

A TARTALOMBÓL:

A 2013-as kémiai, fizikai
és orvosi Nobel-díj

Biztonsági adatlapok

Kémiaoktatás

a Budapest-Fasori

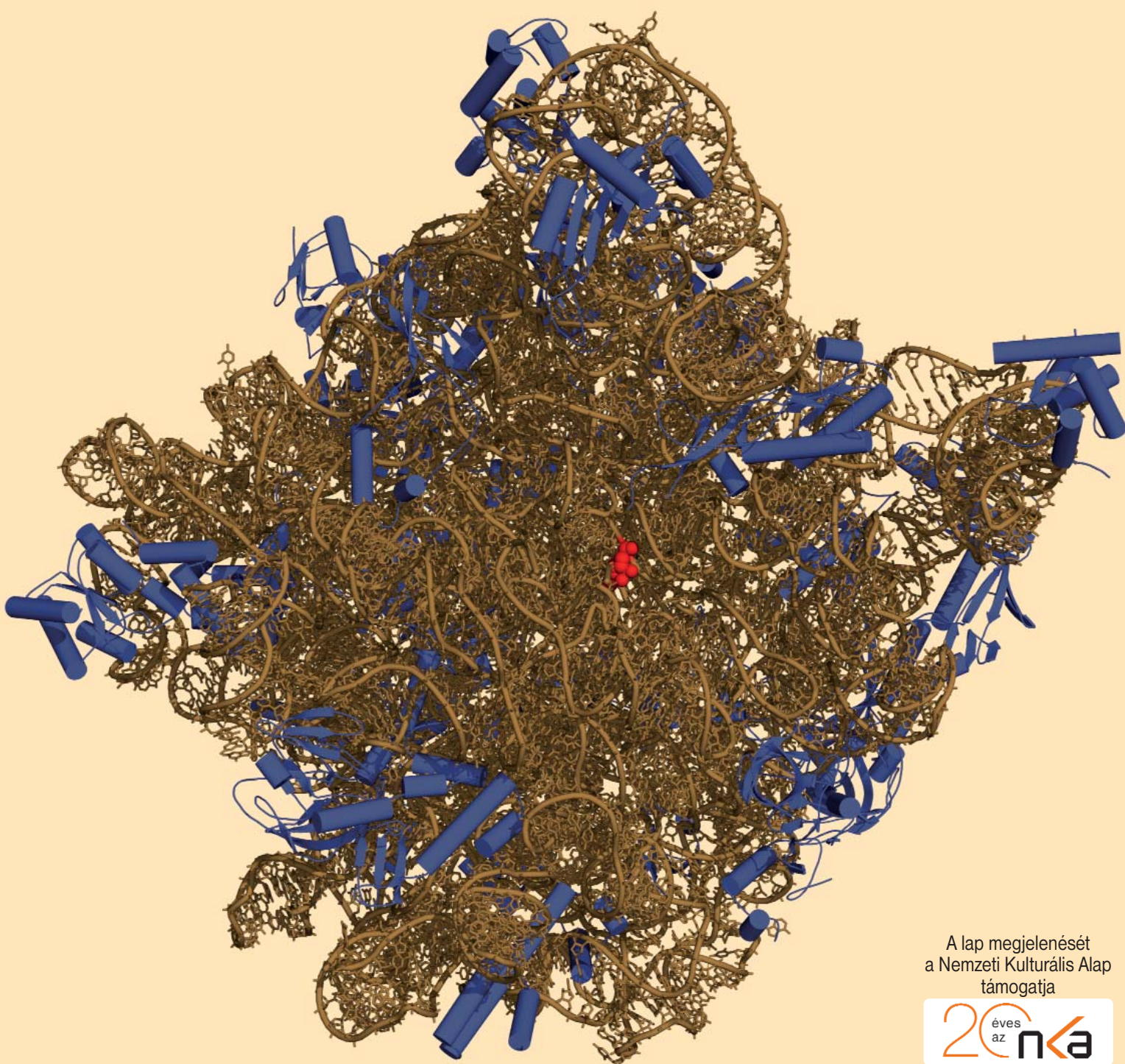
Evangélikus Gimnáziumban

Adatok vizuális
megjelenítése



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXIX. ÉVFOLYAM • 2014. FEBRUÁR • ÁRA: 850 FT



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 költségghatékony 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

LXIX. évf., 2. szám, 2014. február



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

Szerkesztőség:

Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE

Szerkesztők:

ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,
JANÁKY CSABA, LENTE GÁBOR,
NAGY GÁBOR, PAP JÓZSEF SÁNDOR,
ZÉKÁNY ANDRÁS

Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,
a szerkesztőbizottság elnöke,
[SZÉKES GÁBOR] örökös főszerkesztő,
ANTUS SÁNDOR, BECK MIHÁLY,
BIACS PÉTER, BUZÁS ILONA,
GÁL MIKLÓS, HANCÓK JENŐ,
JANÁKY CSABA, JUHÁSZ JENŐNÉ,
KALÁSZ HUBA, KEGLEVICH GYÖRGY,
KOVÁCS ATTILA, KÖRTVÉLYESI ZSOLT,
KÖRTVÉLYESSY GYULA,
LIPTAY GYÖRGY, MIZSEY PÉTER,
MÜLLER TIBOR, NEMES ANDRÁS,
RÁCZ LÁSZLÓ, SZABÓ ILONA,
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 Batthyány Kultur-Press Kft.,
H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.
1251 Budapest, Postafiók 30.
Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:
SÜLI ERIKA

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

Aktuális számaink tartalma,
az összefoglalók és egyesületi híreink,
illetve archivált számaink honlapunkon
(www.mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541
HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)
HU ISSN 1588-1199 (online)



Az év végi ünnepek miatti lapszámtorlódások után most kezdünk visszatérni a normális kerékvágásba, és csak most olvashatják a 2013. évi Nobel-díjasok munkásságát bemutató cikkeinket. Ezúttal is kitekintve a társtudományokra, ismertetést olvashatnak a kémiai mellett a fizikai és az orvosi Nobel-díj által elismert eredményekről. Ilyen alkalmakkor mindig büszkén szoktuk emlegetni, hogy kis országunk 15 tudóssal gazdagította ezen dicső hölgyek és férfiak névsorát. Azt már ritkábban szoktuk említeni, hogy ezek közül csupán egy, Szent-Györgyi Albert volt az, aki itthon elért eredményeiért kapta a tudomány e legrangosabb kitüntetését. Ezt ünnepontásnak szoktuk vélni.

Talán ennél is elgondolkodtatóbb az, amit a Rátz Tanár Úr Életműdíj alapítójának levelében olvastam a 13. díjátadás alkalmából rendezett ünnepség kapcsán, melyről tudósításunk szintén ebben a lapszámban jelenik meg: „Nobel-díjasaink zöme egyetemet már külföldön végzett, de többen ugyanabba a középiskolába, sőt, néhányan ugyanabba az osztályba jártak. Ennyi múlik egy jó tanáron. Hogy a tehetség elkallódik, vagy kifejlődik, az a középiskolában dől el, ezt kellene tehát sokkal jobban megbecsülnünk. Ez nemcsak pénz, hanem társadalmi értékítélet kérdése is. Nobel-díjasaink nevét szinte mindenki ismeri, de ki ismeri tanáraikat? Azt is tudjuk, ki volt az Aranycsapat edzője, de díjunk névadóját, Rátz tanár úr nevét, aki Neumann Jánost és Wigner Jenőt is a Fasori Evangélikus Gimnáziumban tanította, sokkal kevesebben ismerik, mint tanítványai nevét. Ennek a megbecsülés deficitnek a részleges kompenzálására alapítottuk a Rátz Tanár Úr Életműdíjat.” Köszönet az alapítóknak ezért a díjért, amely a tanári pálya legnagyobb szakmai elismerésének számít ma hazánkban.

A Fasori Evangélikus Gimnázium munkájáról, sikereiről, mely a Nobel-díjasok mellett még oly sok kiválóságot adott hazánkban és a világnak, szintén ebben a számban olvashatunk rövid beszámolót.

Felvetődik bennem, és most inkább csak közvetítem sok szakmabeli aggodását, hogy azon erőltetett egységesítési törekvések, melyek a tantervektől a részletes tananyagon át ma már a tankönyvekig terjednek, és az ifjúság teljes tanulási idejét próbálják lefedni, nem elhanyagolható gazdasági szempontokra hivatkozva, nem fognak-e nagyon is hamar visszaütni és a sokszor pozitív példaként hivatkozott kreatív magyar gondolkodást nem váltja-e fel az elszürkült közepszer. Még időben kellene gondolkodnunk!

Szeged, 2014. február

Kiss Tamás

Kiss Tamás
felelős szerkesztő

TARTALOM

NOBEL-DÍJAK

Fogarasi Géza: Kémiai kutatás számítógéppel?

A 2013. évi kémiai Nobel-díj **38**

Horváth Dezső: A 2013-as fizikai Nobel-díj

42

Dankó Tamás: A 2013-as orvosi Nobel-díj

45

VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

Németh Eszter: Áramlásos lineáris dikroizmus spektroszkópia alkalmazása nukleázok tanulmányozására

47

Körtvélyessy Gyula: Biztonsági adatlapok.

Tizenkettedik rész. Veszélyességi besorolások és címkeelemek **50**

A KÉMIA KIVÁLÓSÁGAI

Benkőné Di Giovanni Rita: Kémiaoktatás a Budapest-Fasori Evangélikus Gimnáziumban

52

KITEKINTÉS

Braun Tibor: Tudományos kutatási adatok és ismeretek vizuális megjelenítése

54

VEGYIPAR- ÉS KÉMIATÖRTÉNET

Vegyészkalendárium (Pap József Sándor rovata)

58

VEGYÉSZLELETEK

Lente Gábor rovata

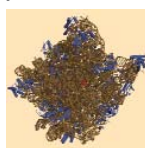
60

EGYESÜLETI ÉLET

A HÓNAP HÍREI

62

64



Címlap:
Vizualizálás:
a *Haloarcula marismortui* nagyobbik riboszóma-alegységének modellje
(Yikrazuul, commons.wikimedia.org)

Fogarasi Géza

■ ELTE Kémiai Intézet

Kémiai kutatás számítógéppel?

A 2013. évi kémiai Nobel-díj

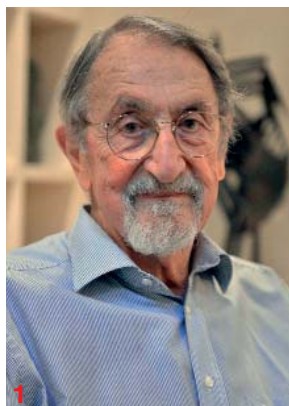
Többszintű modellek kifejlesztése bonyolult kémiai rendszerek leírására (*development of multiscale models for complex chemical systems*) indoklással a 2013-as kémiai Nobel-díjat megosztva a következő három tudósra ítélték oda: *Martin Karplus* (Harvard University), *Michael Levitt* (Stanford University), *Arieh Warshel* (University of Southern California). Mindhárman amerikai állampolgárok, bár egyikük sem amerikai születésű.¹ A díjazottak a számítógépes modellezés területén értek el kimagasló eredményeket. Ezzel kerekén 15 évvel a kvantumkémikus Pople és Kohn Nobel-díja után újból az elméleti kémia kapott legmagasabb szintű elismerést.

De a kémia alapvetően kísérleti tudomány, ezért valószínűleg sokan még ma is „gyanakodva” tekintenek az elméleti kémikusok eredményeire. Ez különösen vonatkozik hazánkra, holott a magyar elméleti kémikusok nemzetközi elismertsége hagyományosan kiemelkedő. E kutatási terület alábbi felvázolása talán enyhíteni tudja a – sokszor nem is indokolatlan – fenntartásokat.

A kémiai gondolkodásmód alapja a kvantummechanika

A 20. század legnagyobb, egész világképünket gyökeresen átalakító tudományos eredménye a kvantummechanika. Jelentősége a kémia számára is felbecsülhetetlen: mai tudásunk szerint a kvantummechanika meg tudja magyarázni a kémiai kötést

¹ Karplus még kisgyermek korában szüleiivel hagyta el Ausztriát a hitleri megszállás elől. Warshel a mai Izrael területén (egy kibucban) született, Izraelben nőtt fel és tanult, ma is erősen kötődik a Weizmann Intézethez. Levitt Dél-Afrikában született, szüleiivel Angliába költözött, majd éveket töltött Izraelben, mielőtt végleg az Egyesült Államokban telepedett le. Levittnek és Warshelnek izraeli állampolgársága is van. A tudomány igazán nemzetközi, mégis szeretjük a neves embert nemzethez is kötni. Jelen esetben mindhárom tudósra leginkább Izrael lehet méltán büszke.



1 Martin Karplus

2 Michael Levitt

3 Arieh Warshel

és – legalábbis elvben – a kémiai történetek minden részletét. A köztudatba nem épült be eléggé, de határozottan állítom, hogy egész mai kémiai szemléletünk a kvantummechanika eredményein alapul, a periódusos rendszertől kezdve a rezonancia-szerkezeteken át egészen a reakciómechanizmusokig.

Állításom tisztázása végett egy pillanatra ugorjunk vissza a modern kémia kezdetéhez: a 18–19. század fordulóján, a rendszeressé váló egyszerű mérések eredményei (egész számokkal kifejezhető súlyviszonyok, illetve gázreakciókban térfogatviszonyok) sugallták azt, hogy az anyag egyedi részecskékből épül fel. A Dalton atomelméletében megfogalmazott atomi-molekuláris szemlélet alapján lett az *alkímiából* igazi *kémia*. De az egész 19. század folyamán talány maradt, hogy mi kapcsolja össze az atomokat a molekulákban. (Szinte teljesen elfelejtődött e kérdésben Avogadro szerepe; tanítjuk az Avogadro-törvényt, de a tankönyvek nemigen említik, hogy Avogadro azt is kifejtette: törvényét elfogadva a vegyülő gázok térfogatarányai csak akkor érthetőek, ha feltesszük, hogy az *elemi* gázok is több atomból áll(hat)nak. De mi tarthat össze két azonos atomot, például két hidrogént?! Ha semlegesek, nincs elektromos kölcsönhatás, ha töltöttek, akkor taszítják, nem vonzzák egy-

mást. Nem véletlen, hogy olyan nagyságok, mint Wilhelm Ostwald még a századfordulón is csak hasznos hipotézisnek, és nem reális, létező objektumoknak tartotta az atomokat és molekulákat.)

Ma már persze az iskolában megtanuljuk, hogy az atomoknak is van szerkezete, a pozitív töltésű mag körül negatív töltésű elektronok „keringenek”. Az elektronok mozgása azonban nem írható le a klasszikus fizika törvényei alapján; a keringés nem klasszikus értelemben vett, a makroszkopikus világból ismert, határozott pályákat jelent. Az elektronok mozgását a kvantummechanika a „hullámfüggvénnyel” írja le, ami matematikailag tökéletes leírás, de értelmezése hihetetlenül bizarr: az elektronoknak nincs klasszikus útvonala, csak „tartózkodási valószínűsége”. A szemléletet végletesen leegyszerűsítve, magam a következő képet szoktam használni az oktatásban: a magok közötti térben az elektronok alkotta negatív töltés mint egy felhő képzelhető el; ahol nagyobb a tartózkodási valószínűség, ott sűrűbb a felhő – nagyobb az elektronsűrűség. És a kémiai kötés szemléletesen: a molekulákban a pozitív magokat a köztük levő negatív *elektronfelhő* tartja össze. (De vigyázat a hasonlattal, ez egy furcsa „felhő”: belőle csak kvantumosan, *egész számú* elektronokat lehet kivenni – ez az ionizáció.)

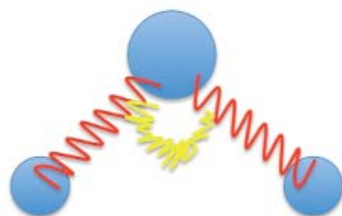


Molekulák számítógépes modellezése

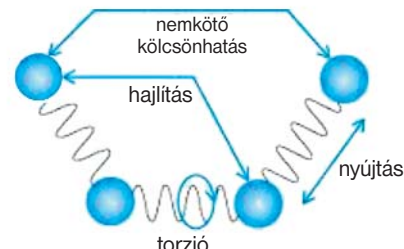
Molekulamechanika (MM)

Az előzők alapján azt gondolnánk, hogy a molekulák leírása csakis az elektronok explicit figyelembevételével képzelhető el. Valójában azonban egészen egyszerű, teljesen klasszikus, mechanikai modellek is meglepően jól alkalmazhatóak a molekulákra. Ezekhez a *molekulamechanikai* (MM) modellekhez a jól ismert fizikai, golyó-pálcika vagy a Dreiding-modellekből² indulhatunk ki. A modellt egészítsük ki azzal, hogy a kötések nem merevek, hanem különböző erősségű rugók; a kötésszögek is hajlíthatók, a torziós szögek is elcsavarodhatnak (**1. ábra**). Az atomok határa pedig nem teljesen éles, két nemkötő atom között van der Waals-kölcsönhatás van. Ezen túlmenően, az atomokon többnyire parciális töltéseket is definiálunk.

Ezt a modellt matematikailag nagyon könnyű kezelni: az energia egy olyan sokváltozós függvény lesz, melyben a felsorolt szerkezeti deformációkhoz „erőállandókat” rendelünk (ezek az energia második deriváltjai a koordináták szerint). Ezért a modellt ún. erőter (force field) módszerként is emlegetjük. Az erőállandókon keresztül – és figyelembe véve az elektrostatikus kölcsönhatásokat – az atomok egy adott pillanatnyi elrendeződéséhez (magkonfiguráció) az energia meghatározott értéke tartozik. Mindezt persze végső soron az elektronszerkezet szabja meg, de most a problémát teljesen empirikusan kezeljük: az energiafüggvény paramétereit (a változók egyensúlyi értékeit és az erőállandókat) kísérleti adatok alapján optimalizáljuk. Fontos megjegyezni, hogy a parciális töltés nem egy igazi, mérhető fizikai mennyiség, ezeket kvantumkémiai számításokból, különböző definíciók sze-



a



b

1. ábra. A molekulamechanikai (MM) modell elve. a) A vízmolekulában a kötésnyújtás és a hajlítás a koordináták, melyekhez „erőállandókat” rendelünk. b) Négy atom esetén már a torzió és a van der Waals-kölcsönhatás is bevezethető (Mini.physics.sunysb.edu)

rint határozzák meg. Az erők megítélésénél jó azt is tudni, hogy az eredmények ijedően érzékenyek lehetnek az elektrostatikus paraméterek megválasztására.

