

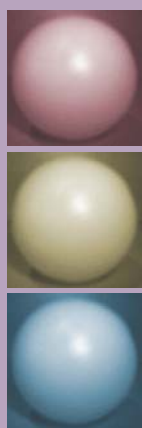
A TARTALOMBÓL:

MOL Gumibitumen

Heparinoid szulfonsavak
szintézise

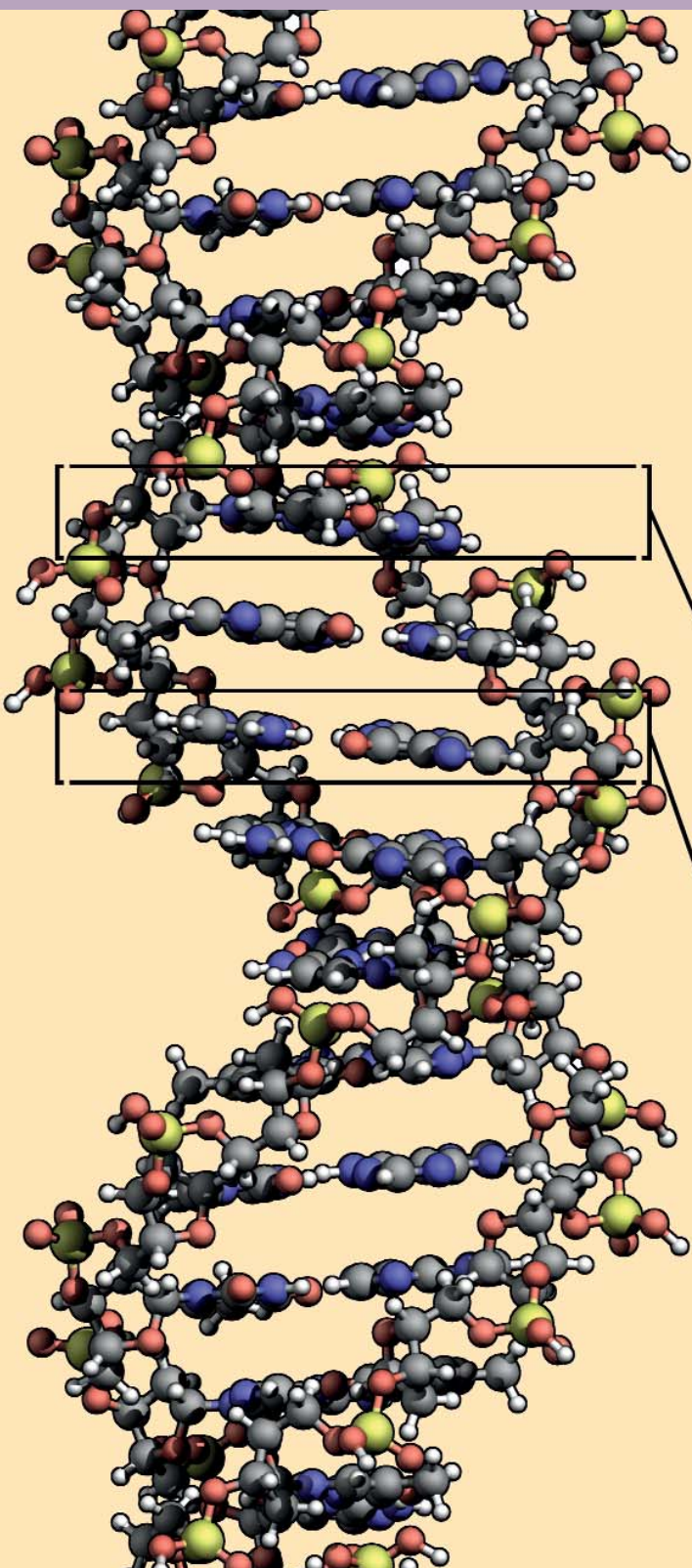
Amikor a kockák
istent játszanak

Az év ismeretterjesztő
tudósa



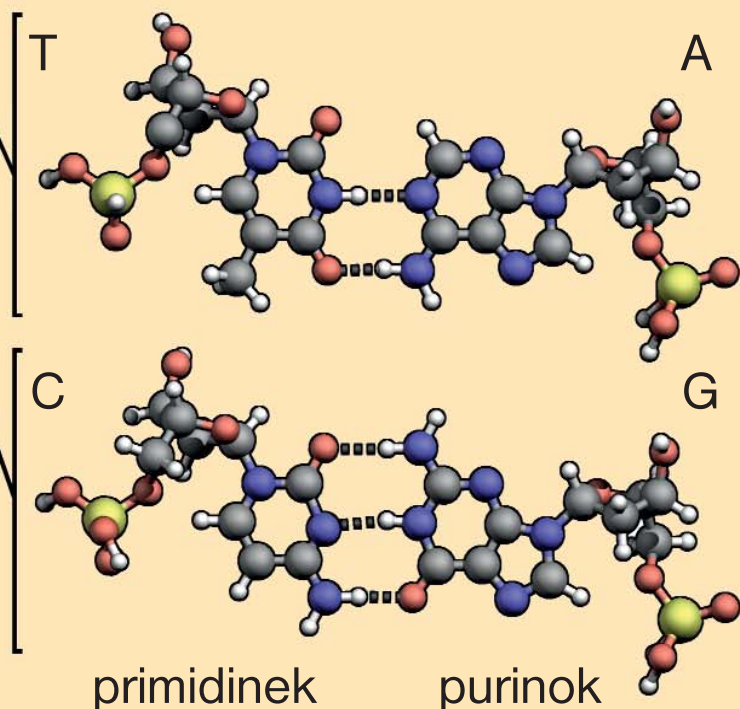
MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXVIII. ÉVFOLYAM • 2013. SZEPTEMBER • ÁRA: 850 FT



*60 éve írták le
a DNS szerkezetét*

- hidrogén
- oxigén
- nitrogén
- szén
- foszfor



A lap megjelenését
a Nemzeti Kulturális Alap
támogatja

20 éves
az
nka

Egy drámaian más ICP-MS

A **Thermo Scientific iCAP Q ICP-MS** analitikai teljesítményben és az egyszerű kezelhetőségben drámaian különbözik a korábbi készülékektől. Az új Q Cell flatapol technológia a jelenleg elérhető legjobb kimutatási határokat biztosítja a teljes analízis idő akár 50%-os csökkenése mellett. A néhány kattintással elérhető automatizált beállítások segítségével gyorsan fejleszthet megbízható mérési módszereket, anélkül hogy az ICP-MS technika szakértője lenne. Az egyszerű karbantartás és a rendkívül kompakt méretek költséghatékony üzemeltetést biztosítanak.

nyomelem analízisre

• thermoscientific.com/dramatic



ICE 3000 AA család
Innovatív dizájn, automatikus váltás a láng és grafitkemence üzemmódok között



iCAP 7000 ICP-OES család
Az elérhető legnagyobb teljesítményű ICP-OES megbízható rutin multielemes analízisre



iCAP Q ICP-MS
Kiemelkedő teljesítményre, termelékenységre és egyszerű használatra tervezve

Kizárólagos képviselő:

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

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

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

20 éves
UNICAM
Magyarország Kft.



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXVIII. évf., 9. szám, 2013. szeptember



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

Szerkesztőség:

Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA

Szerkesztők:

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

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
[SZEKERES GÁBOR] örökös főszerkesztő,
ANTUS SÁNDOR, BECK MIHÁLY,
BIACS PÉTER, BUZÁS ILONA,
GÁL MIKLÓS, HANCSÓK JENŐ,
JANÁKY CSABA, JUHÁSZ JENŐNÉ,
KALÁSZ HUBA, KEGLEVICH GYÖRGY,
KOVÁCS ATTILA, KÖRTVÉLYESSY 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.: 36-1-225-8777, 36-1-201-6883,
fax: 36-1-201-8056
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: 36-1-455-5050

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

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

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

Aktuális számainak 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 nagy nyári hőség elmúltával, az iskolakezdésre színes összedállítással örvendeztet meg bennünket a Magyar Kémikusok Lapja szeptemberi száma. A felelős szerkesztő jóvoltából a kiadvány vegyipari és kémiai vonatkozású témákat tartalmaz, elkalandozik a kémia határterületeire is, ahonnan magazinszerűen érdekességeket mutat be.

Az ipari témákat Geiger András és szerzőtársainak írása nyitja, amely a MOL Csoport és a Pannon Egyetem egyik sikeresnek ígérkező, ipari megvalósítást nyert kutatási témáját, a hulladék gumiabroncsok gumiőrleményéből és bitumból kiinduló gumibitumen előállításának és alkalmazásának első eredményeit ismerteti. Ehhez is kapcsolódhat Körtvélyessy Gyula biztonsági adatlapokkal foglalkozó sorozatának hulladékokkal és visszanyert anyagokkal foglalkozó újabb fejezete.

A kémia és határterületei részben először, a Bruckner-termi előadások sorozatban, a Debreceni Egyetem két karának kutatói, Herczeg Mihály és szerzőtársai, köztük Antus Sándor akadémikus, a heparinoid szulfonsav (stabilabb, szulfonsav típusú véralvadásgátló) szintézisének újabb eredményeiről írnak. A Szegedi Egyetem két munkatársa, Tóbiás Roland és Tasi Gyula docens ismerteti – Andrej Kolmogorov és Neumann János (az egyik „marslakó”) munkásságába betekintve – a kémiai reakciók determinisztikus kinetikai modelljét és annak általános megoldását Taylor-sor segítségével, valamint a kémiai reakciók sztochasztikus kémiai modelljét és annak Monte-Carlo-módszerrel történő megoldását. Ezután Schiller Róbert fizikai kémikus, „az év ismeretterjesztő tudósa” dolgozatával találkozunk, aki a röntgensugár 1895. évi felfedezésének és alkalmazásának tudománytörténeti áttekintése mellett irodalmi forrásokat idéz és képzőművészeti alkotásokat mutat a röntgenkép misztériumáról. Fűri Mária ezt követő közleménye a DNS („a kettős spirál”) hatvan évvel ezelőtti felfedezésének lépéseit idézi fel. Silberer Vera interjújában, amelyet Kovács József csillagásszal készített, a Naprendszeren belüli víz felismerésének módszereiről, valószínűsíthető keletkezéséről és sorsáról olvashatunk. Papp Sándor József Vegyészkalendárium rovatában ezúttal két Dewar (az 1918-ban született Michael James Steuart, a szemiempirikus kvantum-kémiai modellek művelője) és az 1842-es születésű Sir James (a Dewar-edény feltalálója) életét és kémiai munkásságát foglalja össze. Lente Gábor a Vegyészletekben a szokásos rövid hírek mellett most egyoldalas ismertetést közöl a 2012. szeptemberi IgNobel-díjak tíz kategóriájának átadásáról (e díj a Nobel-díj egyesült államokbeli paródiája, a hasonló hangzású ignoble szó magyarul meglehetősen negatív minősítésre utal). Olvasóink többek között megtudhatják, hogy a vélekedés szerint mitől zöldülhet meg az emberek szőrzete (a megoldásért a felfedező kémiai IgNobel-díjat kapott).

A kiadványból nem hiányzik Banai Endre szokásos iparihír-összefoglalója, és az egyesületi híreket is elolvashatjuk.

Szeretettel ajánlom tagságunk figyelmébe a Magyar Kémikusok Lapja sokoldalú és olvasmányos 2013. szeptemberi számát.

Rácz L.

Rácz László
a szerkesztőbizottság tagja

TARTALOM

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

Geiger András, Holló András, Szalmásné Pécsvári Gabriella,
Pavol Fehér, Gergő Péter, Bartha László: MOL Gumibitumen 258

Körtvélyessy Gyula: Biztonsági adatlapok. Hetedik rész.
Hulladékok és visszanyert termékek 262

Bruckner-termi előadás

Herczeg Mihály, Mező Erika, Eszenyi Dániel, Pataki Richárd,
Borbás Anikó, Antus Sándor: Újabb eredményeink a heparinoid
szulfonsavak szintézisében 264

Tóbiás Roland, Tasi Gyula: Amikor a kockák istent játszanak.
110 éve született Neumann János és Andrej Kolmogorov 267

KITEKINTÉS

Schiller Róbert: Röntgenkép és szerelem 271

Fűri Mária: Egy hatvanéves felfedezés 273

Víz a Naprendszerben. Beszélgetés Kovács József csillagásszal 276

VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET

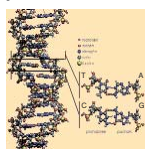
Vegyészkalendárium (Pap József Sándor rovata) 280

VEGYÉSZLETEK

Lente Gábor rovata 282

EGYESÜLETI ÉLET

A HÓNAP HÍREI 284



Címlap:
60 éve írták le
a DNS szerkezetét
(grafika:
Richard Wheeler)



2013. július 25-én
a Google-doodle
Rosalind Franklin
93. születésnapját
közönlötte



Geiger András*–Holló András*–Szalmásné Pécsvári Gabriella*–
Pavol Fehér**–Gergó Péter***–Bartha László***

■ * MOL Csoport, Downstream Fejlesztés, MOL | ageiger@mol.hu

■ ** MOL Csoport, Downstream Fejlesztés, Slovnaft

■ *** Pannon Egyetem, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

MOL Gumibitumen*

A bitumeneket és gumiőrleményeket felhasználó gumibitumen-előállítás nem csupán a hulladékká vált gumibroncsok gumirészének újrahasznosítását teszi lehetővé, hanem lehetséges megoldást is jelent az aszfaltutak minőségének és tartósságának növelésére.

A hagyományos módon épült aszfaltutakhoz képest a gumibitumenek útépitési felhasználása előnyeként főleg a tartósabb utat, a hosszabb élettartamot, a kisebb életciklus- és útfenntartási költséget, a kisebb deformációs hajlámot és a közlekedési zaj csökkenését szokták kiemelni. A pozitívumok mellett a gumibitumen alkalmazásának nehézségei is vannak, például speciális feldolgozóberendezéseket igényel, és emiatt mind a mai napig nem terjedt el széleskörűen. Az anyagot elsősorban az Amerikai Egyesült Államokban alkalmazzák.

A MOL a Pannon Egyetemmel együtt kifejlesztett egy új, szabadalmi oltalommal rendelkező gyártástechnológiát (HU226481). Ennek alkalmazásával új típusú gumibitumen állítható elő, ami MOL Gumibitumen néven kerül piaci forgalomba. A MOL Gumibitumen a MOL által is gyártott polimerrel módosított bitumenhez (PmB-hez) hasonlóan szállítható, tárolható és alkalmazható, speciális berendezéseket és új útépitési technológiát nem igényel. Az elvégzett aszfalttesztek azt igazolták, hogy a MOL Gumibitumennel a legnagyobb terhelésű aszfaltutak építéséhez használt PmB-hez hasonló eredmények érhetők el.

Az eddigi eredmények és tapasztalatok arra hívják fel a figyelmet, hogy a gumibitumen nagy volumenű útépitési alkalmazása az utak állapotának és minőségének ugrásszerű javítása mellett a hulladék gumibroncsok környezetbarát újrahasznosítására is lehetőséget kínál.

2010-ben a MOL 128 millió Ft vissza nem térítendő pályázati támogatást nyert el a Gazdaságfejlesztési Operatív Program keretében. A támogatott projekt fő részei:

- A saját szabadalmon alapuló gumibitumen-gyártástechnológia kialakítása a Zalai Finomítóban (prototípus üzem létrehozása);
- K+F munka a technológia és a receptúrák véglegesítésére;
- aszfalttesztek és tesztutak építése a prototípus üzemben gyártott termék felhasználásával;
- a MOL Gumibitumen marketingje, a piaci bevezetés elősegítése.

Az elkészült prototípus üzemben 2012 második felében elkezdődött a gumibitumen-gyártás.

Az iparilag fejlett országokban évente, egy személyre vonatkoztatva, 9 kg elhasznált gumibroncs keletkezik [1]. Az Amerikai Egyesült Államokban 2–3 milliárd darab elhasznált gumibroncsot halmoztak fel, míg az Európai Unióban 5,7 millió tonnára becsülhető a lerakott hulladék gumibroncsok mennyisége [2]. Magyarországon mintegy 2,7 millió gépjármű közlekedik, és mintegy 40 ezer tonna hulladék gumibroncs keletkezik évente. A hulladék gumibroncsok egyik lehetséges hasznosítási módja a gumiőrlemények előállítása, majd bitumenekhez való keverése és az így gyártott gumibitumen útépitési felhasználása.

* Az eredeti közlemény a MOL Group Scientific Magazine 2012/2. számában „MOL Rubber bitumen – Part I” címmel jelent meg.

A gumiőrlemények aszfaltgyártási és útépitési felhasználását tekintve megkülönböztethetünk száraz és nedves eljárást [4, 5]. A száraz eljárás során a gumiőrleményt a bitumennel egyszerre adagolják az ásványi anyaghoz az aszfaltkeverőben [4, 6]. A nedves eljárás során a bitumént és a gumiőrleményt magas hőmérsékleten összekeverik: ilyenkor a keverési paraméterektől függően bizonyos gumiőrlemény-duzzadási és -oldódási folyamatok is lejátszódhatnak [4, 5, 7]. A nedves eljárás alkalmazásával a gumiőrlemény kedvező hatása sokkal intenzívebben jelentkezik, mint a száraz eljárás során. A kémiaiilag módosított gumibitumen előállítása során felületaktívált gumiőrleményt alkalmaznak és/vagy speciális adalékot használnak a gumiőrlemény és bitumen keverésekor abból a célból, hogy javítsák a gumiőrlemény és a bitumen összeférhetőségét [8–10]. Ilyen alkalmazások során a



gumiőrlemény hatása a módosított bitumenek előállításához alkalmazott speciális polimerekéhez hasonló, vagyis a gumiőrlemény aktív módosítószerként fejt ki hatását.

Már a kezdeti alkalmazások igazolták a gumibitumenek alkalmazásának előnyeit és azt is, hogy az elhasznált gumiabroncsok ilyenfajta hasznosítása lényegesen többet jelent egyszerű hulladékhasznosításánál. A gumibitumennel épített aszfaltutak minősége és tartóssága felülmúlta a hagyományos bitumennel épített utakét [4, 11]. A gumibitumen felhasználásával épített utaknak főként az alábbi előnyei emelhetők ki a normál bitumennel épített aszfaltutakhoz képest [4, 12–16]:

- hosszabb élettartam,
- kisebb fenntartási költség,
- szélesebb alkalmazhatósági hőmérséklet-intervallum (jobb nyári és téli viselkedés),
- nagyobb terhelhetőség,
- kisebb közlekedési zaj,
- biztonságosabb közlekedés.

Megfelelő műveleti paraméterekkel olyan gumibitumen gyártható, amely bizonyos tulajdonságokban (pl. hidegoldali viselkedés) a polimerrel módosított bitumeneknél is jobb minőséget és aszfaltjellemzőket eredményez [17].

A gumibitumen alkalmazása napjainkban is az Egyesült Államokban a legelterjedtebb, ahol a gumibitumen útépitési kötőanyagot elsősorban az aszfaltgyártás közelében állítják elő mobil gumibitumen-keverő üzemben, a gyártás után pedig szinte azonnal felhasználják a gumiszemcsék kiülepedésének elkerülése miatt [18]. A gumibitumen és a felhasználásával épített aszfaltutak előnyei Európában is egyre számottevőbbek. A környezetvédelmi és minőségi előnyöket felismerve 2007-ben Portugáliában kormányrendeletet fogadtak el a gumibitumen útépitési alkalmazásának elősegítésére [19].

Az előnyök mellett hátrányokat, műszaki nehézséget és bizonytalanságot is említ a szakirodalom a gumibitumen-gyártás és -felhasználás kapcsán. Ezek közé tartozik a gumibitumen-gyártó üzem beruházási költsége, a gumibitumen-gyártással járó emisszió, az aszfaltkeverő üzem átalakításának igénye, valamint a kötőanyag megszokottnál lényegesen nagyobb viszkozitása miatt egyes esetekben a gumibitumenes aszfalt tömöríthetőségi nehézségét is kiemelik [13, 15, 20–22]. Termékminőségi szempontból a gumibitumen széles körű elterjedésének az alábbiak a legfőbb akadályai:

- alkalmazási nehézségek a megszokottnál nagyobb viszkozitás miatt [13],
- nem megfelelő tárolási stabilitás (fázisszétválás) [22],
- változó termékminőség a változó gumiőrlemény-minőség miatt [23, 24].

Új típusú nedves eljárás

A nedves eljárás alkalmazása során a bitumént és a gumiőrleményt az aszfaltkeverés előtt érintkeztetik, azonban a gumiőrlemény csupán csekély mértékben oldódik az alkalmazott fázisérítkeztetési paraméterek mellett [13, 24]. Az általánosan alkalmazott gyártási körülmények között a gumiőrlemény polimer láncainak devulkanizációja és depolimerizációja kismértékben vagy egyáltalán meg sem történik, főként csak a bitumen olajos komponenseinek adszorpciója játszódik le a gumiőrlemény felületén [5, 7]. Ez a folyamat a gumi-bitumen rendszer jelentős viszkozitásnövekedését idézi elő. Ugyanakkor a gumiőrleményből ki-

oldódó lágyító olajok hatása ellentétes. A nedves eljárást alkalmazó technológiáknál a felhasznált gumiőrlemény 85–90 m/m%-a visszanyerhető a termékből. Az oldatba kerülő 10–15 m/m% főként a gumimátrixból kioldódó, a gumiabroncs gyártásához felhasznált lágyítókból származik, azaz a gumiőrlemény polimer szerkezete gyakorlatilag változatlan marad a gumibitumen-gyártás során.

A MOL és a Pannon Egyetem közös K+F tevékenysége a gumibitumenek területén a 2000-es évek elején kezdődött. A célkitűzés olyan gumibitumen-gyártó technológia kidolgozása volt, amely a kőolaj-finomítóban megvalósítható, nem igényel speciális gyártóüzemet, a termék pedig rendelkezik a gumibitumen ismert előnyeivel, illetve a legjobb minőséget képviselő polimerrel módosított bitumenekhez hasonlóan szállítható és alkalmazható, azaz az aszfaltkeverő telepen és az útépitésnél sincs szükség speciális eszközökre. A több évig tartó K+F tevékenység eredményeként született egy szabadalmi oltalommal (HU226481) védett új nedves eljárás [25]. A gyártási folyamat első technológiai lépésében a gumiőrlemény magas hőmérsékleten történő részleges degradációs folyamatai mennek végbe. A következő technológiai lépésben kisebb hőmérsékletű, a revulkanizációs folyamatokat elősegítő fázisérítkeztetés történik. A gyártáshoz egy multifunkciós adalékot használunk, ami egyrészt a gumiőrlemény oldódási folyamatait és a gumi-bitumen rendszer összeférhetőségét javítja, másrészt viszkozitáscsökkentő funkciója miatt a termék alkalmazhatóságának (az aszfalt keverőtelepi szivattyúhatósága, porlasztás, tömöríthetőség) javításában is jelentős szerepe van. A gumiőrlemény teljes oldódása nem megy végbe a gyártás során (ugyanis ez már a termék minőségének rovására menne), azonban a felhasznált gumiőrleménynek így is jelentős része, legalább fele feloldódik, és a bitumenbe kerülő polimerek aktív módosító szerként javítják a bitumen tulajdonságait. A fel nem oldódott, duzzadt gumiszemcsék az alacsony hőmérsékleten bekövetkező termikus repedésekkel szembeni ellenálló képességet javítják, ezzel az aszfaltburkolatok téli viselkedését kedvező irányba változtatják.

A gumiőrlemény minősége

A gumiőrlemény-minőség meghatározó tényező az előállított gumibitumen termék minőségében. Tiszta, ásványi anyag, agyag- és egyéb szennyeződéstől mentes, hulladékká vált gumiabroncs alkalmazható a gumiőrlemény gyártásához. Az őrlés során a gumiabroncs gyártásához felhasznált fémerősítést és a textil alkotórészeket elválasztják a gumitól. Ezek az alapfeltételei a tiszta és megfelelő minőségű gumiőrlemény előállításának. A gumibitumen-gyártás szempontjából a gumiőrlemény legértékesebb komponense a poliizoprén (természetes és mesterséges). A személygépkocsik gumiabroncsaiból előállított gumiőrlemények poliizoprén-tartalma 10–20 m/m%, teherautók gumiabroncsai esetén ez az érték 35–45 m/m%. A gumiőrlemények az ASTM D 297–93 [26] alapján meghatározott további alkotórészei a szintetikus gumik (15–45 m/m%), a korom (25–30 m/m%), a lágyítók (5–15 m/m%) és a szervesetlen töltőanyagok (5–15 m/m%). Az elmúlt évek kísérleti munkájának eredményeként az ASTM D297-93 szerinti összetétel-meghatározásra alapuló előírást dolgoztunk ki a gumibitumen-gyártáshoz felhasználható gumiőrlemények minőségére.

A piacon jelenleg rendelkezésre állnak olyan gumiőrlemények, amelyek teljesítik a MOL Gumibitumen gyártásához megkövetelt minőséget és a mennyiségi igényt is lefedik.



Kísérleti gumibitumen-gyártások és tesztút-építések – az elmúlt évek eredményei

Az elmúlt évek kutató-fejlesztő tevékenységének eredményeként üzemi gumibitumen-tesztgyártásokat hajtottunk végre a MOL zalaegerszegi és pozsonyi finomítójában. Ezek a tesztgyártások a meglévő, modifikált bitument gyártó üzem ideiglenes átalakítása után kezdődhettek meg. Az üzemi gumibitumen-tesztgyártások alapvető információkat szolgáltattak a későbbi gumibitumen prototípus üzem kialakításához.

A tesztgyártások gumibitumen termékét aszfaltgyártáshoz és tesztutak építéséhez használták fel Magyarországon és Szlovákiában. Az **1. ábra** gumibitumen felhasználásával gyártott AC11 aszfalt



1.a–d ábra. MOL Gumibitumen felhasználásával gyártott AC11 aszfalt alkalmazásával hazai aszfalt kopóréteg építések különböző helyszíneken. a) Zalaegerszeg – 2004, b) Veszprém – 2006, c) Veszprém – 2007, d) Gyál – 2008

falt alkalmazásával hazai aszfalt kopóréteg építéseket mutat be különböző helyszíneken. Az aszfaltgyártáshoz, az aszfaltkeverék helyszínre szállításához, a terítéshez és a bedolgozáshoz (tömörítéshez) a meglévő aszfalt- és útépítő-ipari infrastruktúrát használtuk, az elvégzett részfolyamatok műszaki probléma nélkül zajlottak. Annak ellenére, hogy a 2007-ben elvégzett veszprémi aszfalt kopóréteg építésre (*1.c ábra*) kedvezőtlenül alacsony, 6–7 °C környezeti hőmérsékleten került sor, az útépítő szakemberek nem tapasztaltak nehézséget a gumibitumen felhasználásával gyártott AC11 aszfalt bedolgozásakor.

