elektrolitrétegre is szükség volt. Az új eljárás során először egy szövetszerű templátot állítanak elő, amelyre aztán a 3,4-etiléndioxitiofén (EDOT) monomer gőzeit vezetik. Így elektromosan vezető sajátosságú polimer képződik, amelyen termokrómos vagy elektrokrómos festékanyagból újabb réteg alakítható ki. A színváltozást általában 100 mA-t meghaladó nagyságú áram hozhatja létre, ami meglehetősen nagy számítás, de további fejlesztéssel ez minden bizonnyal csökkenthető.

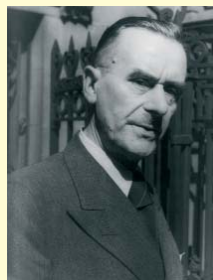
J. Mater. Chem. 20, 8233. (2010)

Ionfolyadék-rakéta

Az ionfolyadékok gyúlékonysága eddig mindeken előtt a velük való laboratóriumi munka biztonságának megteremtésében volt fontos tényező. Néhány felhasználási területen azonban ez a tulajdonság egyenesen kívánatos. A 2-hidroxiethylhidrazínium-nitrát és a 2-hidroxiethylhidrazínium-dinitrát vizsgálatakor azt tapasztalták, hogy ezek az ionfolyadékok 100 °C fölé a kereskedelemben kapható Shell 405 katalizátorral (alumínium-oxidra felvitt irídium) való érintkezés hatására gyújtóadalek vagy oxidálószer hozzáadása nélkül is lángra lobbannak. A jóval illékonyabb, és így jóval mérgezőbb hidrazin helyett ionfolyadékos származékai ezért kedvezőbbek lehetnek a rakétatechnológia számára.



Chem. Commun. 46, 8965. (2010)



IDÉZET

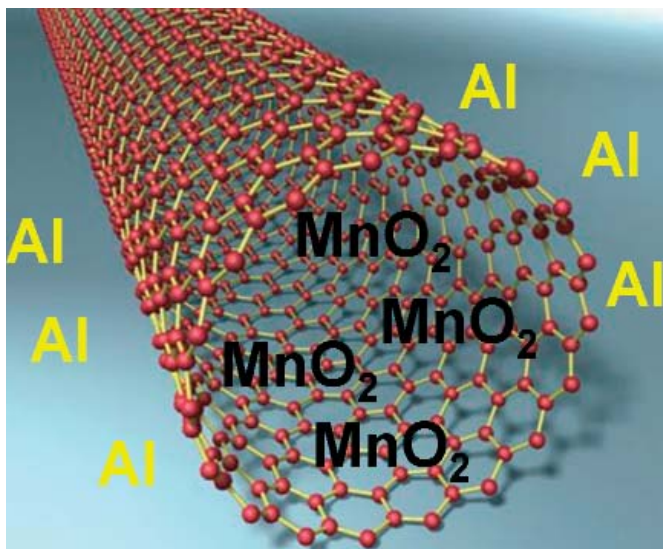
„A fertőtlenítésnél alaposan megnyomták a tollat, mert tíz frank ára H_2CO -t nem használhattak el, hogy kifüstöljék az amerikai lányt.”

Thomas Mann: *A varázshegy* című regényének (1924) egy mondata, amelyből kiderül: a nagy német író természetesnek vette, hogy az olvasói felismerik a benne szereplő kémiai képletet.

Nanocső-termit

A termitreakciókban egy fém-oxid és egy erősen redukáló sajátosságú fém, általában alumínium pora lép erősen exoterm reakcióba. Újabban az ehhez használt keverékeket nanotermitnek is nevezik, s a pirotechnikában és robbanóanyag-technológiában is fontos szerepük van. Francia és német tudósok az ilyen nanotermit kezelését tették lényegesen biztonságosabbá a közelmúltban úgy, hogy fém-oxid helyett MnO_2 -ot tartalmazó szénnanocsöveket használtak. Az így készített keverék biztonságosan használható, mert a fém-oxid nem érintkezik közvetlenül az alumíniumporral. A nanocsövek készítésénél olvadt $Mn(NO_3)_2 \cdot 4H_2O$ -ot töltöttek a nanocsövekbe, majd magas hőmérsékletre hevítették őket, s így a bomlás eredményeként keletkezett a mangándioxid. A termit begyújtásához szén-dioxid-lézer impulzusa, vagy megfelelően kiképzett, vékony, „robbanó” platinadrót használható, amelyen a reakció indításakor áramot vezetnek át.

J. Phys. Chem. C 114, 19562. (2010)





Bazsa György 70 éves

Bazsa György 1940. november 7-én született. A debreceni Fazekas Mihály Gimnáziumban érettségizett, majd a Kossuth Lajos Tudományegyetemen kitüntetéses vegyész oklevelet kapott 1963-ban. Életútja során egységbe fonódott tudományos, egyetemi oktatói, felsőoktatás-szervezői és közéleti tevékenysége.

A tudományos kutatás elemeivel már hallgatóként megismerkedett. 1963-tól a KLTE Fizikai Kémiai Tanszékén radioaktív izotópok elkülönítését tanulmányozta aszimmetrikus elektrolízissel. 1968-ban Beck Mihály professzor mellett a koordinációs kémia kinetikai kérdéseivel kezdett foglalkozni. Egyetemi doktori értekezését „A koordináció hatása a kéntartalmú ligandumok reakcióképességére. Adatok a jód-azid reakció kémiájához” címmel készítette 1970-ben. A továbbiakban – főként két göttingeni tanulmányút révén – a króm(III)-komplexek gyors képződésének lehetőségeit, s ezen reakciók kinetikáját vizsgálta. Kandidátusi értekezését – „Króm(III)-komplexek képződése gyors reakciókban” címmel – 1975-ben védte meg. Társ szerzőként könyvet írt „Gyors oldatreakciók kinetikájának vizsgálati módszerei” címmel.

Kutatói munkájának újabb fejezetét a nemlineáris kinetikai jelenségek (autokatalízis, kémiai hullámok, oszcilláció) képezik. 1986-ban egy évet vendégprofesszorként dolgozott az Amerikai Egyesült Államokban, a Brandeis Egyetemen. Akadémiai doktori értekezését „Autokatalízis salétromsavas oxidációkban” címmel 1989-ben védte meg. Ezekben a témakörökben vezetésével több egyetemi doktori, kandidátusi és PhD-értekezés készült el. Több sikeres – OTKA, US–Hungarian Joint Fund, magyar–oszt rák kormányközi TÉT-együttműködési, Pro Renovanda – pályázat témavezetője volt. Foglalkoztatta a tudományos eredmények gyakorlati hasznosítása. Így vizsgálta a fotográfiai előhívás kinetikáját. Munkatársaival kidolgozta a Nap ultraibolya sugárzását detektáló kémiai doziméter egy környezetre ártalmatlan, széles körben használható, új típusát, melyre szabadalmat kapott.

Aktívan tevékenykedett tudományos testületekben. Tagja volt az MTA Fizikai Kémiai Bizottságának, a Koordinációs Kémiai, valamint a Reakciókinetikai és Fotokémiai Munkabizottságnak, a Reaction Kinetics and Catalysis Letters és az Oriental Journal of Chemistry c. folyóiratok szerkesztőbizottságának, nemzeti képviselője az IUPAC oktatási bizottságának. Az MTA Kémiai Tudományok Osztályának két ciklusban tanácskozó tagja. 1998-ban, majd 2001-ben az MTA közgyűlési képviselőjévé választották. 2001–2003 között az MTA Elnökség választott tagja volt.