Molekulamechanikai erőtereket az 1960-as évek óta használnak, az egyik legelső erőter *Lifson és Warshel CFF*-je volt [1]. (CFF – *Consistent Force Field*; a konzisztens csak annyit jelent, hogy összhangban van a kísérleti eredményekkel.) Ma az egyik legelterjedtebben használt erőter a Karplus nevével fémjelzett *CHARMM* (Chemistry at *HAR*vard Molecular Mechanics), melyen az évtizedek során sokat alakítottak-finomítottak [2,3], s mára a legsokoldalúbb alkalmazásokra használható. Az MM területén természetesen számos más kutatócsoport is dolgozott, ezek közül legalább kettőt feltétlenül meg kell említenem: *Norman L. Allinger* [4], illetve *Harold A. Scheraga* csoportja³ [5] a díjazottakkal összevethető mértékű ismertséggel és eredményekkel büszkélkedhet.

Az MM módszer óriási előnye az, hogy számítástechnikailag gyakorlatilag semmi problémát nem jelent, akár több száz ezer atomból álló rendszer is kezelhető. De a pontosság-megbízhatóság mindig kérdéses, s természetesen eleve függ az erőter-től. A legmegbízhatóbb egy erőter nyilván abban az esetben, ha jól körülhatárolt esetekre dolgozták ki, egy-egy vegyületcsoportra, ilyenek nevezetesen a polipeptidek-fehérjék. De nem véletlen, hogy rengeteg különböző erőter ismert az irodalomban, s ezeket csak megfelelő körültekintéssel szabad használni. Az önálló elméleti munkák mellett az erőterek gyakorlatilag nélkülözhetetlenek fontos kísérleti adatok kiértékelésében. Talán nem is minden felhasználó tudja, hogy a kiterjedten alkalmazott NMR-spektroszkópiai konformációanalízist végző számítógépes programok „mélyén” mindig molekulamechanikai erőter „működik”: az MM-program keresi a konformációs minimumokat, s a vezér-

program értékeli, hogy ezek összeegyeztethetők-e a kísérleti (jellemzően ún. *NOE*) adatokkal. Hasonló a helyzet a fehérjekristallográfiában, ahol a diffrakciós adatokat szintén MM-mel kell kombinálni a hatékony és megbízható szerkezetoptimaláshoz. A kvantumkémikus is jól tudja használni az MM-erőtereket például a geometria *előoptimalására* – melyet kvantumkémiai optimalás követ.

Az MM-erők jól használhatók konformációvizsgálatra, ezért nagyon népszerűek a molekuláris biológiában, vagy például az anyagtudományban. Alapvető korlátjuk azonban, hogy nyilván nem tudják leírni a kötések felhasadásával járó folyamatokat (kémiai reakciók), vagy például az elektrongerjesztett állapotokat. Ezek a feladatok már elkerülhetetlenül kvantummechanikai leírást igényelnek.

Kvantumkémia (QC)

A számítógépes módszerek másik ágán az elektronszerkezetet explicite figyelembe vevő, igazi elméleti módszer, a *kvantumkémia* (QC) áll. A kvantumkémia nem más, mint a kvantummechanika (QM) alkalmazása kémiai rendszerekre, molekulákra. Ez a „szimpla” alkalmazás azonban óriási elméleti erőfeszítéseket kívánt és kíván ahhoz, hogy a kvantummechanika alap-egyenletét, a Schrödinger-egyenletet minél jobb közelítésben tudjuk megoldani. A közelítés szintje szerint a kvantumkémia nagyon különböző pontosságú (és számítógép-igényű) lehet. Ez vonatkozik az *ab initio* módszerekre is („ab initio” – a kezdetektől, vagyis a tisztán elméleti alapokból kiindulva). Tehát vigyázat: az „elegáns” jelző önmagában nem biztosítja a nagy pontosságot, nem szabad megtéveszse a felhasználót!

A legpontosabb *ab initio* számítások elérik a kísérleti módszerek pontosságát (sőt, helyenként azok korrigálására is vezettek),

² Úgy tűnik, e tankönyvekből ismert név tulajdonosa még él: az Universität Zürich honlapja még fotóval és lakáscímével szerepelteti professor emeritusai között az 1919-ben született Dreidinget: <http://www.oci.uzh.ch/research/emmereti/dreiding.html>

³ Scheraga, 90. életévén túl, professor emeritus a Cornell Egyetemen, ahol egész pályáját töltötte. Számunkra érdekes, hogy magyar kapcsolata is voltak. Maga említi életrajzában, hogy tiszteletbeli tagja a Magyar Biofizikai Társaságnak. Fontos szerepet játszott mellette egy magyar származású kutató, Némethy György. Egyik leg-többet idézett cikkük: Némethy, G., Pottle, M. S., Scheraga, H. A.: *J. Phys. Chem.* (1983) 87, 1883–1887. (Némethy az 50-es évek elején, még gimnazistaként hagyta el szülőivel az országot. A Cornell Egyetemen doktorált, majd dolgozott, nagyon magas idézettségű kutatóként. Tudományos pályája mellett egyik vezető alakja volt a külföldi magyar cserkészmozgalomnak. 59 éves korában hunyt el, a 90-es évek elején.) A 70-es, 80-as években Scheragánál töltött hosszabb időt az MTA Enzimológiai Intézetéből Simon István.

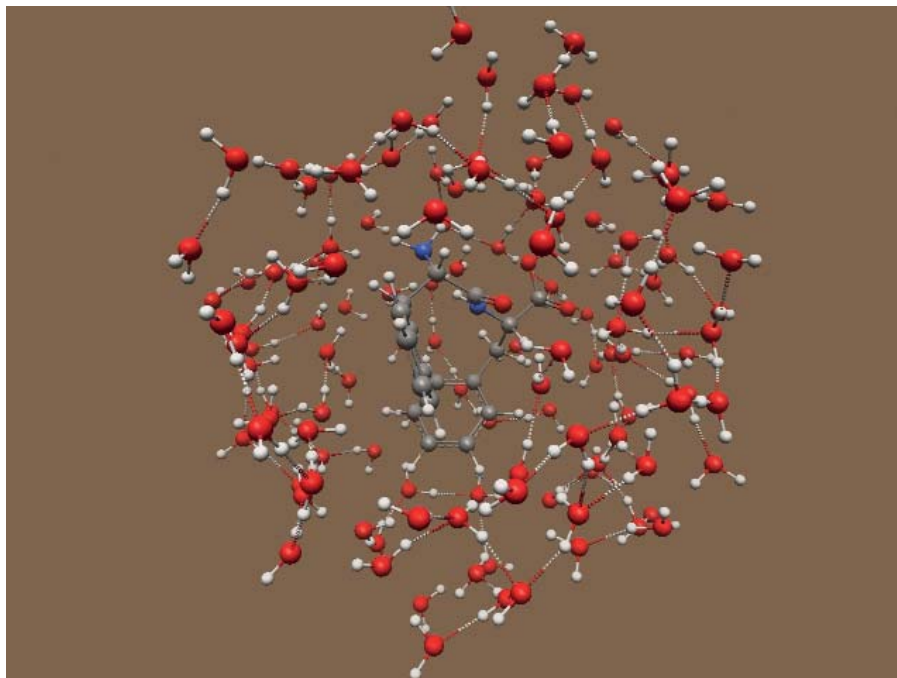


de csak kis molekulákra (manapság 10–20 atom) végezhető el. Kisebbségi igényű, de akár *ab initio* számítások (Hartree–Fock, MP2) viszont ma már sok száz, akár ezer atomból álló molekulákra is elvégezhetőek. Még tovább lehet lépni a *szemiempirikus* módszerekkel – de ezek egyre inkább háttérbe szorulnak, különösen a rendkívül népszerűvé vált sűrűségfüggvény-elmélet (DFT) hatására.

Molekulamechanika és kvantummechanika együtt (QM/MM)

A Nobel-indoklásban a „*complex systems*” egyrészt nagy, másrészt szerkezeti bonyolult rendszerekre utal. Ezek csak a címbeli „*multiscale*” módszerekkel szimulálhatók, melyekben a probléma különböző részeit különböző szinten kezeljük. Ez elsősorban a fent vázolt két leírás kombinációját, a kvantummechanikai/molekulamechanikai (QM/MM) modellt jelenti. A gondolat régóta létezik, sok csoport dolgozott és dolgozik rajta; standard referenciának számít a Karplus-csoport publikációja [6], de úttörő munkát végzett például Peter Kollmann is [7]. (Bizonyos értelemben a QM/MM elv jelenik már meg Warshel és Karplus 1972-es cikkében [8], melyben konjugált kettős kötésű rendszerekre a CFF-erőteret használták a σ -váz leírásához, míg a π -kötésekhez értelemszerűen kvantumkémiai kellett használniuk – szemiempirikus formában.)

Az elv teljesen kézenfekvő: egy adott problémában próbáljuk szétválasztani azt a részt, amely aktív szerepet játszik a folyamatban, a rendszer többi része legyen a kevésbé fontos „környezet”; az aktív részt QM-szinten, a maradékot csak MM-szinten kezeljük. A dolog egyszerű, ha a két rész jól szétválasztható, például egy QM-molekula, melyet oldószer-molekulák vesznek körül, utóbbiak alkotva az MM-részt. A QM-leírás szempontjából, az elektronok csak az oldószer-molekulákon levő parciális töltésekkel vannak kölcsönhatásban, és az atommagok (QM és MM) kölcsönhatása – mely elektrosztatikus, kiegészítve empirikus van der Waals-kölcsönhatással – csak egy additív tagot ad az energiához. Egy ilyen QM/MM („dinamika”, l. alább) számításból vett pillanatképet láthatunk a 2. ábrán [9]: az aktív centrum a QM-mel le-



2. ábra. Fenilalanin-dipeptid egy vízcseppben (122 vízmolekula). Pillanatkép egy QM/MM dinamikai számításból. QM: RHF/6-31G*, MM: TIP3P [9]

írt fenilalanin-dipeptid, a „vízcsepp” az MM-környezet. Bonyolultabb a helyzet, ha az aktív rész és a maradék egyazon molekula különböző részei, melyek tehát kovalens kötésben vannak (például egy nagy enzim és azon belül az aktív centrum); a két rész kapcsolatának megbízható kezelése nem egyszerű, erre különböző módszerek léteznek.

Alkalmazás: molekulák egyensúlyi szerkezete, illetve molekuladinamika

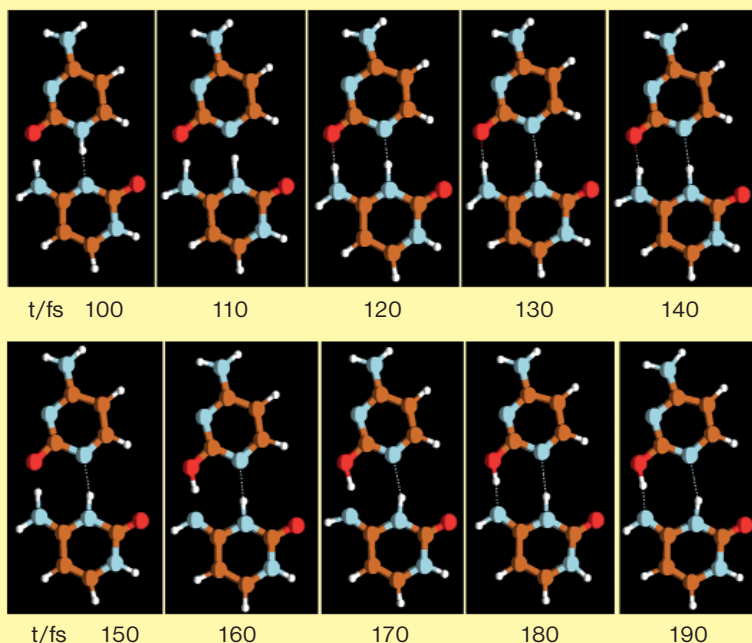
A számítógépes modellezés évtizedekig inkább a molekula egyensúlyi geometriájára és annak – az atomok rezgése folytán elért – közvetlen környékére terjedt ki. Az adott elméleti modellben egyensúlyi geometria a magok azon elrendeződése, melyben az energia minimális, ami matematikailag azt jelenti, hogy a magkoordináták szerinti első deriváltak zérussá válnak. A geometriaoptimalás ma is minden feladat első lépése. A második (és esetleg magasabb) deriváltak alapján a molekularezgések határozhatók meg. Magyar vonatkozás, hogy a terület nemzetközi úttörője Pulay Péter volt a 60-as évek végétől. Ma már minden kereskedelmi programban megvan a rezgési spektrum számításának lehetősége, és rutinnak számít a szerkezetkutatásban, hogy az infravörös és Raman-színképek kiértékeléséhez a *számított* spektrumokra is támaszkodnak. Egy *ad hoc* hazai példa: Tarczay és munkatársai nemrég egy ele-

gáns munkában az alanin lézerrel generált konformereit vizsgálták alacsony hőmérsékletű mátrixban [10], az azonosításhoz QC-spektrumokat számolva.

Az „igazi” kémiában az atomok jelentősen elmozdulnak, a „potenciálfelület” távoli régióit is bejárják; ezzel foglalkozik a *molekuladinamika*. Ebben a körben a *kémiai reakciók*, amikor is a kötések felhasadnak és az atomok kapcsolatai teljesen átrendeződnek, csakis QM-alapon írhatók le. Egyszerű a helyzet ugyanakkor a konformációváltozások során, melyek jó eséllyel kezelhetők MM módszerekkel.

Kisebbségi rendszerek dinamikai vizsgálatára akár tisztán QM-potenciálfelület is alkalmazható. Ilyenkor a trajektória minden pontján teljes QC-számítást végzünk, melyben nemcsak az energiát, hanem annak deriváltjait (negatív előjellel az atomokon ható erőket) is meghatározzuk, s ezek alapján az atomokat a klasszikus mechanika törvényei szerint léptetjük. Egy saját példát hozva: a citozinmolekula tautomerizációjának egyik lehetséges mechanizmusát tanulmányoztam [11]; ebből vett pillanatképeket mutat a 3. ábra. A dinamikával kapcsolatban feltétlenül megemlítendő a Car–Parrinello-módszer [12]. Ez szintén QM-felülettel dolgozik, de egy szellemes technikával a hullámfüggvényt nem számítja ki minden lépésben, hanem azt is dinamikai változónak tekintve „propagáltatja”. A rendkívül hatékony módszer jelentősége összevethető a Nobel-díjasok eredményével.⁴

⁴ Roberto Car és Michele Parrinello olasz fizikusok, mindketten Triestben dolgoztak 1985-ben, amikor módszerüket megalkották. Módszerük jelentőségét az anyagtudományban szerkesztésű cikk méltatta: Nature Mater. (2010) 9, 687. Úgy gondolom, a jelenlegi Nobel-díj várományosai között ők is szerepelhettek.



3. ábra. A citozin tautomerizációjának egyik lehetősége: dimerizációs mechanizmus, melyben az 1:1 dimer 2b:3a-vá alakul. 1 – amino-oxo tautomer, 2b – amino-hidroxi, 3a – imino-keto. *Ab initio* Born–Oppenheimer-molekuladinamika, DFT(b3lyp)/6-31+G szinten

A QM/MM módszer különösen az ilyen dinamikai kutatásokban nagy jelentőségű. A dinamika során sok százezer vagy több millió pontban kell meghatározni az energiát (és deriváltjait), amit csak a mai hihetetlen teljesítményű számítógépek tesznek lehetővé. De emellett meghatározó a modell helyes megválasztása és a hatékony algoritmus. Legújabb példaként a Pulay-csoport javasolt egy modellt, mely bizonyos típusú vizsgálatokban a számításokat több nagyságrenddel (!) meggyorsíthatja [9].

Példák a díjazottak munkáiból

A számítógépes dinamikai szimulációk tehát atomi felbontásban követik a kémiai változásokat. [A szokásos időfelbontás néhány tized fs (10^{-15} s).] A leglátványosabb alkalmazások a *biológiai* folyamatok *molekuláris* követésének területén jelennek meg (*enzimek* működése, *protein folding* stb.). A díjazottak vezető szerepet játszottak ilyen kutatásokban, ami fontos szem-

pont lehetett kitüntetésükhöz. A következőkben egy-egy review-jellegű példát említek az elmúlt évtizedből. Karplus a *Molecular Dynamics Simulations of Biomolecules* című cikkében [13] például a következőkkel foglalkozik: oldószerhatás a proteinek dinamikájában; protein-modulok dinamikus csatolása protein kinázokban; konformációs változások szerepe a funkció mechanizmusban; gerjesztett állapotok szerepe a biológiában stb. Ezzel egy időben Warshel review-ja *Molecular Dynamics Simulations of Biological Reactions* címmel [14] főleg a látás mechanizmusára koncentrált: tárgya a rodopszin fény hatására bekövetkező fotoizomerizációjának leírása. (Ez a téma régóta foglalkoztatja; már 1976-ban közölt egy modellt – „biciklipedál” – a retinál izomerizációjára [15]. Az akkori lehetőségeket tekintve ehhez a hályogkovács bátorsága kellett, de munkáját máig is idézik.) Warshel különösen sokat foglalkozott az elektrosztatikus kölcsönhatások szerepével is: *Electrostatic basis for enzyme catalysis* [16].

Stockholm, 2013. december 10. A Nobel-díjakat XVI. Károly Gusztáv svéd király adta át



Levitt vegyész körökben kevésbé ismert, legtöbbet idézett munkája egy Warshellel együtt írt cikk az enzimreakciókról [17]. Ő ma talán leginkább már a számítógépes *molekuláris biológiát* képviseli. Alapmunkája a proteinek konformációjának „szegmens-illesztés” modellezése (*Accurate modeling of protein conformation by automatic segment matching*) [18]; ennek finomított változata 10 évvel később készült [19], és már információelméletet is felhasznál.