1. táblázat. Az aszfalttesztekhez felhasznált bitumenek tulajdonságai

Jellemző	Vizsgálati eljárás	MOL Gumi-bitumen	50/70 bitumen	25/55-65 PmB
Lágyuláspont, °C	MSZ EN 1427	59	51	74
Penetráció 25 °C-on, 0,1 mm	MSZ EN 1426	65	58	45
Fraass-töréspont, °C	MSZ EN 12593	–24	–12	–14
Dinamikai viszkozitás 180 °C-on, mPa·s	MSZ EN 13702-2	490	90	410

A Zalai Finomítóban 2007-ben gyártott tesztüzemi MOL Gumibitumen felhasználásával aszfaltteszteket is végzett a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem. Célunk az volt, hogy összehasonlítsuk a különböző bitumenes kötőanyagok felhasználásával előállított aszfaltokat. A MOL Gumibitumen mellett 50/70 normál útépítési bitument és 25/55-65 polimerrel módosított bitument (PmB-t) használtak fel a tesztekhez. (Az 50/70 bitumen a hazánkban legnagyobb mennyiségben felhasznált útépítési bitumen, míg a 25/55-65 PmB a legjobb minőségű útépítési kötőanyagot jelenti Magyarországon.) A háromféle bitumen néhány jellemzőjét az **1. táblázat** tartalmazza.

A MOL Gumibitumen felhasználásával előállított AC11 aszfalt minden vizsgált jellemzője jobb volt, mint az 50/70 bitumen fel-

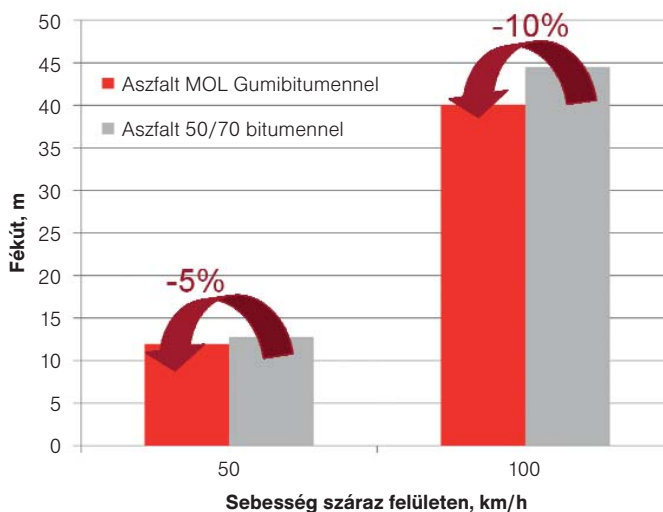
2. táblázat. A három különböző bitumennel készült AC11 aszfalt összehasonlítása

	Hazai követelmény	MOL Gumibitumen	50/70 bitumen	25/55-65 PmB
Kötőanyag-koncentráció, m/m%		5,1	5,1	5,1
Permanens deformáció/Keréknyomvályú teszt (EN 12697-22)				
Relatív deformáció, %	max. 5,0	1,0	3,6	1,0
Fáradási ellenállás (EN 12697-24)				
E_{hhmax} ($N=10^6$), microstrain	megadandó	160	143	201
Aszfaltrepedés*				
Repedési hőmérséklet, °C	max. –18,0	–31,0	–18,0	–24,8

* Thermal Stress Restrained Specimen Test (TSRST) [27]

használásával előállított aszfalté (**2. táblázat**). A MOL Gumibitumen és a 25/55-65 PmB-tartalmú aszfaltok 60 °C-on elvégzett permanens deformációjának vizsgálata azonos eredményt adott, azaz a magas hőmérsékletű (nyári) viselkedést tekintve azonosan teljesített a kétféle kötőanyag. A közepes hőmérsékletű viselkedést jellemző fáradást tekintve a 25/55-65 PmB jobban teljesített a MOL Gumibitumennél, azonban az alacsony hőmérsékletű karkartert tekintve (téli viselkedés) a MOL Gumibitumenes aszfalt lényegesen kisebb repedési hőmérséklettel rendelkezett, azaz jobb a hidegoldali viselkedése.

2. ábra. Fékút különböző aszfaltokon, különböző sebességek esetén





A MOL Gumibitumennel és 50/70 bitumennel épített aszfaltfelületeken meghatároztuk a féktávolságot is (2. ábra). A vizsgálatokat a Continental Teves végezte a Veszprémben 2007 őszén felújított Budapest úton (1c ábra). Mindkét vizsgált sebesség mellett kisebb féktávolságot mértek a gumibitumenes aszfaltokon, mint a hagyományos bitumennel épített felületeken. Ezek az eredmények a gumibitumen közlekedéssbiztonsági előnyeire hívják fel a figyelmet, amelyek egy gyalogátkelőhely környezetében kiemelten fontosak lehetnek.

A gumibitumennel épített aszfaltutakon mért zajcsökkenést a szakirodalom is leírja [12]. Két különböző típusú aszfalt (SMA11 és AC11) folytak a közlekedési zajmérések Szlovákiában, a Vuis Cesty révén. A vizsgált SMA11 aszfalttal épített útszakasz egy része MOL Gumibitumennel, a másik része 65/105-65 PmB felhasználásával készült. A gumibitumenes aszfaltúton 3,2 dB ér-

3. táblázat. Közlekedési zaj különböző bitumennel előállított aszfaltokon

Aszfalt típusa	Kötőanyag	Közlekedési zaj 20°C-on, dB
SMA11	65/105-65 PmB	85,1
SMA11	MOL Gumibitumen	81,9
AC11	50/70 bitumen	80,2
AC11	MOL Gumibitumen	77,1

-3,1 dB -3,2 dB

téssel kisebb zajt mértek. Hasonlóak voltak a tapasztalatok, és mintegy 3 dB-lel kisebb zajhatást adott a gumibitumenes AC11 aszfaltfelület is, mint az 50/70 bitumennel épített kopórét (3. táblázat). A 3 dB zajcsökkenés a zajforrástól mért távolság megduplázásával egyenértékű.

A MOL Gumibitumen projekt

A sikeres gumibitumen-tesztgyártások, aszfalttesztek és útépitések azt igazolták, hogy a MOL Gumibitumen alkalmazása hozzájárulhat a jó minőségű és hosszan tartó utak koncepciójához. Ezenkívül elősegíti a hulladék gumiabroncsok környezetbarát újrahasznosítását és egy jelentős hozzáadott értékű termék gyártását.

A sikeres tesztek követően a MOL 2010-ben a Gazdaságfejlesztési Operatív Program keretében „A 21. század útburkolata” című pályázatát benyújtotta a Magyar Gazdaságfejlesztési Központ Zrt.-nek. A pályázati projektben az Euro-Novex Kft. és a Hornyák Kft. mint pályázati partner vett részt. Előbbi mint gumiórlemény-gyártó és -beszállító, utóbbi pedig mint aszfaltútépítő. A pályázat sikeres volt, és a MOL 128 millió Ft vissza nem térítendő, részben hazai, részben európai uniós finanszírozású támogatást nyert el. Ez az összeg 40% támogatási intenzitásnak felelt meg. A támogatási szerződés aláírását követően 2011 tavaszán indulhatott a pályázati projektben foglalt négy fő célkitűzés megvalósítása:

- a saját szabadalmon alapuló gumibitumen-gyártástechnológia kialakítása a Zalai Finomítóban (prototípus üzem létrehozása),
- K+F munka a technológia és a receptúrák véglegesítésére,
- aszfalttesztek és tesztutak építése a prototípus üzemben gyártott termék felhasználásával,
- a MOL Gumibitumen marketingje, piaci bevezetés elősegítése.

A prototípus üzem 2012 második felére elkészült, a sikeres üzemi tesztek után a MOL Gumibitumen, mint új útépitési bitumen termék, piacra került.



IRODALOM

- [1] Reschner, K., Scrap Tire Recycling, 2006. (http://www.entire-engineering.de/Scrap_Tire_Recycling.pdf)
- [2] European Tyre and Rubber Manufacturers' Association, End of life tyres – A valuable resource with growing potential – 2011 edition. (<http://www.etrma.org/uploads/Modules/Documentsmanager/brochure-elt-2011-final.pdf>)
- [3] Sinka, G.: A gumi és a környezetvédelmi szabályozás. Gondolatok és kérdések 2005 júliusában, Műanyag és gumi, (2005) 7, 42.
- [4] Zareh, A., Way, G.B., 35 Years of Asphalt-Rubber Use in Arizona, Proceedings of Asphalt Rubber 2006 Conference, Palm Springs, California, ISBN: 962-405-091-0, 2006, 17–37.
- [5] Zanzotto, L., Kennepohl, G.J., Development of rubber and asphalt binders by depolymerization and devulcanization of scrap tires in asphalt, Transportation Research Record, Materials and Construction, Vol. 1530, 1996, 51–58.
- [6] Pinheiro, J., Soares, J., The effect of crumb rubber and binder-rubber interaction time on the mechanical properties of asphalt-rubber mixtures (Dry process), Proceedings Asphalt Rubber 2003 Conference, Brasilia, Brazil, ISBN: 85-903997-1-0, 2003, 707–718.
- [7] Gawel, I., Stepkowski R., Czechowski, E., Molecular interactions between rubber and asphalt, Ind. Eng. Chem. Res. (2006) 45, 3044–3049.
- [8] US 5762700, Memon, M., Ghulam, M., Catalytic process for producing free radicals on crumb rubber, 1997.
- [9] US 5704971, Memon, M., Homogeneous crumb rubber modified asphalt, 1998.
- [10] Geiger, A., Bíró, Sz., Gergő, P., Hulladék gumiabroncsok hasznosítása, gumibitumenek előállítása és alkalmazása, Magyar Kémikusok Lapja (2008) 63, 198–202.
- [11] Takallou, M.B., Takallou, H.B., Benefits of Recycling Waste Tires in Rubber Asphalt Paving, Transportation Research Record, Vol. 1310, ISSN: 0361-1981, 1991, 87–92.
- [12] Carlson, D.D., Zhu, H., Xiao, C., Analysis of traffic noise before and after paving with asphalt-rubber, Proceedings Asphalt Rubber 2003 Conference, Brasilia, Brazil, ISBN: 85-903997-1-0, 2003, 413–428.
- [13] State of California Department of Transportation, Materials Engineering and Testing Services: Asphalt Rubber Usage Guide, 2006.
- [14] Choubane, B., Sholar, G.A., Musselman, J.A., Page G.C., Ten –Year Performance Evaluation of Asphalt-Rubber Surface Mixes, Transportation Research Record, Vol. 1681, ISSN: 0361-1981, 1999, 10–18.
- [15] Artamendi, I., Khalid, H., Fracture characteristics of crumb rubber modified asphalt mixtures, 3rd Euroasphalt & Eurobitume Congress, Vienna, Austria, 12–14 May, 2004.
- [16] Malpass, G.A., Khosla, N.P., Use of Ground Tire Rubber in Asphalt Concrete Pavements – A Design and Performance Evaluation, Transportation Research Record, ISSN: 0361-1981, Vol. 1515, 1995, 11–17.
- [17] Martínez, G., Caicedo, B., González, D., Celis, L., Performance of a test truck using crumb rubber asphalt and other modifiers, Proceedings of Asphalt Rubber 2006 Conference, Palm Springs, California, ISBN: 962-405-091-0, 2006, 863–884.
- [18] Shatnawi, S., Asphalt rubber maintenance treatments in California, Proceedings Asphalt Rubber 2003 Conference, Brasilia, Brazil, ISBN: 85-903997-1-0, 2003, 35–48.
- [19] Portuguese Government Order: Ministries of the Environment, Planning and Regional Development and of Public Works, Transportation and Communications, Number 4015/2007, January 30, 2007.
- [20] Burr, G., Tepper, A., Feng, A., Olsen, L., Miller, A., Crumb-Rubber Modified Asphalt Paving: Occupational Exposures and Acute Health Effects, National Institute for Occupational Safety and Health (NIOSH), Health Hazard Evaluation Report No. 2001-0536-2864, 2001.
- [21] Carlson, D., Zhu, H., Asphalt-Rubber – An Anchor to Crumb Rubber Markets, Third Joint UNCTAD/IRSG Workshop on Rubber and the Environment, International Rubber Forum Veracruz, Mexico, October 7, 1999.
- [22] Kandhal, P.S., Quality control requirements for using crumb rubber modified bitumen (CRMB) in bituminous mixtures, Journal of the Indian Roads Congress, No. 522, Vol. 67–1, April–June, 2006.
- [23] Hicks, R.G., Epps, J. A., Quality Control for Asphalt Rubber Binders and Mixes, Proceedings, Asphalt Rubber 2000, Portugal, 13–17, November, 2000.
- [24] Fontes, L., Pereira, P., Pais, J., Triches, G., Behaviour of Asphalt Rubber Mixtures with Different Crumb Rubber and Asphalt Binder Sources, Proceedings of Asphalt Rubber 2006 Conference, Palm Springs, California, ISBN: 962-405-091-0, 2006, 619–639.
- [25] HU 226481, Bíró, Sz., Bartha, L., Deák, Gy., Geiger, A., Chemically stabilized asphalt rubber compositions and a mechanochemical method for preparing the same, 2009.
- [26] American Society for Testing and Materials (ASTM) standard: ASTM D297-93(2006) Standard Test Methods for Rubber Products – Chemical Analysis.
- [27] Kanerva, H.K., Vinson, T.S., Zeng H., SHRP-A-401 Low-Temperature Cracking: Field Validation of the Thermal Stress Restrained Specimen Test, Department of Civil Engineering Oregon State University, Strategic Highway Research Program National Research Council, Washington DC, 1994.



Körtvélyessy Gyula

■ Email: gyula@kortvelyessy.hu

Biztonsági adatlapok. Hetedik rész

Hulladékok és visszanyert termékek

Fogalmak

Az egész kérdéskörben a legnagyobb problémát az okozza, hogy országonként és vállalatonként eltérő értelemben használják az ide vonatkozó fogalmakat. Ráadásul más fogalmakat használ a REACH és teljesen mást a 2013. január 1-től érvényes hulladéktörvény és csatolt rendeletei. Nem tudok és nem is lehet ez ügyekben igazságot tenni, ezért a következőkben praktikus oldaláról próbálom a kérdést megközelíteni.

A biztonsági adatlap szempontjából nyilvánvalóan csak a visszanyert vegyi anyagokról kell, hogy beszéljünk. Ezek lényege, hogy már értékes termék, és kettévágva a fele mennyiség ugyanazt a funkciót tudja, mint az eredeti. Ha ezek veszélyesek (és itt mondom el, hogy anyagok esetén a veszélyességet a CLP rendelet, keverékek esetén pedig még a 44/2000 EüM rendelet alapján kell megállapítani), akkor forgalomba hozatal esetén biztonsági adatlapot kell melléjük adni.

Biztonsági adatlapot semmiféle hulladék mellé nem kell adni, ez teljesen egyértelmű. A kérdés csak az, hogy mi a hulladék, és mikor válik ez újra vegyi anyaggá: amikortól kilép a hulladéktörvény hatálya alól és belép a REACH hatályába.

- A vegyi anyagok akkor válnak véglegesen hulladékká, ha
 - az azonosságuk már nem megállapítható, vagy nem éri meg megvizsgálni (pl. leesett a címkéjük),
 - ha annyira elszennyeződtek, hogy nem érdemes ezeket sem a cégnél, sem máshol újra felhasználni, még regenerálás után sem (tipikus példa az oldószerek, szokásos végük az elégetés);
 - ha felhasználás közben hulladékba kerülnek. Ilyen a véggázba/levegőbe vagy a szennyvízbe kerülő minden anyag, még akkor is, ha valami céllal került oda, például elpárolgó festékdoldó szer, szagtalanító dezodor vagy egy pH-t állító mészhidrárt a szennyvíztisztítóban.

Az árucikkek akkor válnak véglegesen hulladékká, amikor már minden részalkatrészt (lásd autóbontó, vagy villamos berendezések bontója) kiszedtek belőle. Észre kell venni, hogy az ilyen „hulladék árucikkek” ebben a pillanatban hulladék vegyi anyaggá válik, hiszen a formáját, alakját többé már nem hasznosítjuk. De a szerkezeti anyaga még nagyon értékes lehet, gondoljunk a fém- és műanyag tárgyak hulladékaira. Ezek visszanyerhetőek, a termék anyagában hasznosítható.

Egyre jobban terjed az a „szokás”, hogy sem ezeket a „hulladék árucikkeket”, sem pedig mindazon vegyi anyagokat, melyek nem tartoznak a fenti kategóriákba, nem tekintik hulladéknak.

Főként akkor, ha tudják, hogy az átadás után ezek anyagukban hasznosulnak. Ez egy izopropil-alkohol oldószer esetén azt jelenti, hogy az első (további) felhasználó, például egy gyógyszergyár elpiszkolja úgy, hogy nem célszerű már semmire sem használnia. Nem tekinti hulladéknak, hanem továbbadja egy olyan cégnek, mely mosogatásra még használhatja. Ez a második cég is további felhasználó státuszban van, megkapja az adatlapot (és ha van, benne) a regisztrációs számot a gyógyszercegtől. Ezt követően még mindig nem „hivatalos” hulladékként kerül az izopropil-alkohol egy oldószer-regeneráló céghez, ahol „tisztá” anyaggá regenerálják, de a terméket mindvégig ugyanaz a regisztrációs szám, azonban változó „veszélyt” mutató biztonsági adatlapok követik. Nagy előnye ennek a megközelítésnek, hogy minden fázisban ott az adatlap és benne információ a szennyezőkről. Ennek átadására – hulladékká válás esetén – semmi sem kötelezné az átadót.

Fontos fogalom a melléktermékek fogalma. Ezt a hulladéktörvény definiálja és mind ebből, mind a REACH-ből következik, hogy a REACH hatálya alá tartoznak. Tehát forgalomba hozatal és veszélyesség esetén adatlapot kell melléjük adni. Ilyen lehet a salak, a pernye, a szétválasztott izomerkeverékből a nem annyira fontos izomer stb.

Természetesen bármely cég kijelentheti valamely termékről, hogy az már nem termék (nincs haszna), hanem hulladék. Ad neki hulladékkódot, leadja a megfelelő cégnek. Ezt követően is történhet újrahasznosítás. Az új európai hulladék-irányelv, 2008/98/EK előírja, hogy a Bizottság adjon közre olyan követelményeket, melyek megmutatják, hogy milyen feldolgozottsági fok kell ahhoz, hogy egy hulladékot újra vegyi anyagnak lehessen tekinteni.

2011 áprilisában a Bizottság elfogadta a vas- és alumínium-hulladék hulladékstátuszának megszűnésére vonatkozó követelményeket, majd 2012 júliusában az üveghulladékokra ugyanezt. A technikai munkát az Európai Közös Kutató Intézet végzi, és a honlapján [1] mind a megfelelő információk, mind pedig a többi hulladékra vonatkozó követelmény-javaslatok is olvashatók. Ezek megkönnyítik a visszanyerő vállalatok dolgát, megfogalmazva, hogy melyik fázistól lép be a REACH hatályába a termék, kiváltva a regisztrációs, osztályozási és veszélyesség esetén a bejelentési és adatlap-adási követelményeket. A megfelelő iránymutatás [2] fontos és jól használható alapelve, hogy az újrahasznosítás utolsó fázisától következik ez be: tehát például akkor, amikor a hulladék vasból újra alkatrész lesz, a műanyag hulladék be megy a fröccsöntőbe, a hulladék oldószerkeveréget a desztillációk után hordóba rakják eladásra.



Visszanyert hulladékok biztonsági adatlapja

Bár a hulladékfázisból visszanyert vegyi anyagok a regisztráció alól, ha már valaki regisztrálta azokat, fel vannak mentve, de a forgalomba hozatal esetén a vállalkozásnak el kell végeznie az osztályba sorolásukat. Az első kérdés itt merül fel: anyagnak, vagy keveréknek tekinti-e a visszanyert terméket? A regisztrációs követelményt elhalasztó előregisztrációval kapcsolatban az iránymutatásban [2] jól kifejtették, hogy ez a hulladék visszanyerést megelőző „kiválogatásán” múlik: ha például csak saválló acélhulladékokat gyűjtünk, akkor azok króm- és nikkeltartalmát is előregisztrálnunk kellett, ha eléri az évi egy tonnát. Ugyanígy ha csak égésgátolt műanyag hulladékot gyűjtünk: az égésgátoló is előregisztrálandó volt. Hiába esnek ezek az anyagok a 20%-os küszöb alá, a terméket keveréknek kell tekinteni regisztrációs szempontból, és komponensenként előregisztrálni, hasonlóan, mintha importálnánk. (Az előregisztrációs kötelezettség elmúlt idejével azt jelzem, hogy mindez a 2008-as előregisztrációnál volt csak érdekes: azóta a krómot és a nikkelt, no meg a vasat is regisztrálták, tehát most a visszanyerőknek semmi regisztrációs feladatuk nincs.)

Semmi erre vonatkozó utalás nincs leírva, de nyilvánvaló, hogy az osztályozás szempontjából is így kell eljárunk: ha mindenféle alkoholos hulladékot gyűjtünk, akkor azt anyagnak kell, hogy tekintsük és CLP szerint kell, hogy osztályozzuk. Ha ellenben tudatosan csak etanol- és izopropil-alkohol-tartalmú gyógyszeripari szennyvizekből regeneráljuk az alkoholelegyet, azért, hogy eladjuk ablakmosó folyadéknak, akkor az keverék, és a 44/2000 szerint kell osztályoznunk. Regisztrációs szempontból az első eset alkohol-mixje kezelhetetlen, mivel nem bevezetett anyag és illet biztos nem regisztrál(t) soha senki, tehát nem vonatkozik rá az általános visszanyerési felmentés. Tehát azonnali regisztrációs kötelezettségünk lenne. Nincs sehol leírva, de elképzelhető, hogy ha a komponenseit már regisztrálták, ilyen esetre is érvényes a felmentés. A dolog lényege, hogy ezt egyértelműen el kell döntennünk és megfogalmaznunk.

Az osztályozás megállapításánál támaszkodhatunk a „tisztá” anyag besorolására, de figyelembe kell venni, hogy a visszanyerésnél olyan szennyezések kerülhetnek a termékbe, melyek szigorúbb osztályba sorolást tehetnek szükségessé; például aromások, nehézfémek, rákkeltő bomlástermékek stb.

Amennyiben a visszanyert termék veszélyesnek bizonyul, biztonsági adatlapot kell mellé adnunk, ha forgalomba hozzuk. Egyértelmű, hogy erre nincs felmentés [2].

A legizgalmasabb kérdés a visszanyert termékeknek a felhasználás azonosítása. Utal arra az iránymutatás, hogy a visszanyerő számára rendelkezésre álló információ (pl. biztonsági adatlap) jelezheti, hogy bizonyos felhasználásokat az adatlapot készítő eredeti gyártó nem támogatott. Ezt a visszanyerőnek is figyelembe kell vennie, mikor a saját adatlapját elkészíti a vevőjének, tehát azt a felhasználást nem szabad támogatnia (pl. lakossági). De itt azért a visszanyerő a saját döntésére van utalva, mely nyilván a visszanyert terméke paramétereitől függ.

Ahol ennél határozottabb az iránymutatás, az az expozíciós forgatókönyv kérdése. Kijelenti, hogy még akkor sem kell ilyent (magyarul kémiai biztonsági értékelést) a visszanyerőnek készítenie, ha az általa visszanyert anyag valamelyik vevőjénél bekövetkező felhasználása nem szerepelt a regisztrációban. Továbbá neki sem kell erre regisztrálnia a visszanyert anyagát (és nem is kell jeleznie ezt, amint az V. cím előírja, sem a „beszállítójának”,

akitől a hulladékot kapta visszanyerésre, sem az Ügynökségnek, hiszen fel van mentve az V. cím alól). Ez számomra a REACH-ben a regisztráció alóli felmentéshez kötődő, információ-birtoklási kötelezettséggel úgy függhet össze, hogy a visszanyerőnek minden, a regisztrálók által birtokolt információval rendelkeznie kell, tehát akár a kémiai biztonsági értékeléssel, illetve az expozíciós forgatókönyvvel is, és mindezt az információt közölni kell a vevőjével, de új értékelést új felhasználásokra/expozíciókra nem kell készítenie és nem kell azt továbbadnia a megfelelő vevőjének.

Külön fel szeretném hívni a figyelmet arra, hogy ha több vállalkozáson keresztül megy a hulladék-visszanyerés, akkor onnan kezdve, ahol hulladékká „tették” a terméket, nagyon hasznos lenne, ha jeleznék a visszanyerő(k)nek, hogy mit tettek a termékbe (amitől az hulladék lett). Ilyen követelmény sajnos sehol nincs leírva, de rengeteg példát lehetne mondani, hogy a hulladék-visszanyerők és majd az új termék felhasználói milyen nehéz helyzetbe kerülnek, ha nem rendelkeznek ezzel az információval. Gondolhatunk a régi PVC-alkatrészek ólom- vagy kadmium-szappan stabilizátorára, a gyógyszeripari hulladék oldószerek erős biológiai hatással rendelkező gyógyszermaradványaira stb. Ha ezekről nem tudnak, az nemcsak a visszanyert terméket felhasználó vevőket „zavarja”, hanem ezek nélkül a visszanyerő sem tudja értelmesen a munkahelyi kockázatbecslést elkészíteni. Vannak gyógyszergyárak, ahol kötelességüknek érzik, hogy még hulladék esetén is informálják a lehetséges szennyezőkről a hulladékfeldolgozókat.

További érdekes kérdés a visszanyert termékeknek a regisztrációs szám. Ilyet nyilvánvalóan a visszanyerő nem kap, és mivel fel van mentve, nem is szerezik. De ha például saját „tisztá” oldószert nyeri vissza hulladékfázison keresztül, elvben lehetséges, hogy a beérkező regisztrációs számot adja tovább. Azonban ilyen esetekben teljesen felesleges „házon belül” hulladékfázisba átvinni a terméket, a cég végig továbbfeldolgozó státuszban lehet, és ekkor sincs regisztrációra szüksége, hogy eladhassa például a legyengült minőségű használt oldószert, amint fentebb részletesen bemutatam. Nyilván az átadott oldószert tisztaságát és osztályba sorolását értékelnie kell, és ennek megfelelő adatlapot kiadnia, a beérkező regisztrációs számmal.

IRODALOM

[1] <http://susproc.jrc.ec.europa.eu/activities/waste/>

[2] Útmutató a hulladékokhoz és a visszanyert anyagokhoz http://echa.europa.eu/documents/10162/13632/waste_recovered_hu.pdf

ÖSSZEFOGLALÁS

Körtvélyessy Gyula: Biztonsági adatlapok. Hetedik rész. Hulladékok és visszanyert termékek

Egyre gyakoribb, hogy a cégek nem viszik át hulladékfázisba a termékeket, hanem újrahasznosítják a gyengébb minőségűvé vált vegyi anyagot, például oldószert. Ilyenkor is, a hulladékból visszanyert vegyi anyagok esetén is értékelni kell a forgalomba hozónak a termék veszélyességét, és ha veszélyes, biztonsági adatlapot adni mellé. Sem a regisztrációs szám továbbadására, sem expozíciós forgatókönyv készítésére nincsenek a visszanyerők kötelezve. Fontos lenne annak bevezetése – bár nem követelmény –, hogy a visszanyerők megkapják a „hulladékgyártóktól” a hulladékból került veszélyes összetevők veszélyes tulajdonságait.

Bruckner-termi előadás

Herczeg Mihály¹–Mező Erika¹–Eszenyi Dániel¹–Pataki Richárd¹–Borbás Anikó²–Antus Sándor¹

¹ DE TTK, Szerves Kémiai Tanszék

² DE OEC Gyógyszerészi Kémia Tanszék (Volt MTA-DE Szénhidrátkémiai Kutatócsoport)

Újabb eredményeink a heparinoid szulfonsavak szintézisében

Az állati eredetű heparin poliszacharidot 1937-től használják a klinikai gyakorlatban véralvadásgátló szerként. Hatását úgy fejt ki, hogy alloszterikusan aktivál egy enzim-inhibitor fehérjét, az antitrombint (AT), és ez az aktivált fehérje gátolja a véralvási kaskád két proteázát, a trombint és a Xa faktort. A heparin-antitrombin kötődésben nagy szerepe van a poliszacharid anionos csoportjai (szulfát- és karboxilcsoportok) és a fehérje bázikus aminosavai (arginin, lizin) között kialakuló erős ionos kölcsönhatásoknak.