Oktatói tevékenysége a Debreceni Egyetem Fizikai Kémiai Tanszékéhez kötődik. Vezetett számolási és laboratóriumi gyakorlatokat, tartott fő- és speciális kollégiumokat, írt házi és országos jegyzeteket, készített oktatófilmeket. Kezdeményezte P. W. Atkins „Fizikai kémia” c. tankönyvének fordítását, és annak kontrollszerkesztője volt. A fordítás eddig két kiadásban jelent meg. Ugyancsak kezdeményezte, szerkesztette – és részben írta – azt a 15 szerzős egyetemi jegyzetet „Nemlineáris dinamika és egzotikus kinetikai jelenségek kémiai rendszerekben” címmel, amit négy egyetemen a doktoranduszképzésben használnak. Behatóan foglalkozott az egyetemi képzés és továbbképzés, a kutatás-értékelés szervezeti és tartalmi kérdéseivel. Vezető szerepet vállalt a magyar akkreditációs rendszer kidolgozásában és a Kossuth Egyetem doktori programjainak megszervezésében.

Három évtizeden át töltött be vezetői beosztásokat a Kossuth Lajos Tudományegyetemen. A Fizikai Kémiai Tanszék vezetője, a Természettudományi Kar dékánhelyettese, majd dékánja volt. 1990–95 között az egyetem tudományos és külügyi rektorhelyet-



Bazsa professzor úr megköszöni az ünneplést

tese, majd 1995–2000 között a KLTE rektora volt. Vezetői tevékenysége meghatározó módon befolyásolta az egyesített Debreceni Egyetem létrejöttét, az egyre sokszínűbbé váló egyetem fejlődését. Az 1997/98. tanévre a Magyar Rektori Konferencia elnökévé választották. Emellett a TEMPUS Felügyelő Bizottság, a HUNGARNET elnöksége, az Országos Innovációs Tanács tagja, a Magyar Kémikusok Egyesülete oktatási bizottsága elnöke volt.

Az 1998–2002-es ciklusban a Magyar Köztársaság Országgyűlésének, 2002–2006 között a Hajdú-Bihar megyei közgyűlésnek, 2006–2010 között a debreceni városi közgyűlésnek volt a képviselője.

Az Országos Doktori és Habilitációs Tanács, illetve a Felsőoktatási és Tudományos Tanács elnöki feladatait látta el, majd a Magyar Akkreditációs Bizottság elnökeként (immár második ciklusban) dolgozik. Számos hazai és külföldi meghívásnak eleget téve előadásokban mutatja be a magyar felsőoktatás helyzetét, soron következő feladatait, eredményeit, többek között az Európai Rektori Konferencia rendezvényein. Nemzetközi elismertségét jelzi egyebek mellett az is, hogy a Kijevi Nemzeti Sevcsenko Egyetem díszdoktorává fogadta.

Bazsa György barátai és tisztelői 2010. november 12-én bensőséges ünnepség keretében köszöntötték a 70 éves professzort. Az ünnepségen megjelent a KLTE és a Debreceni Egyetem több korábbi rektora is. Joó Ferenc akadémikus, a Fizikai Kémiai Tanszék jelenlegi vezetője mondott születésnap köszöntőt. Köszöntötte az ünnepeltet Gaál István, a DE Tudományegyetemi Karok elnöke és Nagy János korábbi rektor, a DE Agrár és Gazdálkodástudományok Centrumának elnöke, aki kitüntetést adott át Bazsa Györgynek. Beck Mihály akadémikus, akit Bazsa György követett a Fizikai Kémiai Tanszék élén, kedves szavakkal emlékezett vissza közös tevékenységük időszakára. Fábián István jelenlegi rektor felidézte a közös munkák emlékeit. Személyesen fejezte ki jókívánságait Pálkás József, az MTA elnöke is. Bazsa György, akinek energiája, feladatvállalása és munkaszeretete messze meghazudtolja 70 évét, humorral is átszótt bölcsességgel köszöntö meg a jókívánságokat.

E sorok írója hálával gondol vissza azokra az évekre, amikor még egyetemi hallgatóként, majd kezdő kutatóként Bazsa György mellett dolgozhatott, és a szakmai iránymutatás mellett élete más területein is tanácsokat, segítséget kapott témavezetőjétől. Bár 40 év eltelt már azóta, még ma is előfordul, hogy egy-egy kérdéssel bekopogtat az ajtaján, és kikéri régi tanára véleményét, tanácsát.

Rábai Gyula

egyetemi tanár



TUDOMÁNYOS ÉLET

XXXIII. Kémiai Előadói Napok
Fókuszban a kémia és a gyógyszer

Szeged, 2010. október 25–27.

A sokéves hagyomány szerint a szimpózium a kémia különböző területein született új kutatási eredmények, fejlesztések, illetve gyakorlati alkalmazások bemutatására teremt a fiatal szakemberek, PhD-hallgatók számára fórumot. Örömteli tény, hogy az elmúlt évek trendjének megfelelően, az idei évben is a korábbiaknál nagyobb érdeklődés mellett zajlottak a három nap eseményei. Ezt jól alátámasztja a bemutatott előadások száma (81), illetve a szekciók hallgatóságának létszáma. A szimpózium *Fülöp Ferenc* akadémikus, egyetemi tanár és *Hannus István* egyetemi tanár, az MKE Csongrád Megyei Csoportja elnökének ünnepélyes megnyitójával indult. Ezt követően *Wölfling János*, az MKE Intézőbizottságának tagja nívódíjakat adott át a 2010. évben kiemelkedő diplomamunkájukért jutalmazott fiatal kutatóknak. (A nyertesek névsorát az MKE-hírek között olvashatják.)

A konferencián a nívódíjas fiatal szakemberek lehetőséget kaptak díjnyertes munkáik rövid bemutatására. Tizenketten élni is kívántak ezzel a lehetőséggel, így a munkák bemutatása két igen színvonalas szekció keretein belül zajlott. A további szakmai munka tematikus bontásban, az alábbi 11 szekció keretein belül folytatódott: Fizikai kémia, Koordinációs és bioszervetlen kémia, Szerves kémia I., Szerves kémia II., Szerves kémia III., Anyagtudomány, Környezeti kémia, Gyógyszerkutatás, Elméleti és számítógépes kémia, Analitikai kémia, Katalízis.

A szekciók címei is elárulják, hogy igen változatos témájú mun-

kák eredményeivel ismerkedhettek meg az érdeklődők. A szerves kémiai és gyógyszerkutatási szekciókban hallottunk többek között gyógyszerhatóanyagok elválasztásának és metabolizmusának vizsgálatáról, szteroidok szintéziséről, új L-nukleozidok előállításáról, érdekes peptidkémiai eredményekről, valamint számos enantio-szelektív szintézismódszerről. A szegedi tudományos műhelyek munkájához kapcsolódva sok előadás foglalkozott mind a szén-nanocsövekkel, mind a titán-dioxiddal, és ezek különféle kompozitjaival. Egyebek mellett előadások hangzottak el újfajta kromatográfiás módszerekről, különböző antitumor hatású fémkomplexeiről, sőt, számos elméleti kémiai témájú előadás bemutatta, hogyan lehet a számítási kémiát a gyakorlat szolgálatába állítani.

A konferencia reprezentatív, 284 oldalas kiadványa 105 példányban készült, és tartalmazza az előadások részletes, az esetek többségében többoldalas összefoglalóit. A kiadvány, valamint a konferenciával kapcsolatos egyéb információk továbbra is hozzáférhetők (<http://www.staff.u-szeged.hu/~mkecsms/ken.htm>).