Végül, Karplusszal kapcsolatban külön érdekességgént említem meg, hogy neve jól ismert az NMR-spektroszkópusok körében is. A vicinális hidrogénatomok J csatolási állandójára 1960 (!) körül végzett nagyon leegyszerűsített QM-számítások alapján arra az eredményre jutott, hogy a J értékek jól fittelhetők a H–C–C–H torziós szög koszinuszából képzett másodfokú polinommal. Ez az egyszerű összefüggés, mely Karplus-egyenletként ismert, különösen hasznos a peptidek konformációinak NMR-meghatározásában.

Talán a fentiekből is kitűnik: az elméleti kémiai számítások mindig közelítések, modelleken alapulnak. Ezek akkor igazán hasznosak, ha figyelembe vesszük a módszerek határait, s nem *visszaélünk*, hanem értelmesen *élünk* velük.

IRODALOM

- [1] Lifson, S., Warshel, A.: J. Chem. Phys. (1968), 49, 5116–5129.
- [2] Brooks, B.R. et al.: J. Comput. Chem. (1983) 4, 187–217.
- [3] Brooks, B.R. et al.: J. Comput. Chem. (2009) 30, 1545–1614.
- [4] Allinger, N. L.: J. Comput. Aid. Mol. Des. (2011) 25, 295–316. A 80 év felett járó szerző a molekulamechanika filozófiáját foglalta össze.
- [5] Hammes, G. G., Skolnick, J.: J. Phys. Chem. B, (2012) 25, 6572–6572. A Scheraga tiszteletére megjelent lapszám szerkesztői írása.
- [6] Field, M. J., Bash, P. A., Karplus, M.: J. Comput. Chem. (1990) 11, 700–733.
- [7] Singh, U.C., Kollman, P.A.: J. Comput. Chem. (1986) 7, 718–730.
- [8] Warshel, A., Karplus, M.: J. Am. Chem. Soc. (1972) 94, 5612–5625.
- [9] Janowski, T., Wolinski, K., Pulay, P.: Chem. Phys. Lett. (2012) 530, 1–9. Az ábrát Tomasz Janowski készítette a kérésre.
- [10] Bazzo, G., Najbauer, E. E.; Magyarfalvi, G., Tarczay, G.: J. Phys. Chem. A, (2013) 117, 1952–1962.
- [11] Fogarasi, G. konferenciapozster: WATOC Congress, Santiago de Compostela, Spain, July 17–22, 2011.
- [12] Car, R., Parrinello, M.: Phys. Rev. Lett. (1985) 55, 2471–2474.
- [13] Karplus, M., McCammon, J. A.: Nature Struct. Biol. (2002) 9, 646–652.
- [14] Warshel, A.: Acc. Chem. Res. (2002) 35, 385–395.
- [15] Warshel, A.: Nature (1976) 260, 679–683.
- [16] Warshel, A., Sharma, P. K., Kato, M. et al.: Chem. Rev. (2006) 106, 3210–3235.
- [17] Warshel, A., Levitt, M.: J. Mol. Biol. (1976) 103, 227–249.
- [18] Levitt, M.: J. Mol. Biol. (1992) 226, 507–533.
- [19] Yona, G., Levitt, M.: J. Mol. Biol. (2002) 315, 1257–1275.
- [20] Karplus, M.: J. Chem. Phys. (1959) 30, 11–15.; J. Am. Chem. Soc. (1963) 85, 2870–2871.



Horváth Dezső

■ MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont és MTA ATOMKI | horvath.dezso@wigner.mta.hu

A 2013-as fizikai Nobel-díj

2012. július 4-én a CERN két nagy kísérlete, az ATLAS és a CMS bejelentette, hogy a Nagy Hadronütköztetőnél megfigyeltek egy olyan új részecskét, amely tulajdonságaiban a részecskefizika általánosan elfogadott és kísérletileg messzemenően igazolt elméletének egyetlen addig még nem azonosított elemi részecskéjével, a Higgs-bozonnal azonos. Mivel létezése igazolja a részecskefizika elméletének egyetlen addig bizonyítatlan elemét, az elemi részecskék szimmetriasértéssel történő tömegképződését, az elmélet két megalkotója, a belga François Englert és a skót Peter Higgs megkapta a 2013. évi fizikai Nobel-díjat.

A hogyan a fizika fejlődésével egyre mélyebbre hatoltunk az anyag szerkezetében, minden nagyobb lépés eredményeképpen újabb, oszthatatlannak hitt, „elemi” részecskék jelentek meg. Látható világunk fő alkotórészei között az elektron valóban elemi, de a proton és a neutron egyáltalán nem azok, komoly belső szerkezettel rendelkeznek. A részecskék belső szerkezetét, mindenfajta anyagelmélethez hasonlóan, szimmetriák írják le, a részecskefizikában viszont minden a szimmetriákból (vagy azok sérüléséből) származik: a megmaradási törvények, a kölcsönhatások, sőt a részecskék tömege is.

A részecskéket belső szimmetriájuk szerint két csoportra osztjuk, *fermionokra* és *bozonokra*. Ama roppant egyszerű transzformáció hatására, hogy kicserélünk az állapotot leíró függvényben két azonos részecskét, a függvény vagy előjelet vált, akkor fermionnak hívjuk, vagy nem, akkor bozonnak. Adott állapotban akárhány bozon lehet egyidejűleg, de fermionból csak egy, ez a Pauli-elv. Ennek következtében töltönek az atomi elektronok egyre növekvő energiájú energiahéjakat, és ez akadályozza azt meg, hogy az atomok az anyagban és a nukleonok az atommagban egymásba hatoljanak.

A részecskefizika elmélete, a Standard Modell (SM) az alapvető kölcsönhatásokat lokális, azaz helyről helyre meghatározott törvényszerűség szerint változó *mérték-szimmetriák* segítségével származtatja. Ezek azonban nem engedik, hogy tömegük legyen az elemi részecskéknél, a kvarkoknak és leptonoknak, valamint a kölcsönhatásaikat közvetítő bozonoknak, az ugyanis sértené a kölcsönhatást létrehozó szim-

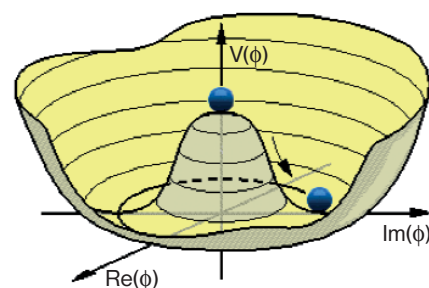
metriákat. A lokális mértékszimmetria tehát valahogyan sérül. A fizika számos sérülő szimmetriát kezel, ilyen például a paritás-szimmetria. Frank Wilczek írja *Az elveszett szimmetriák nyomában* című cikkében, hogy „A fizika egyenletei több szimmetriával rendelkeznek, mint a való világ.” A sérülő szimmetriák matematikailag egyszerűsítik a fizikai jelenségek leírását.

A Peter Higgs és François Englert (és velük csaknem egyidejűleg, de tőlük függetlenül mások is) által javasolt spontán szimmetriasértési mechanizmus a részecskefizika elméletének, a Standard Modellnek számos problémáját megoldja. Megteremti többek között a gyenge kölcsönhatást létrehozó lokális szimmetria sértésével a kölcsönhatást közvetítő részecskék tömegét, lehetővé teszi az alapvető anyagi részecskék, a leptonok és a kvarkok tömegének létrejöttét, és – mintegy melléktermékként – megteremti a Higgs-bozont, ezt az igen furcsa, hipotetikus részecskét.

A spontán szimmetriasértést legegyszerűbb a mexikói kalappal, a sombreroval illusztrálnunk (**1. ábra**). Ez tökéletesen hengersizimmetrikus, és elvben azzal sem rontjuk el a szimmetriáját, ha a csúcspontjára helyezünk egy golyót. Ez az állapot azonban nem lesz stabil, stabil állapotot a rendszer csak akkor talál, amikor a golyó legurul valahova a völgybe. Az természetes véletlenszerű, hogy konkrétan hova gurul, de akárhol áll meg, spontán megbontja a hengersizimmetriát. Matematikailag ezt úgy fejezzük ki, hogy a rendszernek nem stabil a zérus potenciálú állapota, tehát nem nulla a vákuumbeli várható értéke.

A Standard Modell feltételezi, hogy a fizikai vákuumot kitölti a négykomponen-

sű, szimmetriasértő Higgs-mező; a négy szabadsági fokból hármat elvesz a gyenge kölcsönhatást közvetítő három mértékbozon tömege, a negyedik adja a Higgs-bozont. Az elmélet szerint az elemi részecskék a szimmetriasértő Higgs-mezőben mozogva, azzal kölcsönhatásban nyernek tömeget, mint amikor térdig érő vízben futunk a normálisnál sokkal nagyobb tehetlenséget érezve. Makroszkopikus világunk tömege azonban nem ennek köszönhető, hiszen a proton és a neutron tömegében az őket alkotó elemi részecskék, a kvarkok tömegjáruléka igen kicsiny, néhány százaléknyi, a legnagyobb része a kvarkok és gluonok energiájának tulajdonítható.



1. ábra. Spontán szimmetriasértés. A $V(\phi)$ Higgs-mező tökéletes hengersizimmetriája elromlik, amikor golyót helyezünk a csúcsára, mert a golyó stabil állapota valahol a völgyben van, de legurulván véletlenszerű, hogy hova esik

A részecskefizika egyik alapkérdése az volt, hogy igaz-e a spontán szimmetriasértés, és egyáltalán létezik-e a Higgs-részecske. A Higgs-bozonnak valamennyi jellemző kvantumszáma zérus, és pusztá lé-



tével kiküszöböli azokat a végtelen tagokat, amelyek egyébként lehetetlenné teszik a gyenge kölcsönhatás bizonyos folyamatait (például az atommagok bomlása) valószínűségeinek kiszámítását. Az LHC előtti 40 évben megfigyelnünk nem sikerült ugyan, de tekintve a részecskefizika elmélete, a Standard Modell fantasztikus sikerét az összes megfigyelt részecskefizikai folyamat kvantitatív leírásában, kevesen kételkedtek a létezésében.

A Higgs-részecske kivételével a Standard Modell valamennyi elemi részecskéjét már régen sikerült kísérletileg azonosítani és tanulmányozni. A világ legnagyobb kísérleti berendezését, a CERN óriási LHC komplexumát, a Nagy Hadronütköztetőt egyebek között főleg a Higgs-bozon felfedezésére és tanulmányozására építették. Elsősorban erre készült az egymással versengő és egymást remekül kiegészítő két óriási, egyenként több ezer fizikus részvételével épített észlelőrendszer, az ATLAS és a CMS detektor. A CMS együttműködésben alapító tagok vagyunk, az MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont Részecske- és Magfizikai Intézete, az MTA Atommagkutató Intézete, a Debreceni Egyetem és az Eötvös Loránd Tudományegyetem kutatói és hallgatói vesznek részt benne.

Szimulációk elemzésével a CMS kísérletnél tíz éve készülünk a Higgs-bozon megfigyelésére. Mivel a Standard Modell alapján a Higgs-bozon bármely feltételezett tömegére valamennyi keletkezési és bomlási reakció valószínűsége pontosan kiszámítható, a különböző lehetséges tömegértékekre különböző adatelemzéseket készítünk. Kedvenc energiaegységünk az elektronvolt: 1 eV energiát nyer egy elektron, amikor átszel 1 volt feszültséget, de a ré-

szecskefizikusok általában gigaelektronvoltban ($1 \text{ GeV} = 10^9 \text{ eV}$) gondolkodnak, amely igen közeli a proton $0,938 \text{ GeV}/c^2$ -es tömegéhez. A korábbi kísérleti adatokkal a legjobb egyezést $90\text{--}100 \text{ GeV}/c^2$ tömegű Higgs-bozon feltételezésével kaptuk. Régen ismeretes, hogy ilyen részecske megfigyelésére annak két nagy energiájú fotonra való bomlása nyújt kiváló megfigyelési lehetőséget, a folyamat igen kicsi valószínűsége ellenére.

Minden kísérleti adatnak természetes statisztikus bizonytalansága, tudományos zsargonban hibahatára van, és általában $m \pm \sigma$ alakban írjuk fel, ahol m a mért érték és σ annak bizonytalansága. Mivel a bizonytalanságot nagyon nehéz pontosan megbecsülni, a gyorsítós fizikában a következő megállapodás született: *megfigyelünk* valamit, ha azt az adatok vagy szimulációk segítségével számított háttér fölött látjuk, legalább az összegezett kísérleti és elméleti bizonytalanság ötszörösével.

Az már 2012 tavaszán látszott, hogy év végére elegendő adatunk gyűlik össze, hogy megtaláljuk a Higgs-bozont vagy kizárjuk a létezését, bármekkora legyen is a tömege. A kritikus tömegtartományban, $120 \text{ GeV}/c^2$ körül, mindkét LHC-kísérlet látott ugyanis a 2011-es adatokban némi többletet a Higgs-bozon nélkül számolt adatmennyiséghez képest. 2012. július 4-én, hatalmas érdeklődés mellett, az ATLAS és a CMS bejelentette, hogy sikerült kimutatniuk a Higgs-bozonhoz hasonló tulajdonságokkal rendelkező részecskét. A két előadást interneten a világ minden táján közvetítették, többek között a budapesti Wigner Fizikai Kutatóközpontban és a debreceni ATOMKI-ban is. Az új részecske megjelenése igen meggyőző: két füg-

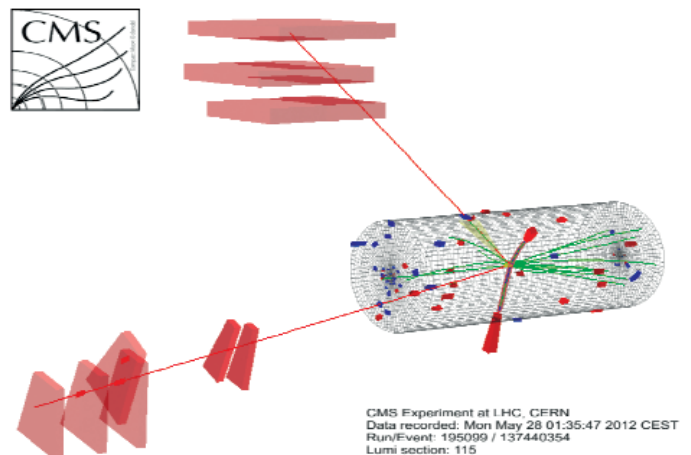
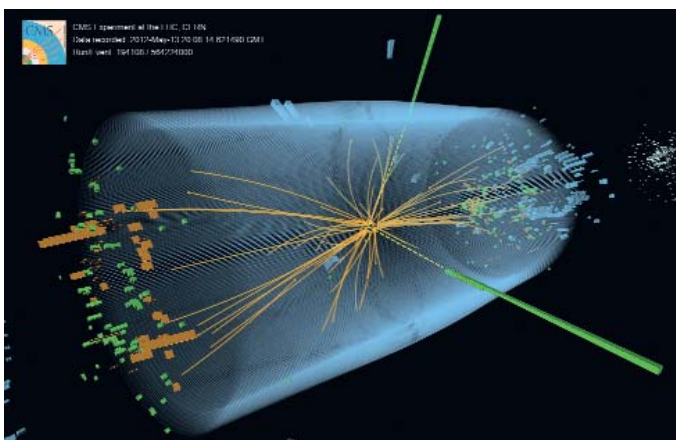
getlen kísérlet, két különböző gyorsítóenergián, több különböző módon, de ugyanazokkal a tulajdonságokkal, $126 \text{ GeV}/c^2$ körüli tömegnél mutatta ki. Annak egyértelmű eldöntéséhez azonban, hogy az valóban a Peter Higgs által megjósolt részecske, további vizsgálatok voltak szükségesek. Meg kellett mutatnunk, például, hogy a keletkezési és bomlási valószínűségei valóban a Standard Modell előrejelzéseit követik, és ahhoz az akkorinál sokkal több adatra volt szükségünk. A 2012 folyamán gyűjtött összes adat elemzése azonban már elegendőnek bizonyult, és valóban bebizonyosodott, hogy nagy valószínűséggel a Standard Modell Peter Higgs által megjósolt Higgs-bozonját látjuk.

A 2. ábrán a Higgs-bozon bomlásának tulajdonítható, tipikus események láthatók. Mint említettük, a megfigyelés szempontjából a legjobb bomlási csatornának a $H \rightarrow \gamma\gamma$ kétfotonos csatorna ígérkezett és bizonyult is, de a négy töltött leptonra való bomlás is jó.

Az ATLAS és a CMS tehát a Higgs-bozon keresésénél, egymástól függetlenül, két különböző LHC-energiánál, különböző bomlási csatornák elemzésével egymással egyező tömegű új bozonra bukkant, amelynek tulajdonságai a Higgs-bozonéhoz hasonlóak. A későbbi adatok a fentieket megerősítették.

A részecskefizika konvenciójának megfelelően tehát megállapíthatjuk, hogy van egy új bozonunk, mert mindkét kísérlet külön-külön is a felfedezési küszöböt meghaladóan látja. Ma már azt is kijelenthetjük, hogy ez az új részecske valóban Higgs-bozon, és tulajdonságai nagyon közeliek a Standard Modell jósolta Higgs-bozonéhoz. Sikerült ugyanis meghatároznunk az

2. ábra. CMS-esemény a Higgs-részecskénél várthoz hasonló bomlással. Balra: a bozon két nagy energiájú fotonra bomlik, amelyet az eseményábrán zöld téglalapok jelölnek. Jobbra: a bozon két Z bozonra bomlik, az egyik Z elektronpárra (piros téglalapok az elektromágneses kaloriméterben), a másik pedig a müonkamrákon átrepülő müonpárra





3. ábra. François Englert és Peter W. Higgs a CERN-ben, 2013. július 4-én



4. ábra. 2013. október 8. – ünnepel a CERN. Rolf-Dieter Heuer, a CERN főigazgatója bejelenti a Nobel-díjat az ATLAS és CMS együttműködések irodaépületének aulájában

új részecske perdületét és paritását (0^+), valamint keletkezési és bomlási valószínűségeit, és valamennyi eredmény hibahatáron belül egyezik a Standard Modellrel végzett számításokéval. A statisztika érdekes játéka, hogy amíg az ATLAS a Standard Modell jóslatánál valamivel (de még a kétszeres hibahatáron belül) több eseményt észlelt, a CMS mintegy ugyanannyival kevesebbet. Ez némileg el is szomorított bennünket. A Standard Modell ugyanis – a kísérletekkel való kiváló egyezés ellenére – számos elméleti problémától szenved, amelyek megoldásához a Standard Modellnél túl új fizikára van szükség, és reménykedtünk benne, hogy a Higgs-bozon környékén felfedezzük annak jeleit.