Az 1980-as években azonosították a heparin azon minimális egységét (**1. ábra**, **DEFGH** pentaszacharid, **1**) [1], amely az AT aktiválása révén képes véralvadásgátló hatást kifejteni. Francia és holland kutatók 55 lépéses kémiai szintézissel előállították a pentaszacharid módosított analógját (**2**) [2], amely véralvadásgátló gyógyszerként 2002 óta van forgalomban Arixtra® néven. A második generációs szintetikus antitrombotikumok vezérmolekulájának tekinthető a „nem glikózaminoglikán” típusú idraparinux (**3**) [3], amely nagyobb an-

tikoaguláns aktivitással és hosszabb felezési idővel rendelkezik, mint az Arixtra, ugyanakkor az előállítása sokkal egyszerűbb.

A Debreceni Egyetem Szerves Kémiai Tanszékén működő volt MTA DE Szénhidrátkémiai Kutatócsoportban az idraparinux vezérmolekulából kiindulva új típusú antitrombotikumok szintézisét kutatjuk. Célunk a pentaszacharid-antitrombin kötődésben kulcsszerepet játszó szulfátészterek szisztematikus cseréjével szulfonsav-típusú véralvadásgátlók előállítása. A szulfátészterek ($-\text{OSO}_3^-$) helyett bioizoszter szulfonátometil-csoportot ($-\text{CH}_2\text{SO}_3^-$) tartalmazó célvegyületek ellenállnak az észterázok hidrolitikus hatásának, ezért stabilabbak, és valószínűleg hosszabb felezési idővel fejtik ki hatásukat, mint az eddig ismert származékok.

E kutatások keretében már előállítottuk az idraparinux két szulfonsav-mimetikumát (**4**, **5**) [4,5,6], amelyekben az **F**, **H** és a **D**, **F**, **H** glükózegységek 6-*O*-szulfát-csoportjait metánszulfonsav-csoportra cseréltük (**1. ábra**). A szulfonsav-mimetiku-

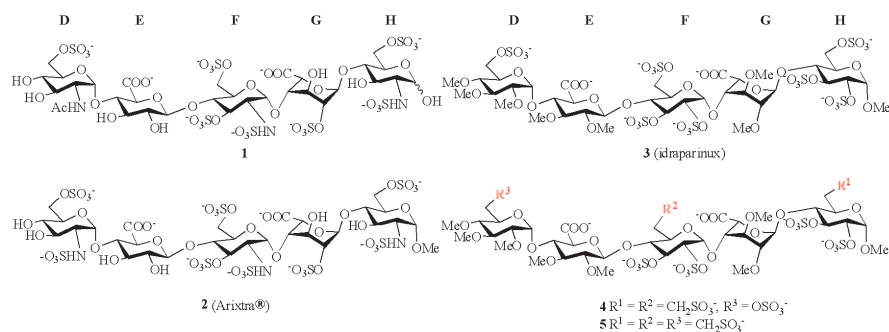
mok szintézisével párhuzamosan az idraparinuxot (**3**) [7] is előállítottuk, hogy a biológiai vizsgálatokhoz referenciamolekulaként alkalmazhassuk.

Az előállított pentaszacharidok véralvadásgátló hatásának vizsgálatát a DE Orvosi és Egészségtudományi Centrumában végeztük el. Meghatároztuk az Arixtra® (**2**), az általunk előállított idraparinux (**3**) és a két szulfonsavtartalmú pentaszacharid (**4**, **5**) heparinra vonatkoztatott anti-Xa aktivitását (**1. táblázat**). A pentaszacharid-diszulfonsav kiváló Xa-gátló hatása bizonyítja, hogy az **F** és **H** egységek 6-os helyzeté-

1. táblázat. A pentaszacharidok anti-Xa-aktivitása

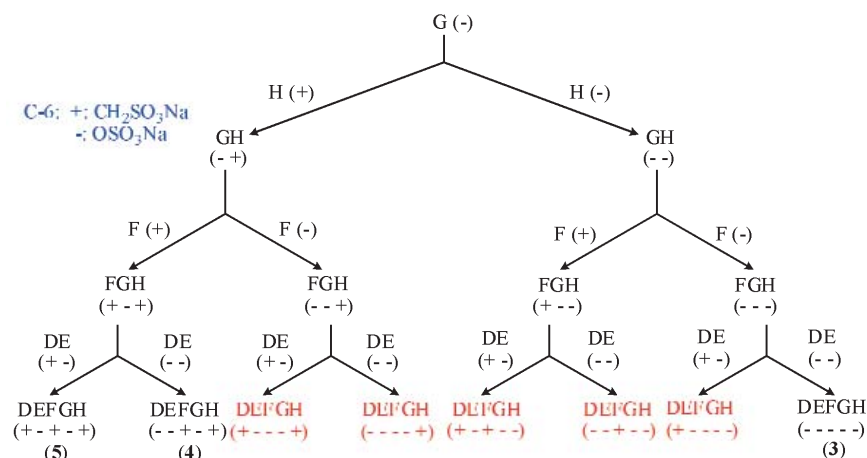
	Anti-Xa aktivitás (U/mg)
Arixtra® (2)	1195±189
idraparinux (3)	1911±193
pentaszacharid-diszulfonsav (4)	2153±153
pentaszacharid-triszulfonsav (5)	384±139

1. ábra. A véralvadásgátló hatású pentaszacharidok szerkezete



ben levő szulfátészter-csoportjai hatékonyan helyettesíthetők szulfonátometil-csoporttal. Ugyanakkor a **D** egységen kialakított újabb szulfonsav az inhibíciós hatást nagymértékben lerontotta.

Annak érdekében, hogy pontosabb képet kaphassunk a szénhidrát-fehérje kölcsönhatásokról és a véralvadásgátlás-értékekben lévő különbségek szerkezeti okát meghatározzuk, célul tűztük ki a teljes 6-szulfonátometil-tartalmú pentaszacharid-sorozat hiányzó elemeinek (**6–10**) szintézisét (**2. ábra**), valamint teljes szerkezet-



D egység

11

F egység

12

H egység

13

E egység

17

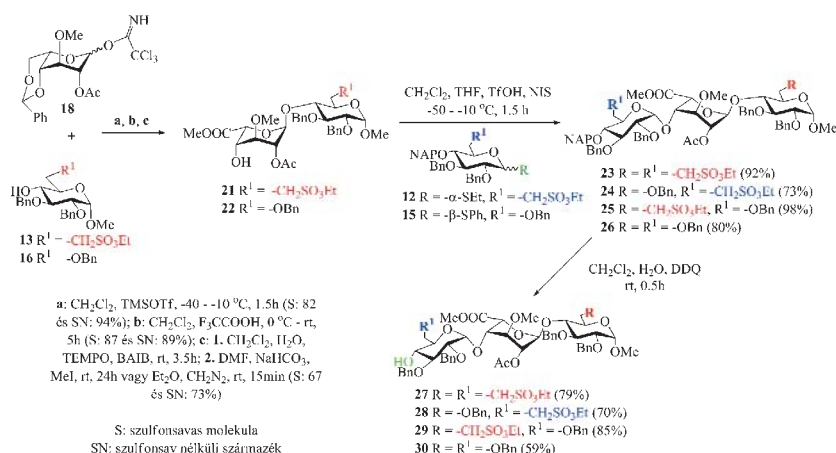
G egység

18

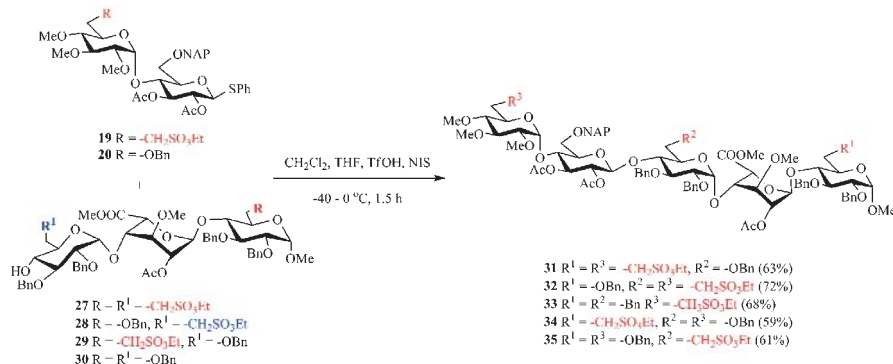
11 R = α -SEt, R³ = $-\text{CH}_2\text{SO}_3\text{Et}$
 14 R = β -SPh, R³ = $-\text{OBn}$

19 R³ = $-\text{CH}_2\text{SO}_3\text{Et}$ (89%)
 20 R³ = $-\text{OBn}$ (70%)

6. ábra. Az FGH triszacharidok előállítása



A **19** és **20** DE diszacharid donorok és a **27–30** triszacharid akceptorok kombi-



7. ábra. A védett pentaszacharidok szintézise

nálásával, [2+3] blokk-szintézissel állítottuk elő a tervezett öt védett pentaszacharidot (7. ábra). A reakciókban jó hozammal és sztereoselektivitással képződtek a várt termékek. A végleges funkciók csoportok kialakítása, mely pentaszacharidokként 8 lépést igényel, még folyamatban van.

Összegzőképpen elmondható, hogy a korábbi kísérleteinket alapul véve sikerült

kidolgoznunk egy hatékony reakcióutat a 6-szulfonsav-tartalmú pentaszacharidok teljes sorozatának szintézisére. Amint elkészülnek a pentaszacharidok és elvégezzük a biológiai és szerkezetmeghatározási vizsgálatokat, teljesebb képet kaphatunk a szulfonátometil-csoportok hatásáról, és lehetőségünk nyílik további változtatások végrehajtására a molekulák a biológiai hatékonyság növelése érdekében. ●●●

KÖSZÖNETNYILVÁNTÁS

Ezúton szeretném köszönetemet kifejezni tudományos témavezetőmnek, Prof. Dr. Lipták András† akadémikus úrnak áldozatos munkájáért, mellyel tudományos előmeneteltem segítette.

„A kutatás a TÁMOP 4.2.4.A/1-11-11-2012-0001 azonosító számú Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése országos program című kiemelt projekt keretében zajlott. A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.”

IRODALOM

- [1] C.A.A. van Boeckel, M. Petitou, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. (1993) 32, 1671.
- [2] P. Westerduin et al., Bioorg. Med. Chem. (1994) 11, 1267.
- [3] M. Petitou, C. A. A. van Boeckel, Angew. Chem. Int. Ed. (2004) 43, 3118.
- [4] M. Herczeg, L. Lázár, A. Borbás, A. Lipták, S. Antus, Org. Lett. (2009) 12, 2619.
- [5] M. Herczeg, L. Lázár, A. Mándi, A. Borbás, I. Komáromi, A. Lipták, S. Antus, Carbohydr. Res. (2011) 346, 1827.
- [6] M. Herczeg, L. Lázár, Zs. Bereczky, K. E. Kövér, I. Timári, J. Kappelmayer, A. Lipták, S. Antus, A. Borbás, Chem. Eur J. (2012) 18, 10643.
- [7] M. Herczeg, E. Mező, L. Lázár, A. Fekete, K. E. Kövér, S. Antus, A. Borbás, Tetrahedron (2013) 69, 3149.
- [8] M. Herczeg, Magyar Kémikusok Lapja (2012) 67, 294.

G-fehérje kapcsolt receptorokon át ható vegyületek azonosítása

A TargetEx Kft. Nemzeti Fejlesztési Ügynökség KMOP 1.1.1 programja keretében elnyert támogatásával folytatott integrált kutatási projektje sikeresen befejeződött (szerződés szám: KMOP-1 1 1-09/1-2009-0051)

„A támogatás elnyerésével lehetőség nyílt a cég szolgáltatási portfóliójának kiterjesztésére a gyógyszerkutatás egyik különösen piacképes irányába, amivel versenyképességünket is javíthattuk” – mondta Cseh Sándor, a magyar biotechnológiai kisvállalat ügyvezetője. „Társaságunk mindkét szolgáltató tevékenysége számára komoly fejlesztéseket sikerült végrehajtunk mind a molekuláris biológia és a rekombináns fehérje-expresszió, mind pedig a közepes és nagy áteresztőképességű biológiai szűrések alkalmazása területén. Létrehoztunk rekombináns GPCR-túltermelő sejtvonalakat és kifejlesztettünk közepes áteresztőképességű GPCR-esszéket modulátor kismolekulák szűrésére.”

A G-fehérje kapcsolt receptorok (GPCR) a humán genom egyik legnagyobb fehérjecsaldája. Úgynevezett elsődleges hírvivők, melyek hormon, neurotranszmitter vagy citokin/kemokin kismolekulák hatására aktiválódnak, ami elindítja a sejten belüli jelátviteli folyamatot. A GPCR-ok jelentősek a központi idegrendszer folyamatainak szabályozásában is, így lehetőséget adnak az abban kialakuló megbetegedések kezelésére, amilyen például a depresszió, a skizofrénia, az Alzheimer- és a Parkinson-kór.

„Esszéfejlesztésre az idegrendszeri eredetű megbetegedésekben fontos gyógyszer-célpontokat választottunk ki, amelyekre fókuszált molekulakönyvtárakat is létrehoztunk, és ezek jelentették a projekt közvetlen célkitűzéseit. A kiválasztott 6 recep-

torra, az 5HT₆ és 5HT₇ (szerotonin), a H₃R (hisztamin receptor 3), a CB₁ és CB₂ (kannabinoid) és a GLUR₈ (glutamát) receptorokra kialakított biológiai szűrőrendszer fontos szerepet játszik a korszerű gyógyszerfejlesztésben hatóanyagjelöltek gyors azonosítására, profilírozására – részletezte Lőrincz Zsolt, a TargetEx Kft. tudományos igazgatója. – Az így létrehozott innovatív termék- és szolgáltatás-portfólió komoly érdeklődésre tart számot a gyógyszerfejlesztési piac egy fontos szegmensén, a GPCR-támadásponton alapuló gyógyszerfeldezés területén.”

„A projekt keretében kemoinformatikai módszerek alkalmazásával GPCR-modulátor fókuszált könyvtárakat választottunk ki milliós nagyságrendű kereskedelmi adatbázisokból a korábban hatásosnak talált ligandumok szerkezetéből kiindulva hasonlósági kereséssel, a molekuláris váz módosításával, illetve bioizosztérikus fragmentumcserékkel” – tette hozzá Dormán György, a projekt gyógyszerkutatási szakértője.

„Nagyon hasznosnak bizonyult a Nemzeti Fejlesztési Ügynökségtől kapott pályázati támogatás. A közel 134 millió Ft összköltségű projekt 65%-át valósítottuk meg európai uniós forrásokból az Új Magyarország Fejlesztési Terv keretében, amely nélkül a projekt és az abból származó termelő-, szolgáltatáskapacitás növekedése nem jöhetett volna létre. Az Európai Unió Bizottsága, valamint a Magyar Kormány által meghatározott fenntarthatósági irányelveket is figyelembe véve a projekt során társaságunk gondot fordított a környezetvédelemre és az esélyegyenlőség javításának horizontális szempontjaira is, ami – a közvetlen üzleti és tudományos sikerek mellett – közvetett értékeket teremt a cég, illetve általánosan a magyar gazdaság számára” – egészítette ki Bágyi István, a TargetEx pályázati igazgatója. ●●●



Tóbiás Roland–Tasi Gyula

■ Szegedi Tudományegyetem, Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék | tasi@chem.u-szeged.hu



NEUMANN JÁNOS (1903–1957)

Amikor a kockák istent játszanak

110 éve született Neumann János és Andrej Kolmogorov



ANDREJ KOLMOGOROV (1903–1987)

Ki ne hallotta volna már Albert Einstein (1879–1955) híres mondatát: „Isten nem kockázik.” Einstein kijelentése a kvantummechanika valószínűség-elméleti értelmezésére vonatkozott, amit egész életében nem tudott elfogadni.

Werner Heisenberg (1901–1976) bizonytalansági relációja és az állapotfüggvény valószínűség-elméleti értelmezése, amiért Max Born (1882–1970) fizikai Nobel-díjat kapott 1954-ben, a modern fizika és a modern kémia alapkövévé tette a valószínűség-elméletet a 20. században.



BLAISE PASCAL (1623–1662)

A valószínűség-elmélet alapjait Blaise Pascal (1623–1662) és Pierre de Fermat (1601–1665) fektette le a 17. században de Méré lovag kockajátékokkal kapcsolatos problémáinak megoldása során [1]. Rényi Alfréd a „Levelek a valószínűségről” című – nagyközönségnek szánt – lebilincselő művében megpróbálta felidézni a tudománytörténeti hátteret [2]. A kialakulóban lévő elmélet a 18. és a 19. században nem játszott meghatározó szerepet a fizikában.



PIERRE DE FERMAT (1601–1665)

A valószínűség-elmélet a véletlen matematikai tudománya: véletlen kísérletekkel foglalkozik. Véletlen kísérlet alatt olyan kísérletet értünk, amelynek kimenetelét az általunk ismert – vagy figyelembe vett – okok nem határozzák meg egyértelműen. A továbbiakban kísérlet alatt ilyen kísérletet értünk, s feltételezzük, hogy egy kísérletet egymástól függetlenül, tetszőlegesen sokszor meg tudunk ismételni. Egy kísérlet kimeneteleit elemi eseményeknek nevezzük. Az elemi események összessége alkotja az Ω eseményteret. Az összes lehetséges eseményt pedig az Ω halmaz részhalmazaként kapjuk meg: $F = \{A \mid A \subseteq \Omega\}$. Minden A eseményhez hozzárendelünk egy nemnegatív valós számot, $P(A)$ -t, amit a kérdéses esemény valószínűségének nevezünk. Az Ω mindig bekövetkezik, hiszen az összes kimenetelt tartalmazza, ezért biztos eseménynek nevezzük, s a valószínűségét 1-nek vesszük: $P(\Omega) = 1$. Ennek következtében egy tetszőleges esemény valószínűsége 0 és 1 közé esik. Ha két, A és B esemény együtt sosem következik be, azaz kizárják egymást, akkor $P(A+B) = P(A) + P(B)$. Az (Ω, F, P) objektumot valószínűségi mezőnek nevezzük. Ez a bekezdés Andrej Nyikolajevics Kolmogorov (1903–1987) szovjet tudós érdeme, aki az 1930-as

években kidolgozta a valószínűség-elmélet axiomatikus rendszerét [3].

Vegyünk egy tökéletes – nem cinkelt – kockát. Egy ilyen kocka tömegeloszlása egyenletes, s tömegközéppontja pontosan egybeesik geometriai középpontjával. Az elemi események – azaz a dobott számok – száma véges (6), és minden elemi esemény azonos valószínűséggel ($1/6$) következik be. Az ilyen valószínűségi mezőt klasszikus valószínűségi mezőnek nevezzük. A statisztikus mechanika eloszlásmodelljei (Maxwell–Boltzmann, Bose–Einstein, Fermi–Dirac) is klasszikus valószínűségi mezőknek felelnek meg. Egy adott makroállapot termodinamikai valószínűsége – a matematikai valószínűséggel szemben – azonban igen nagy szám is lehet, mivel a biztos esemény valószínűségét itt nem vesszük 1-nek, azaz nem normáljuk a termodinamikai valószínűséget.

Neumann János mint a matematikusok fejedelme



K. FRIEDRICH GAUSS (1777–1855)

Karl Friedrich Gauss (1777–1855) kortársai a matematikusok fejedelmének (latinul princeps mathematicorum) nevezték. Őt Henri Poincaré (1854–1912) és David Hilbert (1862–1943) követte a trónon. Haláluk után ezt a megtisztelő címet egyértelműen Neumann János (1903–1957) örökölte.



HENRI POINCARÉ (1854–1912)



DAVID HILBERT (1862–1943)

Az 1920-as években Neumann János Zürichben vegyészetet, Budapesten matematikát és Berlinben fizikát tanult párhuzamosan [4–6]. Vegyész mérnöki oklevelet 1925-ben kapott. David Hilbert asszisztenseként kvantummechanikával kezdett foglalkozni, s megszületett a kvantummechanika absztrakta Hilbert-teres megfogalmazása [7]. Kurt Gödel (1906–1978) nemteljességi tétele azonban „kiűzte őt a paradicsomból”: felhagyott az axiomatikus elméletek kreálásával. A nemteljességi tétel szabad megfogalmazásában a következőt állítja: Minden véges sok axiómán alapuló deduktív elméletben megfogalmazhatók olyan állítások, amelyek az

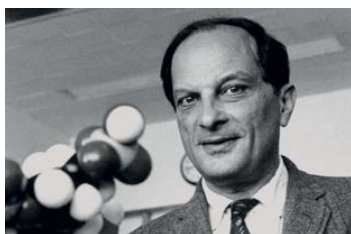


elméleten belül se nem igazolhatók, se nem cáfolhatók. A tétel természettudományi konzekvenciáiról jelenleg keveset tudunk. Mindenesre létezése árnyékot vet az axiomatikus elméletek sikerére.

Az 1930-as évek elején Neumann János útja – az egyre rosszabbodó európai helyzet miatt – Amerikába vezetett, ahol hamarosan számos katonai kutatásba kapcsolódott be: a tiszta matematika területéről fokozatosan áttért az alkalmazott matematika területére. Nagy olvasottsággal rendelkező, sziporkázó társasági ember volt. Amerikában megtanult kocsit vezetni és pókerezni. Az utóbbiról tanulmányt is írt, s pókerjátékot neveztek el róla. Ő lett a játékelmélet megteremtője [8].

A II. világháború idején Neumann János és Stanislaw Ulam (1909–1984) Los Alamosban tanulmányozták neutronok elnyelődését különböző anyagokban.

STANISLAW ULAM (1909–1984)



A feladatot azonban nem tudták analitikusan megoldani: véletlen jelenségekre alapozott számítógépes szimulációt alkalmaztak [9]. Neumann és Ulam a Monte-Carlo nevet adták a projektnek, utalva a

véletlennek a projektben játszott alapvető szerepére, valamint a véletlen és a szerencsejátékok kapcsolatára.

A számítógépek kitűnően alkalmazhatók véletlen kísérletek szimulációjára és Monte-Carlo-számítások végzésére [10]: csak jó véletlenszám-generátorra van szükségünk. Egy számítógépen igen sok kísérletet tudunk végrehajtani rövid idő alatt. Ennek megfelelően a valószínűség-elméleti problémák analitikus megoldásával kapott eredményeinket számítógépes szimulációval numerikusan ellenőrizni tudjuk. Sőt, akkor is meghatározhatjuk a helyes választ szimulációval, ha a probléma analitikus megoldása nincs a kezünkben.

A véletlenszámoknak alapvetően három típusát különböztetjük meg: igazi véletlenszámok, pszeudo-véletlenszámok és kvázi-véletlenszámok. Az igazi véletlenszámok statisztikus értelemben véletlenek. A sorozat bármely része független az előző számoktól. Az ilyen sorozatok természetesen megismételhetetlenek. Előállításukhoz speciális berendezésre és sok időre van szükség. Sajnos, szisztematikus hibákat ezek is tartalmazhatnak. Ha Monte-Carlo-módszerekben igazi véletlenszámokat alkalmazunk, akkor az eredmények egzaktak lesznek! Ez a jelentőségük. Szerencsére, a Monte-Carlo-módszerek általában pszeudo-véletlen számokkal is jól működnek. Ezeket a számokat megfelelő numerikus algoritmussal generáljuk, így a sorozatuk előre jósolható. Általában csak a sorozat előző tagjától függ az aktuális szám. Ugyanaz a kezdőérték mindig ugyanazt a sorozatot generálja. Napjaink FORTRAN fordítói rendelkeznek megfelelő véletlenszám-generátor függvénnyel: `rand()`. A kérdéses FORTRAN könyvtári függvény a $[0,1)$ intervallumban, egyenletes eloszlásban szolgáltat véletlen, duplapontos valós számokat.

A következőkben először röviden bemutatjuk a kémiai reakciók determinisztikus és sztochasztikus kinetikai modelljét, majd egy példán keresztül illusztráljuk a Monte-Carlo-módszer egyszerűségét és teljesítőképességét.

Kémiai reakciók determinisztikus kinetikai modellje

A kémia legfőbb feladata kémiai reakciók tanulmányozása. A kémiai reakció összetett, ha van legalább egy köztitermék, elemi, ha nincs. Az összetett reakciók elemi reakciókból állnak. Az ösz-

szetett reakciót alkotó elemi reakciók a kémiai rendszer reakciólépései. A reakciólépések összessége alkotja a rendszer kemizmusát, azaz a kémiai mechanizmusát [11].

A meghatározott súlyviszonyok törvénye a kémiai reakciók kvantumosságát fejezi ki. Eszerint egy kémiai reakcióban részt vevő kémiai komponensek anyagmennyiségeinek megváltozásai úgy viszonylanak egymáshoz, mint kis egész számok. Ezeket az egész számokat nevezzük a kérdéses kémiai komponensek adott reakcióra vonatkozó sztöchiometriai együtthatóinak. Az egyértelműség érdekében a lehető legkisebb abszolút értékű egész számokat választjuk.

Tegyük fel, hogy egy homogén rendszerben, állandó hőmérsékleten és nyomáson K számú kémiai komponens között R számú elemi kémiai reakció játszódik le! A reakciórendszer kemizmusát kifejező sztöchiometriai egyenletrendszer:

$$\sum_{j=1}^K (g_{ij} - d_{ij}) A_j = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, R),$$

ahol g_{ij} megmutatja, hogy az i -ik reakcióban a j -ik komponensből, A_j -ből mennyi keletkezett, d_{ij} pedig azt, hogy mennyi fogyott. A $\mathbf{G} = \{g_{ij}\}$ mátrixot forrásmátrixnak, a $\mathbf{D} = \{d_{ij}\}$ mátrixot nyelőmátrixnak nevezzük ($\dim(\mathbf{G}) = \dim(\mathbf{D}) = R \times K$). A $\mathbf{D}$ és a $\mathbf{G}$ nemnegatív mátrixok, azaz egyik elemük sem kisebb zérusnál.