A konferencia előadói elsősorban a legjelentősebb hazai felsőoktatási intézményekből érkeztek, de az MTA KK, MTA SZBK, Bay-Bio és vegyipari vállalatok (Richter Gedeon Nyrt., sanofi-aventis Nyrt.) is képviseltették magukat.

Köszönetet mondunk azoknak, akik 2010-ben is jelentős mértékben hozzájárultak a rendezvény színvonalas lebonyolításához: NFÜ (a TÁMOP-4.2.3-08/1-2009-0015 projekt keretében), MOL Nyrt., Szegedi Akadémiai Bizottság, az MKE központi szervezete.

Janáky Csaba



A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósult meg.

Kutatóközponti Tudományos Napok

Az MTA Kémiai Kutatóközpontjában az év végén a kutatók számot adnak elért eredményeikről. 2010-ben 15. alkalommal rendezték meg a három napon át zajló Kutatóközponti Tudományos Napokat.

Pálinkás Gábor főigazgató megnyitó szavai után *Iván Béla* tudományos tanácsadó tartotta meg főelőadását a polimerekről, a 21. századot egyenesen a „polimerek korának” nevezve. Az intézetben nagy hagyományai vannak az amfifil polimer kotérhálók előállításával, szerkezetével és alkalmazhatóságával kapcsolatos kutatásoknak. Tudományos eredményeik és közvetlen ipari alkalmazásaik sokkal közelebb állnak egymáshoz, mint máshol. Az Iván Béla által vezetett fiatal kutatói csapat több – nagy nemzetközi vállalatokkal közös, szabadalmakkal védett – eljárást is kidolgozott különböző polimerek előállítására.

A rendezvényen három szekcióban elhangzott 39 előadás jól tükrözte azt a szerkezeti átalakulást, amely a természettudományok terén zajlik napjainkban: megnőtt az élettudományok szerepe a kutatómunkában. Valamennyi téma ismertetésére itt nincs lehetőség, ezért *Vinkler Pétert*, az intézmény tudományos titkárát kértem meg, hogy szemezgesse a sok érdekes előadásból.

A szénnanocsövek az elektrokémiai energiatárolás és -átalakítás ígéretes anyagainak tekintendők, nagy fajlagos felületük, kémiai ellenálló képességük, kis sűrűségük és jó elektromos vezetőképeségük miatt. A nagy teljesítmény- és energiasűrűségű szuperkondenzátorokat elsősorban elektromos járművekben és távközlési eszközökben használhatják majd fel. Az intézetben nanocsőerdőből készített szuperkondenzátorokat állítottak elő és vizsgáltak egy EU FP-7-es projekt keretében.

A poliamidoamin polimerek a gyógyászatban alkalmazhatók: átjutnak a sejtmembránokon és a hozzájuk kötött gyógyszermolekulákat a hatás helyére képesek szállítani.

Olyan új szintézismódszerek bevezetéséről is beszámoltak a kutatóközpont munkatársai („frusztrált Lewis-pár” koncepció), amelyek segítségével fontos gyógyszerek állíthatók elő szerves katalízissal az eddigieknél olcsóbban, egyszerűbben. A kutatások rövidesen egy nemzetközi katalizátor-előállító cég termékeiben is hasznosulnak.

A környezetvédelemmel kapcsolatos vizsgálatok is hangsúlyt kaptak. Az acetone és a butanon fotobomlását a SCOUT-03 elnevezésű EU-légkörkémiai program keretében vizsgálják. Az eredmények a légköri szennyeződések és az ózonréteg bomlása közötti összefüggések jobb megértéséhez járulnak hozzá.

A biológiai szerepű molekulákkal kapcsolatos újabb eredmények közül jelentősek a tuberkulózist okozó baktérium gyógyszerének hatékonyságát fokozandó, a sejtfaon történő átjutást elősegítő peptidhordozóval, az emésztőenzimekkel, a folyadékokban kialakuló hidrogénkötéses molekulaháló szerkezetének felderítésével, az orvosi diagnosztikában használható mintázattelismerési, kiértékelési módszerekkel kapcsolatos újabb információk.

A Tudományos Napok alkalmából az igazgatótanács PRO ARTE CHEMIKA érmet adományozott *Somorjai A. Gábornak*, a Kaliforniai Egyetem kémiaprofesszorának, *Párkányi László* tudományos tanácsadónak, *Újszászy Kálmán* tudományos munkatársnak.

A tudományos rendezvényen elhangzott előadások alapján kutatói díjban részesült: *Nyikos Lajos*, fiatal kutatói díjat vett át: *Bálint Szabolcs*, *Erős Gábor*, *Harnos Szabolcs*, *Kasza György*, *Mohos Miklós* és *Palló Anna*.

Chikán Ágnes



HÍREK AZ IPARBÓL

Az Európai Petrolkémiai Szövetség (EPCA) 44. éves közgyűlése

Budapest, 2010. október 2–6.

A hivatalos beharangozó szerint Budapesten, „Kelet és Nyugat kulturális kapujában”, „a gyönyörű korábbi császárvárosban” (sic!) több mint 2000 regisztrált delegátus jelenlétében tartotta idei közgyűlését a brüsszeli székhelyű EPCA (European Petrochemical Association). Az 1967-ben alapított szövetségnek ma több mint 570 tagvállalata van a világ minden részéből, amelyeknek az összesített forgalma meghaladja a 2750 milliárd eurót és amelyek több mint 3 millió alkalmazottat foglalkoztatnak. Az EPCA-nak két rendes és egy társult tagja van Magyarországról, ezek a BorsodChem (képviselője *Szentmiklóssy László*), a TVK (képviselője *Olvasó Árpád*, Ásványolaj és Petrolkémiai Szakosztályunk elnöke) és a MASPED TLOG Kft. (képviselője *Horváth Miklós*). A szövetség vezető szerveiben nincs közép-kelet-európai vállalati képviselő. Saját minősítése szerint az EPCA nem lobbizó szervezet, tevékenységének fő célja a petrolkémiai ipar hosszú távú fenntartható fejlődésének előmozdítása nyílt vitákkal és a vegyipar imázsának javítása. A célok megvalósítását találkozó, szemináriumok, munkaértekezlet szervezésével mozdítják elő.

A budapesti rendezvényre két hónappal az újabb üvegházhatású gáz (ÜHG) kibocsátás-csökkentési megállapodás esélyét nyújtó cancúni (Mexikó) ENSZ éghajlat-változási konferencia (COP-16) konferencia előtt került sor, és ez megadta a kapcsolódó konferencia vezérfonalát. Az október 4-én és 5-én tartott, a sajtó számára is nyilvános bő százperces délelőtti üléseken a „Kilenc milliárd ember 2050-ben. A vegyipar mint a megoldások elősegítője” témájú előadások után panelvita következett. A fellépők tárgyalták az emberiség előtt álló kihívásokat (globális felmelegedés, ivóvízellátás, élelmezés, elfogadható lakás, egészségvédelem és oktatás a hagyományos energiaforrások csökkenése mellett), valamint a rövid és hosszú távú vegyipari vállalati válaszstratégiákat holisztikus és gyakorlati elemekkel. A korábbi tv-s moderátor, *Nadine Dereza* a BBC-n megszokott fórumok hangulatát idézve a hosszabb monológokat kérdésekkel törte meg, nyílt, pezsgő, élvezetes vitákat generált és jól kézben tartotta a konferenciát.