A 2013. évi fizikai Nobel-díjat tehát François Englert és Peter W. Higgs kapta, a hi-

vatalos indoklás szerint „azon mechanizmus elméleti felfedezéséért, amely hozzájárul ahhoz, hogy megértsük a szubatomi részecskék tömegének eredetét, és amelyet mostanában megerősített a megjósolt alapvető részecske felfedezésével a CERN Nagy Hadronütköztetőjénél az ATLAS és CMS kísérlet”. Nekünk, kísérletezőknek, az indoklás igen jólesett, hiszen a két kísérlet 6000 résztvevőjének úgysem lehetett volna közülünk hármat kiválasztani, aki a kísérletet dominálta volna. A 3. ábrán Englert és Higgs látható 2013. július 4-én, a felfedezés bejelentésének napján, a 4. ábrán pedig Rolf-Dieter Heuer, a CERN főigazgatója bejelenti a Nobel-díjat a CERN-ben.

A visszaemlékezések szerint Peter Higgs

skót fizikus volt az első, aki megírta és folyóiratnak beküldte a spontán szimmetriasértésről szóló publikációját, de akkor azt a folyóirat nem fogadta el. Tovább dolgozott rajta, és 1964. szeptember 15-én, két héttel Robert Brout és François Englert belga fizikusok cikke beküldése után küldte be. G. S. Guralnik, C. R. Hagen és T. W. B. Kibble angol fizikusok csak 1964. november 16-án küldték be a cikküket ugyanoda, tehát a Nobel-díjat két hónappal lekésték, Brout pedig, sajnos, nem érte meg. A történetek fényében tehát méltánytalan a „Higgs-tér” és „Higgs-mechanizmus” elnevezés, mostanában igyekszünk a „BEH-mechanizmus” kifejezést használni, a skálár bozont viszont valóban Peter Higgs vezette be, tehát a „Higgs-bozon” név rendben van.

Fizika, gyógyítás, cselgáncs

2013 decemberében rendezték meg Budapesten a már hagyományos Zimányi Nehézion-fizikai Téli Iskolát, melynek legrangosabb vendége Nagamiya Shoji volt (japán szokás szerint Nagamiya a vezetékneve). Nagamiya professzor korábban, a New York-i Columbia Egyetem tanszékvezetőjeként megalapította a nagy sikerű PHENIX kísérletet, melynek magyar csoportja most ünnepelte fennállásának 10. évfordulóját. A kísérletnek az a fő célja, hogy előállítsa a Nagy Bumm, az ősrobbanás utáni néhány mikromásodpercben keletkező, világegyetemet kitöltő ősanyagot, a kvarklevest és meghatározza a tulajdonságait. Ehhez a nagyenergiás nehézion-ütközésekben, a kis bummokban keletkezett részecskék tulajdonságait kell igen alaposan megvizsgálni.

Nagamiya professzor a fizika tudományát képviseli a Japán Tudományos Tanácsban. 2012 közepéig ő irányította (elsőként) a J-PARC japán protongyorsító komplexumot, és ő kezdeményezte Japánban a részecske- és nehézion-gyorsítók orvosi célú alkalmazását. Nagamiya professzor most beszámolt a kiemelkedő fontosságú, HIMAC nevű, rák gyógyítására használt gyorsítóról is: már több mint 7000 beteget kezeltek nehézion-terápiával. A tüdőrákot az áttét előtti, első és második fázisban közel 99%-os hatékonysággal tudják gyógyítani.

Nagamiya Shoji nem most járt először Magyarországon. Külön érdekesség, hogy anyai nagyapja, Sasaki Kichisaburo volt a magyar dzsúdó



Nagamiya Shoji és Major Tibor, az Országos Onkológiai Intézet Sugárterápiás Osztályának orvos-fizikai részlegvezetője

első szakképzett oktatója. 1907-ben adta ki *Dzudo, a japán dzsju-dzsicu tökéletesített módszere* című könyvét, amely a Magyar Elektronikus Könyvtárból letölthető. 2009-ben Nagamiya professzor magánkiadásban újra megjelentette a kötetet. Kutatásai nyomán kiderült, hogy az 1907-ben kiadott munka volt az első, nem japán nyelvű dzsúdó szakkönyv.





Dankó Tamás

■ Department of Molecular and Cellular Physiology, Stanford University School of Medicine | tdanko@stanford.edu

A 2013-as orvosi Nobel-díj

A 2013-as orvosi/élettani Nobel-díjat *Randy Schekman*, *James Rothman* és *Thomas Südhof* kapta megosztva (**1. ábra**). Három olyan kutató, akik munkájukkal elévülhetetlen érdemeket szereztek a sejten belüli transzportfolyamatok szabályozásának jobb megértésében. Minden sejt egy külön gyár, amely molekulákat állít elő, és rendeltetési helyükre szállítja azokat. A szállítás kis buborékszerű csomagokban, azaz vezikulákban történik a sejt egyes membránnal határolt belső részei (organellumai), valamint a sejt külső membránja között. A csomagok tartalma a sejtmembránnal történő fúzió után kerül a sejten kívüli térbe (szekréció). Így készül és szabadul fel a sejtekből például az inzulin, valamint az idegsejtek közötti jelátvitelt biztosító, neurotranszmitternek nevezett anyagok csoportja is. Akárcsak egy forgalmas kikötőben, a szabályozórendszereknek igencsak pontosan kell működniük ahhoz, hogy a rakomány a megfelelő időben jusson el a kívánt helyre. A sejt is hasonló kihívások elé néz, mikor az általa termelt hormonokat, enzimeket és neurotranszmittereket a sejt egyes organellumai, valamint a külső membrán között szállítja. Minden a pontos időzítésen és a célpont precíz meghatározásán múlik. A három Nobel-díjas kutató éppen azokat a molekuláris mechanizmusokat tárta fel, melyek révén a szállítmány a sejten belül a megfelelő időben jut el a megfelelő helyre.

Randy Schekmant olyannyira lenyűgözte az a rendszer, amely szerint a sejt megszervezi saját transzportfolyamatait, hogy

a 70-es években el is kezdett foglalkozni ennek genetikai alapjaival, élesztőmodellt használva. E vizsgálatok során feltárta bizonyos élesztősejtek transzportjának hibás működését, amely leginkább egy rosszul szervezett tömegközlekedési rendszerre emlékeztetett: vezikulák torlódtak fel a sejt egyes részeiben. Felismerte, hogy a vezikulák felhalmozódásának genetikai okai vannak, majd azonosítani kezdte a mutáns géneket. Munkája során a géneknek három olyan osztályát különítette el, melyek meghatározó szerepet játszanak a vezikuláris transzportfolyamatok szabályozásában.

Randy W. Schekman 1948-ban született St Paulban (Minnesota, USA). Tanulmányait előbb a UCLA-n (University of California, Los Angeles), majd a szintén kaliforniai Stanford Egyetemen végezte, ahol 1974-ben PhD-fokozatot szerzett a korábbi Nobel-díjas (1959) Arthur Kornberg irányítása mellett azon a tanszéken, melyhez néhány évvel később Rothman is csatlakozott. Pályafutását 1976-tól a University of California, Berkeley-n folytatta, ahol jelenleg is a Molekuláris és Sejtbiológiai Tanszék professzora. Schekman tagja a Howard Hughes Medical Institute-nak is.

James E. Rothman 1950-ben született Haverhillben (Massachusetts, USA). PhD-fokozatát a Harvard Egyetem orvosi karán szerezte meg 1976-ban. Ezt követően két évet Massachusettsben (Massachusetts Institute of Technology, MIT) dolgozott, majd 1978-tól a Stanford Egyetemen folytatta, itt kezdte el vezikuláris transzporttal kapcsolatos munkáját. Rothman ké-

sőbb dolgozott a Princetoni Egyetemen, a Memorial Sloan-Kettering Rákkutató Intézetben és a Columbia Egyetemen is. 2008 óta a Yale Egyetem (New Haven, Connecticut, USA) Sejtbiológia Tanszékének professzora és igazgatója is egyben.

Rothman a 80-as és 90-es évekbeli, emlős sejteken végzett vizsgálatait során rájött, hogy a vezikulák egy fehérjekomplex (*SNARE fehérjék*) segítségével horgonyzódnak ki és fuzionálnak a célmembránnal. A folyamat leginkább a cipzár két részének összeillesztéséhez hasonlítható. A komplexet alkotó sok különböző fehérje csak egy bizonyos kombinációban képes kötődni a célhelyhez, így biztosítva, hogy a vezikulák tartalma valóban a megfelelő helyre jusson el. Felismerte azt is, hogy a vezikulák hasonló módon kötődnek ki mind a sejten belüli organellumokhoz, mind magát a sejtet határoló membránokhoz. Később kiderült, hogy a Schekman által élesztőben azonosított gének közül néhány megfelel a Rothman által emlős sejten találtakal. Ez a tény a sejten belüli transzportfolyamatok közös evolúciós eredetére utal. Együttes munkájukkal sikeresen térképezték fel a sejtek szállító rendszerének számos kritikus alkotóelemét.

Thomas Südhofot egy kevésbé általános, de nem kevésbé fontos jelenség érdekelte igazán: az idegsejtek egymás közötti kommunikációja az agyban. Az idegsejtek közötti kommunikációs egységekből, más néven szinapszisokból jelátvivő molekulák, azaz neurotranszmitterek szabadulnak fel olyan vezikulákból, melyek a Rothman és

1. ábra. Randy W. Schekman, James E. Rothman és Thomas C. Südhof (balról jobbra)

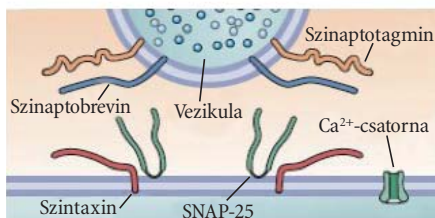




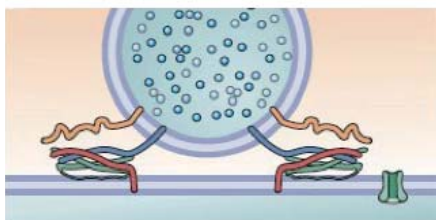
Schekman által korábban leírt mechanizmussal fuzionálnak az idegsejtek külső membránjával. A vezikulákból azonban csak akkor szabadulhatnak fel ezek az anyagok, ha a sejt előtte elektromos jelzést, ún. akciós potenciált küldött a szomszédos sejt irányában elhelyezkedő szinapszisba. Mégis hogyan lehetséges a neurotranszmitterek elválasztásának ilyen precíz szabályozása? A kalciumionok (Ca^{2+}) szerepe már a 90-es években ismert volt, így Südhof azt a kalciumra érzékeny fehérjét kereste a sejteken belül, mely az összeköttetést je-

2. ábra. A Ca^{2+} -triggerelt vezikulafúzió modellje. A vezikuláris SNARE fehérje (szinaptobrevin) komplexet formál a sejtmembrán SNARE fehérjéivel (szintaxin, SNAP-25). A vezikuláris Ca^{2+} -kötő fehérje (szinaptotagmin) központi szerepet játszik a membránok fúziójának katalizálásában, amely végül a vezikulák tartalmának felszabadulásához vezet

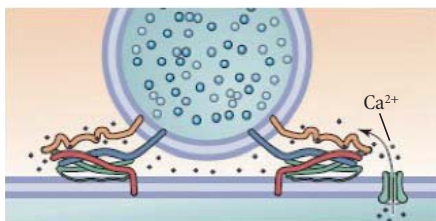
(1) Vezikula dokkolása



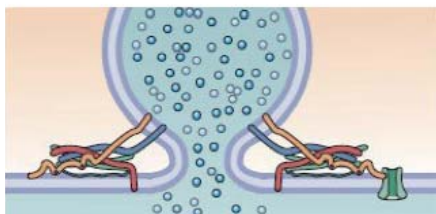
(2) SNARE komplexek formálódnak, így a membránok közelebb kerülnek egymáshoz



(3) A beáramló kalcium a szinaptotagminhoz kötődik



(4) A kalciumot kötött szinaptotagmin katalizálja a membránok fúzióját



lenti az elektromos szignál és a neurotranszmitterek felszabadulása között. Így sikerült azonosítani a *szinaptotagmin*nak nevezett fehérjét. Ezek a Ca^{2+} -szenzor fehérjék az akciós potenciált követő Ca^{2+} -beáramlás révén asszociálnak a vezikulák SNARE fehérjekomplexével, arra utasítva a szinapszisokat, hogy azonnal kössék a vezikulákat az idegsejt külső membránjához. A cipzár kinyílik, és a jelátvivő anyagok felszabadulnak (**2. ábra**). Südhof felfedezése végre megfelelő magyarázatot szolgáltatott a parancsra történő, gyors idegi jelátvitel precíz szabályozásának mechanizmusára.

Thomas C. Südhof 1955-ben született Göttingenben (Németország). Tanulmányait a göttingeni Georg-August Egyetemen végezte, ahol 1982-ben előbb orvosi diplomát, majd, még ugyanabban az évben, doktorátusi fokozatot is szerzett neurokémiaiából. 1983-tól munkáját a Texasi Egyetem Southwestern Medical Centerében (Dallas, Texas, USA) folytatta Michael Brown és Joseph Goldstein irányítása mellett. (Utóbbiak megosztva kaptak orvosi Nobel-díjat 1985-ben.) Südhof 1991-től a Howard Hughes Medical Institute kutatója lett, majd a Stanford Egyetem Molekuláris és Sejtélettani Tanszékének professzorává nevezték ki 2008-ban.

A három Nobel-díjas felfedezései tehát egy, a sejtben belül az óramű pontosságával működő, folyamatos ellenőrzés alatt álló transzportrendszer létezésére hívták fel a figyelmet, mely hasonló elveken alapul még annyira különböző organizmusokban is, mint amilyen az élesztő és az ember (**1. táblázat**). Mivel a sejtben nagyon sok olyan élettani folyamat játszódik le egyszerre, mely vezikulák szállítását és fúzióját igényli, nagyon fontos a rendszer precíz irányítása, legyen szó az agyban történő jelátvitelről vagy hormonok és citokinek felszabadulásáról. A vezikuláris transzport meghibásodása számos betegség, így például cukorbetegség, vagy különböző idegi és immunológiai rendellenességek ki-

Fontosabb publikációk

Novick P, Schekman R: Secretion and cell-surface growth are blocked in a temperature-sensitive mutant of *Saccharomyces cerevisiae*. *Proc Natl Acad Sci USA* 1979; 76:1858–1862.

Balch WE, Dunphy WG, Braell WA, Rothman JE: Reconstitution of the transport of protein between successive compartments of the Golgi measured by the coupled incorporation of N-acetylglucosamine. *Cell* 1984; 39:405–416.

Kaiser CA, Schekman R: Distinct sets of SEC genes govern transport vesicle formation and fusion early in the secretory pathway. *Cell* 1990; 61:723–733.

Perin MS, Fried VA, Mignery GA, Jahn R, Südhof TC: Phospholipid binding by a synaptic vesicle protein homologous to the regulatory region of protein kinase C. *Nature* 1990; 345:260–263.

Sollner T, Whiteheart W, Brunner M, Erdjument-Bromage H, Geromanos S, Tempst P, Rothman JE: SNAP receptor implicated in vesicle targeting and fusion. *Nature* 1993; 362:318–324.

Hata Y, Slaughter CA, Südhof TC: Synaptic vesicle fusion complex contains unc-18 homologue bound to syntaxin. *Nature* 1993; 366:347–351.

1. táblázat. A három kutató meghatározó publikációi a Nobel-díj háttérében

alakulásához vezethet. A hihetetlenül precíz szervezethez nélkül ugyanis káosz uralkodik a sejteken belül.

Mi az, ami közös ebben a három briliáns, friss Nobel-díjas kutatóban? Alacsony, magas, vékony, kevésbé vékony – semmi, ami kívülről azonnal feltűnhetne a gyánutlan szemlélőnek. Az viszont biztos, hogy mindhárman szenvedélyesen elkötelezettek a tudomány iránt, nagyon jó és lelkes előadók, mindemellett azonban elbűvölő a személyiségük és kiváló humorérzékkel is rendelkeznek.



NOBEL LAUREATES 2013

Nobelprize.org

Együtt a díjazottak. Akikről nem írtunk: Alice Munro irodalmi és Eugene F. Fama, Robert J. Shiller, Lars Peter Hansen közgazdasági Nobel-díjasok



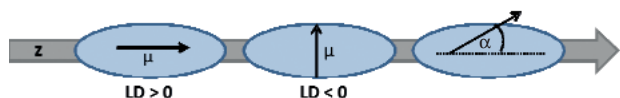
Németh Eszter

■ Szegedi Tudományegyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék | nemethe@chem.u-szeged.hu

Áramlásos lineáris dikroizmus spektroszkópia alkalmazása nukleázok tanulmányozására*

A DNS nagy energiájú foszfátészter-kötéseinek hidrolitikus úton lejátszódó felhasadását a nukleáz enzimek katalizálják. A reakció követhető például agaróz gélelektroforézissel, vagy megfelelő jelölőanyag hozzáadása esetén fluorimetriával. Egy kevésbé ismert technika, az áramlásos lineáris dikroizmus spektroszkópia előnye az előbbi módszerekhez képest, hogy külső beavatkozás nélkül teszi lehetővé a rendszer vizsgálatát, az enzimek vagy ionok, a molekulák és a DNS kölcsönhatásainak tanulmányozását [1–7].

Lineáris dikroizmusnak nevezzük azt a jelenséget, amikor egy minta különböző mértékben nyeli el a rábocsátott, egymásra merőleges síkban polárizott fénykomponenseket. Ennek feltétele, hogy az átmeneti dipólusmomentum-vektorok anizotróp módon rendeződjenek. Folyadékfázisú mintáknál ez a feltétel nem teljesül, azonban mechanikai erők segítségével a molekulákat lehet orientálni. A detektált jel függ attól, hogy az orientáció milyen hatékony, valamint hogy az orientált molekulában található átmeneti dipólusmomentumok hogyan helyezkednek el az orientációs tengelyhez képest (a köztük bezárt szög α , **1. ábra**).