Bevezetve az $\mathbf{S} \equiv \{v_{ij}\} = \mathbf{G} - \mathbf{D}$ sztöchiometriai mátrixot ($\dim(\mathbf{S}) = R \times K$), a fenti összefüggés az alábbi formára egyszerűsödik:

$$\mathbf{S}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0},$$

ahol $\boldsymbol{\alpha} = \{A_j\}$ a kémiai komponensek szimbólumainak vektora ($\dim(\boldsymbol{\alpha}) = K \times 1$), $\mathbf{0}$ pedig a nullvektor ($\dim(\mathbf{0}) = R \times 1$). Jelölje $\mathbf{N}(t) = \{n_i(t)\}$ a reakcióban részt vevő komponensek anyagmennyiségeinek vektorát a t időpillanatban ($\dim(\mathbf{N}) = K \times 1$), $\mathbf{N}_0 = \mathbf{N}(t=0)$ a kémiai komponensek kiindulási anyagmennyiségét, $\boldsymbol{\Xi}(t) = \{\xi_i(t)\}$ pedig az extenzív reakciókoordinátákból alkotott vektort ($\dim(\boldsymbol{\Xi}(t)) = R \times 1$)! Az $\mathbf{N}(t)$ vektor következőképpen állítható elő:

$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{N}_0 + \mathbf{S}^T \boldsymbol{\Xi}(t),$$

ahol $\mathbf{S}^T$ a sztöchiometriai mátrix transzponáltja. Ha a rendszerünk V térfogata állandó, akkor érdemes azzal osztani, s bevezetni a következő plauzibilis jelöléseket:

$$\mathbf{C}(t) \equiv \frac{\mathbf{N}(t)}{V} = \{c_j(t)\}$$

$$\mathbf{C}_0 \equiv \frac{\mathbf{N}_0}{V} = \{c_{0j}\}$$

$$\mathbf{X}(t) \equiv \frac{\boldsymbol{\Xi}(t)}{V} = \{x_i(t)\},$$

ahol $\mathbf{X}(t)$ az intenzív reakciókoordinátákból alkotott vektor. A komponensek koncentrációinak vektorára a következő kifejezést kapjuk:

$$\mathbf{C}(t) = \mathbf{C}_0 + \mathbf{S}^T \mathbf{X}(t).$$

Differenciálva az idő szerint ezt az egyenletet, megkapjuk a reakciórendszer differenciális anyagmérlegegyenlet-rendszerét:

$$\dot{\mathbf{C}}(t) \equiv \frac{d\mathbf{C}(t)}{dt} = \mathbf{S}^T \boldsymbol{\rho}(t)$$

$$\boldsymbol{\rho}(t) = \{r_i(t)\} \equiv \{\dot{x}_i(t)\},$$

ahol a mennyiségek fölé tett pont idő szerinti differenciálást jelöl, s $\boldsymbol{\rho}(t)$ a reakciósebességek vektora ($\dim(\boldsymbol{\rho}(t)) = R \times 1$). A reakciósebesség e definíciója pontosan megfelel az IUPAC – állandó térfogatra vonatkozó – ajánlásának [12,13].



A tömeghatás törvénye alapján az i -ik elemi reakció sebességére a következő összefüggés írható fel:

$$r_i = k_i \prod_{j=1}^K c_j^{d_{ij}},$$

ahol k_i a reakciósebességi együttható (állandó), melynek értéke függ a kérdéses reakciótól, a hőmérséklettől és (esetleg) a nyomástól; d_{ij} pedig az A_j komponens fogyási együtthatója az i -ik reakcióban (a már megismert nyelőmátrix (i,j) eleme). Abban az esetben, ha az i -ik reakció nem autokatalitikus, $d_{ij} = |v_{ij}|$. Az i -ik reakció μ_i molekularitása alatt az i -ik reakcióban részt vevő komponensek fogyási együtthatóinak összegét értjük:

$$\mu_i = \sum_{j=1}^K d_{ij}.$$

Fontos megjegyezni, hogy az elemi reakciókra vonatkozó sebességi egyenletek egyszerű kombinatorikai eszközök segítségével levezethetők [14]. Erről a tényről a reakciókinetikával foglalkozó tankönyvek általában megfelelően emlékeztetnek.

Vezessük be a $\mathbf{k} = \{k_i\}$ sebességi együtthatóvektort ($\dim(\mathbf{k}) = R \times 1$) és az $\mathbf{M} = \{\mu_i\}$ molekularitás-vektort ($\dim(\mathbf{M}) = R \times 1$)! Ekkor a t időpillanatbeli koncentrációk vektora a $\mathbf{C} = \mathbf{F}(\mathbf{S}; \mathbf{D}; \mathbf{C}_0; \mathbf{k}; \mathbf{M}; R; t)$ vektorfüggvénnyel egyértelműen megadható.

A determinisztikus modell általános numerikus megoldása Taylor-sor segítségével

Az előzők szerint a determinisztikus modell egy csatolt, autonóm (időtől explicite nem függő), polinomiális, közönséges differenciálegyenlet-rendszert eredményez. Ennek a megoldása általában numerikus integrálással történik, mivel az esetek többségében analitikus megoldás nem létezik, vagy nem ismert. A következőkben egy olyan általános numerikus módszert mutatunk be a megoldására, amiben csak deriválni szükséges. Az elemi matematikai analízis két alapvető formuláját használjuk fel: a Taylor-sort és a szorzatfüggvények deriválására vonatkozó Leibniz-formulát. Ezekkel a fogalmakkal minden vegyész legalább egyszer találkozott az élete során.

Ha $\mathbf{C}(t)$ -t sima vektorfüggvénynek (végtelenszer differenciálhatónak) tekintjük, felírhatjuk Taylor-sor formájában:

$$\mathbf{C}(t) = \sum_{l=0}^{\infty} \mathbf{C}^{(l)}(t_0) \frac{(t-t_0)^l}{l!},$$

$$\mathbf{C}^{(l)}(t_0) = \frac{d^{(l)}\mathbf{C}(t)}{dt^l} \Big|_{t=t_0}.$$

Mivel $\dot{\mathbf{C}}(t_0) = \mathbf{S}^T \mathbf{p}(t_0)$, a fenti egyenlet az alábbi alakot ölti:

$$\mathbf{C}(t) = \mathbf{C}(t_0) + \sum_{l=0}^{\infty} \mathbf{S}^T \mathbf{p}^{(l)}(t_0) \frac{(t-t_0)^{l+1}}{(l+1)!},$$

$$\mathbf{p}^{(l)}(t_0) = \frac{d^{(l)}\mathbf{p}(t)}{dt^l} \Big|_{t=t_0}.$$

A $\mathbf{p}(t)$ vektor elemei koncentrációsorzatok, így azok analitikus deriváltjai előállíthatók a Leibniz-formula alkalmazásával. Ehhez azonban definiáljuk a λ_{im} indexet ($i = 1, 2, \dots, R$, $m = 1, 2, \dots, \mu_i$) a következő módon: λ_{im} legyen az i -ik reakciósebességben szereplő koncentrációsorozat m -ik tényezőjének az indexe. Például ha $r_i = k_i c_1 c_2^2 c_3$, akkor $\mu_i = 6$, $\lambda_{i1} = 1$, $\lambda_{i2} = 2$, $\lambda_{i3} = 2$, $\lambda_{i4} = 3$, $\lambda_{i5} = 3$, és $\lambda_{i6} = 3$. A λ_{im} paraméter segítségével az i -ik elemi reakció sebessége a következő alakot ölti:

$$r_i = k_i \prod_{j=1}^K c_j^{d_{ij}} = k_i \prod_{m=1}^{\mu_i} c_{\lambda_{im}}.$$

Ennek révén az $r_i = r_i(t)$ függvények tetszőlegesen rendű deriváltjai előállíthatók a többszörös szorzatra vonatkozó Leibniz-szabály segítségével:

$$\frac{d^{(l)} r_i(t)}{dt^l} \Big|_{t=t_0} = k_i \frac{d^{(l)}}{dt^l} \left[\prod_{m=1}^{\mu_i} c_{\lambda_{im}} \right] \Big|_{t=t_0}.$$

A $\{\mathbf{C}^{(n)}(t_0), n = 0, 1, \dots, l\}$ vektorokból rekurzive számítható

$\frac{d^{(l)}}{dt^l} \left[\prod_{m=1}^{\mu_i} c_{\lambda_{im}} \right] \Big|_{t=t_0}$ deriváltak generálják a $\mathbf{C}^{(l+1)}(t_0)$ vektorokat, melyek révén $\mathbf{C}(t)$ előállítható, így tetszőlegesen – állandó térfogatban végbemenő – reakciórendszer koncentrációeloszlását számíthatjuk. Érdemes megemlíteni, hogy a kérdéses numerikus módszer autokatalitikus reakciók esetén is alkalmazható.

Kémiai reakciók sztochasztikus kinetikai modellje

Az előzőekben bemutatott determinisztikus modell numerikus megoldására alkalmazhatunk egyszerű Monte-Carlo-módszert is [15–18]. Sőt, abban az esetben, ha kevés molekula ($N < 10^8$) van a rendszerben, a determinisztikus modell érvényét veszti: a közönséges differenciálegyenlet-rendszert sztochasztikus differenciálegyenlet-rendszerrel kell helyettesítenünk [19].

Legyen továbbra is állandó a rendszerünk térfogata! Először is a determinisztikus modellben szereplő mennyiségekkel analóg sztochasztikus mennyiségeket vezetünk be:

$$\mathbf{N}^p(t) = N_A \mathbf{N}(t) = \{n_i^p(t)\},$$

$$\mathbf{k}^p = \{k_i^p : k_i^p = k_i (N_A V)^{(1-\mu_i)}\},$$

$$\mathbf{p}^p(\mathbf{N}^p) = \{r_i^p : r_i^p = k_i^p \prod_{j=1}^K n_j^{d_{ij}}\},$$

ahol $\mathbf{N}^p(t)$ a molekulák számának a vektora, N_A az Avogadro-szám, V a rendszer térfogata, $\mathbf{k}^p$ a sztochasztikus sebességi együtthatóvektor, és $\mathbf{p}^p(\mathbf{N}^p)$ a sztochasztikus sebességvektor. Az $\mathbf{S}$ és a $\mathbf{D}$ mátrixot, illetve az $\mathbf{M}$ vektort nem kell transzformálni.

A $P(\mathbf{N}^p, t | \mathbf{N}_0^p, t_0)$ jelentse annak a valószínűségét, hogy $\mathbf{N}^p(t) = \mathbf{N}^p$ adott $\mathbf{N}^p(t_0) = \mathbf{N}_0^p$ mellett! A kérdéses valószínűség idő szerinti változását a következő egyenlet írja le [19]:

$$\frac{\partial P(\mathbf{N}^p, t | \mathbf{N}_0^p, t_0)}{\partial t} = \sum_{i=1}^R \left[r_i^p(\mathbf{N}^p - \mathbf{v}_i^p) P(\mathbf{N}^p - \mathbf{v}_i^p, t | \mathbf{N}_0^p, t_0) - r_i^p(\mathbf{N}^p) P(\mathbf{N}^p, t | \mathbf{N}_0^p, t_0) \right],$$

ahol $\mathbf{v}_i^p$ az $\mathbf{S}$ mátrix i -ik sorából készített oszlopvektor. Ezt az egyenletet – néhány egyszerű esettől eltekintve – igen nehéz megoldani: általában egy ezzel ekvivalens Monte-Carlo-szimulációt alkalmaznak [17–19]. Ezek közül itt a legegyszerűbb – Moebs és munkatársai által közölt [17] – Monte-Carlo-szimulációs algoritmust mutatjuk be:

1. $t = 0$; $\mathbf{N}^p = \mathbf{N}_0^p$.
2. Kiszámítjuk az $\dot{\mathbf{N}} = \mathbf{S}^T \mathbf{p}^p(\mathbf{N}^p)$ vektort.
3. Meghatározzuk az $\dot{n}_{\max}^p = \max_{j=1}^K |\dot{n}_j^p|$ értéket, és azt az ε indexet, amelyre $\dot{n}_{\varepsilon}^p = \dot{n}_{\max}^p$.
4. Megkeressük az $r_{\max}^p = \max_{i=1}^R |r_i^p(\mathbf{N}^p)|$ értéket.
5. Generálunk egy r^* pszeudo-véletlenszámot.
6. Módosítjuk a sebességvektort: $r_i^p(\mathbf{N}^p) = \begin{cases} 1, & \text{ha } r_i^p(\mathbf{N}^p) > r^* r_{\max}^p \\ 0, & \text{különben} \end{cases}$.
7. Előállítjuk a $\delta \mathbf{N}^p = \mathbf{S}^T \mathbf{p}^p(\mathbf{N}^p)$ vektort.



8. Meghatározzuk az időbeli ellépést: $\delta t = \frac{\delta n'_e}{\dot{n}_e}$.

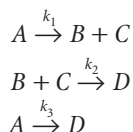
9. $t \leftarrow t + \delta t; N' \leftarrow N' + \delta N'$.

10. Visszatérés a 2. ponthoz, amíg el nem érjük a maximális iterációs számot.

A módszerben δt számítása egy kissé pontatlan, így – ha pontosabb számítási eredményekhez szeretnénk jutni – érdemes a Gillespie-féle algoritmust [19] alkalmazni. A sztochasztikus kinetikai modelleknek jelentős szerepük lehet a biológiai kiralítás eredetének értelmezésében [20].

Alkalmazás

Illusztrációként tekintsünk egy – már korábban részletesen tanulmányozott – egyszerű reakciórendszert [15,16,21]:

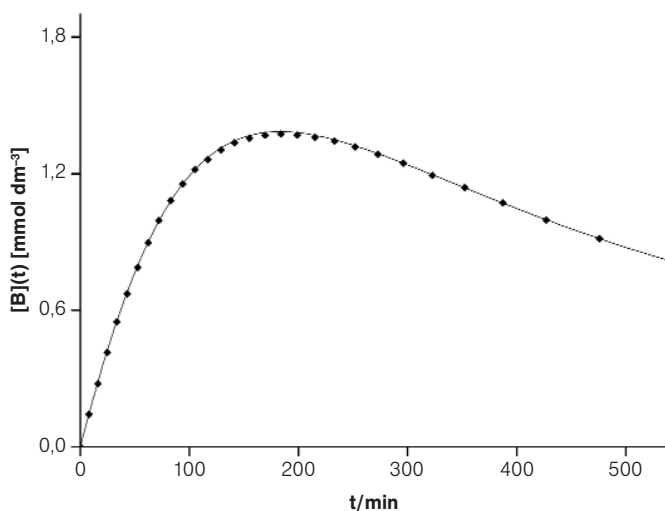
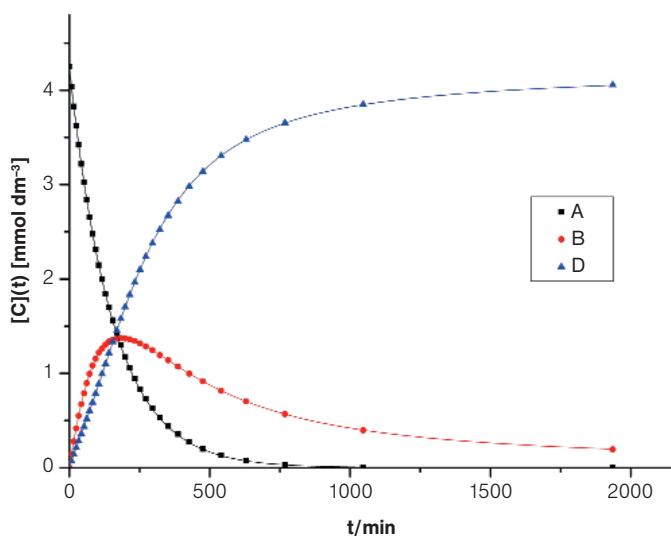


ahol $k_1 = 0,0044 \text{ min}^{-1}$, $k_2 = 2,96 \text{ min}^{-1} \text{ mol}^{-1} \text{ dm}^3$, és $k_3 = 0,0021 \text{ min}^{-1}$. A $t = 0$ időpillanatban legyen $[A] = [A]_0 = 4,25 \times 10^{-3} \text{ mol/dm}^3$, továbbá $[B]_0 = [C]_0 = [D]_0 = 0$. Látható, hogy az adott feltételek mellett $[B] = [C]$ minden időpillanatban teljesül. A feladatot analitikusan is sikerült megoldani, bár a B komponens koncentráció-idő függvényében nulladrendű és elsőrendű Bessel- és Hankel-függvények is szerepelnek [21]. A Monte-Carlo-szimulációhoz VN_A -t 10^7 -nek vettük, s a komponensek koncentrációjának az időbeli változását mind a determinisztikus, mind a sztochasztikus modell segítségével numerikusan meghatároztuk. Az eredmények az 1. ábrán láthatók. A 2. ábrán a B komponensre külön is bemutatjuk a számítási eredményeket az irodalommal való könnyebb összehasonlítás végett. A Taylor-sor segítségével kapott numerikus számítási eredmények tökéletesen megegyeznek az analitikus eredményekkel. A Monte-Carlo-módszer hibája pedig kisebb, mint 0,2% a teljes időtartományban.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS.

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

1. ábra. Az A, a B és a D komponensek koncentrációjának változása az idő függvényében. A diszkrét értékek Monte-Carlo-szimulációval, a vonalak Taylor-sor segítségével adódtak



2. ábra. A B komponens koncentrációjának alakulása az idő függvényében. A diszkrét értékek Monte-Carlo-szimulációval, a vonalak Taylor-sor segítségével adódtak

IRODALOM

- [1] Tasi, Gy., Matematikai kémia. JATEPress, Szeged, 2009.
- [2] Rényi, A., Levelek a valószínűségről. Typotex, Budapest, 1994.
- [3] Kolmogorov, A.N., A valószínűség-számítás alapfogalmai. Gondolat, Budapest, 1982.
- [4] Marx, Gy., Marslakók érkezése. Akadémiai Kiadó, Budapest, 2000.
- [5] Hargittai, I., Az öt világformáló marslakó. Vince Kiadó, Budapest, 2006.
- [6] Aspray, W., Neumann János és a modern számítástechnika kezdetei. Vince Kiadó, Budapest, 2004.
- [7] Neumann, J., A kvantummechanika matematikai alapjai. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1980.
- [8] Leonard, R., Von Neumann, Morgenstern, and the Creation of Game Theory: From Chess to Social Science, 1900–1960. Cambridge University Press, Cambridge, 2012.
- [9] Manno, I., Introduction to the Monte-Carlo Method. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1999.
- [10] Tasi, Gy., Számítógépes kémia. JATEPress, Szeged, 2010.
- [11] Turányi, T., Reakciómechanizmusok vizsgálata. Akadémiai Kiadó, Budapest, 2010.
- [12] Schmitz, G., Journal of Chemical Education (2005) 82, 1091.
- [13] Le Vent, S., Journal of Chemical Education (2001) 80, 89.
- [14] Perkins, R.S., Journal of Chemical Education (1974) 51, 254.
- [15] Schaad, L.J., Journal of American Chemical Society (1963) 85, 3588.
- [16] Rabinovitch, B., Journal of Chemical Education (1969) 46, 262.
- [17] Moebis, W.D., E.A. Haglund, Journal of Chemical Education (1976) 53, 506.
- [18] Moebis, W.D., Mathematical Biosciences (1974) 22, 113.
- [19] Gillespie, D.T., Annual Review of Physical Chemistry (2007) 58, 35.
- [20] Lente, G., Symmetry (2010) 2, 767.
- [21] Pearson, R.G., L.C. King, S.H. Langer, Journal of American Chemical Society (1951) 73, 4149.

ÖSSZEFOGLALÁS

Tóbiás Roland, Tasi Gyula: **Amikor a kockák istent játszanak.**

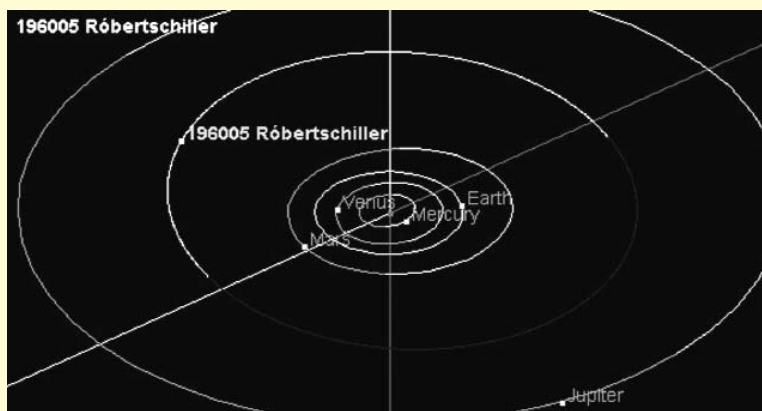
110 éve született Neumann János és Andrej Kolmogorov

Neumann János és Andrej Kolmogorov tevékeny szerepet játszott a valószínűség-elmélet és a sztochasztika mai arculatának kialakításában. A Neumann János közreműködésével létrejött Monte-Carlo-módszerek sikeresen alkalmazhatók szinte a kémia minden területén: a reakciókinetikában, az enzímek katalízisben, a heterogén katalízisben, az adszorpció folyamatának kinetikai tanulmányozásában stb. Jelen cikk a determinisztikus kinetikai modell Taylor-sor általános numerikus megoldását és a sztochasztikus kinetikai modell egy Monte-Carlo-módszerrel történő megoldását mutatja be. A Taylor-soros módszer autokatalitikus reakciók esetén is alkalmazható.



Az év ismeretterjesztő tudósa

Az idén Schiller Róbert fizikai kémikus, a kémiai tudomány doktora nyerte el a kitüntetést. Néhány éve jelent meg különleges esszéinek gyűjteménye, az *Egy kultúra között*. „Ami közös ezekben az írásokban, az a szerző alapvetően természettudományos műveltsége (gondolkodásmódja), kiegészítve azonban a Trefort utcai Mintagimnáziumban elsajátított intellektuális nyitottsággal és a humán tudományokban (irodalomban) való irigylésre méltó jártassággal” – írta egyik recenzió.



A kitüntetettől kisbolygót is elneveztek. „Övé” a 196005 Róbertschiller (2002 RS241), amely 5,7 év alatt kerüli meg a Napot (az égitestet Sárneckzy Krisztián fedezte fel)

Schiller Róbert

■ MTA Energiatudományi Kutatóközpont

Röntgenkép és szerelem

A véletlen felfedezésekről szóló gyermekszobai történetek között a röntgensugárzás az egyik legnépszerűbb. Talán mert röntgenképpel már mindenki találkozott. A jelenség ezért bizonyára nagyon egyszerű (hogyan is nem ismerték már régen?) és nagyon rejtélyes (de hát mégis, hogyan lát belém?). A véletlenről szóló mese a Crookes-csővel kezdődik, azzal a két fémlektódot tartalmazó, több-kevesebb gázzal töltött vagy teljesen evakuált kisülési csővel, amely minden mai fénycsö-vünknek és katódsugárcsővünknek (tehát régebbi fajta képernyőnek és monitornak) az őse. Ha a csőben gáz van, fényjelenségek lépnek fel. Ha azonban gondosan leszívják, nem világít, de a katódból valamilyen sugárzás halad az anód felé. Ezt katódsugárzásnak nevezték el. Létezéséről többek között onnan lehet tudni, hogy az anód mögött az üveg fluoreszkál, és az üvegen megjelenik az anód árnyéka.

Ezzel a berendezéssel a 19. század végén sokat kísérleteztek, köztük nagyon nagy emberek is: Crookes mellett a rádióhullámokat felfedező Heinrich Hertz, az elektrokémikus Hittorf, a villamosmérnök Tesla, az elektront felfedező J. J. Thomson... Kimutatták például, hogy egy permanens mágnes tere eltéríti a katódsuga-

rat. Lénárd Fülöp pedig átalakította a kisülési csövet: felnyitotta az üvegburát, majd egy vékony alumíniumfóliával zárta le; ilyen módon a cső vákuumterén kívülre tudta hozni a sugarakat. A sugárzást az alumíniumablaktól néhány centiméternyire még észlelte: bárium-platin-cianürrel [ennek mai nevezékünk szerint bárium(tetracianoplatinát) a helyes neve] bevont, fluoreszcens ernyőt tett a nyaláb mozgásának gyanított irányába, és azt nézte, milyen távolságban világít még az ernyő.

Röntgen arra volt kíváncsi, nem lehet-e ezt a sugárzást nagyobb távolságokon is észlelni. Lehetett – az ernyő méterekkel távolabb is világított. Ugyanazt a sugárzást? Mert ezt a több méterre elhatoló sugárzást úgy is észlelte, ha lezárt Crookes-csövet használt, olyat, amelyen nem nyitott a katódsugárzásnak utat egy Lénárd-fólia. Tehát nem a katódsugár érte el az ernyőt. A sugárzás a cső üvegfalából indult ki. Aztán Röntgen fotólemezt tett az ernyő helyére: a lemez megfeketedett. Vagyis Röntgennek szerencséje volt? No nem! J. J. Thomson egy évvel korábban már észlelte a csőtól távoli fluoreszcenciát, de nem törődött vele. Crookes észrevette, hogy a cső közepében megfeketednek a sötét papírba csomagolt fotólemezek, utasította is a mun-

katársait, hogy rakják a lemezeket arrébb. Sokan látták azt, amit Röntgen alaposan megnézett.

A felismerést követő hetekben nem hagyta el a laboratóriumát, ott evett, ott aludt, még az előadásait se tartotta meg (egy német professzor!). Két hét elmúltával elkészítette az első röntgenfelvételt: a felesége kezét tette a sugárzás útjába, az ernyőn megjelent a kézcsontok képe. „Láttam a halálomat!” – kiáltott fel az asszony.

Három hét intenzív munka után megírta első cikkét „a sugarak egy új fajtájáról”. A cikk 1895. december 28-án jelenik meg. Egy bécsi napilap, a Presse 1896. január 6-án már hírt ad róla. Január 12-én Röntgen előadást tart Vilmos császár előtt. Január 16-án a budapesti német nyelvű Pester Lloyd mellékletében közli az eredeti munkát, és ugyanezen a napon délután, tehát alig több mint két héttel az első közlemény megjelenése után, a Matematikai és Fizikai Társulat nyilvános előadóülésén Klapáthy Jenő beszámol ezekről az eredményekről, bemutatva az első hazai röntgenfelvételt, amelyet Eötvös Loránd készített a saját kezéről.

Szerencse? A háromheti munka nyomán írt cikk mindazt a megfigyelést, eredményt és megfontolást tartalmazta, amit a kor-



Részletek a párizsi haláltáncból (15. század)

Forrás: Gallica.bnf.fr/Bibliothèque nationale de France

szak tudása csak lehetővé tett. Röntgen 17 pontban foglalta össze az észleleteit. Közte volt a nagy áthatólképesség mellett az a fontos észrevétel, hogy erre a sugárzásra, szemben a katódsugarakkal, nincs hatással a mágneses tér. Tizenhat évnek kellett eltelnie ahhoz, hogy fontos új eredményt érjenek el ezen a területen. Laue, Friedrich és Knipping 1912-ben készített első röntgendiffrakciós felvételéig, Moseley 1913-as felismeréséig az antikatód rendszámának és a kibocsátott sugárzás frekvenciájának az összefüggéséről, nem tudtak sokkal többet a sugárzásról, mint amennyit az első cikk leírt. Amelyet rövidesen két másik követett, aztán Röntgen abbahagyta ezeket a kutatásokat – más problémák foglalkoztatták hátralévő évtizedeiben.

Az orvosi diagnosztika hatalmas új eszközzel gazdagodott. A terápiás eljárások is – itt, sajnos, sok szörnyű hiba is történt, pedig már a legkorábbi időkben észreveték, hogy a sugárzás pusztítani is tud. Röntgen maga ólomkötenyt viselt, amikor kísérletezett. Az orvostudományokban képzetlen, laikus közönség pedig átélte azt, amit Röntgen felesége: élő emberek csontvázával találkozhatott.

Magának a csontváznak a látványa régtől fogva nem volt Európában idegen. Ha korábban nem is, a 14. században pusztító fekete halál, az évszázadig tartó pestisjárvány, bomló holttestekkel, csupasz vázakkal ismertette meg a földrészlakókat. A városok szűk temetőiben az exhumálások természetes rendben folytak, Hallstatt vagy Kutna Hora templomainak csontházai ma is takaros halmokban állnak a koponyák és lábszárcsontok. A haláltánc-ábrázolásokban a Halál szimbólumaként mindig csontváz jelenik meg, aki hol a kaszáját emeli, hol lepergő homokórát tart, néha vidáman muzsikál, és királyt, püspököt, jobbágyot egyformán terel a sír felé.