Október 4-én *Jeremy Bentham* (Shell Int., Global Business Environment) és *Andreas Kreimeyer* (BASF kutatás) előadásait két kiválóság, *Asit K. Biswas* (Third World Centre for Water Management) és *Jeremy Rifkin* (Foundation on Economic Trends) csatlakozásával panelvita követte. Bentham hangsúlyozta, hogy a folytonos fejlődés megszakadása miatt a kereslet-kínálat-környezet hármasszempontjából a következő öt év nagyon fontos lesz és kiemelte a technológiai innováció fontosságát. Kreimeyer elemezte a vegyipari trendeket, és megállapította, hogy a vegyipar olyan innovációival járulhat hozzá a fenntartható fejlődéshez, mint az intelligens anyagok (pl. bevonatok, kenőanyagok, szigetelőanyagok) gyártása és áruk helyett vevőre szabott megoldások kínálása. Az intelligens anyagok a kőolajból és földgázból kiinduló „petrolkémiai termékek – alaptermékek – speciális termékek” vegyipari értéklánc legújabb elemét jelentik. Biswas professzor kijelentette, hogy a vízmenedzsment terén a következő 30 évben több változás fog bekövetkezni, mint ami az elmúlt kétezer évben történt, és példákat hozott fel a helyzet komolyságának alátámasztására. Rifkin az éghajlatváltozás kezelésére a hidrogéngazdaság bevezetését javasolta; amivel kapcsolatban Kreimeyer és Biswas is aggályaiknak adtak hangot (technológiai és gaz-

dasági nehézségek különösen a szegény országokban, szén-dioxid-hasznosítási és vízmenedzsment problémák). A hallgatóság soraiból érkezett egyik kérdésre Kreimeyer aláhúzta, hogy eladható termékeket kell gyártani, és közölte, hogy a hagyományos úton előállítottnál jelenleg 20–40%-kal drágább zöldkémiai termékek iránti kereslet nyomott.

Október 5-én *Jeffrey Sachs* (Columbia University) előadását követően *Michael Behrendt* (Hapag Lloyd), *Yousuf Al-Zamel* (Sabic) és *Christoph Schmitz* (McKinsey) tárgyalták meg az előadó álláspontját. Sachs professzor, akit az Economist 2010 januárjában a világ egyik legkiválóbb fejlesztési közgazdászának nevezett, azzal indított, hogy rövid távra ugyan tud előrejelzést adni, de a pontos hosszabb távú prognózissal gondolai vannak. Egyben azt is jelezte, hogy *Ban Ki-Moon* ENSZ-főtitkár tanácsadójaként annak nézeteitől nem fog eltérni. Előadásában a globális változás alapvető elemeinek nevezte a demográfiát, konvergenciát, fenntarthatóságot, instabilitást és technológiát. Jövőképe szerint 2050-re a világ összességében zsúfolt, városiasodott, fejlődő és korosodó lesz. Európában (és Észak-Amerikában) a városiasodás mértéke a trenddel szembe menve csökkenni fog. Kína és India fogják vezetni Ázsia felemelkedését, és Afrika országai megjelennek a feltörekvő államok között. A fenntarthatóság előfeltételeként általánosan felismerik az emberi eredetű éghajlatváltozás valóságát, amit az emberiség számára biztonságos tevékenységi területek szűkülésével, az ivóvízhiányos területek bővülésével és a biológiai fajok számának csökkenésével demonstrált. Az instabilitás jeleként értékelte a gazdag országokban fellelhető szociális megosztottságot, a tulajdoni problémákat a szegényebb országokban, valamint az élelemforrás-energiaforrás eltérésekből adódó globális méretű konfliktust. Sachs professzor új elemeket is ismertető diagnózist (prognózist) viszonylag rövid és ismert lépéseket összefoglaló terápiai javaslat követte, amikor összefoglalta a technológia (értelmezése szerint a vegyipar) kritikus jövőbeni feladatait. Ezek az áttérés a kis szén-dioxid-kibocsátású gazdaságra (megújuló energia, szén-dioxid-felfogás és -tárolás, elektromos meghajtású járművek, zöld épületek alkalmazása útján), áttérés a fenntartható mezőgazdaságra (jobb műtrágyák, hatékonyabb növényvédő szerek és hatékonyabb vízgazdálkodás révén), elmozdulás a városi fenntarthatóság irányába (hatékonyabb hulladékkezelés, a mérgező anyagok eliminálása és a közegészségügy javítása által). Mindemellett fontosnak ítélte a szereplők együttműködését a gondok megoldásában, így az újabb ÜHG kibocsátás-csökkentési megállapodás létrehozását. A panelvita során megemléstettek az életciklus-szemlélet alkalmazásának fontosságát a vegyiparban.

Az október 5-i konferencia ebédjén *Gerhard Schröder*, korábbi német kancellár fejtette ki geopolitikai nézeteit a témával kapcsolatban.

A neves előadókat és paneltagokat felvonultató, mindvégig élénk és élvezetes rendezvény nagyon jó szellemi táplálékot nyújtott a második napra még inkább megfogyatkozott hallgatóságnak.

Rácz László

A Richter vegyesvállalatot alapít Kínában

A Richter Gedeon Nyrt. kínai kereskedelmi partnerével, az Rxmidas Pharmaceuticals Holdings Ltd.-vel szerződést írt alá, amelynek értelmében 50-50%-os tulajdoni részesedésű vegyesvállalatot hoznak létre. A vegyesvállalat neve Gedeon Richter Rxmidas Jo-



int Venture Co. Ltd. A megállapodás értelmében a Richter 18 millió RMB összeget fektet be a vegyesvállalatba, melynek elsődleges célja egy, a Richter nőgyógyászati termékvonalának törzskönyvezését és piaci bevezetését támogató értékesítési és promóciós hálózat felállítása Kínában. (*Tőzsdefórum Online*)

Z. A.

A termelékenységet javítja a Teva fejlesztése

A Teva Gyógyszergyár Zrt. nyerte el a Magyar Kereskedelmi és Iparkamara innovációs díját a pravastatin gyógyszerhatóanyag hazai előállítására kifejlesztett új eljárásával.

Az érrendszer leg súlyosabb megbetegedéseiben vezető szerepet játszanak a trigliceridek és a koleszterin. A koleszterinszint diétával maximum 10 százalékkal csökkenthető, az állapot javítására csak az úgynevezett statinok alkalmazásával van lehetőség. A Teva a fermentációs ipari fejlesztés korszerű eszköztárának felhasználásával dolgozott ki olyan technológiát, amelynek segítségével a pravastatin generikus piacon elsőként tudott megjelenni. A gyártásban olyan mikroorganizmust használnak fel, amely magas biokonverziós hatásokkal képes átalakítani az első fermentációs intermedierét (a compactint) pravastatinná. Ez a képesség lényeges egyszerűsítésekre adott lehetőséget a teljes gyártási folyamatban. A fejlesztés eredményeként szabadalmilag független, környezetkímélő, ipari méretben gazdaságosan megvalósítható eljárások láncolata jött létre. Az átalakítás határfoka 50 százalékkal lett magasabb; számos, korábban szükséges tisztító lépés elhagyható lett. A termelékenység több mint egy nagyságrenddel nőtt, a gyártási költségek pedig 90 százalékkal csökkentek. Az innováció gyártásszervezési és kapacitásbővítési előnyökkel is járt, a Teva külön gyártósort létesített a pravastatin előállítására. A compactin intermedier hazai gyártására a vállalat debreceni egységének fejlesztésén túl a sajátbányai ipari parkban új telephelyet hozott létre. A pravastatin a Teva egyik vezető terméke, a társaság e készítmény eladásából származó árbevétele meghaladja a 10 milliárd forintot. (*Napi Gazdaság*)

Zékány András



Vegyipari mozaik

sanofi-aventis/Chinoin: 2010-es Magyar Kutatási Díj. A vállalat 2003 óta minden évben átadja a díjat a fiatal magyar kutatónemzedék jelentős tudományos eredményeinek elismerésére. 2010-ben a „Nem kismolekulás megközelítések a betegségek kezelésében és megelőzésében” területről várták a pályázatokat, amelyeket az eredmények tudományos súlya és a kutatás eredetisége alapján rangsoroltak.