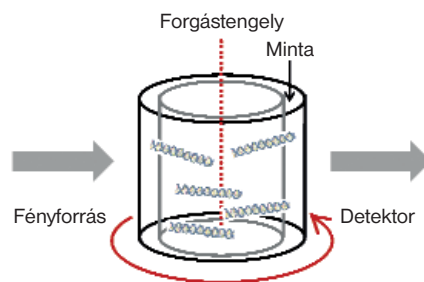
1. ábra. Az orientációs tengely (z) mentén elhelyezkedő molekulákban (kék ellipszisek) található különböző irányú átmeneti dipólusmomentumok LD-effektusai

Legegyszerűbb esetben (egytengelyű mintákra vonatkozóan) a következő (1) kifejezéssel írható le a mért jel [8]:

$$LD^r = \frac{LD}{A_{iso}} = \frac{A_{||} - A_{\perp}}{A_{iso}} = \frac{3}{2} S(3\cos^2\alpha - 1) \quad (1)$$

ahol LD^r a koncentrációfüggetlen redukált lineáris dikroizmus, LD a mért lineáris dikroizmus, A_{iso} az izotróp minta abszorban- ciája és $A_{||}$ ill. $A_{\perp}$ a minta orientációs tengelyére párhuzamos, ill. arra merőleges irányban polárizott fényt elnyelése. S az orientá- ciós paraméter, amelynek értéke 0 izotróp minta esetén és 1 tö- kéletesen rendezett mintában.

A molekulák elrendezésére leggyakrabban a nyújtott polimer filmeket vagy áramló folyadékokat alkalmaznak. Ez utóbbi „fo- nalszerű”, például szálás műpolimerek, fehérjék vagy DNS-mole- kulák orientálására alkalmas azok oldataiban. A biológiai min- táknál fontos szempont a kis mintatérfogat. Ez az ún. mikro- Couette-cella alkalmazásával biztosítható [9, 10], mely két egy- másba illeszkedő kvarchengerből áll. A minta az ezek közötti tér- be kerül. Az áramlást az egyik vagy mindkét henger forgatásával érik el (**2. ábra**).



2. ábra. A Couette-cella vázlatja. A minta oldata (40 μ l) a két kvarchenger közötti térben található. A molekulák orientálását a henger(ek) forgatása révén fellépő súrlódási erők idézik elő

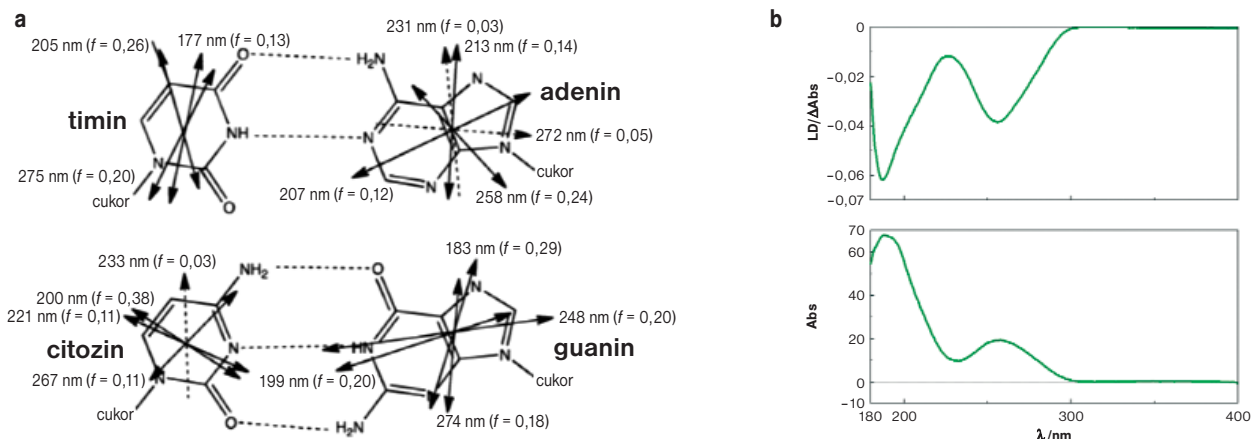
A lineáris dikroizmus spektrumot általában egy hagyományos CD-spektrométer átalakításával nyert műszerrel mérik. Ebben a mintatartó helyén egy Couette-cellát rögzítenek, és a mintán cir- kuláris helyett síkban polárizott fényt bocsátanak át. A lineáris dikroizmus spektroszkópiát Alison Rodger és Bengt Nordén könyve mutatja be részletesen [8].

A DNS LD-spektruma

A DNS UV-abszorpciós spektrumához hasonlóan az LD-spektru- ma is a bázisok átmeneti dipólusmomentumainak gerjesztéséből ered (**3.a ábra**). Mivel ezek a gyűrű síkjában, a molekula hossz- tengelyére, így az orientációs tengelyre is közel merőlegesen he- lyezkednek el, a DNS LD-spektruma negatív, alakja az abszorpc- iós spektrum tükörképéhez hasonlít (**3.b ábra**).

A DNS lineáris dikroizmus vizsgálatához Couette-cellában leg- alább ~1000 bázispár hosszúságú molekula szükséges [11]. Az orientálhatóságot a lánc hosszán kívül a bázisösszetétel és flexi-

*A dolgozat az MKE doktoranduszhallgatóknak kiírt pályázatára készült.



3. ábra. A DNS bázisainak átmeneti dipólusmomentumai [12], és a borjú thymus DNS LD-, valamint UV-abszorpciós spektruma

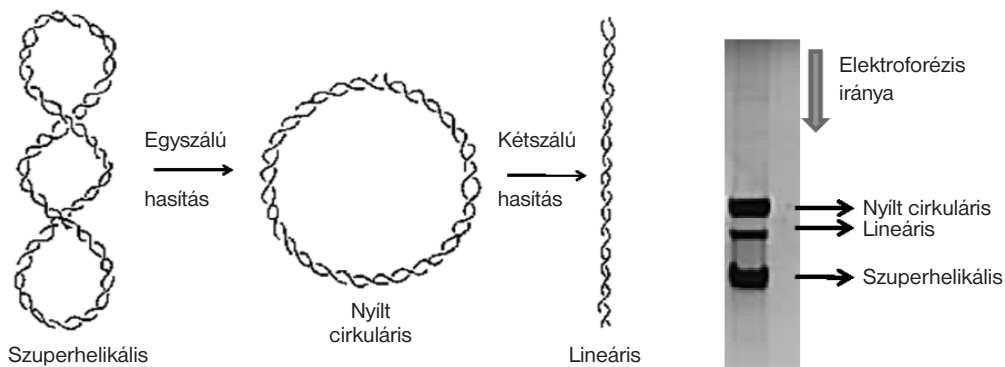
bilitás is befolyásolja, ez utóbbi pedig érzékeny többek között a hőmérsékletre, az ionerősségre és a ligandumok kötődésére.

Restriktációs endonukleázok által katalizált DNS-hidrolízis követése LD-spektroszkópiával

A DNS-konformáció LD-spektrumot befolyásoló hatását jól szemlélteti a plazmid DNS-molekulák különböző formáinak spektruma. Amennyiben a szuperhelikális formán (4. ábra) egyszálú hasítás történik, a konformációs feszültségek megszűnnek, és ki-

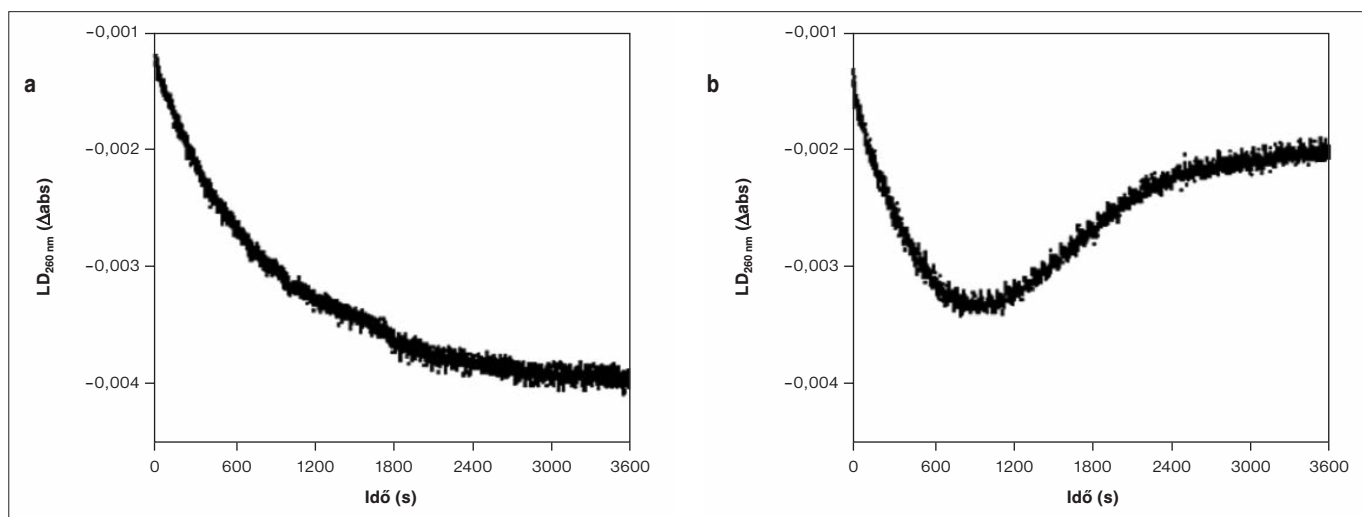
alakul a nyílt cirkuláris forma. A kétszálú hasítás eredményeként pedig lineáris DNS képződik. Az egyes formák viselkedése az áramlások cellában eltér, így átalakulásuk az agaróz gélelektroforézis mellett LD-spektroszkópiával is követhető.

Érdekes, hogy a különböző plazmidformák 260 nm-en mért LD-intenzitásának aránya a pUC19 nevű DNS-re vonatkozóan szuperhelikális : lineáris : nyílt cirkuláris = 1,00: 1,75 : 2,00 [3], tehát a nyílt cirkuláris forma rendelkezik a legnagyobb LD-intenzitással annak ellenére, hogy tökéletes orientáció esetén hossza mintegy fele a lineáris DNS-ének. Az LD-intenzitást azonban a



4. ábra. A plazmid DNS különböző formái és ezek megjelenése az agarózzgelen (pUC19 plazmid 1%-os agarózzgelen)

5. ábra. Restriktációs nukleázok által katalizált DNS-hidrolízis követése a 260 nm-en mért lineáris dikroizmus segítségével. Az EcoRI (A) egy, az EagI (B) két helyen hasítja el a vizsgált plazmidot [6]





DNS flexibilitása is befolyásolja, ami a lineáris DNS esetén jóval nagyobb, nehezítve a minta orientálhatóságát.

Alison Rodger és munkatársai plazmid DNS katalitikus hidrolízisét követték lineáris dikroizmus mérésével [6]. Az EcoRI restrikciós enzim a tanulmányozott szuperhelikális DNS-szálon egyetlen kétszálú hasítást végez. A reakciót LD-spektroszkópiával követve a megjelenő lineáris DNS-molekulák számának megfelelően az intenzitás növekszik, majd telítést ér el (5.a ábra). A jelintenzitás növekedését összehasonlítva a lineáris DNS koncentrációjának függvényében felvett kalibrációs görbével, meghatározták az enzim Michaelis–Menten-paramétereit ($K_M = 4,2$ nM), ami jó egyezést mutatott más irodalmi adatokkal.

Az olyan enzimek, amelyek két helyen hasítják a plazmid DNS-t (pl. EagI, 5.b ábra), más LD-profilt eredményeztek a reakció során. A kezdeti intenzitásnövekedés után az LD_{260nm} jel abszolút értéke maximumot ért el, majd csökkenni kezdett, és beállt egy értékre. Ez annak köszönhető, hogy a második hasítás után képződött rövidebb DNS-szakaszok orientációs képessége gyengébb, mint a teljes lineáris plazmidé. A kísérletet különböző enzimekkel elvégezve más-más eredményt kaptak. Mivel több nehézség is felmerült, matematikai modellt még nem készítettek a több hasítási hellyel rendelkező enzimek reakciójára vonatkozóan. Az LD kinetikai görbe alakja attól is függ, hogy a két hasítási helyen egymáshoz képest milyen sebességgel megy végbe a reakció, hogy az enzim milyen erősen kötődik az egyes szekvenciákhoz, milyen azok térbeli hozzáférhetősége és mindez hogyan változik az első hasítást követően. Azonban a különböző görbék összehasonlítása révén így is értékes információkhoz juthatunk.

A restrikciós endonukleázok leggyakrabban dimer formában fordulnak elő, és kétszálú hasítást végeznek. A nem specifikus nukleázok viszont monomerként egyszálú hasítást is végezhetnek. Ebben az esetben a lineáris forma csak akkor alakul ki a nyílt cirkulárisból, ha véletlenszerűen a másik szálát is elhasítja az enzim, egy korábbi hasítási hellyel szemben. Az ilyen összetett reakció kinetikájáról más módszerrel nehezen meghatározható kvalitatív és kvantitatív információ nyerhető a lineáris dikroizmus spektroszkópia segítségével [3].

A nukleáz-DNS rendszer LD-spektrumát befolyásoló tényezők

A nukleázok többnyire globuláris fehérjék, az áramlósos cellában nem rendeződnek, ezért az LD-spektrumhoz nem járulnak hozzá. Fontos azonban megjegyezni, hogy a fehérje kötődése a hid-

rolitikus reakció hiányában is befolyásolja a DNS spektrumát. Ez az effektus függ attól, hogy a fehérje milyen alakú, specifikus szekvenciához kötődik-e, illetve a kis vagy a nagy árokban kötődik. A 6. ábra egy inaktivált metallonukleáz DNS-kötésének LD-spektrumokra gyakorolt hatását mutatja.

A fehérje kötődése befolyásolhatja a spektrumot a DNS-hidrolízis vizsgálata során is. A fentiek figyelembevételével azonban az LD-spektroszkópia alkalmas az egyszálú vagy kétszálú DNS-hasítás kinetikai vizsgálatára anélkül, hogy valamelyik molekulát izotópos vagy más jelöléssel kellene ellátni. Emellett értékes információkat nyerhetünk a katalízis mechanizmusáról és a nukleáz DNS-kötő képességéről.

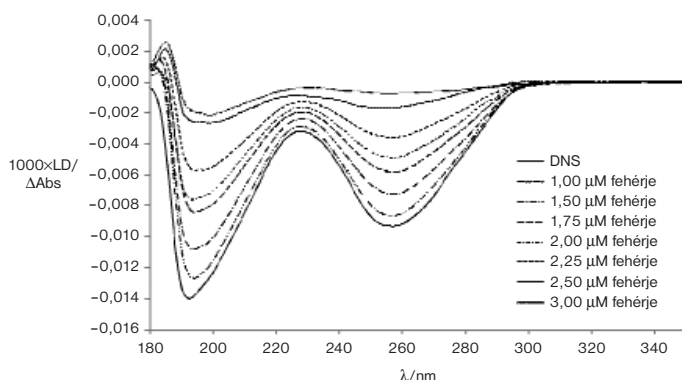


KÖSZÖNETNYILVÁNTÁS. A kutatás az Európai Unió és Magyarország támogatásával a TÁMOP 4.2.4.A/2-11-1-2012-0001 azonosító számú „Nemzeti Kiválóság Program – Hazai hallgatói, illetve kutatói személyi támogatást biztosító rendszer kidolgozása és működtetése konvergencia program” című kiemelt projekt keretei között valósult meg.

IRODALOM

- [1] Matsuoka Y., Nielsen P.E., Nordén B.J.E., On the structure of active chromatin – A flow linear dichroism study of chromatin fractionated by nuclease digestion, FEBS (1984) 169, 2, 309–312.
- [2] Kubista M., Takahashi M., Nordén B., Stoichiometry, Base Orientation, and Nuclease Accessibility of RecA-DNA Complexes Seen by Polarized Light in Flow-oriented Solution, J. Biol. Chem. (1990) 265, 31, 18891–18897.
- [3] Golobov G.V., Chernova E. A., Schourov D. V., Smirnov I. V., Kudelina I. A., Gabibov A. G., Cleavage of supercoiled plasmid DNA by autoantibody Fab fragment: Application of the flow linear dichroism technique, Procl. Nat. Acad. Sci. (1995) 92, 254–257.
- [4] Kim H.-K., Tuite E., Nordén B., Ninham B.W., Co-ion dependence of DNA nuclease activity suggests hydrophobic cavitation as a potential source of activation energy, Eur. Phys. J. E 4, (2001) 411–417.
- [5] Childs L.J., Malina J., Rolfsnes B.E., Pascu M., Prieto M.J., Broome M.J., Rodger P.M., Sletten E., Moreno V., Rodger A., Hannon M. J., A DNA-Binding Copper(I) Metallo-supramolecular Cylinder that Acts as an Artificial Nuclease, Chem. Eur. J. (2006) 12, 4919–4927.
- [6] Hicks M.R., Rodger A., Thomas C.M., Batt S.M., Dafforn T.R., Restriction Enzyme Kinetics Monitored by UV Linear Dichroism, Biochemistry (2006) 45, 8912–8917.
- [7] Wang W., Lee G.J., Jang K.J., Cho T. S., Kim S.K., Real-time detection of Fe-EDTA/H2O2-induced DNA cleavage by linear dichroism, Nucleic Acids Research (2008) 36, 14, e85.
- [8] Rodger, A., and Nordén, B., Circular Dichroism and Linear, Dischroism, Oxford University Press, Oxford, 1997.
- [9] Marrington R., Dafforn R. T., Halsall J.D., Rodger A., Micro-Volume Couette Flow Sample Orientation for Absorbance and Fluorescence Linear Dichroism, Biophysical Journal (2006) 87, 3, 2002–2012.
- [10] Wada, A., Kozawa S., Instrument for the studies of differential flow dichroism of polymer solutions, Journal of Polymer Science Part A. (1964) 2:853–864.
- [11] Rodger A., Marrington R., Geeves M.A., Hicks M., de Alwis L., Halsall D.J., Dafforn T.R., Looking at long molecules in solution: what happens when they are subjected to Couette flow? Phys. Chem. Chem. Phys. (2006) 8, 3161–3171.
- [12] Rittman M., Hoffmann S. V., Gilroy E., Hicks M.R., Finkstadt B., Rodger A., Probing the structure of long DNA molecules in solution using synchrotron radiation linear dichroism, Phys. Chem. Chem. Phys. (2012) 14, 353–366.