Most azonban köztünk élő és mozgó emberek csontjai lettek láthatóvá. Sétáló síri szimbólumokká. Sok minden juthatott erről a röntgenképeket nézegető ember eszébe. Elmúlás és szerelem, halál és Érosz

összefüggése olyan régi, mint a mitológia vagy az irodalom. A művészet és a lélektan avatott tudósai szerint ez a tény annyira közismert, hogy beszélni se nagyon illik ma már róla. A csontvázról és a szerelemről se? Ez nyersebb dolog, de úgy látszik, az ilyen nyers megjelenítéstől régen se riadt vissza mindenki.

Ezek a képek halott áll az élő mellett. De hát az eleven csontváz azért mégis csak más dolog. Röntgen után ezzel kellett megismerkednie az emberiségnek. Az ő ideje óta, ha egy képre nézünk, alig lehet tudnunk, hogy lágy hús fed-e még a riasztó csontot. Babits 1920-ban megjelent írása, a *Novella az emberi húsról és csontokról*, a röntgenkép tapasztalatát szembesíti

a testi szerelemmel. A novella főhőse először egy színpadi táncosnő érzéki táncát nézi, és ahogyan fűti fantáziáját a látvány, úgy tűnik el a szeme elől az eleven test, és kezd táncolni előtte egy nem kevésbé eleven csontváz. Aztán felkeresi a szeretőjét. Sarolta „leeresztette szép hímzett ingét és kacéran kilépett belőle. S ebben a pillanatban egy csúf szürke, szögletes csontváz jelent meg a kályha vörvörös fényében.”

A röntgenfelvétel nem csak riadalmat kelthet. Szerelmi zálog – ez régen elefántcsontra festett arckép, hajtincs, könnyáztatta levélke, száraz ibolyacsokor volt. Ilyesmi. Madame Chauchat valamikor 1910 táján búcsúzik egy tüdőbeteg szanatóriumban Hans Castorptól Thomas Mann regényében, *A varázshegyben*. A szanatórium páciensei számára a röntgenkép nem egyszerűen mindennapos látvány, hanem betegségüket és gyógyulásukat, halálukat és életüket feltáró jóslat. Egy illedelmesen mámoros karneváli éjszakán Castorp, aki betegsége ideje alatt némi anatómiai és életani ismeretekre is szert tett, az orvostudomány nyelvén dicséri, ünnepli és becézi az asszony testét. Másnap reggel az elutazáshoz készülődő asszony a saját röntgenképét ajándékozza a férfinak. Képet, „amely arc híján volt ugyan, de megmutatta felsőteste finom csontozatát, a hús halványan, kísértetiesen sejlő puha formáitól körülveve, és hozzá a mellüreg belső szerveit... Milyen sokszor megnézte, ajkához szorította abban az időben. [...]”

Szerelem ennél pörébb már nem lehet. Úgy látszik, a természettudomány nem csak szabatos ismeretekkel ajándékoz meg bennünket.

Hans Baldung Grien festménye, 1517



IRODALOM

Wilhelm Conrad Röntgen, Egy újfajta sugárzásról. Előadás a wüzburgi fizikai és orvosi társaság előtt, 1895, *Nature* (1896), 53, 274. Magyarul: <http://chemonet.hu/hun/olvaso/histchem/viz/rontgen.html>

Alexi Asmus, Early History of X Rays, Beam Line, Summer 1995, 10–24. <http://www.slac.stanford.edu/pubs/beamline/25/2/25-2-assmus.pdf>

Babits Mihály, Karácsonyi Madonna, Táltos, Budapest, 1920.

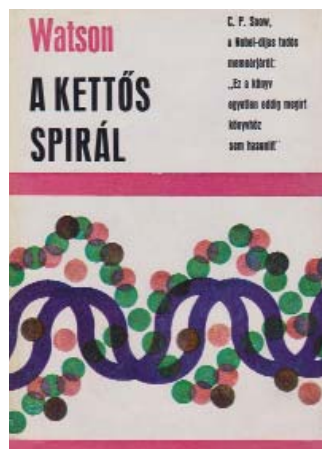
Thomas Mann, A varázshegy (ford. Szöllősy Klára), Európa, Budapest, 1974.



Fúri Mária

Egy hatvanéves felfedezés

J. D. Watson *A kettős spirál* című könyvét újraolvasva szükségét

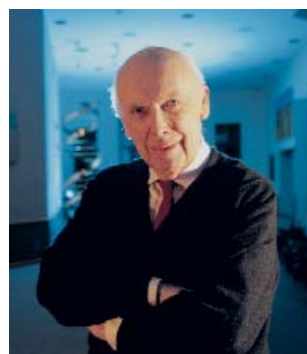


A könyv 1970-es magyar kiadásának borítója

láttam, hogy a magam számára készítek egy szakmai kivonatot. A könyv ugyanis rendkívül szórakoztató módon, a korabeli társadalmi élet és Watson személyes benyomásai között szövi a DNS-szerkezet felderítésének menetét, de tanulságos volt kiválasztani azokat a részleteket, amelyek csak a felfedezésre vonatkoznak, és látni, ahogy a tudomány különböző területei, a biológia (fágkutatás), a kémia (a DNS összetételének meghatározása), a fizika (röntgenkristallográfia-szerkezetkutatás) összekapcsolódik.

J. D. Watson: A kettős spirál

1. Erwin Schrödinger *Mi az élet?* című könyvében leírja azt a feltevést, hogy az élő sejtek döntő alkotórészei a gének.
2. Amikor Schrödinger ezt a könyvét írta (1944), általában elfogadták, hogy a gének speciális típusú fehérjemolekulák.
3. Csaknem ugyanebben az időben végezte kísérleteit a New York-i Rockefeller Intézetben O. T. Avery bakteriológus is. Az ő kísérletei azt mutatták, hogy az örökletes jegyeket tisztított DNS-molekulákkal lehet átvinni egyik baktériumsejtről a másikra. Köztudott volt, hogy a DNS valamennyi sejt kromoszómáiban megtalálható, tehát Avery kísérletei határozottan azt sugallták, hogy a jövőbeni kísérletek majd bebizonyítják: valamennyi gén DNS-ből áll.



James D. Watson 2012-ben

4. James D. Watson a Chicagói Egyetem hallgatójaként egy genetikai kutatócsoportban, a „fág-csoport”-ban dolgozott, az olasz származású mikrobiológus, Salvador Luria és Luria német születésű barátja, Max Delbrück elméleti fizikus vezetése alatt. A csoport baktériumvírusok (bakteriofágok vagy röviden fágok) szaporodásával foglalkozott. A genetikusok azt gyanították, hogy a vírusok voltaképpen csupasz gének.

Ha ez igaz, akkor a gének megismerésének és kettőződésük felderítésének a legjobb módja, ha a vírusok tulajdonságait tanulmányozzák. Minthogy a legegyszerűbb vírusok a fágok voltak, 1940 és 1950 között a tudósok egyre többen – ez volt a fág-csoport – tanulmányozták a fágokat, abban reménykedve, hogy végül megtudják: miképpen irányítják a gének a sejt átöröklését. Míg Delbrück azt remélte, tisztán genetikai fogásokkal megoldható a probléma, Luria mind gyakrabban tűnődött azon, hogy az igazi választ csak a vírus (a gén) kémiai szerkezetének felderítése hozza-e majd meg. Ezért azt gondolta, átküldi Watsont Európába. Gondolkodás nélkül döntött egy fehérjekémikus és egy nukleinsav-kémikus között. Noha a bakteriofágok tömegének csak a felét tette ki a DNS (a másik fele fehérje volt), Avery kísérlete óta az volt a gyanú, hogy ez az öröklődés lényegi anyaga. Egy olyan neves kémikus, Herman Kalckar mellé kerül Watson, akitől a genetika sem idegen. Ennek ellenére a koppenhágai labor nem ösztönözte a biokémiai ismeretek megszerzésére, viszont kémiai érdeklődésének új irányt szab egy Kalckar által javasolt nápolyi, szakmai kirándulás.

5. 1951-ben Maurice Wilkins, a londoni King's College munkatársa nápolyi előadásában bemutatja a DNS röntgendiffrakciós ké-



Maurice Wilkins a felfedezés idején

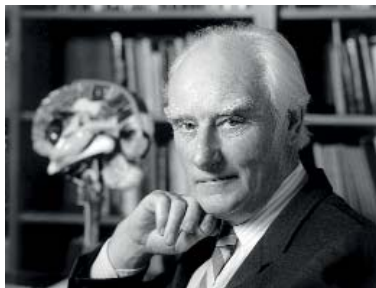
pét. A felvétel jobb minőségű, mint a megelőzőek, így ténylegesen mérlegelhető, hogy az egy kristályos anyag képe. A kristályosíthatóság azt jelenti, hogy a DNS-nek szabályos szerkezetűnek kell lennie. Watsonot érdekelni kezdi a röntgenkristallográfia, és Luriával egyeztetve úgy dönt, átmegy Angliába, a cambridge-i laborba, ahol szintén biológiai nagymolekulák szerkezetét (pl. hemoglobin) tanulmányozzák, és ahol reményei szerint a röntgenkristallográfia alapjait elsajátíthatja. Watson 1951 őszén érkezik a Cambridge-i Egyetem Cavendish Laboratóriumába. A Cavendish igazgatója a Nobel-díjas Sir Lawrence Bragg, a röntgenkristallográfia megalapítója; a csoportot, amelyiknek munkájába Watson bekapcsolódik, Max Perutz vezeti.

6. Ebben az időben már sok mindent tudtak a DNS kémiai összetételéről. Ismert volt, hogy négyféle nukleotidból áll (nukleotid = összekapcsolódó bázis + cukor + foszfát). A nukleotidokat alkotó négyféle nitrogénbázis: adenin és guanin (purin bázisok), valamint citozin és timin (pirimidin bázisok).

7. Alexander Todd szerves kémikusokból álló kutatócsoportja feltevelte, hogy valamennyi nukleotid közti kötés foszfodiészterkötés, amely a cukor 5. szénatomját a mellette levő nukleotid cukrának a 3. szénatomjához kapcsolja.



8. Francis Crick és J. D. Watson (a cambridge-i labor munkatársai) a DNS-ről folytatott beszélgetés közben úgy döntenek, hogy Linus Paulinghoz hasonlóan, aki az α -spirál szerkezetének felderítéséhez molekuláris modellkészletet (is) használt, szintén megpróbálkoznak ezzel a megoldással a DNS szerkezetének felderítéséhez.



Francis Crick 2004-ben

Feltételezték, hogy a DNS-molekula igen nagyszámú nukleotidot tartalmaz, amelyek lineárisan kapcsolódnak egymáshoz, szabályos elrendeződésben, oly módon, ahogyan azt Toddék feltételezték. A modellépítés során feltételezték, hogy a cukor-foszfát „gerinc” nagyon is szabályos, a bázisok sorrendje viszont nagyon szabálytalan. Ha a bázissorrend mindig azonos lenne, akkor valamennyi DNS-molekula azonos volna, és nem létezne az a változékonyság, amely az egyik gént a másiktól megkülönbözteti.

9. Maurice Wilkins a röntgendiffrakciós eredmények alapján azt állítja, hogy a DNS-molekula átmérője nagyobb, mintha egyetlen, nukleotidokból álló polinukleotidlánc volna jelen. Ezért arra gondol, hogy a DNS-molekula összetett spirál. Ezt mérlegelve Cricknek és Watsonnak még a komoly modellépítés megkezdése előtt el kellett dönteni: a láncokat hidrogénkötések tartják-e össze vagy a negatív töltésű foszfátcsoportokat tartalmazó sókötések.

10. Bill Cochran skót kristallográfus és Francis Crick megalkotják a spirális molekulák röntgendiffrakcióját magyarázó elméletet.

11. Watson meghallgatja Wilkins munkatársa, Rosalind Franklin (Rosy) röntgenkristallográfiás előadását a DNS-ről, és tájékoztatja a kísérleti eredményekről Cricket.



Rosalind Franklin az 1950-es években

Ezeket elemezve Crick azt állítja, hogy a kísérleti adatokkal és a Cochran-Crick-elmélettel csak kisszámú formális megoldás egyeztethető össze. Ezért Crick és Watson úgy dönt, hozzákezdnek a modellkészítéshez. Feltételezésük szerint a cukor-foszfát gerinc a molekula közepén húzódik, a bázisok kívül helyezkednek el, a cukrokhoz kapcsolódva. Három lánc tekeredik egymással úgy, hogy a spirál-tengelye körül minden 28 Å távolságon ismétlődik. A láncokat ebben a modellben sóhidak tartják össze – Mg^{++} vagy Ca^{++} a negatív töltésű foszfátionok között.

12. Maurice és Rosy rossznak tartja a modellt. Rosy szerint a Mg^{++} -ionokat vízmolekulák tömör burka veszi körül, s így aligha lehet a tömör szerkezet fő tényezője. Watson rosszul emlékezett Rosy mintáinak víztartalmára – a helyes DNS-modell kb. tízszer annyi vizet tartalmaz, mint amivel a modell készítésekor dolgoztak. Rosy arról is meg volt győződve, hogy a cukor-foszfát gerinc bizonyíthatóan a molekula külsején van.

13. Akkoriban már ismerték azt a különös szabályszerűséget, amelyet elsőként az osztrák származású Erwin Chargaff figyelt

meg a Columbia Egyetemen. Chargaff és tanítványai azt tapasztalták, hogy a vizsgált DNS-készítményekben az adenin- (A) molekulák száma nagyon hasonló a timin- (T) molekulák számához, a guanin- (G) molekulák száma pedig a citozin- (C) molekulákéhoz. Az A-T és G-C arány aztán biológiai eredetük szerint variálódik. Egyes szervezetek DNS-ében túlsúlyban van az A és T, míg más élőlényekben G- és C-többséget találtak. E feltűnő eredményekre Chargaff semmiféle magyarázatot nem tudott adni, noha nyilvánvalóan szignifikánsnak tartotta őket.

14. Linus Pauling, a kor egyes számú kémikusa, a fehérje szerkezeti alapegységének (α -spirál) megfejtője, szintén elkészíti a DNS feltételezett modelljét, ami szintén háromlángú spirál, középen a cukor-foszfát gerinccel. A modell legnagyobb hibája, hogy a foszfátcsoportok nincsenek ionizálva, hanem mindegyik csoport tartalmaz egy kötött hidrogénatomot, így nincs szabad töltésük. Pauling nukleinsava – bizonyos értelemben – egyáltalán nem is sav. Ráadásul a hidrogének a hidrogénkötések részei, amelyek a három összefonódó láncot tartják össze. A hidrogénatomok nélkül a láncok azonnal szétrepülnének, a szerkezet pedig megszűnnék. Márpedig a DNS – sav! Ahogy Watson írja: egy óriás megfélemezett az elemi iskolai kémiairól.

15. Rosy a DNS egy másik (B) formájáról – ez akkor fordul elő, amikor a DNS-molekulákat nagy mennyiségű víz veszi körül – kiváló röntgendiffrakciós felvételt készít. A kép sokkal egyszerűbb, mint a korábbi A formáról készült, és egyértelműen spirális szerkezetre utal. Maurice Watson látogatásakor megmutatja Watsonnak Rosy felvételét.

16. Watson és Crick, részben az új, egyértelmű röntgendiffrakciós felvételtől inspirálva, részben mert nem akarják, hogy Pauling a hiba felfedezése után újra munkába lendülve megelőzze őket, újrakezdik a molekulamodellek készítését. Kétlángú és háromlángú modellek jöhetnek számításba az új kísérleti adatok alapján is. Watson biológiai ismeretei („a fontos biológiai dolgok párban járnak”) azt sugallják, hogy a kétlángú modellel kezdjenek. Először most is belül próbálják elhelyezni a cukor-foszfát gerincet, de így nem sikerül a B forma röntgenadataival megfelelő egyezést találni. Ezért Watson megpróbál olyan modellt építeni, ahol a gerinc kívül van. Azt tapasztalja, a kívülre helyezett gerincet minden további nélkül olyan formájúvá lehet csavarni, hogy megfeleljen a röntgenbizonyításnak. Ekkor a munkapáros már Rosy pontos méréseivel dolgozik. Ezeket Perutz szerezte meg az Orvosi Kutató Tanácson keresztül. A közlemény nem volt titkos, így Perutz a felvételt átadta Cricknek és Watsonnak.

17. A nehézséget most a bázisok jelentették. Hogyan jön létre két vagy több lánc szabálytalan bázissorrenddel? Watson úgy próbálta elrendezni a középen elhelyezett bázisokat, hogy a kívül levő gerincek tökéletesen szabályosak legyenek, vagyis minden nukleotid cukor-foszfát csoportja azonos, háromdimenziós alakzatot adjon. De mindannyiszor felbukkant az akadály: a négy bázis teljesen elütő formájú! Az első töprengések eredménye a „hasonló a hasonlóval” modell, ahol az egymással szemben elhelyezkedő azonos bázisokat hidrogénkötések tartják össze (a hidrogénkötéseket Crick és Watson korábbi beszélgetéseikben határozottan elvetették). Ennél a modellen már felsejlett a gondolat, hogy minden molekulában egy lánc egy korábbi fokon a másik lánc szintézisének a templátjául szolgál. Eszerint a replikáció a gén két azonos láncának a szétválásával kezdődik. Aztán két új leány fo-



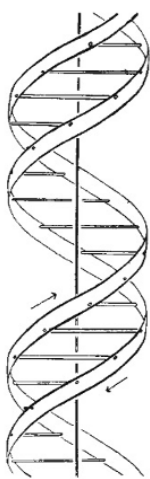
nal alakul a két szülői templáton, s ezáltal két, az eredeti molekulával azonos DNS-molekula képződik. A génreplikáció lényegi trükkje tehát abból a követelményből származhat, hogy az újonnan szintetizált lánc minden bázisának mindig hidrogénkötésben kell lennie egy azonos bázissal.

18. A „használó a használóval” modell hibásnak bizonyul. Jerry Donohue amerikai kristallográfus közli Watsonnal, hogy a bázisok általa használt tautomer formái valószínűtlenek. Szerinte a szerkesztők évek óta önkényesen előnyben részesítenek bizonyos tautomer formákat – Watson a bázisok enol formájával dolgozott, holott a keto változatot kell feltételezni. A keto formát feltételezve viszont a purinok és pirimidinek közötti méretkülönbségek sokkal lényegesebbé válnak, mint az enol formák esetén, és így a lánc túlságosan meggörbülne. A röntgenkristallográfiás értékekkel sem volt összeegyeztethető a modell, továbbá nem adott magyarázatot a Chargaff-szabályokra (az adenin „egyenlő” a timinnel, a guanin pedig a citozinnal).

19. Mivel a fémből készült purin és pirimidin bázisok nem készültek el időre, Watson kemény kartonlemezekből pontos bázismodelleket vág ki, és elkezd tologatni a bázisokat más különböző párosítási lehetőségek szerint. Hirtelen rádöbben, hogy az adenin-timin pár, amelyet két hidrogénkötés tart össze, azonos formájú, mint a legalább két hidrogénkötéssel összetartott guanin-citozin pár. Jerrynek sincs kifogása az új bázispárokkal szemben. Megoldódni látszik a rejtély: miért egyezik meg a purincsoportok száma pontosan a pirimidincsoportokéval. Két szabálytalan bázissorrend szabályosan elhelyezhető a spirál közepén, ha a purin mindig hidrogénnel kötődik a pirimidinhez. A hidrogénkötés-feltételezés továbbá azt jelentette, hogy az adenin (purin) mindig a timinnel (pirimidin) lép párba, míg a guanin (purin) csak a citozinnal (pirimidin). Chargaff szabályai most hirtelen a DNS kettős spirálszerkezetének a következményei lettek. S ami még izgalmasabb volt, ez a kettős spiráltípus sokkal megfelelőbb replikációs sémát sugallt, mint a „használó a használóval” párosodása. Ha az adenin mindig a timinnel, a guanin mindig a citozinnal alkot párt, akkor a két egymásba fonódó lánc bázissorrendje egymásnak a kiegészítője. Tehát, ha az egyik lánc sorrendje adott, akkor ez automatikusan meghatározza a másikat. Így könnyen elképzelhető, hogy miként lehet egy szülői lánc egy komplementer bázissorrendű lánc szintézisekor templát.

20. Elkészítik a modellt a műhelyben erre a célra gyártott fémlapokból, meghatározzák a pontos atomkoordinátákat, majd megmutatják a Todd-csoportnak és a King's College munkatársainak. Ezt a modellt Maurice és Rosy is elfogadják.

21. A bázispárokról szóló cikket 1953. április 23-i számában lehozza a Nature; ugyanabban a számban jelennek meg Rosalind Franklin és tanítványa, Gosling, valamint Maurice és munkatársai röntgenkristallográfiás eredményei. Ezek a Nature-beli cik-



Watson és Crick 1953. április 25-i Nature-cikkének illusztrációja: „Csak vázlatos ábra. A két szalag a két foszfát-cukor láncot, a vízszintes rudak a láncokat összetartó bázispárokat szimbolizálják. A függőleges vonal a szál tengelyét jelzi”



A DNS művészeti alkotásokat inspirált

kek az évszázad egyik legfontosabb tudományos eredményének bizonyultak, forradalmasították a biológiát és megteremtették a molekuláris biológia alapjait.

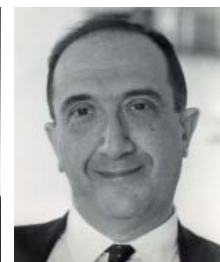
22. Watson, Crick és Wilkins 1962-ben orvosi-élettani Nobel-díjjal jutalmazták a DNS szerkezetének felfedezéséért. Rosalind Franklin addigra meghalt rákban, 37 éves korában. (A DNS felfede-



MAX DELBRÜCK



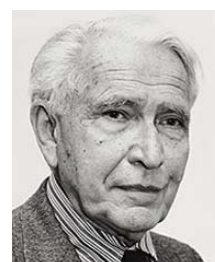
ALFRED DAY HERSHEY



SALVADOR LURIA



OSWALD AVERY



ERWIN CHARGAFF

zéséhez kapcsolódó kutatók közül Todd fontos, a természetben található anyagok – például a nukleotidok és nukleotid-koenzimek, vitaminok – és más anyagok szerkezetének vizsgálatáért és

kémiai szintéziséért 1957-ben Nobel-díjat kapott; Max Delbrück 1969-ben Alfred Day Hershey-vel és Salvador Luriával a vírusok replikációs mechanizmusának és genetikai szerkezetének kutatásában elért eredményeiért megosztott orvosi-élettani Nobel-díjat kapott. Sokak szerint ez az elismerés Oswald Averyt és Erwin Chargaffot is megillette volna.)

JEGYZETEK

Az 1–20. pont J. D. Watson A kettős spirál (Gondolat, Budapest, 1970, ford. Korányi Tamás) című könyvéből kevés és lényegtelen változtatással vesz át részleteket.

A 21. és 22. ponthoz felhasznált linkek: http://nagygyendiagnosztika.hu/publikaciok/cikkek/dns_kettos_spiral_szerkezetének_felfedezese.php, <http://hu.wikipedia.org/wiki/Dezoxiribonukleinsav>, <http://tudosnapta.kfki.hu/historia/egyen.php?nanev=todd&nev5=Lord+Todd>, <http://tudosnapta.kfki.hu/historia/egyen.php?nanev=delbruck&nev5=Delbr%FCck,+Max>



Víz a Naprendszerben

Beszélgetés Kovács József csillagással

Kovács József az ELTE Gothard Asztrofizikai Observatórium és Multidiszciplináris Kutatóközpont munkatársa. A szombathelyi csillagvizsgálóban, az egykori Gothard-kúriában beszélgettünk.

– A földi élet a vízhez kötődik, s könnyen arra a gondolatra ragadtatjuk magunkat, hogy a környező bolygókon, ahol nincs emberi élet, biztosan víz sincs. Egyik előadásán éppen az ellenkezőjére idézett számos példát. Hogyan mutatható ki a „Földön kívüli” víz?

– A világűrbeli vízről többnyire csak közvetve szerzünk tudomást: általában az égitestekről származó fényt elemezzük. Az első számú módszer a spektroszkópia, de ha egy objektum nagyon fényes, akkor leginkább a fényvisszaverő képessége miatt érzékeljük. Mi veri vissza jól a fényt? A jég. A Jupiter és a Szaturnusz „világító” holdjai, a Kuiper-öv fényes objektumai nagyrészt jégből állhatnak.

A vízmolekulákat rendszerint az emissziós spektrumok alapján próbáljuk kimutatni. Az atomok – az elektrongerjesztés megszűnésekor – többnyire a látható, még inkább az ultraibolya tartományban bocsátanak ki fotonokat. A molekulák elektronjainak energiaszintjei általában közelebb vannak egymáshoz, mint az atomi energiaszintek, ezért a gerjesztett molekulákból kisebb energiájú, nagyobb hullámhosszú fotonok távoznak. A molekulák és az atomok mozognak is. Az atomokat alapesetben gömbszerűnek képzeljük el, de a molekulák alakja szabálytalanabb, így rezgő- és forgómozgásuk is információt hordoz. Ezek a mozgások szintén kvantáltak. A rezgési gerjesztés energiája a legtöbbször az infravörös, a forgásié a mikrohullámú tartományba esik. Amikor a víz nyomát keressük, ezeket a régiókat kell vizsgálnunk.

Csak hogy a földi légkörben is van víz, ezért az IR-mérések a világűrben, de legalább a magasban folynak – például egy több ezer méteres hegy csúcsán, ahol már kevés a vízgőz, vagy repülőgépekre telepített obszervatóriumokban. A Kuiper Airborne Observatory (KAO) volt az első repülőgépes csillagvizsgáló: egy átalakított Boeing-747 14 kilométer magasra vitte fel az IR-távcsövet. Ennek az obszervatóriumnak az utóda a SOFIA, amelynek a fedélzetén szintén IR-távcső üzemel. Tehát vagy hegy-csúcsokon, optikai megfigyelésre is alkalmas távcsövekkel, vagy repülőgépre, űreszközeire szerelt berendezésekkel detektálhatjuk a víz spektroszkópiai vonalait, sávjait.

– Előfordulnak a spektroszkópiában „csillagász-trükkök” is?