A több tucat pályázó közül Pál Gábor immunológia terén elért eredményeit ítélte a legjobbnak a szakmai zsűri. Pál Gábor, az ELTE TTK egyetemi docense a fehérjék irányított evolúciójával elsőként fejlesztett ki olyan reageneket, amelyek jelentősen javítják az oxigénhiányos betegségek utáni felépülést olyan súlyos betegségek esetében, mint például a szívinfarktus vagy a szélütés. A kutatási eredmény jelentőségét igazolja, hogy a szív- és érrendszeri betegségek, illetve a szív oxigénhiánnyal járó megbetegedései vezető helyen állnak a halálozási okok között, éves szinten pedig mintegy 450 milliárd forintot költ az ország ezen megbetegedések kezelésére. (*napi.hu*)

Uniós támogatással épült gyógyszergyártó üzem Zalaegerszegen. A Nyugat-dunántúli Regionális Fejlesztési Ügynökség tájékoztatása szerint a közel 194 millió forintból elkészült beruházáshoz a cég 61,7 millió forint uniós támogatást nyert el a Nyugat-Dunántúli Operatív Program telephely-fejlesztési pályázatán.

A beruházás keretében a kéthajós csarnokban a gyártó üzemrészek és laborok mellett korszerű raktárt, a gépészeti termet és a személyzetet kiszolgáló helyiséget létesítettek. Bakos Gábor ügyvezető elmondta, hogy a Pernix Pharma Gyógyszergyártó Kft. a gyógyszergyártás iránt megnövekedett igények kiszolgálására alakult meg 2000-ben. A cég humán gyógyszer- és gyógyhatású készítmények, táplálékkiegészítők, kozmetikai készítmények, állatgyógyászati termékek gyártásával, valamint takarmány-előkeverékek előállításával és kiszorolásával foglalkozik. (*MTI*)

Banai Endre összeállítása

MKE-HÍREK

Konferenciák

7. Kémikus Diákszimpózium

A Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Kara Kémia Intézete, a Ciszterci Rend Pécsi Nagy Lajos Gimnáziuma és a Pollack Mihály Műszaki Szakközépiskola 2011-ben, a Kémia Évében a Magyar Kémikusok Egyesületével együttműködve rendezi meg a kémia iránt érdeklődő diákok és tanáraik számára a 7. Pécsi Kémikus Diákszimpóziumot.

Időpont: 2011. április 1–3.

Helyszín: Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnázium (Pécs, Széchenyi tér 11.)

JELENTKEZÉS ÉS MINDEN FONTOS INFORMÁCIÓ: <http://www.ttk.pte.hu/analitika/kemia/7szimp/index.shtml?meghivo>

12. Magyar Magnézium Szimpózium

2011. április 15.

Budapesti Corvinus Egyetem Tudásközpont

(Budapest, Villányi út 29–31. G épület, alagsor)

Részletes információ és online jelentkezés:

www.mke.org.hu, a rendezvények menüpont alatt

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Kőröspataky Panna,

korispataky@mke.org.hu

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

MKE 1. Nemzeti Konferencia

2011. május 22–25.

(Liszt Ferenc Konferenciaközpont, Sopron)

Online jelentkezés: <http://www.mkenk2011.mke.org.hu>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

A konferencia szekciói:

1. Fenntartható fejlődés és kémia
2. Kémiatanulás és -tanítás: mit, mennyit és hogyan?
3. Kémia az egészség szolgálatában
4. Kémia holnap – a jövő kémiája
5. Kémia és környezet



A HÓNAP HÍREI

A szekciók tartalmi részletezése és az előadás-jelentkezés módja a www.mkenk2011.mke.org.hu honlapon.

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Körispataky Panna és Bondár Mónika, mkenk2011@mke.org.hu

4th European Conference on Chemistry for Life Science

2011. augusztus 31. – szeptember 3.

ELTE, Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A

Online regisztráció: <http://www.4eccls.mke.org.hu/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika, 4eccls@mke.org.hu

Conferentia Chemometrica 2011

2011. szeptember 18–21.

Sümege, Hotel Kapitány (Tóth Tivadar u. 19.)

Online regisztráció hamarosan a <http://www.cc2011.mke.org.hu/> honlapon

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓ: Körispataky Panna, cc2011@mke.org.hu

12. Labortechnika Kiállítás

Időpont: 2011. március 29–31.

Helyszín: SYMA Sport- és Rendezvény központ, „C” csarnok (1146 Budapest, Dózsa György út 1.)

Az MKE 2011. évi rendezvénytágra

Április 1–3.	7. Kémikus Diákszimpozium	Pécs
Április 15.	Magyar Magnézium Szimpózium	Budapest
Május 7–8.	Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny	Miskolc
	XXXIII. Kolorisztikai Szimpózium	
Május	Biztonságtechnika Konferencia	Siófok
Május 22–25.	MKE I. Nemzeti Konferencia	Sopron
Augusztus 31. – szept. 3.	4 th European Conference on Chemistry for Life Science	Budapest
Szeptember 18–21.	Conferentia Chemometrica 2011	Sümege
Szeptember 28–30.	Interfaces'11	Sopron
Október 5–7.	Környezetvédelmi és Analitikai Technológiai Konferencia és 54. Spektrokémiai Vándorgyűlés	Sümege
Október	Őszi Radiokémiai Napok	
November	Kozmetikai Szimpózium	Budapest
November	Hungarocoat 2011	Budapest

Előfizetés

a Magyar Kémiai Folyóirat 2011. évi számaira

A Magyar Kémiai Folyóirat 2011. évi díja fizető egyesületi tagjaink számára 1400 Ft. Az előfizetési díjat a tagdíjjal együtt vagy külön csekken (igényelhető a Titkárságon) kérjük befizetni. Lehetőség van átutalással rendezni az előfizetést a Titkárság által küldött számla ellenében. Kérjük, jelezzék az erre vonatkozó igényüket.

Köszönetet mondunk mindazoknak, akik 2010-ben kettős előfizetéssel hozzájárultak a határon túli magyar kémikusoknak küldött folyóirat terjesztési költségeihez. Kérjük, aki teheti, 2011-ben is csatlakozzon a kettős előfizetés akcióhoz.

1%

Ismét támogathatja személyi jövedelemadója 1 százalékával a Magyar Kémikusok Egyesületének közhasznú céljait.

Tájékoztatjuk tisztelt tagtársainkat, hogy személyi jövedelemadójuk 1 százalékának felajánlásából idén **1 574 559** forintot utal át az APEH Egyesületünknek.

Köszönjük felajánlásait, köszönjük, hogy egyetértenek a kémia oktatásáért és népszerűsítéséért kifejtett munkánkkal. A felajánlott összeget ismételten a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, valamint a Kémia tanári Konferencia és a 2010-ben másodszor megszervezett Kémia tábor egyes költségeinek fedezésére használtuk fel, valamint arra a célra, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő, határon túli honfitársunkhoz.