6. ábra. Egy inaktivált metallonukleáz (mutáns colicin E7) DNS-kötésének hatása a ctDNS spektrumára, különböző fehérje-DNS aránynál. A DNS-koncentráció 150 μ M bázispárokra számítva



ÖSSZEFOGLALÁS

Németh Eszter: Áramlósos lineáris dikroizmus spektroszkópia alkalmazása nukleázok tanulmányozására.

Az áramlósos lineáris dikroizmus spektroszkópia (flow LD) segítségével külső beavatkozás nélkül követhetők a DNS-molekulákat érintő változások, például a nukleázok által katalizált hidrolitikus hasadás. Az LD-spektroszkópia a CD- (cirkuláris dikroizmus) spektroszkópiával rokon technika. Itt azonban a mintára két, egymásra merőleges síkban polarizált fénykomponenst bocsátanak, és ezek elnyelésének különbségét mérik, aminek előfeltétele a molekulák anizotróp rendezettsége. Az áramlósos cellában fonalaszerű molekulák orientálhatóak jól, ezért a technikát gyakran alkalmazzák DNS-oldatok vizsgálatára. A hidrolízis hatására a lánchossz csökken, így az orientációs képesség romlik, és az LD-intenzitás csökken. Ezt használja ki az áramlósos LD-spektroszkópia a reakció kinetikájának tanulmányozására.



Körtvélyessy Gyula

■ Email: gyula@kortvelyessy.hu

Biztonsági adatlapok. Tizenkettedik rész

Veszélyességi besorolások és címkeelemek

Veszélyességi besorolás

Az adatlap két szakaszában találhatóak veszélyességi besorolások: a 2.1 alpontban magára arra a veszélyes termékre (anyagra vagy keverékre), melynek biztonságos felhasználását az adatlap megadja. Amennyiben pedig a termékünk keverék, akkor még a 3.2 alpontban kell megadnunk – jelenleg a 44/2000 rendeletben meghatározott anyagkomponensekre – az osztályozást.

Már a jogi alapokkal foglalkozó közleményemben ismertettem, hogy ha anyagra készítünk adatlapot (vagy ilyet kapunk), akkor a 2.1 alpontban már a CLP szerinti osztályozást is kell szerepeltetnünk, a 44/2000 rendelet szerinti – régi – osztályba sorolás mellett. Amennyiben keverő vállalkozás vagyunk, akkor a keverékünket 2015 júniusáig nem kötelező még a CLP szerint osztályoznunk. Azonban ha megkaptuk a beszállítónktól valamely bekevert komponensünkre az új, CLP szerinti osztályozást, akkor ezt a keverékünk adatlapjának legközelebbi átdolgozásánál be kell vennünk az adatlapunk 3.2 alpontjába. Nincs olyan kötelezettség, hogy ezt nekünk be kellene gyűjtenünk, vagy kitalálnunk.

Ha a régi besorolásról látjuk, hogy az osztályozás nem változott (hiszen csak azt tudjuk összevetni az adott komponens eddigi osztályba sorolásával), akkor csupán a CLP osztályozás beérkezése miatt nem kell a keverékünk adatlapját aktualizálnunk (és nem kell minden vevőnknek, akinek az elmúlt 12 hónapban szállítottuk a keverékünket, elküldenünk az új, aktualizált adatlapot). De ha változott az osztályozás, akkor haladéktalanul aktualizálnunk kell a keverékünk adatlapját és mindenkinek el kell küldenünk.

Anyagok osztályba sorolásának forrásai

Amennyiben a felhasználói lánc elején álló, első adatlapkészítő már regisztrált, csak egyetlen – de nagyon fontos – feladata van: az elkészült biztonsági adatlapban az osztályozás (és persze minden más állítás is) egyezzen meg a regisztrációban megadottal és a címkén lévővel. Ha azonban az első adatlap elkészítője még nem regisztrált (vagy lehet, hogy nem is fog a kis volumenű gyártása vagy importja miatt), akkor köteles minden lehetséges forrást felkutatni a forgalomba hozatal előtt az anyagának a helyes osztályozására (CLP rendelet előírása). Ha az anyag szerepel a CLP VI. mellékletében, akkor az ott található, ún. harmonizált osztályba sorolás kötelező számára is. De csak az adott végpontok esetén, és ezekre is csak akkor, ha nincs csillag jel mellette. Ekkor ugyanis ez az osztályozás ún. minimális osztályozás, és ha a cégnek van olyan információja, hogy annál szigorúbb osztályozás lenne a helyes, akkor – e tény megjelölésével – azt alkalmazhatja.

Azért fogalmaztam úgy, hogy csak az adott végpontokra kötelező a harmonizált osztályozás, mert az összes többi végpontra ugyanúgy kötelező a forgalomba hozónak megvizsgálnia, hogy nem kell-e azokra veszélyesként osztályozni az anyagát, mint egy olyan anyagra, ami nem szerepel a harmonizált listán. Gyakran előfordul ugyanis, hogy a har-

monizált osztályozás nem foglalkozik például egy benzinfrakció tűzveszélyességével, vagy a környezeti veszélyességgel. Mindezekért mindig célszerű megnézni és értékelni a regisztrációban talált osztályozást akkor is, ha van és akkor is, ha nincs az anyagra harmonizált osztályozás.

Ha egyik sem elérhető, akkor az első adatlap készítője „szabadon”, de megalapozottan dönthet. Az ellenőrző hatóság felé igazolnia kell tudnia a döntését, és a megfelelő dokumentumokat 10 évig meg kell őriznie. Célszerű ilyenkor megnézni az Ügynökség honlapján – úgyis ott találja ugyanazon keresőben az előző adatokat – a CLP bejelentéseket is: bár ott egy-egy anyagra sok eltérő osztályozás található, az alapján lehet választani köztük, hogy melyiket hány cég alkalmazta, mert ez is látszik. Nagy valószínűséggel vizsgálati adatok nincsenek az anyagára, tehát inkább tapasztalatok és analógiák alapján kell döntenie. Érzékeny egyensúly ez, hiszen ha túl szigorúra osztályoz, senki se fogja megvenni tőle például a rákkeltő termékét, ha túl enyhére, akkor jogi felelősségre vonás érheti, ha a felhasználói láncában bárkinek baja esik a termékétől.

Keverékek osztályba sorolása

A keverő cégek ma még általában a régi rendszer szerint osztályozzák a forgalomba hozott keverékeiket. Fontos tudni, hogy ha már átváltozik a keverék esetén is az CLP rendszerre, akkor is meg kell, hogy adja az adatlap 2.1 alpontjában a régi rendszer szerinti osztályba sorolást is. Számukra kulcskérdés, hogy három dolgot figyeljenek a beérkező – komponensekre vonatkozó – adatlapokban:

- Nem szigorodott-e valamelyik komponens osztályba sorolása (nyilvánvalóan csak a régi rendszer szerinti osztályozások vethetők csak egymással össze). Ez elég gyakori a regisztrációt követően. Ekkor ugyanis újra kell ellenőrizniük a keverékük osztályba sorolását.
- Van-e harmonizált osztályozású komponens és megfelel-e annak az osztályozása a VI. mellékletnek. A két elfogadható eltérési lehetőséget már fentebb tárgyaltam. Van egy harmadik is, főként finomítói termékekre. Ezeknél a VI. mellékletben ún. megjegyzések találhatóak, melyek szerint ha bizonyos szennyezések mennyisége limit alá esik (pl. benzoltartalom, butadiéntartalom, 0,1% alatt, de vannak mások is), akkor mégse kell rákkeltőnek osztályozni az adott anyagot. És ez nem mindegy, hiszen ha egy benzinfrakcióban csak 0,2% benzol van, akkor ettől az egész benzinfrakció rákkeltő lesz. Ha pedig a keverékemben csak 0,2% ez a benzinfrakció (szándékosan sarkítom a példát), de az a frakció rákkeltő az előbbieket szerint, ettől az egész keverékem rákkeltő lesz, pedig csak 0,0004% benzol van benne. A gond sajnos ott van, hogy nem igazán jelzik az adatlapok a 3.2 alpontban, hogy egy-egy komponens harmonizált osztályozású (pl. azzal, hogy megadják az index számát, mely a VI. mellékletben szereplő sorszáma). Célszerű ilyenkor nem a benzoltartalomról beszélni a 3.2-ben, hanem például azt mondani, hogy a P megjegyzés miatt nem rákkeltő az anyagkomponens.



Felhasználó és kereskedő osztályozási kötelezettsége/ osztályozás-ellenőrzési kötelezettsége

A CLP rendelet és az Ügynökség által készített kérdés-felelet anyag egyértelműen úgy rendelkezik, hogy az *anyag* átvétői, tehát akik csak használnak az anyagot, de azok is, akik továbbadják, például kereskedők, áttöltők számára nincs osztályozási kötelezettség. Ők átvehetik a beérkező osztályozást, de nem feladatuk, hogy – az első forgalomba hozótól eltérően – minden információt összegyűjtsenek, vagy hogy ellenőrizzék a beérkező anyag vagy keverék adatlapban az osztályozásokat.

Ezzel szemben a hazai előírások – szokott módon – zavarosak és elmentmondók. A kémiai biztonsági törvény szerint, 5. § (2):

„Az anyagok, illetve a keverékek osztályozását a REACH és a CLP rendelkezéseire figyelemmel, illetve a külön jogszabályban meghatározottak szerint a regisztrációra kötelezett végzi, regisztrációs kötelezettség hiányában a gyártó, továbbfelhasználó, az importőr vagy a forgalomba hozatalért felelős személy”.

A 44/2000 EüM szerint pedig (3. melléklet 1.):

„1.5. Az EINECS-ben szereplő, de a közösségi jegyzékben még nem szereplő veszélyes anyagok gyártói, forgalmazói és importőrei kötelesek maguk felkutatni az anyagok tulajdonságaira vonatkozó hiteles és hozzáférhető adatokat és az adatok alapján kötelesek az osztályozást, felíratot (címkézést) és csomagolást elvégezni.”

Mindezek alapján úgy tűnik, hogy mindenki köteles (lenne) az osztályozást elvégezni. Nem akarom itt most a hazai kémiai biztonsági rendelkezések ellentmondásait tárgyalni, a honlapomon külön oldalt indítottam [1] ezek összefoglalására, hogy segítsen a törvényalkotókat azok kijavításában. De annyit meg kell jegyezni, hogy a CLP hatályba lépése óta mindazok a rendelkezések, melyek az anyagok osztályozásának feladataira vonatkoznak a hazai jogrendben semmiek, tehát például a 44/2000-ben megadott fenti kötelezettség is (nyilván az, hogy milyen paraméterek szerint kell besorolnom a régi rendszer szerint az anyagomat, csak innen vehetem, de a fenti mondatok nem erre vonatkoznak). Tehát a forgalmazó „nem köteles felkutatni”, de a további felhasználók sem. Megjegyzem, hogy ennek megkövetelése soha nem is volt gyakorlat. Bár régen előfordult, hogy egy nem megfelelő osztályozásért az adatlapban vagy címkén a végfelhasználót büntették, de ez ma már igen ritka.

A kérdésben a javaslatom annyi, hogy a felhasználói lánc elején állók végezzék el a fent tárgyalt – nagyon szigorú – feladataikat. Az adatlapot fogadók pedig ellenőrizzék, hogy nincs-e a fogadott termékben

- harmonizált osztályozással rendelkező anyag,
- munkahelyi határértékkel rendelkező anyag.

Mindkettőben meglévő hiba ugyanis komoly munkavédelmi következményekkel járhat, pl. rákkeltők bejelentése, monitorozás stb. De ez része kell, hogy legyen annak a munkahelyi kémiai kockázatbecslésnek, melyet a végfelhasználóknak úgyis el kell végezniük.

Címkézés az adatlapokban

Nagyon fontos azt látni, hogy bár a 2.1 és a 2.2 alpontokban sok az ismétlés, de az adatlap rendelet alapján mindkét pontot külön használni kell, valamint pontosan megadni, hogy a régi, vagy az új előírások szerinti osztályozás vagy címkeelemek vannak-e megadva.

Alapvető eltérés van az előírásokban aszerint, hogy az CLP szerint osztályoztuk-e a termékünket (vagy azért mert ez kötelező, anyagok esetén, vagy önként, keverék esetén), vagy pedig – és csak keverékre – a régi rendszert használjuk. Ez az eltérés arra vonatkozik, hogy a címkén megjelenő információkból mit tegyünk az adatlapba és hova.

Ettől függetlenül már a REACH bevezetésével egyértelmű követelménnyé vált, hogy a megkapott engedély azonosító számát (engedélyszám) nemcsak a címkén, hanem az adatlapban a 2.2 alpontban is szerepeltetnünk kell. Ha pedig a termékünkre a XVII mellékletben a címkén megjelenítendő mondat szerepel, akkor azt CLP osztályozású terméknek a 2.2 alpontban, míg a régi rendszer szerinti osztályozású keveréknek pedig a 15. szakaszba kell beírni.

CLP osztályozású termékek

A CLP és az adatlap rendelet egyértelműen előírják, hogy a biztonsági adatlapban a 2.2 alpontban nemcsak a CLP (és REACH) rendeletből következő címkeelemeket kell szerepeltetni, hanem az ún. kiegészítő címkeelemet is. Ezek részben a régi rendszerből átvett címkeelemek (pl. izocianátokat tartalmaz, vagy 1% felett ismeretlen, de akut toxicitású összetevőket, vagy ismeretlen, a vízi környezetre veszélyes összetevőket tartalmaz stb.) Másfelől ide kerültek az egyéb európai, illetve ezek hazai áttételéből származó rendeletek által előírt címkeelemek. Nagyon sok ilyen lehetséges, VOC, növényvédő szer, mosószer, aeroszol stb. Ezek tehát a 2.2 alpontba valók.

A 44/2000 szerint osztályozott keverékek

Az adatlap rendelet az 1999/45-ös irányelv V. melléklet A és B szakaszát adja itt meg, hogy ilyen esetekben ezeket szerepeltetni kell a 2.2 alpontban. Ezek a fent már idézett izocianátokat tartalmaz, cianoakrilátokat tartalmaz és hasonló mondatok. További részletekre nézve lásd az irányelvet [2]. Az ott részletezettek közül számunkra most egy a fontos: az irányelv tételesen felsorolja az aeroszolókat. Ez azt jelenti, hogy az aeroszolos kiszerelésű termékekre az aeroszol-rendeletben előírt további címkeelemet az adatlap 2.2 alpontjában kell szerepeltetni. Az adatlap iránymutatásból úgy látszik, hogy ilyen régi osztályozású keverékeknél az egyéb rendeletekből származó címkeelemek helye változatlanul a 15. szakasz, a megfelelő rendeletre való hivatkozással.

Itt említem meg, hogy a Kozmetikai és Háztartás-vegyipari Szövetség – hatósággal egyeztetett – állásfoglalása szerint (2013. február 21.) azokra a biocid termékekre, melyekre kell adatlapot adni, nem kell a biocid rendelet által előírt címkeelemeket a biztonsági adatlapban szerepeltetni. Meg kell jegyezni, hogy e közlemény megjelenésekor már érvénybe lépő közösségi biocid rendelet – szemben a fenti állásfoglalás fő érvelésével – a következőt mondja a biocid adatlapokról: 70 cikk: „A hatóanyagokra és a biocid termékekre vonatkozó biztonsági adatlapokat – ahol alkalmazandó – az 1907/2006/EK rendelet 31. cikkével összhangban kell elkészíteni és hozzáférhetővé tenni.” A javaslatom ebben a bonyolult helyzetben az, hogy a biocid címkeelemet is hozzuk legalább a 15. szakaszban. Hiszen ezt az adatlap iránymutatás is egyértelműen előírja.

Ne felejtjük el továbbá, hogy ha a keverékünk nem veszélyes, de tartalmaz – a REACH rendeletben megadott koncentráció felett – veszélyes anyagkomponenseket, vagy koncentráció nélkül közösségi határértékkel rendelkező komponenseket, akkor szerepeltessük a címkén és a 2.2 alpontban is a „Biztonsági adatlap foglalkozásszerű felhasználók kérésére rendelkezésre áll” feliratot. További részleteket ezzel kapcsolatban már részletesen tárgyaltam a második közleményemben [3]

IRODALOM

- [1] <http://kortvelyessy.hu/REACH/hazai-jogszabalyok-problemai.htm>
- [2] <http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CONSLEG:1999L0045:20090120:HU:PDF>
- [3] Magyar Kémikusok Lapja (2013) 8–80.

ÖSSZEFOGLALÁS

Körtvélyessy Gyula: Biztonsági adatlapok. Tizenkettedik rész. Veszélyességi besorolások és címkeelemek

Az adatlap 2. szakasza az osztályozást és a címkén megjelenő elemeket tartalmazza. Ezeket nem lehet egy alpontba összevonni, és pontosan meg kell jelölni, hogy melyik jogi előírás alapján hozunk adott információt. Külön probléma az egyéb, speciális felhasználású, például biocid, VOC, növényvédő szer, mosószer stb. rendeletileg előírt további címkeelemeinek helye az adatlapban. A CLP-re való áttérés után ezek a 2.2 alpontba valók, addig is vagy itt, vagy a 15. szakaszban célszerű ezeket megadni, hiszen fontos biztonsági információt jelentenek.



Benkőné Di Giovanni Rita



Kémiaoktatás a Budapest-Fasori Evangélikus Gimnáziumban

A nagy elődök idején

Már iskolánk elődjében, a mai *Deák téri – Sütő utcai Gimnáziumban*, az 1800-as évek közepétől a képzés része volt a kémia. A kor színvonalának megfelelően modern oktatási eszközökkel látták el a gimnáziumot. Az iskolatörténet krónikája így számol be a korabeli beszerzésekről: „1861-ben Nendtvich Károly professor az iskolának chemiai apparátusokat és könyveket ajándékozott ... 1867-ben Kubinyi Ágoston kamarás állat- és ásványgyűjteményt adott az intézetnek ... 1874-ben a vegytani terem berendezéséhez a főváros ajándékozott vegytani »tűzhely-fülkét«.”