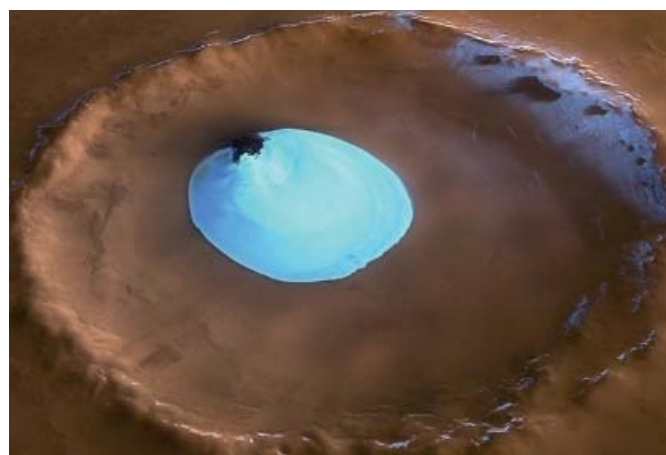
– Az üstökösök spektruma például felvehető a Föld közelében, de a kétféle égitesttől származó víz vonalait szét kell választani. Ehhez a Doppler-eltolódást hívjuk segítségül. Ha a megfigyelő és

a forrás relatív sebessége nem nulla, vagyis a testek egymáshoz képest mozognak, akkor a színképvonalak eltolódnak a laboratóriumban mérhető hullámhosszhoz képest. Amikor a testek távolodnak egymástól, a színképvonalak a hosszabb hullámhosszak felé mozdulnak el, ha pedig közelednek egymáshoz, a rövidebbek felé. A Halley-üstökös megfigyelését akkorra időzítették a KAO-n, amikor az üstökös – néhány 10 km/s sebességgel – éppen a Föld felé tartott. Ez már eltolódást idézett elő a színképvonalakban: így sikerült leválasztani a földi víz spektrumáról az üstökösbeli vizét.¹

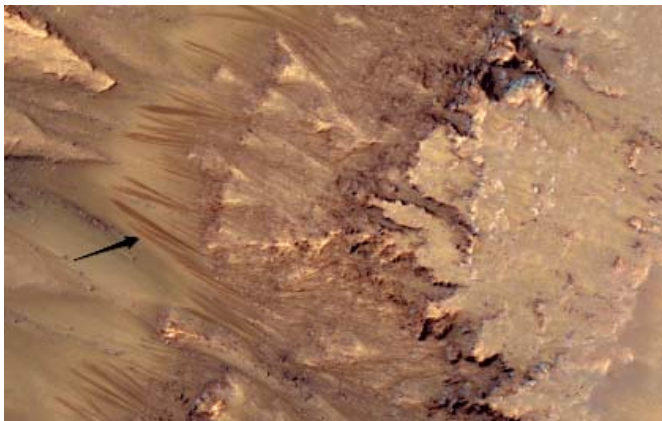
De nem csak optikai spektroszkópiára támaszkodhatunk. A Hold vízkészletét több űreszközzel próbálták már feltérképezni az elmúlt 15–20 évben. Nagyon szeretnénk tudni, hogy a Holdon van-e jelentős mennyiségű és könnyen hozzáférhető víz, mert az ember előbb-utóbb ott is megveti a lábát. Jelenleg körülbelül tízezer dollárba kerül egy kilogramm hasznos teher – például egy liter víz – feljuttatása a világűrbe...

A Holdnak nincs légköre, ezért a kozmikus sugárzás akadálytalanul lejut a felszínére és behatol a talaj felső részébe. A sugárzásban mozgó nagy energiájú részecskék neutronokat ütnek ki a kőzetekből vagy a víz oxigénjéből. Ezek gyors neutronok – csakúgy, mint az atommaghasadáskor felszabaduló neutronok. Az atomreaktorban a gyors neutronokat le kell lassítani, hogy további maghasadást idézzenek elő. Ezért hasonló tömegű részecskékkel ütköztetik őket. Ilyen részecske például a proton, amely megtalálható a vízmolekulában. Ha tehát a Holdból is érkeznek lassú neutronok az érzékelőberendezésbe, akkor víz jelenlétére gyanakodhatunk. Neutronspektroszkópiás mérésekkel

Vízjég egy marsi kráter belsejében az ESA Mars Express szondájának felvételén



¹ Az IR-spektroszkópia alkalmazásakor azzal is meg kell küzdeni, hogy a távcső, a mérőberendezés hőmérsékleti sugárzása jórészt szintén az infravörös tartományba esik, ezért a megfelelő jel/zaj arány elérése érdekében a teljes észlelőrendszert héliummal 0 K közelébe hűtik.



A jellegzetes marsi alakzatok arra utalnak, hogy a bolygó felszínének egy részét egykor víz boríthatta

valóban detektáltak vizet a Hold pólusai környékén. A kutatók azonban még ennél is messzebb mentek: miután egy űreszköz bizonyos része elvégezte a feladatát, beleirányították a holdfelszínbe, és a becsapódás közben felszabaduló anyagban próbálták spektroszkópiai módszerekkel keresni a víz nyomát.

A mérések eredménye azt mutatja, hogy a Holdon nincs túl sok víz: 100–200 millió köbméternyi lehet összesen, és ez is nehezen hozzáférhető: azokban a kráterekben bújhat meg, amelyeket kevés napsütés ér, vagy jégbe fagyva, hideg kőzetekben rejtőzik.

– *Hogyan került víz az univerzumba?*

– Az ősrobbanás elmélete szerint a világegyetem keletkezése után még csak hidrogén, hélium és nyomokban lítium képződött. Az összes többi elem később jött létre, a csillagok belsejében, termionukleáris fúzióval. A természetes elemek úgy jelenhettek meg a Földön, hogy a leendő Naprendszer környékén bekövetkezett egy szupernóva-robbanás, amely a csillagokhozban termelődött elemeket szétterítette abban a csillagközi felhőben, amelyből aztán a Naprendszer is kialakult. A hidrogén és az oxigén tehát már készen állt, a molekulák képződéséhez azonban hidegre volt szükség. Néhány tíz kelvines térségek azokban a molekulafelhőkben is előfordulhattak, amelyekből a csillagok – adott esetben bolygórendszerükkel együtt – kialakultak. Azt mondhatjuk, hogy a víz elég hamar „megvolt”, mert az ősrobbanás után az első csillaggenerációk gyorsan elégették a nukleáris üzemanyagukat, szupernóvaként fölrobbantak és átadták az anyagot a következő generációknak.

Tehát az az ősi anyag, amelyből a Naprendszer 4,6 milliárd évvel ezelőtt kialakult, tartalmazott vizet. Ebből nagyon sok megtalálható a bolygók képződése után visszamaradt testekben. Ilyenek főként a Neptunuszon túl, a Kuiper-övben és az Oort-felhőben keringenek. A Kuiper-öv a Naptól 30 csillagászati egységre kezdődik és körülbelül még egyszer eddig tart.² Ez a bolygóknál jóval kisebb, de legalább 100 km-es égitestek birodalma. Egy nagyságrenddel távolabb van az Oort-felhő, amely gömbszimmetrikusan veszi körbe a Naprendszert. Ebben, az elképzelések szerint, üstökösök milliárdjai keringenek. A két külső zóna égitestjei tehát nagyon gazdagok vízben. A Merkúrra, a Vénuszra, a Földre és a Marsra üstökösök szállították a víz egy részét. Az Oort-felhő közel van a csillagközi térhez, itt a Nap gravitációs hatása mellett a közeli csillagoké is érvényesülhet. Ezért úgy gondoljuk, hogy az égbolton megjelenő üstökösök innen származ-

nak: a környező csillagoktól eredő gravitációs zavar miatt megváltozik egy-egy üstökös pályája, és az üstökös megindul a belső Naprendszer felé. Ma ez ritka, de a korai időszakban nagyon gyakori lehetett. Az üstökösök a Föld felszínét is bombázhatták: a mi vizünk jelentős részét tehát ők hozhatták ide.

– *Minden égitesten ugyanolyan víz van?*

– Előfordulhatnak apró eltérések. Például a protonoknak $+1/2$ és $-1/2$ lehet a spinjük, és attól függően, hogy a két proton spinje azonos vagy ellentétes irányban áll-e, orto- vagy para-víz képződik. A kétféle állásnak megfelelő víz spektruma is különbözik kicsit. Az orto- és para-víz aránya a bolygórendszerek kialakulásakor rögzül, mert az uralkodó hőmérsékleti viszonyok határozzák meg. Ezért a kétféle víz arányából a kialakulás hőmérsékletére is lehet következtetni. Az üstökösök esetében az orto-para arány más, mint a földi vizekben, ezért úgy gondoljuk, hogy a víz nem csak az üstökösöktől érkezett hozzánk.

– *Nagy kataklizmák játszódhattak le...*

– A becsapódástól az üstökös biztosan elpárolgott, és később a légköri gőzből keletkezett újra víz – ebből alakulhattak ki az óceánok. Egy ilyen becsapódásnak óriási az energiája, el sem tudjuk képzelni. Gondoljunk a pár hónappal ezelőtti orosz eseményre: nem is volt becsapódás, csak egy néhány méteres meteor száguldott el Cseljabinszk fölött, mégis mekkora károkat okozott!

A bolygórendszer kialakulásának késői fázisában volt sok becsapódás, valószínűleg ekkor került ide a víz nagy része. Nemcsak a Földre, hanem a belső bolygókra is. Nálunk megmaradt, máshonnan helyel-közzel eltűnt.

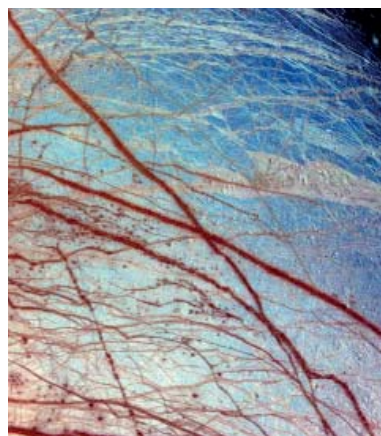
– *Ennek mi lehetett az oka?*

– A legbelső bolygónak, a Merkúrnak kicsi a tömege, ezért a mi Holdunkhoz hasonlóan nem képes arra, hogy megtartsa a légkörét, ráadásul a Nap felőli oldala több száz Celsius-fokos.

A Vénuszon az üvegházhatás miatt 400–500 Celsius-fokos a hőmérséklet. A víz már régen elpárolgott és fokozta az üvegházhatást. A mérések szerint valamennyi azért még maradt a légkörben, és ebben jóval nagyobb a nehézvíz aránya, mint a Földön – valószínűleg azért, mert a könnyű víz már megszökött a légkörből. A csillagászok úgy gondolják, hogy ha a Vénusz összes vizét szétterítenénk a bolygón, csak pár centiméter vastag réteg borítaná a felszínt. A Föld esetében ez a réteg 3 kilométeres lehetne, mert a Földön 1,5 milliárd köbkilométernyi víz van, ami körülbelül 700 kilométer sugarú gömbben férne el. A becslések szerint ennél még több víz van a Jupiter Europa nevű holdján. Sok víz lehet a Szaturnusz Enceladus holdján is.

– *Miért alakult ki nagy üvegházhatás a Vénuszon?*

– A Vénusznak egészen más a légköre, mint a Földnek. Ott például nagyon sok szén-dioxid, metán van a légkörben. Ezen a



A Jupiter Europa nevű holdjának felszíne. A hold vastartalmú magját burkoló szilikátköpeny felett 100 km vastagságú vízréteg lehet, ezt a felszínen 10–20 km vastag jég-réteg borítja. A vízen úszó jégréteg sok helyütt megreped: a rianások jól kivehetők az űrszondák, például a Galileo felvételein

² 1 csillagászati egység (CsE) az átlagos Nap–Föld távolság, kb. 150 millió km.



napsugárzás többé-kevésbé akadálytalanul áthatol, aztán elnyelődik a talajban, amely hosszabb hullámhosszú, infravörös sugárzás formájában bocsátja ki az elnyelt energia jelentős részét. Ez már gerjeszti a légkör molekuláit, tehát elnyelődik – ahogy a Földön is. Az elnyelt energia miatt a légkör folyamatosan melegszik. Erre nekünk is oda kell figyelniünk... Azt már látjuk, hogy a globális felmelegedés miatt olvadnak a sarki jégsapkák. A sarki tengerek alatt, az üledékben, rengeteg metán van, amely így felszabadulhat. A metán a szén-dioxidnál is „gyilkosabb” molekula, mert hatékonyabban nyeli el az infravörös sugárzást.

A Föld másik bolygószomszédja a Mars: egy jövőbeli űrutazás célpontja. Itt több víz van, mint a Merkúron és a Vénuszon. Például a poláris, 1000 kilométernél nagyobb átmérőjű jégsapkákban nemcsak szárazjég, hanem vízjég is található. Felszíni alakzatok is árulkodnak arról, hogy korábban nagy mennyiségű víz lehetett a bolygón. A marsi vízkutatás abból indult ki, hogy Giovanni Schiaparelli csatornákat vélt felfedezni a felszínen a 19. század végén. Innen eredeztetik a marslakókat – mert az ember a vízből rögtön az életre, sőt a magas szintű szerveződésre asszociál.

A Mars körül keringő űreszközök felvételei még mostani vizes aktivitás nyomaait is jelzik. Sőt, kiderült, hogy a Marson vannak

olyan kőzetek, amelyek csak vizes környezetben keletkezhettek. Ebből a szempontból a Mars ígéretes célpont az expedíciók számára.

– *Előfordulhat víz a csillagokban, esetleg a Napban is?*

– Azt gondolnánk, a Nap olyan meleg, hogy nem. Ennek ellenére ott is mutattak már ki vizet spektroszkópiai úton. A Nap fotoszférája, ahonnan a hozzánk érkező sugárzás túlnyomó része kiindul, 5500–6000 kelvin hőmérsékletű. A vízmolekulának ez már nagyon meleg, de a napfoltokban 1000–2000 fokkal hidegebb van. Itt megmaradhat egy ideig a víz – különösen úgy, ha hirtelen sok érkezik egyszerre. Erre akkor kerülhet sor, amikor üstökös csapódik a Napba.

– *A Gothard–Lendület Kutatócsoportban önök is használják a spektroszkópiát. Milyen adatokat gyűjtenek, elemeznek?*

– A spektroszkópia részben arra szolgál, hogy egy adott égitestnek, forrásnak megpróbáljuk megállapítani a kémiai összetételét. A csillagok színekében először a hidrogén vonalait célszerű keresni. A hidrogén jelenléte azonban függ a csillag hőmérsékletétől, hiszen a spektrumvonal csak akkor jelenik meg, ha az atomok, molekulák elektronjai kötött állapotban vannak, és az elektronok különböző energiájú kötött állapotok között mo-

A Gothard Obszervatórium

Gothard Jenő 1881 októberében kezdte meg az észleléseket a pár száz méterre fekvő kastélyában – *meséli az obszervatóriumban Kovács József*. – Ez testvére, Gothard Sándor kúriája volt; az ő özvegyétől szállt később a magyar államra.

Gothard Jenő 1879-ben gépészmérnöki diplomát szerzett Bécsben, utána itthon gazdálkodott, és folytatta azokat a fizikai kísérleteket, amelyeket tanárával, Kuncz Adolfal – a premontrei rend későbbi csornai prépostjával – kezdtek el még gimnáziumi éve alatt. 1879-ben Székesfehérváron rendeztek egy ipari kiállítást, ahol bemutatták az eszközeiket. Ezek Konkoly Thege Miklós érdeklődését is felkeltették. Konkoly meghívta Gothardot Ógyallára, ahol már 1871 óta működtette a csillagvizsgálóját. Gothardnak annyira megtetszett, amit látott, hogy egy éven belül – Hauszmann Alajos tervei alapján – átalakíttatta a kastélyt. Helyet kapott benne a kémiai és a fizikai labor, a finommechanikai műhely, az épület északkeleti sarkán álló torony tetjén pedig előkészítették a majdani fő műszer, a 10 inches távcső helyét. A távcsövet – egy 1873-as londoni példányt – Konkolytól vette meg Gothard részletre. A barátságot szigorúan különválasztották az üzletől; később már ő adta el saját gyártmányú műszereit Konkolynak.



Gothard Jenő komparátora (1888)

Ezek az eszközök Európa számos obszervatóriumába is eljutottak.

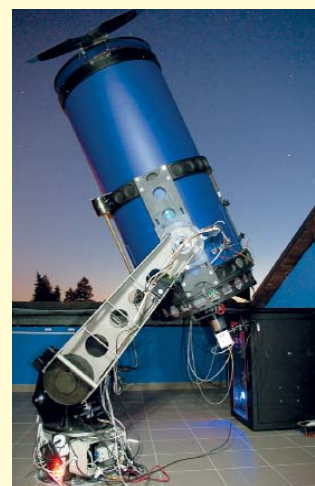
A mostani csillagvizsgálóban technikátörténeti kiállítást rendeztünk be, ahol számos műszerét bemutatjuk. Gothardot nem csak a csillagászat érdekelte: a röntgensugárzás felfedezése után azonnal katód-

sugárcsöveket rendelt, amelyekkel különféle felvételeket készített – azt kereste, hogy mire használhatnák a sugárzást. Ő is konstruált távirót, csillagászati ingaórát. A feljegyzések szerint kezdetben csak hárman tudták felállítani a különleges felfüggesztést igénylő Foucault-ingát: Foucault-on kívül a későbbi Nobel-díjas Kamerlingh Onnes Hollandiában és Gothard Jenő Herényben. Komparátorát – amely színekpvonalak hullámhosszának kimérésére, összehasonlítására szolgált – az Edingtonról³ szóló film forgatásához használták fel néhány éve.⁴

Az állandó kiállítás fölötti szinten két kis szobát és konyhát alakítottunk ki: itt lakhatnak nyáron azok a diákok, akik hozzánk jönnek szakmai gyakorlatra. A „csillagdák” régen is elszállásolták a vendégeket...

Az ELTE Gothard Obszervatórium 60 cm-es Cassegrain típusú távcsöve, holtversenyben a második legnagyobb magyarországi teleszkóp

Az ELTE Gothard Obszervatórium 50 cm-es Ritchey–Chrétien teleszkópja, a spektroszkópiai mérések fő műszere



³ Eddington észlelései – többek között – hozzájárultak az általános relativitáselmélet igazolásához.

⁴ A virtuális múzeum a <http://www.gothard.hu/gttak/> címen érhető el.



zognak. Nagyon magas hőmérsékleten a hidrogén ionizálódik: az elektron leszakad a protonról – ettől kezdve nincs színképvonal. A nagyon hideg csillagokból sem kapunk spektroszkópiai jelet: ezekben nem elég a fotonok energiája az átmenetek gerjesztéséhez. Az elérhető tartományban az általánosan ismert módszerekkel detektáljuk az elemek jelenlétét, mennyiségét.

Számunkra izgalmasabb, hogy ezek a színképvonalak sebesség meghatározására is szolgálnak: a spektrumokból a forrás és az észlelő egymáshoz képesti sebességét állapíthatjuk meg. Az eljárás a Doppler-eltolódáson alapszik, amelyről már beszéltünk: ha a forrás és az észlelő egymáshoz képest mozog, a spektrumvonalak eltolódnak a laboratóriumban mértékhez képest. Ezt az eltolódást át lehet konvertálni sebességre, ami nem is bonyolult, ha a fénysebességtől távoli tartományban maradunk. Ilyenkor

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{v}{c},$$

ahol λ a spektrumvonal „laboratóriumi hullámhossz”-a, $\Delta\lambda$ a hullámhossz-eltolódás mértéke, v a forrás és a megfigyelő relatív sebessége, c a fénysebesség.

Így tehát meg tudjuk mérni egy csillag sebességét, ebből pedig arra is következtethetünk, hogy van-e a csillag körül más égitest. Mi az exobolygókat, a Naprendszeren kívüli bolygókat vizsgáljuk. Két évtizeddel ezelőtt még csak álmodoztunk a kimutatásukról. Ma már a bizonyított exobolygók száma 800 és 900 között van, a jelöltéké majdnem 3000. Az első, Naphoz hasonló csillag körül keringő exobolygót 1995-ben fedezték fel.

– *Milyen bolygók tartoznak a jelöltek közé?*

– Amelyeket már detektáltak, de a létüket még nem igazolták független módszerrel. Az exobolygókat – néhány kivételtől eltekintve – nem tudjuk közvetlenül észlelni, mert a csillaguk fénye milliószor erősebb az övéknél. Ezért kihasználjuk a gravitációs hatást. A Naprendszer esetében azt mondjuk, hogy a bolygók a Nap körül keringenek. Valójában az összes naprendszerbeli égitest – a Nap is – a rendszer tömegközéppontja körül kering. Ez a Nap belsejében van, de nem a Nap geometriai középpontja. Tekintsünk most egy csillagból és egy exobolygóból álló rendszert. Mivel a csillag a tömegközéppont körül kering, hol közeledik hozzánk, hol távolodik tőlünk. A csillag színképében ezért periodikus vonaleltolódást látunk. Az ebből származtatott sebességértékek szintén periodikusan változnak az idő függvényében, és a sebességgörbe elemzéséből megbecsülhetjük például a bolygó tömegét, pályáját. Az első tíz évben ez volt az exobolygók fő detektálási módszere. Így csak a Jupiter- vagy az annál nagyobb töme-

A Szaturnusz Enceladus nevű holdjának déli pólusa közelében sok helyütt gejzírek pumpálnak vízgőzt a magasba. A percnként 9 tonna kilövellt anyag 90–94%-a vízgőz és vízjégszemcse. A felvételt a Cassini űrszonda készítette



A Deep Impact űrszonda – egyik részének becsapódása után – kristályos vízjeget detektált a Tempel-1 üstökösből kidobódott anyagban

gű bolygók mutathatók ki, ezek is akkor, ha nagyon közel keringenek a csillagjukhoz, néhány nap alatt tesznek meg egy „kört”.

Ma már nem ez az elsődleges kimutatási eszköz, hanem a Kepler-űrtávcső. 2009-ben bocsátották fel – nemrég, sajnos, kritikus hiba lépett fel benne, de így is rengeteg adatot szolgáltatott. Mivel a világűrben működik, nem érvényesül a földi légkör zavaró hatása. A Kepler olyan bolygókat keres, amelyek pályasíkja majdnem beleesik a látóirányunkba. Ilyenkor a bolygó adott időközönként a csillag elé kerül, ami nem túl nagy, de jól mérhető fényességcsökkenést okoz. Ez még földi műszerekkel is észlelhető, a világűrből pedig „ultrapontosan” mérhető a fényesség változása. A Kepler-űrtávcső a Hattyú és a Lant csillagképek határán levő területet vizsgálja, és körülbelül 150 000 csillag fényességét méri folyamatosan, többek között ilyen effektusok után kutatva. Ezzel a „transzit-módszerrel” a Kepler 2300 bolygójelöltet talált, amelyek létét a Doppler-módszerrel még meg kell erősíteni.

Körülbelül tíz éve indult Bakos Gáspár és csapatának projektje, a HATNet (Hungarian Automated Telescope Network). Ők kis, 10 cm-es távcsövekkel monitorozzák az égbolt egyes tartományait, négy különböző földi obszervatóriumból. Így sok csillagot figyelnek meg, és automatizált módon mérik a fényességüket, hogy megtalálják a kis fénycsökkenéseket. Ezzel az „előválogatással” derítik fel az ígéretes jelölteket. Ők is több tucatnyi exobolygót fedeztek fel. Amíg nem állt pályára a Kepler, ez volt az egyik leghatékonyabb exobolygó-kereső program.

Mi a Doppler-módszert alkalmazzuk: olyan csillagokat vizsgálunk, amelyek exobolygóját már megtalálták. A felfedezést igazoló mérésekhez nagy távcsöveket használnak: ezek távcső-ideje drága, ezért csak egy-két spektrumot vesznek fel velük. További információt szolgáltathat a csillag hosszabb ideig tartó követése, amire már mi is vállalkozhatunk: megnézzük például, hogy úgy változik-e a csillag színképe, ahogyan korábban feltételezték és/vagy nem befolyásolja-e egy másik exobolygó a pályáját.

A víz az exobolygóknál is kimutatható, sőt, már időjárási viszonyokat kezdenek modellezni a légkörükben. Mivel az exobolygók nagyon halványak, nehezen tudjuk szétválasztani a spektrumvonalait a csillagokétól. Szerencsére, hűvösebbek a csillagjaiknál, ezért a sugárzásuk a láthatóból az infravörös tartomány felé tolódik el. Ha a tranzit módszert alkalmazzák, és akkor veszik fel a színképet, amikor az exobolygó valahol „oldalt” van, integrált spektrumot rögzítenek, amely a csillag és a bolygó vonalait egyaránt tartalmazza. Ha ezután úgy is felveszik a színképet, hogy a bolygó a csillag mögött van, akkor csak a csillag vonalai jelennek meg, és a két spektrum különbsége kiadja a bolygóét. Így találták meg a víz sávjait az exobolygók színképében.

Silberer Vera



Vegyészkalendárium

Pap József Sándor rovata

MICHAEL JAMES STEUART DEWAR (1918. SZEPTEMBER 24.) – ÉLET SZEMISEMPIRIKUSAN. Skót származása dacára az indiai Ahmednagar a szülővárosa. Gyermekkorra ide kötődik, csak nyolcévesen kerül egy angliai bentlakásos iskolába. Ösztöndíjat nyer a neves Winchester College-ba, ebben az időben végzi első kémiai kísérleteit. Élete meghatározó állomása Oxford, ahol végleg elkötelezi magát a kémia mellett, és előbb kiváló eredménnyel diplomát, majd doktori fokozatot szerez. Sir Robert Robinson posztdoktori ösztöndíjasaként penészgombák által termelt hidroxiketokarbonsavakat vizsgál. Az aromás egy új példáját demonstrálja, amely héttagú gyűrűre terjed ki, s az alapvegyületet „tropolon”-nak nevezi el (*Nature*, 1945). Ez a munka nagy lendületet ad a benzoltól eltérő alapvázú



aromás vegyületek kutatásának. Ebben az évben áll elő azzal a feltevésével is, hogy a benzidin átrendeződésekor π -komplex intermedier lép fel. A π -komplex gondolata számos esetben hasznosnak bizonyul, például az olefinek és átmenetifémek közötti kötés Dewar–Chatt–Duncanson-modelljének felállításakor.

1944-ben veszi feleségül Mary Williamsont, aki történész, a Tudor-ház híres szakértője. Két fiuk születik, Robert és Steuart. Házasságuk boldog, kiváló párost alkotnak, híresek a házukban tartott fogadások.

Az Oxford University Press számára elméleti szerves kémiai könyv megírásába kezd, amely 1949-ben *The Electronic Theory of Organic Chemistry* címmel jelenik meg. A mű mérföldkő abból a szempontból, hogy először alkalmazza a molekulaorbitálméletet a szerves kémiában. Közben 1945-től kutatási igazgatóként helyezkedik el a Courtauld vállalatnál, ami furcsa váltás, hiszen a kutatólabor fizikai kémiai területen folytat munkát. Igaz, hogy C. H. Bamforddal leginkább polimerizációs problémákat vizsgálnak, és igyekeznek Dewar elméleteit a gyakorlatba átültetni. Elsőként határoznak meg sebességi állandót vinil-polimerizációra és autooxidációs reakciókra. Szerteágazó érdeklődését bizonyítja, hogy a rezonancia- és az MO-elmélet mellett csillagászatilag kapcsolatos cikke is megjelenik. Könyvén éjszakánként és hétvége dolgozik. Felépíti a szemikvantitatív, ma perturbációs MO-elméletként ismert modelljét.

1951-ben kerül a Queen Mary College-ba, ahol 1959-es távozásáig jelentős szellemi műhely alakít ki, melyet szakadatlanul bővít és fejleszt. Újabb elmélettel áll elő a hiperkonjugációról, s ezzel heves vitát indít a kémiai kötés természetéről. Széles skálájú kísérleti munkát vezényel aromás szubsztitúciós reakcióktól kezdve egészen aza-bora-heterociklusok szintéziséig. Vizsgálja tiolok fémfelületen való megkötődését, folyadékkristályok tulajdonságait és a szubsztituensek irányító hatását szerves reakciókban. A növekvő adminisztrációs teher azonban túlságosan el-

vonja a kémiától, így 1959-ben elfogadja a Chicagói Egyetem professzori állását.