Ezúton is kérjük, hogy a 2010. évi SZJA bevallásakor – értékelve törekvéseinket – éljenek a lehetőséggel és személyi jövedelemadójuk 1%-át ajánlják fel az erre vonatkozó Rendelkező nyilatkozat kitöltésével.

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

Az MKE adószáma: 19815819-2-41.

2011 a „Kémia Nemzetközi Éve”. Egyesületünk a „Kémia Nemzetközi Éve – 2011” programjai között kiemelt hangsúlyt fektet a kémia népszerűsítésére, a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a tehetőségdondozó tevékenységre (Középiskolai Kémiai Lapok, Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, VII. Kémikus Diákszimpozium – Pécs, a 2011-ben harmadszor szervezendő Kémia tábor). Terveink szerint a személyi jövedelemadójuk 1%-ának felajánlásából befolyó összeget a „Kémia Nemzetközi Éve – 2011” programok egyes költségeinek fedezésére használjuk fel.

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

MKE egyéni tagdíj (2011)

Felhívjuk mindazok szíves figyelmét, akik a 2011. évi tagdíjukat még nem fizették be, hogy 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

Tagdíj-befizetési 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, összeg rendeltetése** adatokat kérjük jól olvashatóan feltüntetni. Ahol a munkahely levonja a munkabérből a tagdíjat és listás átutalás formájában továbbítja az MKE-nek, ez a lista szolgálja a tagdíjbefizetés nyilvántartását.



Tagdíj-információ a fizetési hátralékban 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 tagdíjbefizetéseinek helyzetét az MKE-honlap (www.mke.org.hu) „Tagnyilvántartás” menübe történő belépéssel és egyéni tagnyilvántartó lapja „tagság és díjfizetés nyilvántartó” oldalának megnyitásával. Az egyéni tagnyilvántartó lapon a személyes adatok (online) pontosítására is van lehetőség.

MKE Titkárság

Nívódíjak, 2010

A Magyar Kémikusok Egyesülete 2010. évi pályázatára beérkezett 37 színvonalas pályamunka közül a Műszaki Tudományos Bizottság a következő 14 pályázatot jutalmazta Nívódíjjal:

Név	Egyetem	Témavezető	Diplomamunka címe
Aranyi Anita	Szegedi Tudományegyetem TTK Kémiai Tanszékcsoport	Péter Antal, Ilisz István	Aminonaftolok királis folyadékkromatográfiája
Csáki Attila	BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar	Hornýánszky Gábor, Novák Lajos	Az aza-Claisen-átrendeződés vizsgálata <i>physostigmine</i> alapvázak szintézisében
Csendes Zita	Szegedi Tudományegyetem TTK Kémiai Tanszékcsoport	Pálinkó István	Biomimetikus elektrontranszfer katalizátorok készítése
Eszenyi Dániel	Debreceni Egyetem Kémiai Intézet	Fekete Anikó	Oligoszacharid-fehérje konjugátumok szintézise
Gyulai Gergő	ELTE TTK Kémiai Intézet	Kiss Éva	Polimer nanorétegek felületi és fehérje-adszorpciós tulajdonságainak jellemzése
Huszka Beáta	ELTE TTK Kémiai Intézet	Perczel András	Az extendin-4 fehérje <i>in vivo</i> előállítása és NMR-spektroszkópiái vizsgálata
Knapp Krisztina	ELTE TTK Kémiai Intézet	Majer Zsuzsa, Vass Elemér	α - és β -Homo-aminosavak származékai mint spektroszkópiái modellvegyületek
Kosárhó Tímea	ELTE TTK Kémiai Intézet	Wajand Judit	Kémia a bűnüldözésben és a detektív-történetekben
Molnár Ferenc	ELTE TTK Kémiai Intézet	Rácz Zoltán	Csapadékmintázatok kétdimenziós reakció-diffúziós frontokban
Nagy Gábor	Szegedi Tudományegyetem TTK Kémiai Tanszékcsoport	Gyurcsik Béla	Cink-ujj fehérjék specifikus megkötődésének vizsgálata DNS-molekulákon
Pásztor Szabolcs	ELTE TTK Kémiai Intézet	Iván Béla, Kali Gergely Áron	PMAA- <i>l</i> -PIB amfifil polimer kotérhálók előállítása és pH-függő duzzadási tulajdonságaik vizsgálata
Takácsi-Nagy Anna	Pécsi Tudományegyetem Bioanalitikai Intézet	Kilár Ferenc	Új elválasztástechnikai módszerek a gyógyszeranalízisben, gyakorlati és elméleti modellkísérletek
Tóth László	Debreceni Egyetem Kémiai Intézet	Kurtán Tibor	<i>O,N</i> -Heterociklusok gyűrűzárási reakciói tercier amino effektus révén
Turi Ildikó	Debreceni Egyetem Kémiai Intézet	Sóvágy Imre	Multihisztidin peptidek vegyes fémkomplexeinek képződését befolyásoló tényezők vizsgálata

A Fiatal Kémikusok Pályázatán 2010. évben nyertes pályázatok

I. negyedév

Bacsa Bernadett	ELTE	70 000
Hajdú Angéla	SZTE	90 000
Kovács Ervin	BME	70 000
Ötvös Sándor	SZTE	60 000
Szentgyörgyi Eszter	Pannon Egyetem	55 000
Varga Csilla	Pannon Egyetem	95 000

II. negyedév

Ábrányi Balogh Péter	BME	26 500
Szilágyi András Ferenc	BME	70 000
Vajna Balázs	BME	50 000
Balogh János	Pannon Egyetem	60 000

Lorántfy László	ELTE	45 000
Nagy Roland	Pannon Egyetem	45 000

III. negyedév

Bálint Erika	BME	50 000
Dietrich Ádám	BME	50 000
Illés Erzsébet	SZTE	50 000
Dr. Sovány Tamás	SZTE	50 000

IV. negyedév

Kulcsár Edina	Pannon Egyetem	20 000
Fórizs Balázs	BME	80 000



Az MKE Intézőbizottság ülése (2010. november)

1. „Középtávú konferencia-tervezés/szervezés” címmel Wölfling János részletes és alapos előterjesztést készített az IB számára, amelynek megvitatása után hat intézőbizottsági határozatban lettek megfogalmazva a tárgykörrel kapcsolatos jövőbeni teendők és feladatok. A 10-15/2010. IB határozat-ok a honlap „Az Egyesületről > Egyesületi élet > Határozatok” menüjében olvashatók.
2. A „Kémia Nemzetközi Éve – 2011” projektjeinek helyzetéről kapott az IB írásos tájékoztatást, amely az intézőbizottsági ülés után közvetlenül kezdődő „szakosztály-értekezleten” az egyesületi tisztségviselőkkel is meg lett vitatva. Jól sikerült a kémia évét beharangozó 2010. november 5-i „MKE–MTA KTO sajtóreggeli” esemény, amelyen Réthelyi Miklós miniszter (Nemzeti Erőforrás Minisztérium) és Pálkás József, az MTA elnöke köszöntőben méltatta a kémia és a kémiaoktatás jelentőségét.
3. Eddig 13 nagyrendezvény szerepel az MKE Titkárság 2011. évi rendezvénylistáján és ezeken kívül 2011. június 10-re van betervezve az MKE tisztújító Küldöttközgyűlése is.
4. Egyhangú döntés alapján Dr. Lauri Niinistö finn professzor lesz 2011-ben a „Fabinyi Rudolf Emlékérem” díjazottja. A díjszabályzat értelmében ez az elismerés kizárólag külföldi személynek adható, aki tevékenységével hozzájárult az MKE hírnevének a növeléséhez.
5. Az Intézőbizottság 17/2010. IB határozata elfogadta Kiss Tamás felelős szerkesztő írásos előterjesztését az MKL 2011. évi laptervére vonatkozóan, egyben kérte a jelenlegi lapszínvonal megtartását a továbbiakban is.
6. Az Intézőbizottság egyhangú támogatása alapján Dr. Antus Sándor professzor úr (DE) lett felkérve a 2011-es küldöttközgyűlési tisztújítási jelölőbizottsága elnökének, aki a felkérést elfogadta.
7. Az intézőbizottsági ülés utánra meghirdetett „szakosztály-értekezleten” a 2011-es egyesületi tisztújításokból következő feladatok megbeszélésére került sor a szakosztályok, szakcsoportok, területi szervezetek és munkahelyi csoportok tisztségviselőivel.