S mire a Városligeti fasorban az új főgimnázium az 1904-ben első iskolai tanévét megkezdte, már jól felszerelt természetrajzi szertárral büszkélkedhetett: „... nagy előadóasztal és az ettől jobbra-balra lévő szemléltető szekrények alsó fiókjai tele vannak chemiai kísérleti eszközökkel ... valamint ásványok és kőzetek vannak kiállítva a tanulók számára.”

A felszerelések biztosítása mellett a képzés módszertana is igen magas színvonalú volt a Fasori Evangélikus Gimnáziumban. A korabeli évkönyvek tanúsága szerint a IV. osztály tananyagát ásványtani és kémiai gyakorlatok egészítették ki. „Az 1922. év szeptembere óta a szertár öre Dr. Bogsch Sándor. Ez évben a szertár folyosóját kémiai dolgozóvá alakítottuk át 20 dolgozóhellyel, ahol ifjúságunk külön csoportokban az ásványtanból és kémiából gyakorlati kiképzést nyert.” A gyakorlatokat 15–16 fős csoportokban tartották. „A tanulók ... heti 1–1 órában dolgoztak a számukra kijelölt és felszerelt munkahelyükön. A kísérleti felszerelést, s vegyszereket iskolánk adja. A tanulók félénként



Kísérletek a Kutatók Éjszakáján, 2012

10–10 P díjat fizetnek, ezen díj alól felmentettük a szegénysorsú, tandíjmentes tanulókat, vagy indokolt esetben mérsékeljük a díjat.” „A gyakorlatok tárgya kémiából: Vízförralás, szűrés, oltás, kristályosítás, oxigénfejlesztés kísérletek oxigénnel és hidrogénnel. Oxigénbomba, hidrogénbomba. A levegő szétrobbantása. Chlórfejlesztés. Savak, bázisok és sók tulajdonságai és felismerésük. Szén-dioxid fejlesztés. Desztilláció. Kísérletek folyékony levegővel. Fémek oxidálása lángban” – emellett sok más érdekes kísérletet is végeztek.

Az 1940/41-es tanévben „az új tantervi utasítás értelmében a VI. osztály vegytani tanításával kapcsolatban” bevezették heti másfél-másfél órában a *vegytani gyakorlatokat* is. „A gyakorlatok díja 10 P, amely fejében iskolánk ellátta a tanulókat a szükséges felszereléssel és vegyi anyagokkal.” A vegytani gyakorlatokat Vermes Miklós

vezette, és több mint 30 kísérlet szerepelt a tantervben, például: „Lúgok titrálása 0,1 n sósavval. Nitrogénjodid készítése. Egyszerű jodometriás titrálások. Cipőkenőcs készítése. Vaj elszappanosítása, a vajsav ledesztillálása. Indigó szintetikus előállítása o-nitrobenzaldehydből. Furfurol ledesztillálása zöldborsóból. Malachitzöld készítése.” E kiválóan felszerelt és magas szakmai igényességgel oktató intézményből méltán került sok diák az egyetemek természettudományi fakultásaira, s indult el a világhír vagy a Nobel-díj felé.

Ebben az időszakban – elsősorban Vermes Miklós vegytan óráinak hatására – több diák is végleg „megfertőződött” a kémia szeretetével, s évek múlva a kémiatudomány művelői lettek. Közülük nyolcan ma a kémiatudományok doktorai. Köztük van a Volt Növendékek Egyesületének elnöke, Liptay György professzor is, aki so-



kat segítette és segíti ma is az alma materben folyó munkát. Az iránta való tisztelet jeleként a Budapest-Fásori Evangélikus Gimnáziumban 2012-ben átadott, 21. századi kémialaboratórium a *Liptay-labor* nevet viseli.

A „Laborpályázat”

A rendszerváltás idején elsőként újraindult Fásori Evangélikus Gimnázium mindig arra törekedett, hogy felélessze s folytassa a dicső múlt hagyományait a természettudományok oktatása terén. Hála az öregdiákok bőkezű adományainak, a kezdeti években ez meg is valósulhatott. A kilencvenes évek elején Bánhegyi György tanár úr és lelkes fiatal kollégái még sok izgalmas kísérletet végeztek a diákokkal. Az évek során azonban, sajnos, a kísérleti eszközök egy része elkerült az iskolából, mások elavultak, elhasználódtak, múzeumi tárggyá nemesültek. A kémia tanítása egyre inkább az elmélet irányába tolódott el. A tanárok munkabeosztása, megbecsültsége sem kedvezett a kísérletező oktatásnak. Így 2007-re már csak az emlékekben élt a tanulókísérletezés a Fásorban. Ezekben az években egy-egy tanulókísérleti óra csak sok áldozat árán jöhetett létre. Így lassan a lelkesedés is elapadt.

Majd Isten segedelmével újra kedvező fordulat következett be e téren. Az új oktatáspolitikának köszönhetően a természettudományos oktatás reflektorfénybe került, s 2011-ben egy uniós pályázat a Fásorba is lendületet hozott.

A Támop 3.1.3. „A természettudomá-

nyos oktatás módszertanának és eszközrendszerének megújítása a Budapest-Fásori Evangélikus Gimnáziumban” című pályázat keretén belül 290 millió forintot nyert iskolánk. A két év megvalósítási időszakban a gimnáziumot fenntartó Magyarországi Evangélikus Egyház irányította a pályázat megvalósítását, Roncz Béla projektvezető (akkori igazgató) közreműködésével. Felépült két 20–20 fős laboratórium, mely újra nagyszerű lehetőséget ad a tanulók kísérletezésére. Megújultak az előadók, kialakítottak egy új vegyszer szertárat, a kísérletezéshez előkészítő és kiszolgáló helyiségek létsültek. Így ma közel 100 millió Ft értékű eszköz szolgálja a kémia, és a többi természettudományi óra kísérleteit.

A szertárörök utódaiként a laborvezető és a két laboráns gondozza az eszközparkot, ezzel segítve a többi szaktanár munkáját. Feladataikhoz tartozik még a laborokat használó 10 partneriskola tanulókísérleteinek megszervezése, előkészítése és szakmai támogatása.

A pályázat keretében az oktatás módszertana is megújult.

A digitális táblák mellett elindult a digitális tananyagfejlesztés is. Mintegy 80 ív (16 oldal/ív) digitális tananyag készült el, mely új tananyagtartalmakat, kísérleteket és tesztfeladatokat egyaránt tartalmaz. Létrehoztunk egy vizsgáztatási modult is, amely az egyes témakörök anyagát kéri számon évfolyamonként rendszerezve. Kinyomtatunk 24 ívnyi munkafüzetet, 12 ív feladatgyűjteményt emelt szintű érettségéhez és 12 ív kutatási segédletet is.

Évente komplex természettudományi versenyt szerveztünk, ahol fontos szerepet játszik a laborgyakorlatnak.

2009-ben elindult iskolánkban a természettudományi tagozat, melynek utolsó két évében az osztály kémia tagozatos fele heti négy órában tanulhatja a tárgyat.

Az iskolai kémiaoktatást ma újra számoltalan érdekes kísérlet színesíti a szappanfőzéstől a titkosíráson, a titrálásokon át a kemilumineszcens jelenségekig. Évek óta rendszeresen tartunk kísérleti bemutatókat is.

Ezen fejlesztéseknek is köszönhető, hogy az utóbbi pár évben látványosan és meredeken emelkedik iskolánkban a természettudományos tárgyakat választók, ezen belül is a kémia fakultációra járók száma. Minden évben egyre többen tanulnak tovább vegyész szakokon és az orvosképzésben. (Három év óta rendszeresen 4–5 fő orvosi és gyógyszerész, 3–4 fő vegyész és 4–6 diák egyéb, kémia érettségét igénylő szakon folytatja tanulmányait.)

Két éve a Kutatók Éjszakáján látványos és érdekes kémiai kísérleteket végezhetnek laborunkban az érdeklődők.

Több év óta ad otthont laborunk a Pest megyei emelt szintű kémia érettségi szóbeli vizsgáinak is.

Rendszeresen kapunk felkérést a tanár-továbbképzések laborgyakorlatainak megvalósítására, hogy tapasztalatainkat átadva segítsük az Öveges-pályázatban nyertes iskolákat.

Idén, 2008 után, az MKE gondozásában ismét megrendezésre került a „Technológia mérőföldkövei a kémikus szemével” című kiállítás.

„Genius loci”

A kémiai ismeretek életünk egyre szélesebb körét behálózják. Iskolánk egyházi jellegének megfelelően a fenntarthatóság, a fenntartható fejlődés gondolatát a protestáns egyházak által megfogalmazott teremtsésvédelmi szemlélet hatja át. E területen is jelen van a kémia. A teremtsésvédelem gondolatának elmélyítését egy verseny keretében kezdtük meg, ahol a felkészülés során diákjaink az élelmiszer-biztonság, a természetes eredetű tisztítószerek és a konyhai technológiák napjainkban felmerülő problémáival ismerkedtek meg.

A 21. század igényeinek megfelelő labor nagy lehetőségeket és szép kihívást rejt a modern kori kémiaoktatás fejlesztésében. E kihívásnak kíván iskolánk – dicső múltunk árnyékában – Isten segítségével a következő években is megfelelni. ●●●

Kísérletek a Kutatók Éjszakáján, 2013



Braun Tibor

■ ELTE TTK Kémiai Intézet, MTA Könyvtár

Tudományos kutatási adatok és ismeretek vizuális megjelenítése

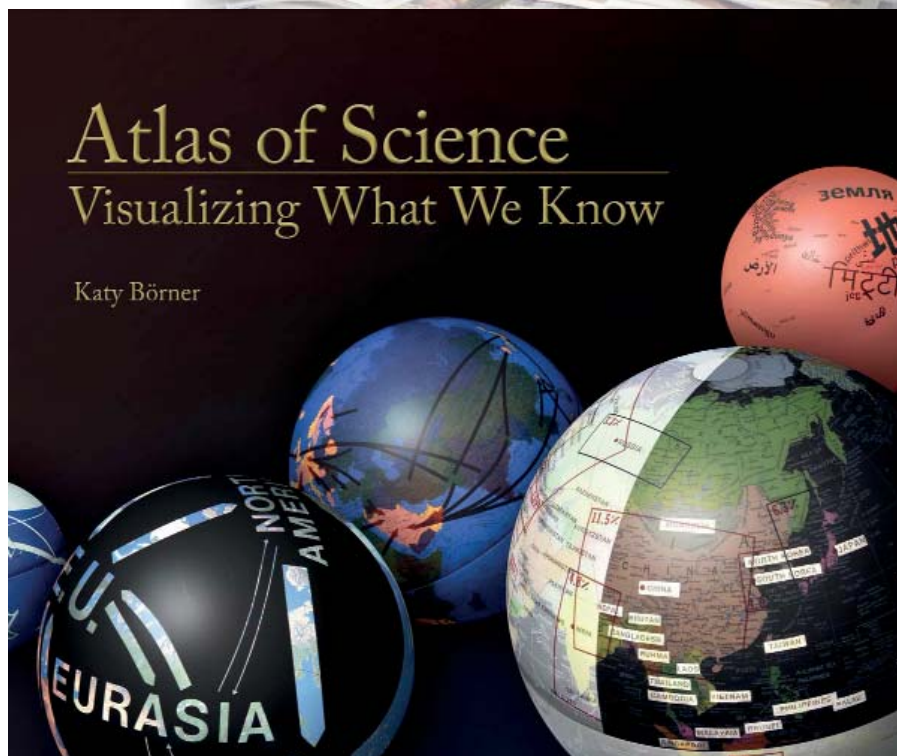
Rendhagyó könyvbemutató*

Előszó

A továbbiak jobb átlátása érdekében etimológiai, illetve fordítási magyarázattal tartozunk. Ugyanis témánkhoz az angol nyelvben használt *visualisation* a kulcsszó. Sajnos, e szónak nincs szótári magyar megfelelője. Elsőre *vizuális láttatásra* gondoltunk, de az nyilvánvalóan pleonazmus, ezért a *vizuális megjelenítést* választottuk annak tudatában, hogy nehezen veheti fel a versenyt angol nyelvű megfelelőjével. Amennyiben a *vizualizálás* ad hoc magyarosításként elfogadhatónak tűnik, úgy talán az is tekintetbe vehető itt. Sajnos, a témához tartozó másik angol szó, a *mapping* is nehézségeket támaszt, mert amennyiben a tudomány, illetve a tudományos kutatás területén használjuk, a szótári fordítása, azaz a *leképzés, térképészet, térképezés* nagyon elterjedt köznapi, geográfiai vonatkozásai miatt némileg hiányosnak, félreértelmezhetőnek tartható.

Bevezetés

Ma már közhelynek is nevezhető, hogy világunk zsúfolásig van tudománnyal kapcsolatos adatokkal és ismeretekkel, sőt ezekből több van, mint eddig valaha [1], és egyre szükségesebbé válik azoknak az utaknak a keresése, amelyek hozzásegítik, illetve hozzáegíthetik a tudományos kutatókat és másokat, hogy átlássák, feldolgozassák, megértsék ezeket az adatokat. El



1. ábra. Alapmű

kell mondanunk, hogy az 1759-ben született mérnök, könyvelő, feltaláló, politikai közgazdász és még számos más elfoglaltságot űző skót *William Playfair* volt az [2], aki a számszerű adatsorok és táblázatok jobb áttekintése érdekében a vizualizálás előfutáraként megalkotta a statisztika grafikai módszereit.

Playfair négyféle diagramot talált fel: 1786-ban a vonalas grafikont és oszlopdigrammot gazdasági adatokhoz, majd 1801-

ben a kördiagramokat (*pie chart, circle graph*). Ezeket 1786-ban és 1801-ben publikált könyveiben [3,4] saját statisztikai adatainak grafikai megjelenítéséhez, illetve értelmezéséhez alkalmazta. Diagramjai vizuális újításokat ihlettek, és az érdeklődők számára az adatok olyan mintázatait tették láthatóvá, amelyek a hosszú számso-
rokkal megtöltött oldalak szemlélésekor rejtve maradtak volna. A kezdeti próbálkozások körvonalazása után nincs szándé-

* Katy Börner: *Atlas of Science*. MIT Press, Cambridge, Massachusetts, London, 2010.



kunkban az adatok grafikai feldolgozásának teljes, különben rendkívül érdekes történetét ismertetni. Ezért fő témánkhoz, az ismeretek vizuális megjelenítéséhez térnénk vissza, idézve a jelen szerző által e téren legrészletesebbnek ítélt, az amerikai *Katy Börner* által nemrég publikált alaptermővet (1. ábra). Ez a mű bemutatja a tudomány, illetve a tudás szemszögéből nézve mindazt a fejlődést, amit a számítástechnikai lehetőségek el tudtak érni a grafikával. A tudás egészével foglalkozó, illetve annak csaknem minden területet érintő könyv többek között a kutatásra is kitér. Jelen ismertetés célja néhány általános érdeklődésre számot tartó példa bemutatása és a kimondottan kémiai vonatkozások kiemelése.

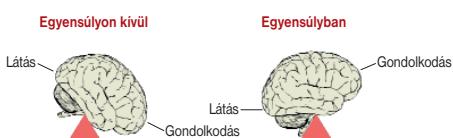
Következzen egy elhatárolódás is: jelen dolgozat és az ismertetett könyv sem érinti az atomok és szerves molekulák számítógépes grafikai modellezését és a képalkotást (*imaging*) sem, amely néha talán megtevesztően átlapolhatja vagy félreértelmezheti jelen ismertetés témáját.

A főleg angol szakirodalom *imaging*-nek, leképezésnek, képalkotásnak nevezi azt az eljárást, amely egy adott kémiai minta összetételéről, szerkezetéről és/vagy dinamikájáról nyújt vizuális jelet. A kémiai képalkotás széles körű műszeres technikákat alkalmaz; ezek mindegyike a fény vagy más sugárzás anyaggal való kölcsönhatásán alapul [5].

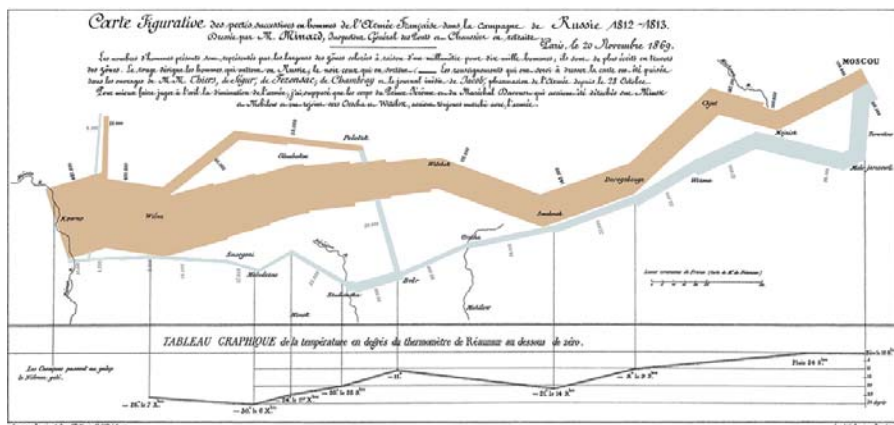
Adatvizualizálás

Az adatok és ismeretek vizualizálása azért hasznos és eredményes, mert az észlelés, érzékelés és megfigyelés közötti egyensúlyt abba az irányba mozdítja el, amelyben az agy képességeit teljes mértékben igénybe veheti. A látás (azaz a vizuális ész-

2. ábra. A látás és a gondolkodás egyensúlya az agyban [6]



lelés), amit az agy hátsó felében elhelyezkedő vizuális kéreg kezel, általában rendkívül gyors és hatékony. Csekély erőfeszítéssel, rögtön (pillanatnyi idő alatt) látunk. Az agykéreg elülső részéhez kötődő gondolkodás sokkal lassabb folyamat. A hagyományos adatértelmezés és -bemutatás átfogó tudatos gondolkodást igényel. Az ada-



3. ábra. Napóleon moszkvai hadjárata

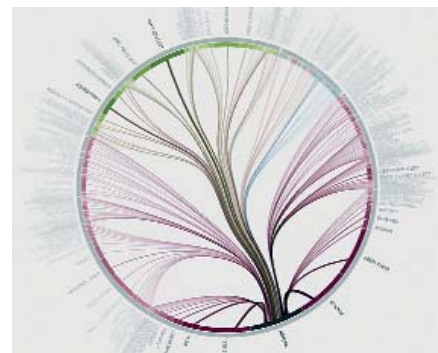
tok és ismeretek vizualizálása viszont eltolja az egyensúlyt a vizuális észlelés irányába: amikor lehetséges, szemünk éles és érzékeny látására épít, amint a 2. ábra jelzi.