Folytatja ugyan kísérleti munkáit is, de egyre több energiát fektet szemiempirikus számítási módszerek fejlesztésébe. Ez a hangsúlyváltás vezet ahhoz, hogy áttegye székhelyét a texasi Austinba (1963). Több mint három évtizedet dolgozik itt. Kísérleti munkássága elsősorban elméletei igazolását célozza, mégis megtartja sokszínűségét. Egyre kifinomultabb módszereket dolgoz ki nagy molekulák orbitáljainak kvantitatív számításaihoz. A reakciómechanizmusok során fellépő átmeneti állapotok energiája és szerkezete különös hangsúlyt kap kutatásaiban. Módszerei, mint a MINDO, MNDO, AM1, PM3, SAM-1 (az akkori számítási kapacitásokhoz mérten) kiválóan alkalmasak realiztikus reakciók intermediereinek geometriai optimalizálására. Ezek sok tekintetben a mai, sokkal pontosabb számítások elődjének tekinthetők.

Nézete szerint alaposan átgondolt és védhető megoldáshoz akkor juthatunk, ha provokatív (de érzelemmentes) vitát generálunk. Dewar minden területen kiváló vitapartner, legyen szó csillagászatról, geológiáról, vagy akár a keleti konyháról. Szókimondása miatt gyakran kerül összeütközésbe a bürokráciával. Öreg éveire ez, és felesége halála megkeseríti jó kedélyét. A floridai Gainesville-be költözik, itt éri a halál 1997. október 10-én. Mind a brit (1960), mind az amerikai (1983) tudományos akadémiának tagja, a szerves kémia számos jelentős kitüntetésének birtokosa volt. (Források: J. Michl, M. A. Fox, *Biogr. Mem. Fell. R. Soc.* 1998, **44**, 129; M. J. S. Dewar: *A Semiempirical life*, American Chemical Society, 1992.)

Dewar kiváló társalgó volt, szeretete meglepni hallgatóságát. Egyszer kijelentette, hogy a latint kötelezővé kell tenni az iskolákban. Három okot sorolt fel: 1) nagyon sokrétű nyelv, kiváló az elme csiszolására és bonyolult indoklásokra, 2) a gyerekek utálják, tehát korán megtanulják túrni a viszontagságokat, 3) általában tökéletesen haszontalan a későbbi életükben, és azt mégsem várhatjuk el, hogy olyan dolgot utáljanak meg, ami később még hasznos lehet számukra!

SIR JAMES DEWAR (1842. SZEPTEMBER 20.) – A NAP FORRÓSÁGA ÉS AZ ABSZOLÚT NULLA FOK KÖZÖTT. Amikor az 1760-as években Thomas Dewar a skót Kincardine-ban fogadót nyit, bizonyára nem is álmodik arról, hogy a város leghíresebb szülötte majdan James nevű, tehetséges, de idejekorán árvaságra jutó dédunokája lesz. Édesanyjuk, s pár évre rá édesapjuk halálának traumája súlyos terhet ró a Dewar testvérekre. James ráadásul tanulmányait is kénytelen megszakítani két évre, mivel jeges vízbe esik és reumatikus láz, valamint tüdőgyengeség gyötri. Ágyba kényszerülve sokat olvas, rendkívüli irodalmi műveltségre tesz szert, mégis a matematika érdekli leginkább. Olyannyira, hogy felépülése után tanárának fel kell készülnie James tanításához. Gardiner tiszteletes tanácsára a család finanszírozza további tanulmányait a Dollar Intézetben, ahol kiváló mentora akad: Dr. Lindsay. Később Dewar úgy emlékszik rá, mint aki helyes mederbe terelte az életét.

1859-ben felvételt nyer az Edinburghi Egyetemre, ahol Lord Playfair formálja tudós fővé. Számos tanulmányi elismerést kap,



teszi a „fenil-alkohol” oxidációjáról szóló művet. Szoros barátság alakul ki mester és tanítványa között, James 1871-es esküvőjén tanára is jelen van.

Playfair utódja a kémiaprofesszori székben Crum Brown, aki új szerkezetábrázolást javasol a Kekulé-féle helyett, melynek alapján Dewar mechanikus eszközt szerkeszt. Ahogy Playfair erről tudomást szerez, elküldi Kekulének, aki meghívja magához az ifjú tehetséget. A benzol szerkezetére több javaslatot is tesz, a sors fintora, hogy ma épp azt nevezzük Dewar-benzolnak, amit ő maga nem pártolt.

1869-ben kerül fiatal oktatóként a Royal Dick Állatorvosi Egyetemre. Egy nap felkeresi McKenrick fiziológusprofesszort az irodájában, hogy megismerkedjenek. Ebből életre szóló barátság keletkezik, no meg közös kutatásuk a retina és a fény kölcsönhatásáról. Vizsgálják az ózon élettani hatását is, többek között saját magukon! Eredményeiket a Nature-ben publikálják. Ekkor már elismert tudós, akit 1873-ban Londonba hívnak előadni, itt a Nap hőmérsékletéről és a napfény hatásáról beszél. Közben pedig skót gazdák által beküldött trágyamintákat, ivóvizet és perui guanót elemez: ez mutatja, hogy pozícióját valóban a köz javára fordítandó szolgálatnak fogja fel.

A tehetséges kémikust azonban elszólítja egy komoly felkérés: 1875-ben a Cambridge-i Egyetem kémia-, jobban mondván „kísérleti természetfilozófia” professzora lesz. A londoni Royal Institution tagja, 1877-től Fuller-professzora. Eleinte spektroszkópiával foglalkozik G. D. Liveing professzorral együtt. Neve mégis a

Dewar-edény és cseppfolyós nitrogén találkozás



lett. 1889-ben szabadalmaztatják a találmányt, amelyet a brit hadsereg többek között a II. búr háborúban, majd az I. világháborúban is használ. A kordit nitroglicerint, lőgyapot és petróleumkocsonya keveréke. Érdekes, hogy Alfred Nobel bepereli a két feltalálót arra hivatkozva, hogy egyszerűen átvették az ő „old-

végül 1862-ben a legmagasabb fokú egyetemi elismeréssel végez. Playfair modern nézeteket vall, komoly hangsúlyt fektet a hallgatók gyakorlati képzésére. Ehhez asszisztensekre van szüksége, így marad az egyetemen Dewar, akiben Playfair hamar felismeri a kísérleti munkához való kivételes képességeket. Első cikke 1869-ben kerül a Királyi Társaság elé, amely tagjai közé választja, és nyomtatásban is közlé-

ható nitrocellulóz” („of the well-known soluble kind”) ötletét. Ebben a félreérthető kifejezésbe kapaszkodva azután el is veszíti a pert. (Ti. Nobel szabadalma alkoholban oldódó nitrocellulózzal, ami nem más, mint a „Collodion”, Abel és Dewar pedig lőgyapotot, vagyis „nem oldódó nitrocellulózt” említ.)

Nagy-Britanniában elsőként cseppfolyósítja a dioxigént és a levegőt, felhasználja azokat hűtőközegként, sőt, mindezt ipari méretben is képes megvalósítani (1891). Kimutatja, hogy mind a dioxigén, mind az ózon paramágneses. 1898-ban hidrogént cseppfolyósít, majd szilárdítja meg a Joule–Thomson-hatás kiaknázásával. Az utolsó kihívás a hélium, ebben azonban Onnes megelőzi (s később fizikai Nobel-díjat kap alacsony hőmérsékleten végzett kutatásaiért). Dewar, bár többször felterjesztik, sosem részesül ebben a kitüntetésben. Az 1900-as évek elején aktív szén gázabszorpcióját vizsgálja alacsony hőmérsékleten, nagyvákuumot hoz létre, kalorimetriai kutatásokba kezd. Sajnos, az I. világháború megtöri lendületét, számos kutatója elesik vagy a háborús kutatások áldozata lesz. Így 1918 után már nem indítja újra korábbi munkáit, inkább szappanbuborékok felületi feszültségét vizsgálja. Élete végéig foglalkoztatja a csillagászat és a távoli objektumokról érkező fény. Saját kis londoni obszervatóriumában kémleli az eget, amikor rosszul lesz, és röviddel ezután, 1923. március 20-án távozik az élők közül. (Forrás: Rev. William Meikeljohn: *Sir James Dewar*, 2005, <http://www.rocinante.demon.co.uk/klhg/people/pp11.htm>)

1921-ben, a feleségével tartott aranylakodalmukon megjegyezte, hogy iskolai kényszerűsége alatt, szinte mozgássérültként, zenész ambíciói voltak. Összebarátkozott a fogadó hegedűsével, akitől megtanult játszani a hangszeren, sőt, maga kezdett hegedűket készíteni. Az egyik hangszerbe beleírta nevét, és a készítés évét, mint ahogy azt Stradivarióról olvasta: James Dewar – 1854. Hogy, hogy nem, az aranylakodalmon előkerült ez a hangszer, s játszottak is rajta.



2013. június 11. és 15. között a Debreceni Egyetemen rendezték a *Debrecen Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms 2013* nemzetközi konferenciát. A rendezvényen három földrészről 12 ország mintegy hatvan kutatója vett részt. A programban olyan fémkomplexek reakcióinak kinetikáját és mechanizmusát bemutató előadások szerepeltek, amelyek a mágneses rezonancia képalkotásnál alkalmazott kontrasztanyagok működése, a hidrogéntárolás, a közvetlen gyógyszerfelhasználás vagy a kis molekulák aktiválása során nagyon jelentősek. A tervek szerint a konferenciát jövőre is megrendezik Debrecenben.



Arzénalapú élet a zöld szakállú papírrepülők univerzumában

A kiemelkedően mulatságos, vagy éppen vérlázítóan öncélúnak tűnő tudományos eredményeket elismerő IgNobel-díjakat 2012. szeptemberben 20-án huszonkettedik alkalommal adták át a Harvard Egyetemen. A ceremónia videofelvétele teljes egészében megtekinthető az Interneten (http://www.youtube.com/watch?v=R_XH9laDFtU&feature=c4overview&list=UUUnbIK56tCdeKC_GmRP-H2A).

Az első néhány évben a díjat átadók megfogalmazása szerint az elismerést olyan tudományos munkák kapták, amelyeket nem érdemes reprodukálni. A harmadik évezredre azonban megváltozott kisse a díj jelentése: olyan szakcikknek szerzői kapják első sorban az „elismerést”, amelyek előbb megnevezték az olvasót, aztán elgondolkodtatják. Talán ennek is a következménye, hogy az utóbbi években egyre több díjazott (hangsúlyozottan saját költségén) eljön a ceremóniára, s egyre kevesebb azoknak a száma, akik nem tudják vagy nem akarják elfogadni az IgNobel-díjat. A díj történetéről magyarul részletesebben Beck Mihály *Humor a tudományban* című könyvében lehet olvasni.

A 2012-es díjátadó fő témája az univerzum volt, a házigazda szerepet szokás szerint Marc Abrahams, az *Annals of Improbable Research* folyóirat főszerkesztője látta el. A hagyományokhoz híven Nobel-díjas vendégek, Dudley Herschbach (kémia, 1986), Rich Roberts (orvostudomány, 1993), Roy Glauber (fizika, 2005) és Eric Maskin (közgazdaságtan, 2007) is részt vettek és szerepet vállaltak a ceremónián. Megtartották a közönség szokásos pa-



A 2012-es IgNobel-díj

pírrepülő-dobó gyakorlatát, s a korábbi évek koreográfiáját folytatva bemutattak egy tudományos ihletésű minioperát is, amelynek címe *Az univerzum és az intelligens tervező* volt.

Az IgNobel-díjakat tíz különböző kategóriában adták ki, a nyertesek hatvan másodperces előadásban mondhatták el eredményeik lényegét. A díj mellé 2012-ben egy nagyméretű homokórát adtak emléktárgyként.

A díjazott munkák tudományterületek szerint a következők voltak.

Akuszтика: olyan készülék feltalálása (SpeechJammer), amely az emberek beszédét azzal zavarja meg, hogy saját hangjukat csekély időkülönbséggel újra hallják.

Anatómia: annak igazolása, hogy a csimpánzok egymás hátsó felének fényképei alapján is azonosítani tudják társaikat.

Béke: régi orosz löszerek gyémánttá alakítása.

Fizika: a lófarokba összefogott haj alakját és mozgását alakító erők egyensúlyának kiszámítása.

Folyadékdinamika: a kézben hordott pohárban lévő kávé mozgásának tanulmányozása.

Idegtudomány: annak bebizonyítása, hogy bonyolult műszerek és egyszerű statisztikai módszerek felhasználásával az agykutatók mindenhol képesek értelmezhető agytevékenységet találni – még egy döglött lazacban is.

Irodalom: egy jelentésekről írt jelentéseket feldolgozó jelentés kibocsátása, amelyben azt javasolják, hogy a jelentésekről írt jelentéseket feldolgozó jelentésről jelentést kell majd írni.

Kémia: annak vizsgálata, hogy a svédországi Anderslöv kisvárosának néhány házában az emberek szőrzete miért színeződik zöldre.

Orvostudomány: módszer kidolgozása arra, hogy végbélvizsgálatok során a beteg felrobbanásának kockázatát minimálisra csökkentsék.

Pszichológia: annak igazolása, hogy balra dőlve az Eiffel-torony kisebbnek látszik.

A kémiai IgNobel-díj nyertese, Johan Pettersson zöld színű szakállt viselve elevenítette fel a történetet, amely a jelek szerint a tudományos szakirodalomban publikálatlan maradt, bár több hírügynökség is beszámolt róla.

Anderslöv nagyjából kétezres lakású kisváros Svédország déli részén. Néhány lakója azt vette észre, hogy a svédeknek gyakori világos színű testszőrzete hirtelen zölddé vált. Azonnal az ivóvíz réztartalmára terelődött a gyanú, de ez a vizsgálatok szerint nem bizonyult kiugróan nagynak. Azonban a csővezetékben egyszer felmelegített, majd lehűlő vízben már a normális tízszerezését el-



Johan Pettersson, a 2012-es kémiai IgNobel-díjas

érő koncentrációkat is kimutattak, azaz végül mégis a réz bizonyult „bűnösnek”. Ez elsősorban újabb építésű házakban fordult elő, ahol a vezetékeknek nincs belső védőbevonatuk.

Elhangzott négy 24/7 előadás is, amelyek teljes tartalmát 24 másodpercben kell elmondani, majd közérthető összefoglalót is kell adni 7 szóban. Rich Roberts Nobel-díjas tudós 24/7 előadása a NASA asztrobiológusainak azon bejelentésére reagált, amely szerint a DNS-be, kivételes esetben, arzén is beépülhet a foszfor helyére. A hétszavas összefoglaló így hangzott: „Only arsoles believe arsenic can support life” (az angol nyelvi lelemény lényege, hogy az arsole a pirrol arzénanalógjának kémiai neve, de kiejtése nagyon hasonlít az „arsehole” brit szlengben előforduló szóra, amely az amerikai „asshole” közvetlen megfelelője).

Marc Abrahams a szokásos mondatával búcsúzott a közönségtől: „Ha valaki nem nyert díjat az idén, de különösen akkor, ha nyert, jövőre több szerencsét kívánunk.” Ez a szerencse már az idén szeptember 12-én eléri a kiválasztottakat, ekkor tartják ugyanis az IgNobel-díj huszonharmadik átadását.



CENTENÁRIUM

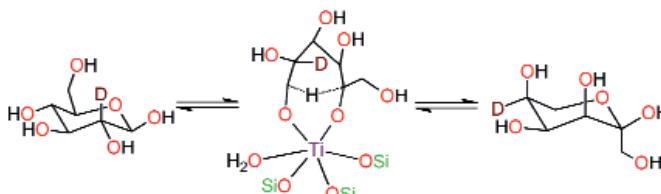
E. Marsden, R. H. Wilson:
Branch Product in Actinium C
Nature, Vol. 92, p. 29.
(1913. szeptember 11.)

Sir Ernest Marsden (1889–1970) angol születésű fizikus volt, aki élete nagy részét Új-Zélandon töltötte. Még egyetemi hallgató korában Ernest Rutherford laboratóriumában dolgozott Manchesterben, s 1909-ben egy társával azt a nevezetes kísérletet végezte el, amelyben egy nagyon vékony aranyfóliát bombáztak alfa-részecskékkal. Ezt manapság általában Rutherford-kísérletként, ritkábban Geiger–Marsden-kísérletként említik. 1915-től korábbi témavezetője támogatásának köszönhetően az új-zélandi Victoria University College fizikaprofesszora lett. A második világháború során radarrendszerek kifejlesztésén dolgozott.

Szorbóz glükózból

A vegyipar évente mintegy százezer tonna C-vitamint állít elő D-glükózból L-szorbóz köztiterméken keresztül. A folyamat többlépcsős, ezért igen nagy jelentősége lehet annak a felfedezésnek, miszerint a D-glükózt egyetlen sztereospecifikus reakcióban L-szorbózzá lehet alakítani titántartalmú zeolitkatalizátor (Ti-béta) segítségével. Az izotópos nyomjelzést is felhasználó mechanizmusvizsgálatok tanúsága szerint a folyamat minden bizonnyal a C₅ és C₁ pozíciók közötti hidridvándorlással játszódik le.

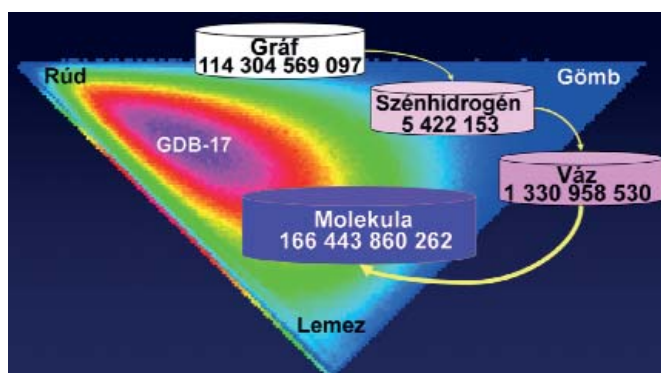
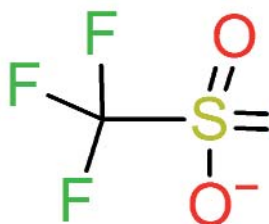
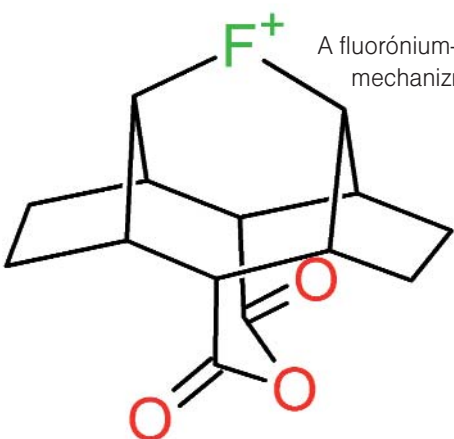
ACS Catal. 3, 1469. (2013)



A HÓNAP MOLEKULÁJA

A fluorónium-ion-t tartalmazó első ismert vegyület (C₁₅H₁₆F₄O₆S) rövid élettartamú; egy intramolekuláris, S_N1 mechanizmusú nukleofil szubsztitúció köztitermékeként sikerült detektálni. A többi halogén esetében már korábban is jól ismerték a halogénatomon formálisan pozitív töltést hordozó származékokat, de a fluor nagy elektronegativitása miatt kétséges volt, hogy létezhet-e egyáltalán ilyen típusú szerkezet. A köztitermék jelenlétét kinetikai mérésekkel, deutériumos izotópjelzéssel és kvantummechanikai számításokkal is alátámasztották.

Science 340, 57. (2013)



Ami sok, az sok

A Chemical Abstract Services által számon tartott mintegy hetvenmillió vegyület igen soknak tűnhet, de valójában ez a szám eltörpül a természetben lehetséges molekulák száma mellett. A közelmúltban két közlemény is foglalkozott ezzel a kérdéssel. Svájci tudósok dolgozták ki a GDB-17 vegyületkönyvtárat, amely 166 milliárd kis szerves molekulát tartalmaz. Amerikai tudósok később kifejlesztették az Algorithm for Chemical Space Exploration with Stochastic Search (ACSESS) nevű számítógépes eljárást, amely kb. 10⁶⁰ különböző, stabilnak jósolt kémiai szerkezet képes előállítani a virtuális kémiai térben. Az ilyen adatbázisokban folytatott szisztematikus keresés a jövőben új anyagok célzott kifejlesztésének fontos eszköze lehet.

J. Chem. Inf. Model. 52, 2864. (2012)

J. Am. Chem. Soc. 135, 7296. (2013)



APRÓSÁG

A francia Ribeauville városka közelében újabban a méhek néha kék mézet gyűjtenek, ennek forrása egy M&M's drázsékat gyártó üzem cukorban gazdag hulladéka.



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

TUDOMÁNYOS ÉLET

10th Congress on Catalysis Applied to Fine Chemicals (CAFC 10)

Turku/Åbo, 2013. június 16–19.



A CAFC két-három évente megrendezett rangos konferencia. A konferencia célja az, hogy összehozza a tudományban, az iparban, főként a finomvegypar területén elsősorban katalízissel foglalkozó kutatókat. Így új együttműködések alakulhatnak ki, amelyek segíthetnek megoldani a vegyipar eljövendő problémáit és fenntartható szin-

tikus módszerek kifejlesztésében játszhatnak szerepet. Elsősorban a homogén, heterogén és enzimátikus katalizátorok alkalmazási lehetőségei állnak a középpontban, különös tekintettel a finomvegyszerek előállítását kísérő szelektivitási kérdésekre.

A négynapos konferencián a plenáris előadásokkal együtt összesen 52 szóbeli előadás volt és 124 posztert mutattak be. Az előadások közül számomra legrelevánsabbak azok a munkák voltak, melyek hidrotalcitszerű heterogén katalizátorok környezetbarát alkalmazását mutatták be szerves kémiai reakciókban. A két poszterszekció során lehetőségem volt a doktori képzésem utolsó fél évének kutatási eredményeit bemutatni. Különösen fontosnak tartom ezt, mivel itt a szokásos anyagszerkezet-vizsgálatól eltérő, új szemszögből, a felhasználási lehetőségekre fókuszálva tehettem ezt meg.

A színvonalas előadások és poszterek mellett a szervezők kitűnő programokat is rendeztek a konferencia résztvevőinek. Ezúton is szeretnék köszönetet mondani a Magyar Kémikusok Egyesületének, hogy támogatásukkal hozzájárultak a konferencián való részvételemhez.

Sipiczki Mónika
PhD-hallgató

HÍREK AZ IPARBÓL

Az Eva Group Magyarországon

Magyarországon hozza létre európai kutató-fejlesztő központját az egyiptomi Eva Group, az észak-afrikai és a közel-keleti térség vezető gyógyszeripari és kozmetikai vállalatcsoportja.

Az európai fejlesztési központ első lépésként 120 új munkahelyet hoz létre Magyarországon, ebből 20-at közvetlenül a vállalatcsoport magyarországi cégénél, 100-at pedig az együttműködésbe bevont külső partnereknél. A vállalatcsoport az európai terjeszkedési tervek megvalósulása esetén jó lehetőséget lát arra, hogy gyártókapacitást is telepítsen Magyarországra. A helyszín kiválasztása és a cégbejegyzés folyamatban van.

A befektetők célja az is, hogy a magyar szaktudásra alapozva előkészítsék az Eva Group gyógyszerészeti és kozmetikai cégeinek európai piaci terjeszkedését.

A cégcsoportot 1935-ben alapították egészségügyi és kozmetikai termékek gyártására, forgalmazására. Az egészségügyi divízió naponta 350 ezer doboz készítményt állít elő, a termékpalettáján 120 termék szerepel, további 200 termékük fejlesztés alatt áll. Az egészségügyi piacon azzal szereztek maguknak hírnevet, hogy elsőként fejlesztettek ki két új molekulát a vesegőrcs kezelésére. A vállalat éves szinten 30 százalékos növekedési ütemet ér el, és Egyiptomban piacvezető a kozmetikai területen. (A *Napi Gazdaság* nyomán.)

Zékány András

A Richter és az Acrux megállapodott az ösztadiol spray értékesítéséről



A Richter Gedeon Nyrt. és az Acrux Ltd. bejelentette, hogy licenc-megállapodást kötött, melynek értelmében a Richter fogja értékesíteni az Egyesült Államokon kívül az Acrux ösztadiol hatóanyagú menopauzás készítményét, egy transzdermális spray-t. Széleskörűen elismert szteroidkémiai tudására alapozva a Richter a nőgyógyászat területének világszínvonalú szereplője; az EU- és a FÁK-régióban már meglévő piaci pozícióit jelenleg bővíti ki a feltörekvő piacokra.

Az Acrux licencbe adja a Richter számára a gyártási és kereskedelmi jogokat a világ valamennyi országára, kivéve az Egyesült Államokat, Dél-Koreát, Dél-Afrikát, Svájcot, Ausztráliát és Új-Zélandot, mely területekre korábbi megállapodások vannak érvényben. A megállapodás értelmében az árbevétel után fizetendő jogdíjak mellett az Acrux 1 millió USD ún. előzetes mérföldkő-kifizetésben részesül, amelyet az EU törzskönyvezési folyamat bizonyos állomásain esedékes, összesen 2,6 millió USD mérföldkő-kifizetések követnek. Az értékesítés után fizetendő jogdíjak első esedékessége várhatóan 2015. A termék értékesítése során felmerülő valamennyi költség a Richtert terheli.

„Ez a megállapodás újabb lépés a nőgyógyászati üzletág kiterjesztése irányába, és stratégiai fontosságú kezdeményezést jelent társaságunk életében” – mondta Bogsch Erik, a Richter vezérigazgatója.

NG

Vegyipari mozaik

A szegedi lézereközpont. A tervek szerint ősszel elkezdődik a szegedi lézereközpont építése. A beruházás első ütemének 2015 nyarára kell elkészülnie. A projekt célja egy lézereken alapuló, egyedülálló kutatóintézet létrehozása, melyben mind a lézerimpulzusok, mind a segítségükkel előállított fényforrások a hazai és külföldi tudósok rendelkezésére állnak – mondta el Lehrner Lóránt, a beruházást irányító ELI-HU Kutatási és Fejlesztési Non-profit Közhasznú Kft. ügyvezető igazgatója. Az egyedülálló lézertechnológia várhatóan nemcsak az ultragyors fizikai alapfo-



lyamatok, de a biológiai, orvosi és anyagtudományok terén is kiemelkedő kutatási eredmények elérését teszi lehetővé.

A 24 400 m² alapterületű kutatóközpontot jól megközelíthető helyen, az M5-ös és az M43-as autópálya csomópontjához közel, a városközponttól 5 km-re lévő 16 hektáros területen építik föl. A kivitelezési és mérnöki munkára már kiírták a közbeszerzési tendert. Szabó Gábor, a Szegedi Tudományegyetem rektora kifejtette, hogy az épületnek rendkívül szigorú rezgésvédelmi előírásoknak kell megfelelnie. A berendezések mechanikai alapozásának annyira stabilnak kell lennie, hogy a lézernyaláb elmozdulása százméteres terjedést követően 99 százalékos valószínűséggel 50 mikrométernél kisebb legyen. Fontos a megfelelő páratartalom és a stabil hőmérséklet biztosítása is, a lézertermeket 20–22 Celsius-fokon tartják, és a 24 órára vetített hőmérséklet-ingadozás nem lehet több mint 0,3 fok.