Kovács Attila

Tisztújítási útmutató

1. A négyévenként esedékes, következő tisztújításokra 2011-ben kerül sor. A tisztújítások során megválasztásra kerülnek az Egyesület tisztségviselői és vezető tisztségviselői (kivéve ügyvezető igazgató).
2. A tisztújításban érintett vezető tisztségviselők: az elnök; a két alelnök; a főtitkár; a két főtitkárhelyettes (egyik egyben a Műszaki Tudományos Bizottság elnöke, a másik egyben a Gazdasági Bizottság elnöke); az Intézőbizottság 7 tagja; a Felügyelő Bizottság elnöke, 2 tagja és 2 póttagja; az Etikai Bizottság elnöke, 2 tagja és 2 póttagja. Őket a tisztújító Küldöttközgyűlés választja meg 4 évi időtartamra.
3. A tisztújításban érintett egyesületi tisztségviselők: az állandó bizottságok elnökei; a szakosztályok (szakcsoportok), területi szervezetek elnökei és titkárai; a munkahelyi csoportok elnökei és/vagy titkárai. Az állandó bizottságok elnökeit a tisztújító Küldöttközgyűlés, a többi egyesületi tisztségviselőt az adott egyesületi szervezet tisztújító taggyűlése választja meg 4 évi időtartamra.
4. Meghatározott tisztségre egy személy legfeljebb háromszor 4 évi időtartamra választható. A lépő tisztségviselő más funkcióba teljes jogú hatáskörrel választható.
5. Egyesületi tisztségre csak MKE-tag választható meg! Egyesületi tagnak tekinthető, aki a tárgyévi tagdíjat (új belépő), de legalább a tárgyévet megelőző évi tagdíjat már befizette. Az egyesületi tisztségre megválasztandó személytől elvárt, hogy a választás előtt a tárgyévi MKE-tagdíjat befizesse.

6. Tisztújító taggyűlések a szakosztályoknál (szakcsoportoknál), területi szervezeteknél és munkahelyi csoportoknál:

- A tisztújító taggyűlésekre az MKE tisztújító Küldöttközgyűlést megelőző időszakban kerül sor (az MKE tisztújító Küldöttközgyűlése várhatóan 2011. júniusban lesz).
- A szakosztály (szakcsoport) és a területi szervezet tisztújító taggyűlése titkosan (a munkahelyi szervezet tisztújító taggyűlése nem feltétlenül titkosan) választ vezetőséget.
- A szakosztály (szakcsoport), területi szervezet és munkahelyi csoport 4 évre elnököt, vezetőséget, valamint a Küldöttközgyűlésre küldöttet/küldötteket választ. A szakosztályhoz tartozó szakcsoport(ok) nem, csak a szakosztály választ küldöttet. Adott egyesületi szervezet küldötteinek számára vonatkozó szabály, hogy minden megkezdett 100 tag után 1 fő küldött választható.
- A szakosztály (szakcsoport), területi szervezet és munkahelyi csoport vezetősége a tagjai köréből titkárt és más tisztségviselőket választhat.
- A szakosztály (szakcsoport) és területi szervezet tisztújító taggyűlésének helyét és időpontját az MKE-honlapon (www.mke.org.hu) meg kell jelentetni. A munkahelyi csoportok tisztújító taggyűléseire nézve ez nem kötelező.

7. A tisztújító Küldöttközgyűlésen a már előzetesen megválasztott küldött/küldöttek képviselik az egyesületi szervezetet.

Budapest, 2010. október 11.

Kovács Attila

főtitkár

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL LXVI. No. 2. February 2011

CONTENTS

- György Mosonyi: A Hungarian state company becomes a regional multinational corporation. The two-decade development history of MOL Plc. 34
- 45th Colloquium on Coordination Chemistry
- Tamás Gajda: An overview 37
- Péter Buglyó: Novel semi-sandwich Ruthenium(II) complexes: solid phase and solution equilibrium investigations 37
- Tamás Jakusch, Tamás Kiss: Biospeciation of Vanadium in blood serum 40
- Gábor Lente: Interpretation of absolute asymmetric reactions 41
- Zsolt Valicsek, Róbert Huszánk, Gergely Harrach, Ottó Horváth: Equilibrium, photophysical, photochemical, and quantum chemical investigation of out-of-plane metalloporphyrins 42
- Dezso Csupor, András Szekeres, Tatsimo N. Simplicio Joel, Anita Kecskeméti, Erika Vékes, Katalin Veres, Edvárd Sulyok, Kálmán Szendrei, Judit Hohmann: Do plants synthesize Viagra? „Plantal” nutritional supplements faked with synthetic active agents 45
- Bruckner Room Lectures
- Péter Kele: Fluorescent compounds for (bio)orthogonal labeling 50
- Truong Son Pham, Katalin Gönczi, János B. Czirok, Béla Mátravölgyi, Szabolcs Solyom: Novel chiral catalysts for the stereoselective synthesis of aminophosphonic acids 51
- Tibor Braun: European Inventor Award 2010. Wolfgang Krätschmer and the pandemic spread of fullerene investigations 57
- Chembits (Edited by Gábor Lente) 60
- Celebration. Professor György Bazsa at 70 62
- The Society's Life 63
- News of the Month 64



A 2010. évi Magyarországi Gyógyszerkutatásért díj



A Magyarországi Gyógyszerkutatásért Alapítvány kuratóriuma és az eddigi díjazottak a 2010. évi Magyarországi Gyógyszerkutatásért díjat *Korbonits Dezső* professzornak, a sanofi-aventis/Chinoin nyugalmozott tudományos osztályvezetőjének ítelték oda a gyógyszerkutatás területén folytatott eredményes, originális magyar és reprodukciós gyógyszerek kifejlesztését és terápiás alkalmazását eredményező kiemelkedő kutatómunkájáért, azon meghatározó oktatói és tudománytörténeti aktivitásáért, amellyel nagymértékben hozzájárult a gyógyszerkutatással és fejlesztéssel foglalkozó elkötelezett újabb generációk neveléséhez, a több mint száz éves magyar gyógyszeripar nemzetközileg is magasra értékelt tevékenységéhez.

A díjazott kiemelkedő eredményének számít a jelentős gazdasági eredményt biztosító, új típusú köhögéscsillapító Libexin és az antianginás hatású Senzit eredeti magyar molekulák kifejlesztése – a készítmények több országban is a mindennapi terápia részévé váltak – a reprodukciós kutatások során a corontin, pentoxifyllin, szulfakinoxalin, verapamil, albandazol hatóanyagokra kidolgozott, szabadalmilag független gyártó eljárások.