A nagyberuházás első fázisában a kutatóközpont épülete és a lézertechnológia egy része készül el, erre 37 milliárd forint fordítható, 85 százalékban uniós, 15 százalékban hazai forrásból. A következő uniós költségvetési ciklusban további 24,3 milliárd forintot szánnak a központban a speciális kutatóberendezések kialakítására. A beruházás második fázisának befejezése 2018-ra várható. (MTI/Szegedma.hu)



Nemzeti kutatás-fejlesztési és innovációs stratégia, 2020.

A nemzetgazdaság versenyképessége a gazdaság egészében megújuló módon megjelenő, hasznosuló új tudással fokozható. A gazdasági-társadalmi adottságokra építő technológiai és tudásvezérelt fejlődés nagyobb súllyal és tartósabban járul hozzá a gazdasági növekedéshez, mint az erőforrások pusztá bővítése. Az új tudás által vezérelt gazdaság fejlődése három fő folyamat köré rendezhető. Ezek a tudás előállításának, a tudás felhasználásának és a tudás áramlásának a folyamatai.

A KFI Stratégia fő célkitűzése, hogy Magyarországon az évtized végére a kutatás-fejlesztési ráfordítások a GDP 1,8%-ára növekedjenek, továbbá olyan környezet jöjjön létre, amelyben a kutatás-fejlesztéssel foglalkozó, valamint az innovatív ötleteket megvalósító vállalkozások, vállalatok és közszféra-szervezetek egyaránt fejlődni és növekedni képesek, megfelelő a társadalom támasztotta elvárásoknak. Az innovációs stratégiát a Kormány a 2013. június 13-i ülésén fogadta el. A stratégia letölthető: Befektetés a jövőbe – Nemzeti Kutatás-fejlesztési és Innovációs Stratégia 2020.

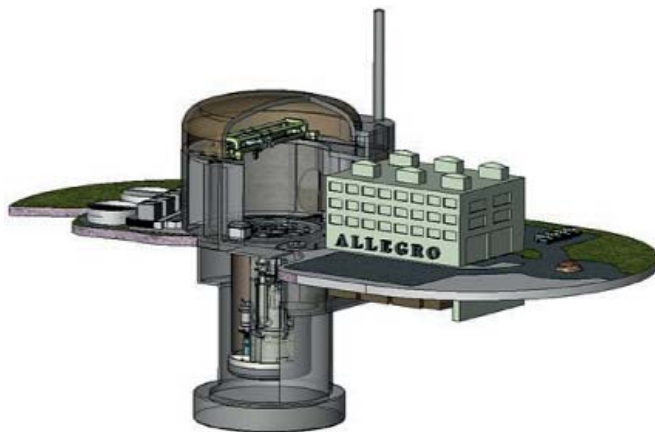


Újszerű technológiával a környezetbarát és biztonságos energiáért. A jelenlegi reaktoroknál megbízhatóbban működő, negyedik generációs gyorsreaktorok kifejlesztéséhez, egy új, ígé-

retes technológia tudományos-műszaki megalapozásához járulhat hozzá az a magyar, szlovák, cseh és lengyel közreműködéssel megalakuló tudományos központ, amelynek létrehozását jelentették be a Magyar Tudományos Akadémián. A közös atomenergetikai kutatásokat magyar részről az MTA Energiatudományi Kutatóközpont szervezi.

A visegrádi országok kutatói a következő években a Francia Atomenergia Bizottság (Commissariat à l'énergie atomique, CEA) által kezdeményezett ALLEGRO projekt előkészítésében vesznek részt. Ennek keretében a négy ország tudósai az úgynevezett V4G4 kiválósági központban végeznék el azokat a tudományos munkákat, amelyek eredménye nyomán várhatóan az évtized végén Magyarország, Szlovákia, Csehország és Lengyelország kormányai elindíthatják az ALLEGRO programot. A fő cél egy új típusú, a jelenleginél hatékonyabban és gazdaságosabban működtethető, negyedik generációs gázhűtéses gyorsreaktor kifejlesztése. A fejlesztési tervekben a gazdaságosság mellett kiemelt jelentősége van a nukleáris biztonságának: a negyedik generációs reaktorokban például jóval kisebb a keletkező radioaktív hulladék fajlagos mennyisége. A szakemberek azt remélik, hogy a jelenleg fejlesztés alatt lévő típusok közül néhányat a 21. század közepére üzembe helyezhetnek.

Addig azonban a kutatóknak még meg kell teremteniük a reaktor és biztonsága tudományos-műszaki hátterét. Ehhez számos megalapozó kísérletet és az újfajta technológiai eszközök alkalmazási minősítését kell elvégezni. Az MTA Energiatudományi Kutatóközpont feladata a reaktorban használandó fűtőelemek kikísérletezése, vizsgálata, valamint alkalmazásának minősítése lesz. A magyar kutatók és mérnökök részt fognak venni a többi új V4G4 laboratórium munkájában is, azaz a reaktor biztonsági kérdéseinek vizsgálatában, a héliumtechnológia problematikus elemeinek megoldásában, a magas hőmérsékletű alkalmazásokhoz szükséges szerkezeti anyagok kikísérletezésében, valamint a speciális mérés technikai megoldások feltalálásában.



A negyedik generációs ALLEGRO demonstrátorreaktor lesz: alapvető rendeltetése egy konkrét technológia megvalósíthatóságának, biztonságosságának, üzembiztonságának modellezése a majdaninál kisebb léptékű, 75 MW hőteljesítménnyel. A létesítmény sokéves sikeres működése után épülhet majd meg a prototípus, amelynek tervezett hőteljesítménye 2400 MW. Összehasonlításképpen: a jelenlegi, négy reaktorblokkból álló paksi atomerőmű összesített hőteljesítménye 1485 MW. Az ALLEGRO helyszínének kiválasztásáról később közösen döntenek majd az érintett kormányok, de a szakemberek szerint földrajzi adottságai miatt Szlovákia a legesélyesebb rá.

Az új technológia tudományos-műszaki megalapozása hozzájárulhat az atomenergia társadalmi elfogadottságának növelésé-



hez, valamint a paksi atomerőműben tervezett új blokkok fűtő-elemeinek minél hatékonyabb és biztonságosabb felhasználásához. Az ALLEGRO jelentőségét tovább erősíti, hogy építése során nagy hozzáadott értéket jelentő területeken fontos beszállítókká válhatnak magyar ipari cégek. A közép-európai régióba – így Magyarországra is – világszínvonalú technológia érkezik majd, a reaktor üzemeltetése pedig magasan képzett szakemberek számára jelent új munkahelyet. (Az MTA nyomán.)



Dinamikusan fejlődő tudományterület. A világon is viszonylag újnak számító bioortogonális kémia területén végez kutatásokat Kele Péter, az ELTE adjunktusa a Lendület-program keretében. Az MTA Természettudományi Kutatóközpontban megalkotandó kutatócsoportjával olyan olcsó és hatékony fluoreszcens jelzővegyületeket tervez kifejleszteni, amelyek képalkotó eljárásokban, biológiai tesztekben, biokémiai folyamatok követésében vagy a korai rákdiagnosztikában alkalmazhatók. A kémikus négy és fél évet töltött az Egyesült Államokban, a Miami Egyetemen, illetve két évet a németországi Regensburgi Egyetemen.

A világban is viszonylag újnak számító kémiai biológia, illetve szűkebb szakterülete, a bioortogonális kémia Magyarországon



még gyerekcipőben jár. „Úgy látom, a közeljövőben robbanásszerű fejlődésnek indul a molekuláris biológia, illetve a diagnosztikai eljárások kémiai biológiai megközelítése. Terveim és reményeim szerint e dinamikusan fejlődő tudományterület egyik bäs-

tyáját tudjuk felépíteni itt, Magyarországon az általunk teremtetett iskola segítségével” – hangsúlyozta a kutató. A kémiai biológiai eljárások során a vizsgálni kívánt biológiai rendszereket – fehérjéket, nukleinsavakat, szénhidrátokat – szintetikusan előállított kismolekulákkal lehet módosítani. A bejuttatott módosító molekula leggyakrabban valamilyen fluoreszcens, mágneses vagy radioaktív marker. Ez nem is olyan egyszerű, hiszen a biológiai rendszerekben rengeteg reaktív funkció csoport van jelen. „A bioortogonális kémia olyan szervezettidegen funkciócsoport-párokat alkalmaz, amelyek tagjai külön-külön nem reagálnak az élő rendszereket felépítő biológiai vegyületekben található funkció csoportokkal. Együtt viszont gyorsan, szelektíven és maradéktalanul reagálnak a megcélzott funkciócsoport-párral, miközben a reakció sem toxikus segédanyagokat nem igényel, sem az élő szervezetre káros melléktermékeket nem termel. A reagensek kifejlesztésén túl fontos szempont, hogy miként juttatják be ezeket a funkció csoportokat a vizsgálni kívánt biomolekulákba. Erre kémiai hírvivőket alkalmaznak, amelyek az egyik bioortogonális funkció csoportot hordozzák. Rajtuk keresztül már szelektíven módosíthatók a vizsgálni kívánt vegyületek. Célunk olyan biológiai építőkövek – aminosavak, cukrok, nukleinsavak – előállítás, amelyeknek általunk kifejlesztett bioortogonális funkciójuk van. A kémiai hírvivőkön túl bioortogonális fluoreszcens markerek kifejlesztésén is dolgozunk. A bioortogonális reagensek és markerek segítségével olyan érzékeny tesztek, eljárásokat lehet kidolgozni, amelyek a tumormarkerek kimutatásától a képalkotó technikákig számtalan területen alkalmazhatók” – magyarázta a kutató. (Az MTA nyomán)

Richter. Összességében a korábban megfogalmazott várakozásoknak megfelelő teljesítményt tudott nyújtani a Richter az idei év első felében – mondta el a társaság vezérigazgatója, Bogsch Erik. A növekedés fő motorjaként Kínát, a FÁK-régiót, Nyugat-Európát, valamint az új termékbevezetéseket nevezte meg.

Az egyes piacok közül Lengyelországban a szigorú szabályozás, valamint az Avorex licenszerződésének lejáratát nyomta rá a bélyegét a forgalomra, Bogsch Erik azonban kiemelte, az utóbbi hatástól tisztítva itt is növekedés van. Romániában pedig a nehéz gazdasági környezet mellett a fizetési késedelmeket emelte ki, melyek jelenleg is érzékelhetők. A FÁK-régiót tekintve Oroszország tovább tudott növekedni, itt is volt egy licenszerződés-lejárat, a kiesést azonban pótolni tudták. Ukrajna jelentős növekedést generált, itt elsősorban a hatékony promóciós tevékenység a fő hajtóerő, kismértékben előszállítások is segítettek a forgalmat. Ukrajna vonatkozásában pénzügyi problémák nincsenek, a pénzek megfelelően folynak be. A hamarosan induló ukrán gyár kapcsán a cégvezető megjegyezte, az üzemben csomagolás lesz csak, a működés pedig a jövő év második negyedében kezdődhet meg.

A Németországban látott jelentős forgalomnövekedés elsősorban a Richter által gyártott fogamzásgátló készítményeknek volt köszönhető. A Grünenthal termékek forgalma az év első felében a tavalyihoz hasonló szinteken alakult. Kína szembetűnően jól teljesít, itt az ország akár már az idén a második legnagyobb gyógyszerpiaccá válhat. A kilátások kapcsán a Richter fokozatos növekedésre számít, de ennek mértékét egyelőre korai lenne még megítélni.

Richter konszolidált gyógyszerbevételei tervek 2013-ra				
	2013. febr.	2013. máj.	2013. aug.	Deviza
Belföld	-5-0%	-5-0%	-5-0%	HUF
FÁK				
- Oroszország	5-10%	5%	5%	RUB
- Ukrajna	10%	10%	10%	USD
- egyéb FÁK	5-10%	5-10%	5-10%	USD
EU				
- Lengyelország	-5%	-5%	-5%	PLN
- Románia	0-5%	0-5%	0-5%	RON
- EU 9	5%	0%	0%	EUR
- EU 15	10%	10%	10%	EUR
USA	-20-25%	-20-25%	-20-25%	USD
Egyéb (Kína nélkül)	-5-0%	-5-0%	-5-0%	EUR
Kína		30-35 m	30-35 m	EUR
Összesen	3%	3%	3%	EUR

Forrás: Richter, Portfolio.hu

Richter üzemi eredményszint (konszolidált)



Forrás: Richter, Portfolio.hu

Az Esmya forgalma az idei első félévben mindössze 5 millió eurót ért el, ami csalódást keltő lehet az idei évre megfogalmazott 15 millió eurós célkitűzés fényében. A Richter azonban továbbra is tartja ezt a várakozást, és jelentős előrelépések történ-



tek az elmúlt hónapokban, melyek segíthetik majd a növekedést az előttünk álló időszakban. Itt elsősorban azt emelte ki Bogsch Erik, hogy a termék két kulcsfontosságú piacon, Franciaországban és Spanyolországban is megszerezte a támogatást, ami a jelenlegi gazdasági körülmények között mindenképpen biztató. Az előrejelzések szerint az idei harmadik negyedévben Belgiumban és Finnországban is meglehetősen támogatás, a negyedik negyedévben pedig forgalomba kerülhet Svájcban a készítmény. Kanadában pedig most szeptemberben kerülhet forgalomba az Esmya. További fontos fejlemény az Esmynál, hogy júliusban a Richter kérelmezte a jelenlegi indikáció kibővítését Nyugat-Európában. Ha a klinikai vizsgálatok sikeresek lesznek, az a korábban adott várakozásoknak megfelelően jelentős forgalomnövekedést okozhat. A másik originális készítmény, a Cariprazine kapcsán Bogsch Erik elmondta, a terveket illetően nincs változás, jelenleg az Amerikai Gyógyszerfelügyelet döntésére várnak. Ez legkorábban novemberben történhet meg, ha a szokásos csúszásokat figyelembe vesszük, akkor az újabb mérföldkőfizetés áttolódhat már a következő évre. Bogsch Erik jelezte, a mérföldkő összege hasonló lehet a korábbiakhoz. A K+F költségek a negyedév során meglepő módon csökkentek, itt a cégvezető megjegyezte, a klinikai vizsgálatokban van volatilitás, a számlák nem egyenletesen jönnek be. Az év egészére vonatkozóan egyébként tartják a korábban megfogalmazott 12–13%-ot árbevétel arányában. Az üzemi eredményhányadra vonatkozó előrejelzés is változatlan, eszerint az idei évben 14% felett alakulhat. (A *portfolio* nyomán.)



Egis. Összességében vegyesen értékelte az Egis negyedéves eredményét a társaság gazdasági igazgatója, Poroszlai Csaba, komoly fejleményként emelte ki ugyanakkor, hogy az első biohasonló termékkel ténylegesen is megjelent az Egis Európában. A folyó pénzügyi évre vonatkozó előrejelzését a társaság enyhén lefelé módosította.

A belföldi forgalom a teljes piac kisebb növekedése mellett 4%-os visszaesést mutatott, ebben a vaklicit rendszer játszott kizárólag szerepet; az Egis termékszerkezetéből kifolyólag olyan szegmensekben van jelen, ahol ez a hatás jobban érvényesül.

Poroszlai Csaba elmondta, új termékebevezetés nem történt a negyedévben Magyarországon, a támogatott körből pedig egy terméket voltak kénytelenek kivonni. Ez azonban nem volt túl jelentős készítmény, éves forgalma pár százmillió forintot tett ki. A régió összességében gyengén teljesített, egyedüli kivételnek Románia számít, ahol növekedés van, ez pedig az év egészére jellemző volt. Nehézségek szempontjából Magyarország és Szlovákia a sorrend, az utóbbinál szintén van egyfajta vaklicit rendszer, ami hatásait tekintve nagyságrendileg hasonló a hazaihoz. Érdeemi javulást várnak itt a biológiai termékektől. Az Egis egyébként a negyedévben Belorussziában megjelent már az első biohasonló készítménnyel, ez Flammegis néven került forgalomba, és az első monoklonális antitest jelenleg Európában.

Eddig az Egis az első két Celltrion-termékre vonatkozóan fogalmazott meg bevételi előrejelzéseket, ezekben továbbra sincs változás. A Celltrionnal kötött megállapodás értelmében az Egis a társaság által kifejlesztett készítményeket forgalmazza a régióban, a hazai társaság részben a csomagolást végzi, emellett pedig analitikai vizsgálatokat is végez.

Összességében a folyó pénzügyi évre vonatkozóan romlott az előrejelzés, amit részben a hatóanyagexportban várt jelentős visszaesés magyaráz. A következő pénzügyi évre vonatkozóan azonban kisebb javulást vár a társaság annak ellenére, hogy a ható-

EGIS anyavállalati tervek 2013-ra						
	2012. aug.	2012. nov.	2013. febr.	2013. máj.	2013. aug.	következő pü-i év
Belföld	-5-10%	-5-10%	-5-10%	-5-10%	-7-9%	-3-6%
Orosz	8-12%	8-12%	8-12%	8-12%	8-10%	6-10%
FÁK összesen	8-12%	8-12%	8-12%	8-12%	9-11%	6-10%
K-EU	3-6%	3-6%	3-6%	3-6%	3-4%	5-10%
Késztermék	5-10%	5-10%	10-15%	10-15%	15-20%	-5-5%
Hatóanyag	0-5%	0-5%	0-5%	0-5%	-10-15%	-25-30%
Teljes bevétel	4-6%	4-6%	4-6%	4-6%	2-3%	2-5%

Forrás: Egis, *Portfolio*.hu

anyagexportban még jelentősebb visszaesést prognosztizálnak. Ebben szerepet játszhat, hogy a régiót illetően javultak az előrejelzések, melyek egyébként tartalmazzák a biohasonló termékek hatását is. Az árbevétel stagnálása mellett a negyedévben enyhén romlott a bruttó fedezeti szint, Poroszlai ugyanakkor kiemelte, változatlan devizaárfolyamok mellett már növekedés mutatkozik, ami azt jelzi, hogy a költségsökkentési intézkedések ellensúlyozni tudják az érvényesülő árnyomást. A működési költségek közül az értékesítési költségek a negyedévben tovább emelkedtek, itt az Egis továbbra is tartja azon előrejelzését, miszerint a folyó pénzügyi évben a költségnövekedés felülmúlhatja az árbevétel növe-



désének ütemét. Az értékesítési költségek növekedése változatlanul a FÁK-hálózatbővítéssel és a biohasonló termékek forgalmazására való felkészüléssel magyarázható. A K+F költségek viszont meglepetésre csökkentek, ezt azonban szezonális hatások okozták főként.

Az Egis kapcsán fontos megemlékezni a potenciális akvizícióról, ez a társaság mostani várakozásai szerint inkább a következő üzleti évre húzódhat, bár elmondták, arra van esély, hogy még az idei naptári évben megtörténjen. Az irányultság változatlanul Oroszország. (A *portfolio* nyomán.)

Banai Endre összeállítása

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

Rendezvéynaptár – 2013

Conferentia Chemometrica	szept. 8–11.	Sopron
International k0 Users' Workshop	szept. 22–27.	Budapest
11. Környezetvédelmi és Analitikai Technológiai Konferencia	október 2–4.	Hajdúszoboszló
1st EuCheMS Congress on Green and Sustainable Chemistry	október 13–15.	Budapest
3rd European Energy Conference	október 27–30.	Budapest
Őszi Radiokémiai Napok	október	
Kozmetikai Szimpózium	november	
Hungarocoat	november	

Conferentia Chemometrica

2013. szeptember 8–11.

Hotel Sopron

Online regisztráció: <http://www.cc2013.mke.org.hu/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, cc2013@mke.org.hu



6th International k0 Users' Workshop

2013. szeptember 22–27.

Hotel Gellért, Budapest

Online regisztráció: <http://www.6thk0-user-workshop.mke.org.hu>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika,

6thk0-user-workshop@mke.org.hu

XI. Környezetvédelmi és Analitikai Technológiai Konferencia

2013. október 2–4. Hotel Béke, Hajdúszoboszló

Online jelentkezés: <http://www.katt2013.mke.org.hu/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix,

beatrix.schenker@mke.org.hu

1st EuCheMS Congress on Green and Sustainable Chemistry

2013. október 13–15. Hotel Flamenco, Budapest

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

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, leugsc@mke.org.hu

tézőbizottságot. A verseny mindhárom fordulója rendben lezajlott. A döntő forduló lebonyolításának házigazda-szerepét 2014-től a Szegedi Tudományegyetem veszi át a Miskolci Egyetemtől. A Magyar Kémikusok Egyesülete köszöni a Miskolci Egyetemenek, Prof. Dr. Patkó Gyula rektornak, Dr. Lengyel Attila intézetvezetőnek, Dr. Bánhidi Olivérnek és az egyetem minden további közreműködőjének, hogy öt éven keresztül magas színvonalon gondoskodtak az Irinyi OKK döntő lebonyolításáról. Pállinkó István beszámolóját az IB elfogadta, egyben köszönetét fejezi ki mindazoknak, akik feladatot vállaltak a 2012–2013. tanévi verseny szervezésében és lebonyolításában.

2. A Baloghné Kardos Zsuzsanna által kezdeményezett „Kémia Hete” ötlet megvalósításának kimunkálása folyamatban van.

3. Az IB jóváhagyta, hogy az Analitikai Szakosztály Agrár- és Élelmiszerkémiai Szakcsoportja a továbbiakban *Élelmiszerkémiai Szakosztály* szervezatként működik.

4. Az IB határozatban rögzítette, hogy egy szakosztály/társaság és szakcsoport vezetése (elnöke) akkor is kapjon tájékoztatást az MKE vezetésétől és/vagy az MKE Titkárságtól a szervezetet vagy szakterületét érintő egyesületi programról, ötletről, ha nem kezdeményezője vagy résztvevője, de szakterületileg érintettje a szóban forgó témának, illetve eseménynek.

Az ülés emlékeztetője a www.mke.org.hu honlap „Az Egyesületről > Egyesületi élet > Jegyzőkönyvek” menüpontja alatt olvasható.

Kovács Attila

Az MKE Kozmetikai és Háztartás-vegyipari Társasága Kozmetikai Szimpózium – 2013

Budapest, Bara Hotel, 2013. november 21.

SZÉPSÉG – EGÉSZSÉG – TUDOMÁNY

Témák:

Új ható- és segédanyagok

Új segédanyagok és technológiák

Vizsgálati módszerek

Klinikai és kozmetológiai vizsgálatok

INFORMÁCIÓ:

Előadás-bejelentés, szponzorálás: Dr. Hangay György, tel.: 06-1-203 0089

SZERVEZÉSI KÉRDÉSEK: Schenker Beatrix, Magyar Kémikusok Egyesülete, tel.: 201 68 83, fax: 201 8056; email: beatrix.schenker@mke.org.hu

A kolozsvári székhelyű Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT) 2013. november 21–24. között Nagybányán (Hotel MARA) a Babeş-Bolyai Tudományegyetem Magyar Kémia és Vegyészmérnöki Intézetével közösen szervezi meg a XIX. Nemzetközi Vegyészkonferenciát. Bővebb információk, jelentkezési lapok, valamint előadás/poszter-bejelentő lapok a konferencia honlapján – <http://chem.emt.ro/> – elérhetők.

Az MKE Intézőbizottság ülése

2013. június

1. Az Irinyi OKK Versenybizottságának elnöke, Pállinkó István a 2012–2013. tanévi versenyévd tapasztalatairól tájékoztatta az In-

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXVIII. No. 9. September 2013

CONTENTS

MOL Rubber bitumen	258
ANDRÁS GEIGER, ANDRÁS HOLLÓ, GABRIELLA SZALMÁS-PÉCSVÁRI, PAVOL FEHÉR, PÉTER GERGÓ, LÁSZLÓ BARTHA	
Safety data sheets. Part VII. Chemical wastes and recycled products	262
GYULA KÖRTVÉLYESSY	
BRUCKNER ROOM LECTURE	
New results on the synthesis of heparinoid sulfonic acids	264
MIHÁLY HERCZEG, ERIKA MEZŐ, DÁNIEL ESZENYI, RICHÁRD PATAKI, ANIKÓ BORBÁS, SÁNDOR ANTUS	
When dices play God. John von Neumann and Andrei Kolmogorov born 110 years ago	267
ROLAND TÓBIÁS, GYULA TASI	
X-ray picture and love	271
RÓBERT SCHILLER	
DNA structure discovered 60 years ago	273
MÁRIA FÜRI	
Water in Solar System. An interview with astronomer József Kovács	276
VERA SILBERER	
Chemistry calendar (Edited by JÓZSEF SÁNDOR PAP)	280
Chembits (Edited by GÁBOR LENTE)	282
The Society's Life	284
News of the Month	284

Virtual NANOPOSTER^{3rd} Nanotechnology Conference

Merre tart a nanotechnológia?

Harmadik virtuális konferencia szeptemberben

Az elmúlt két év hagyományait folytatva a NanoTudomány Nemzetközi Közössége (The International NanoScience Community) idén is megrendezi a nanotechnológiával foglalkozó vegyészek, fizikusok, biológusok, mérnökök és orvosok virtuális tudományos konferenciáját. A NANOPOSTER 2013 rendezvény bemutatkozási lehetőséget kíván nyújtani mindazoknak, akik 2007 óta aktív tagjai a tudományággal foglalkozó szakemberek internetes közösségének.

A tagok által kezdeményezett kutatói fórumon egyenlő eséllyel indulnak a fejlődő országok tudósai is. A virtuális tér lehetővé teszi, hogy az utazási, szállás- és posztternyomtatási kiadásokat megspórolják a résztvevők. Az egy héten át tartó rendezvény jó alkalmat kínál arra is, hogy a hazai kutatók „betekintessenek” olyan távoli országok laborjaiba, mint Irak, Kína vagy Brazília.

Az ingyenes virtuális konferencia nyitott a nanotechnológia legújabb vívmányai iránt érdeklődők számára, ők akár regisztráció nélkül is megtekinthetik a prezentációkat. Az elektronikus poszttereket 2013. szeptember 1-ig várják a szervezők.

A további információk a virtuális konferencia oldalán tekinthetők meg: <http://www.nanopaprika.eu/group/poster2013>

MKE-pályázat doktoranduszhallgatóknak

A Magyar Kémikusok Egyesülete pályázatot hirdet doktorandusz-hallgatók számára, hogy kutatási témájukról szakmai ismeretterjesztő cikket írjanak, amely a Magyar Kémikusok Lapjában jelenhet meg. A cikk terjedelme max. 10 gépelt (A4 formátumú) oldal lehet.

A pályázat beadási határideje: 2013. október 31.

A pályázatokat a cikkek szakmai bírálatában részt vevő kollégák véleménye és a szerkesztőség előterjesztése alapján a szerkesztőbizottság bírálja el.

Eredményhirdetés: 2013. november 30-án.

Az öt legjobb pályamunkát díjazzuk a következők szerint:

1. díj: biztos támogatás a fiatalok MKE konferenciatámogatási pályázatán
2. díj: 3 éves előfizetés az MKL-re
- 3–5. díj: 1 éves előfizetés az MKL-re

További tudnivalók a pályázók/szerzők számára, beleértve a pályázat beküldésével kapcsolatos információt, a <http://www.mkl.mke.org.hu/tajekoztato-szerzoink-reszere.html> webcímen olvashatók.

Magyar Kémikusok Egyesülete

ChemistryViews

Videos & Blogs

News & Articles

Alerts & Events

Join – register – benefit
with 300.000+ users on the platform!

Easy – fast – exciting
updated every day for you and your work!

Spot your favorite content:
www.ChemistryViews.org

ChemPubSoc Europe

WILEY-VCH