Tudományos eredményei közül kiemelkednek a heterociklusos vegyületek gyűrűtranszformációja és a gyűrű-lánc tautóméria területein nemzetközileg is magasra értékelt kutatásai, amelyekből több mint 100, magas impakt faktorú folyóiratban megjelent tudományos közlemény, 100 alap-szabadalom, hazai és nemzetközi konferenciákon elhangzott több mint 150 előadás született.

Több évtizedes egyetemi oktatómunkája során a tehetséges fiatalok több generációját nyerte meg a magyar gyógyszeripari hagyományok folytatásának. Elmélyült tudománytörténeti tevékenységével jelentősen hozzájárult a magyar gyógyszerkutatási hagyományok megismertetéséhez.

Hermecz István

Gábor Dénes-díj, 2010

Az 1989-ben alapított NOVOFER Alapítvány immár 22. alkalommal hirdette meg nyilvánosan a Gábor Dénes-díjra történő felterjesztési felhívását. A díjakat 2010. december 16-án adták át a Parlament Főrendiházi termében. Az ünnepségen hét Gábor Dénes-díjat, két „In memoriam Gábor Dénes” elismerést és egy megosztott Gábor Dénes Tudományos Diákköri Ösztöndíjat adtak át.

Gábor Dénes-díjban részesült többek között *Kéri György* vegyész, biokémikus, a Semmelweis Egyetem Orvosi Vegytani Intézet kutatóprofesszora, a Vichem Kft. ügyvezető és tudományos igazgatója, a hazai és nemzetközi biotechnológiai kutatás-fejlesztés terén nemzetközi szinten elismert és kiemelkedő szakmai tevékenységéért, a peptidhormonok szerkezetének és hatásainak vizsgálata, új rákellenes peptidszármazékok kifejlesztése terén elért eredményeiért, a fájdalomcsillapításban és az ízületi betegségek gyógyításában új perspektívát nyitó TT232 jelű rákellenes hatású peptid létrehozásában vállalt meghatározó szerepéért, a jelátviteli terápiában, illetve kis molekulájú kinázgátlók gyógyszerfejlesztésében elért világszerte elismert eredményeiért, 69 találmány kidolgozásában nyújtott alkotó közreműködéséért, a magyar tudományos kutatási eredmények nemzetközi ismertségét és tekintélyét egyaránt növelő biotechnológiai cég megalapításáért; *Szépvölgyi János* vegyész-mérnök, az MTA doktora, az MTA Kémiai Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet igazgatója, a műszaki kémia, ezen belül egyes korszerű anyagok szintézise, a plazmakémiai és környezeti kémiai, vala-

mint anyagtudományi kutatások és a korszerű műszaki kerámiák terén végzett nemzetközi szinten is elismert, kiemelkedő tudományos teljesítményéért, 36 szabadalmaztatott találmány kidolgozásában nyújtott fejlesztőmunkájáért, a műszaki értelmiségi utánpótlás neveléséért, a doktori képzést segítő iskolateremtő tevékenységéért, a természettudomány népszerűsítésében vállalt kiemelkedő szerepéért.

K. T.

Rácz Tanár Úr Életműdíj, 2010

2010-ben ünnepelte 10 éves jubileumát a Rácz Tanár Úr Életműdíj, amelyet minden évben két-két olyan kémia-, matematika-, fizika- és biológianár kaphat meg, aki kimagasló szerepet tölt be az oktató-nevelő munkában, a tehetséggondozásban, tantárgya népszerűsítésében. A díjat három magyarországi nagyvállalat, a Richter Gedeon, az Ericsson Magyarország és a Graphisoft alapította. A díjat olyan pedagógus kaphatja meg, aki méltó Rácz László (1863–1930), a budapesti Fásori Evangélikus Gimnázium legendás hírnök oktatója – egyebek között Wigner Jenő és Neumann János matematikatanára – nevére.



A Rácz Tanár Úr Életműdíj 2010. évi kitüntetettjei
(balról a második dr. Molnár József, hatodik Dénes Sándorné)

Kémiából az egyik 2010. évi kitüntetett *dr. Molnár József*, a soproni Evangélikus Gimnázium tanára. Neve országosan ismert két digitális tankönyve alapján, alapító tagja a Kutató Tanárok Országos Szövetségének, számos (68!) publikációja jelent meg hazai és külföldi folyóiratokban és konferenciákon, 2009-ben diákjai különdíjat nyertek az osztrák kémia-tanári egyesület nemzetközi projektversenyén. A másik kitüntetett kémiatanár, a nagykanizsai *Dénes Sándorné* neve inkább csak szűkebb pátriájában, Zala megyében ismert. Munkaszeretete, igényessége példamutató, több továbbképzésen vett részt, és az információkat továbbadandó maga is szervezett továbbképzést megyéjében. A róla készült portré-filmben kristálymodellekkel körülvéve mosolyogva mondja, hogy nagyon szereti a kémiát, a kísérletezést.

A jubileumi alkalomra a díjat kezelő alapítvány szép kiállítású könyvvel kedveskedett az elmúlt tíz év kitüntetett tanárainak, köztük a húszt kémia-tanárnak is. A kötet bevezetőjében *Króó Norbert* akadémikus, az alapítvány kuratóriumának elnöke és *Bogsch Erik*, a Richter Gedeon vezérigazgatója is hangsúlyozza, hogy a természettudományos oktatás magas színvonala, a tanárok szerepe kulcskérdés a jövő sikereinek szempontjából.

Nagyon jó lenne, ha a könyv nemcsak a szakma belső ügye lenne, hanem a köztudatba is elkerülne a pedagógusok társadalmi megbecsülését elősegítendő.

Szívből gratulálunk a díjazottaknak!

Riedel Miklós

FOTOMÉTEREK

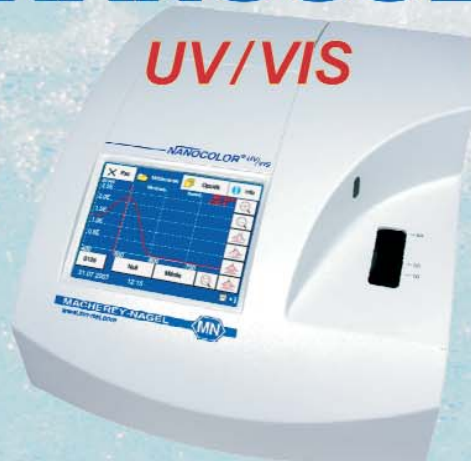
VIS * UV/VIS * SCAN

opciók alapján:

- 90/180 fokos **zavarosság** mérés
- **szín** mérés
- **szoftver magyar nyelven**



NANOCOLOR VIS
NANOCOLOR UV/VIS



- ◆ Színes, világított érintőképernyő
- ◆ 0,3 nm hullámhosszfelbontás
- ◆ Minden Nanocolor teszt tárolva
- ◆ Automata küvettafelismerés:
 $\phi=16$ mm, 10x10, 10x20 és 10x50 mm
- ◆ 100 saját módszer tárolása,
4-ed fokú polinomig
- ◆ Memória: 1000 adatsor
- ◆ Igen gyors, finom szkennelés
- ◆ +ingyen: zavarosság mérés
90 és 180 fokban, szoftver, tartozékok
- ◆ Ingyenes internetes frissítés
- ◆ 3 USB + 1 RS232 interfész
(PC, nyomtató).



AKTIVIT Kft.

1145 Budapest, Pétervárad u. 14.
Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865.



Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web: www.aktivit.hu
Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök

PRECÍZ FELÉPÍTÉS
SZOLID ÁR
EGYSZERŰ KEZELÉS

MACHEREY-NAGEL

www.mn-net.com