Példák a vizualizálásra

Mielőtt a jelzett kémiai témára rátérnénk, be szeretnénk mutatni részben a könyvből, részben az újabb szakirodalomból válogatott néhány meggyőző, általános vizualizálási példát.

Napóleon moszkvai hadjárata

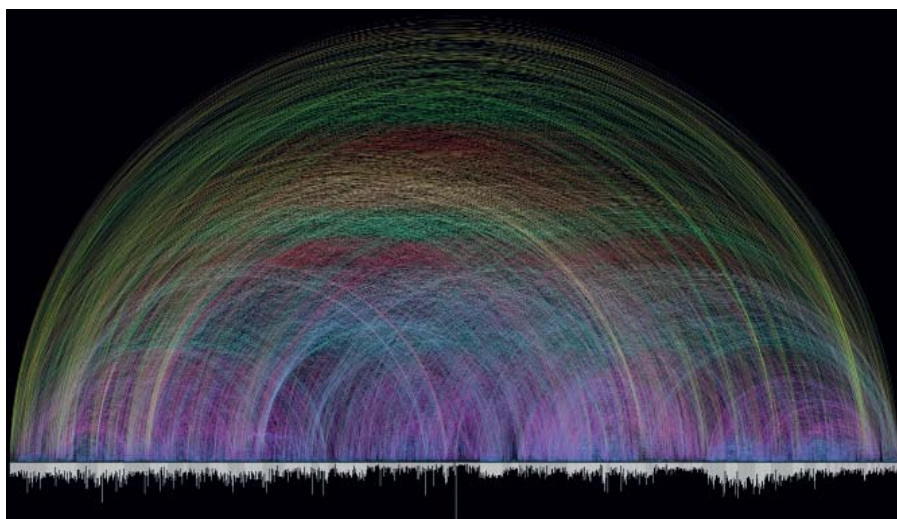
Charles Joseph Minard francia hadmérnök vizualizálását (3. ábra) sokan az ilyen ábrázolások legjobbjának, legkifejezőbbjének vélik, különösen akkor, ha tekintetbe vesszük, hogy a számítástechnika előtti időben készült. Az ábrázolás Napóleon siker-



5. ábra. A Nature folyóirat idézettségi kapcsolatrendszer [9]

telen oroszországi hadviselését, illetve hadseregének elpusztulását szemlélteti 1812-ben. A hadsereg indulásakor 422 000 emberből 100 000 érte el Moszkvát és 10 000-nél kevesebben tértek vissza. Elemzők ki-

4. ábra. Hivatkozások a Bibliában. Az alul látható oszlopgrafikon a Biblia összes fejezetét reprezentálja. A könyveket a váltakozó szürke és fehér színek jelzik. Az oszlopok hossza az egyes fejezetekben levő versek számát jelöli. A kereszt-hivatkozásokat ívek jelenítik meg, színük a két fejezet közötti távolságra utal [7]





emelték, hogy Minard vizualizálása hat adat rögzítésére volt képes egyidejűleg. A fő vonal folyamatosan követi a hadsereg méretét. Ugyanakkor a vonal jelzi a hadsereg mozgásának szélességi és hosszúsági fokát. Mutatja még a hadsereg utazási mozgását offenzívában és visszavonulásban egyaránt. Jelzi a hadsereg helyét is különböző időpontokban. Végül a külső hőmérsékletet is bemutatja a visszavonulás során.

A Biblia vizualizálása

Nem meglepő, hogy a világ legolvasottabbnak tekinthető könyvének (UNESCO-eredmény) képi megjelenítésére (vizualizálására) számos próbálkozás történt. Ezek közül válogattunk itteni bemutatásra. A 4. ábra a Biblián belüli hivatkozásokat szemlélteti.

A Nature folyóirat kapcsolatrendszere

A folyóiratok közötti kapcsolatokat mutatja be az 5. ábra, a világ egyik legjobbjának tartott természettudományi folyóirat, a *Nature* példáján. A kapcsolatrendszert a folyóirat-folyóirat közti idézettség alapján számszerűsítették.

Válogatott példák a kémia és a kémiai kutatás vizualizálására

A periódusos rendszer

Nem túlzás azt állítani, hogy a *Mengyelejev* nevével összeforrt periódusos rendszerek a kémiai vizualizálás őstípusainak tekinthetők. Nincs a világon tankönyv, tanterem vagy laboratórium, amelyik teljesen tekinthetné magát az elemek periódusos rendszere nélkül.

A rendszernek számtalan különböző vizualizálási fejlesztést, újítást igénybe vevő változata készült az 1869-es Mengyelejev-

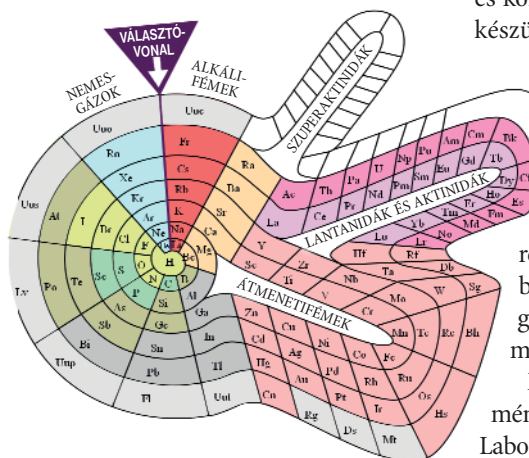
féle táblázat óta (6. ábra). Olyannyira, hogy az interneten felkereshető, illetve megtekinthető az elemek periódusos rendszerének több száz változatát feltüntető adatbázis is [11].

Ezek után talán nem tűnik furcsának, hogy a grafikai vizualizálások csaknem végtelen sorának rendezésére is megalkottak egy periódusos rendszert. Ebben persze a kémiai periodicitással való rokonítást nem kell annyira ortodox módon értelmezni, de a rendszerezési kíváncsnaknak megfelel. Gutenbergi, azaz nyomtatási felbontásban itt nincs lehetőség a vizualizálási elemek bemutatására, de az itt feltüntetett link alapján bárki betekinthez a részletekbe [14].

Maxwell termodinamikai felülete

Már csak történelmi háttére miatt is említésre méltó az a szoborszerű gipszidom (7. ábra), amelyet 1874-ben James Clerk Maxwell készített Josiah Willard Gibbs termodinamikai cikkei alapján. A modell egy vízhez hasonló tulajdonságokkal rendelkező, fiktív anyag különböző állapotainak háromdimenziós ábrázolása [15]. Az idom (szobor) képe egy 1942-ben publikált könyvben jelent meg először [16].

6. ábra. Theodor Benfey spirális periódusos rendszere



7. ábra. Maxwell termodinamikai felülete [15]

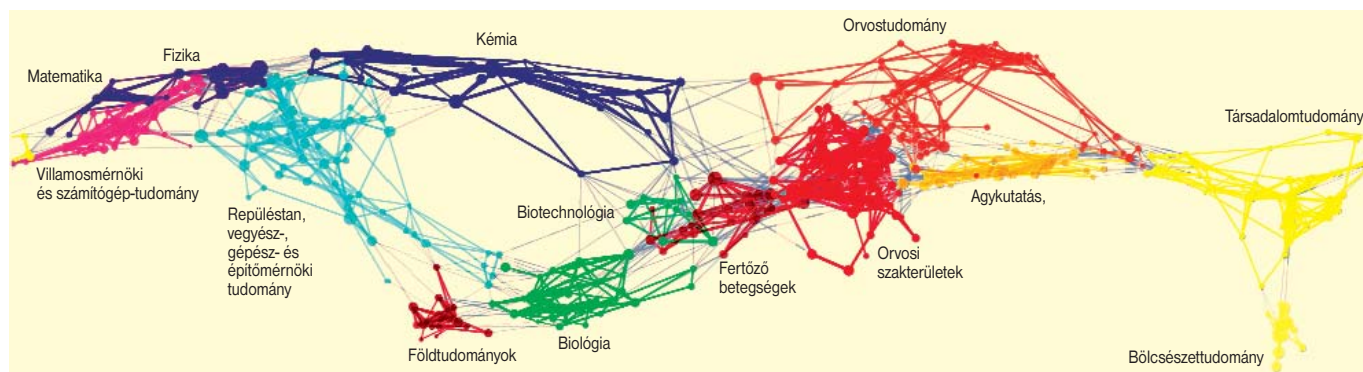
bor) képe egy 1942-ben publikált könyvben jelent meg először [16].

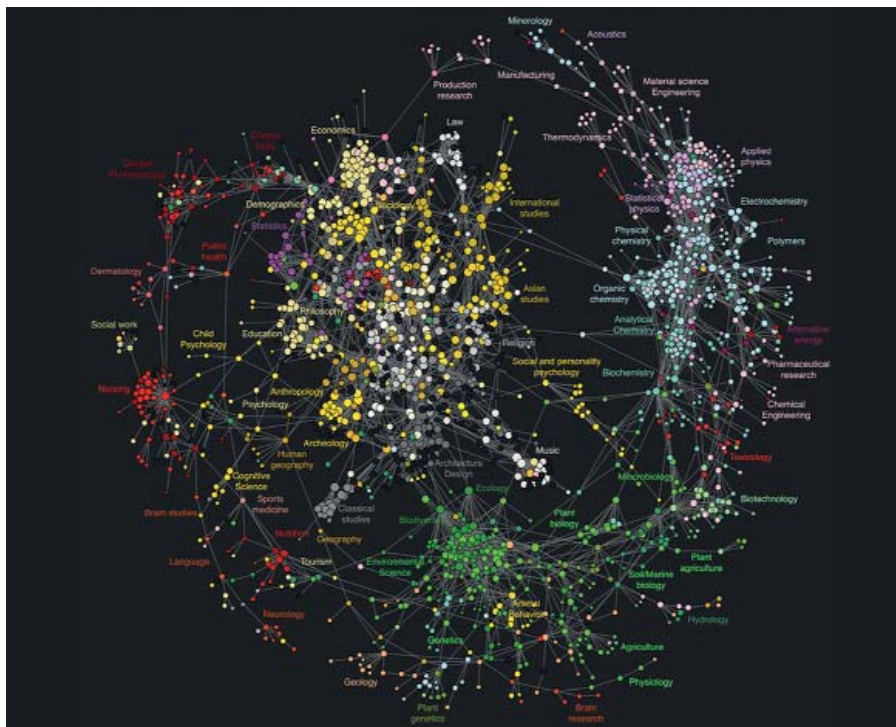
A kémia helye a természettudományok térképén

A természettudományokban manapság megfigyelhető integrálódási és átlapolási interdiszciplináris törekvések idején hasznosnak tekinthető egy olyan vizualizálási lehetőség, amely rálátást ad a különböző területek elhelyezkedésére, csatlakozási pontjaira, összefonódásaira. A 8. ábrán bemutatott térkép egy hatalmas folyóiratcikkes és konferenciadolgozat-adatbázis alapján készült. A feldolgozás 2001 és 2005 között 16 000 folyóiratban megjelent 7,2 millió cikket vett számba. Először háromdimenziós ábrázolást alkalmaztak, amely a természettudomány szakterületeit, folyóiratok csoportosítása alapján, egy gömbre helyezte el. A tengeri térképészetben alkalmazott Mercator-vetítéssel a gömbi ábrázolást laposították kétdimenziós térképpé [17].

Egy még nagyobb adatbázis-gyűjteményre építve a Los Alamos-i Nemzeti Laboratórium kutatói elkészítették egy to-

8. ábra. Tudományterületek csatlakozása, összefonódása [17]



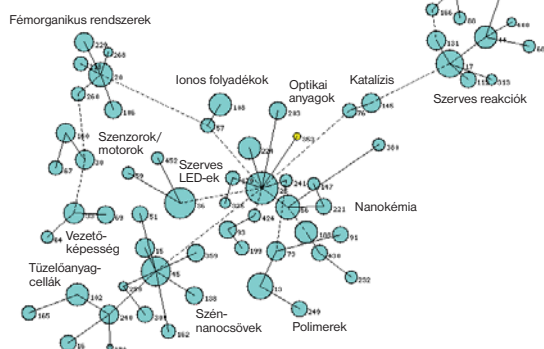


9. ábra. A természettudományok „tejútja” [18]

vábbfejlesztett, szerintük viccesen Tejút-hoz hasonlítható vizualizálást (9. ábra). A térképen a kémia kék színű pontokban jelentkezik [18].

Egy lépéssel közelebb lépve a kémiai kutatáshoz, nemrég az úgynevezett kutatásifront-*(research front)* adatokra támaszkodva is elkészítették a kémiai kutatás vizualizációs térképét a Thomson Reuters cég által publikált *Essential Science Indicators* alapján (10. ábra). A kutatási frontok közötti kapcsolatokat az egyttidézésük alapján számolták, azaz aszerint, hogy kurrens cikkek milyen mértékben idéznek együtt két kutatási frontot. A kialakult csoportokat klaszterező eljárás fogja össze nagyobb aggregátumokká. A térképen minden kör a kémia egy szélesebb aggregátumába sorolja a kutatási frontokat [19].

10. ábra. A kémiai kutatási frontok térképe [19]



Végző

E dolgozat célja a figyelemfelhívás volt egy, az univerzális tudás, de a kémia szempontjából is fontos és jelen szerző szerint monumentálisnak mondható műre, ami csaknem monografikusan fogja össze tudományos ismereteink tárházát. A könyv eleve nagyon általános, ezért villantásnyi bemutatása mellett az volt a fő cél, hogy kiemeljük a vizualizálás lehetőségeit és hasznát a tudományos kutatásban, külön hangsúllyal a kémiai kutatásra.

Végül még érdemes megemlíteni, hogy a kémiai kutatás helyzetéről, illetve a bio-

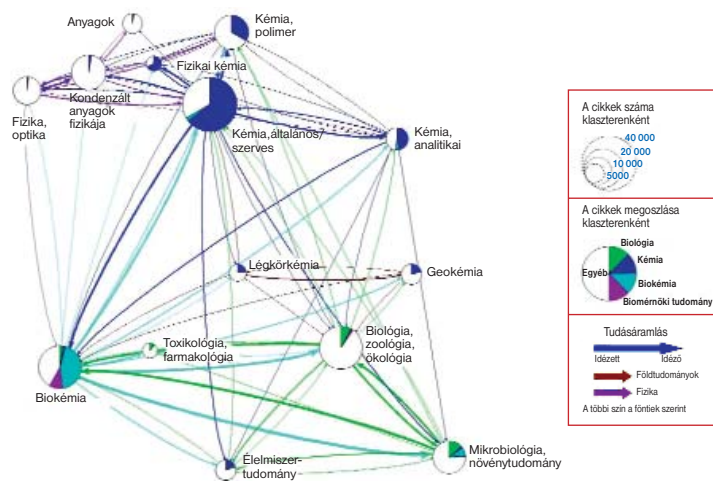
kémiával, a biológiával és a biomérnöki területtel fennálló kölcsönhatásairól szintén az itt ismertetett atlasz szerzője és munkatársai végezték talán a legrészletesebb térképezési-vizualizálási vizsgálatot, 7227 folyóirat cikkeinek klaszterezése alapján (11. ábra) [20].



IRODALOM

- [1] Braun Tibor: Adat-, információ- és ismeret-tárolás az örökkévalóságnak. Remények kvarcban és DNS-ben. Magyar Kémikusok Lapja, 2013. december.
- [2] http://en.wikipedia.org/wiki/William_Playfair
- [3] W. Playfair: The Commercial and Political Atlas
- [4] W. Playfair: Statistical Breviary. Shewing, on a Principle Entirely New, the Resources of Every State and Kingdom in Europe, London, Wallis, 1801.
- [5] Visualizing Chemistry: The Progress and Promise of Advanced Chemical Imaging, National Academics Press, www.nap.edu
- [6] http://www.interaction-design.org/encyclopedia/data_visualization_for_human_perception.html
- [7] <http://www.chrisharrison.net/index.php/Visualizations/BibleViz>
- [8] <http://www.openbible.info/blog/page/2/>
- [9] <http://www.webdesignerdepot.com/2009/06/50-great-examples-of-data-visualization/>
- [10] <http://www.learningfundamentals.com.au/wp-content/uploads/chemistry-map.jpg>
- [11] http://www.meta-synthesis.com/webbook/35_pt/pt_database.php?PT_Id=449
- [12] W.F. Shelan: Ref. Chem. (1976) 49, 17.
- [13] <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Element-spiral.svg>
- [14] http://www.visual-literacy.org/periodic_table/periodic_table.html
- [15] http://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell%27s_thermodynamic_surface
- [16] M. Rukeyser, Willard Gibbs: American Genius, Ok Bow Press, Woodbridge, CT, 1942.
- [17] http://en.wikipedia.org/wiki/Mercator_projection, http://scimaps.org/maps/map/maps_of_science_fore_50
- [18] <http://www.wired.com/wiredscience/2009/03/mapof-science/>
- [19] <http://archive.sciencewatch.com/dr/rfm/mos/09jul-mosCHE/#36>
- [20] K. W. Boyack, K. Börner, R. Klavans, Mapping the Structure and Evolution of Chemistry Research, Proc. 11th Int. Conf. Scientometrics, Informetrics, Madrid, 2007. 112–123.

11. ábra. A kémia kapcsolatrendszerének és információáramlásának kölcsönhatása a biokémiával, a biológiával és a biomérnöki tudománnyal [20]





Vegyészkalendárium

Pap József Sándor rovata

MOSES GOMBERG (1866. FEBRUÁR 8.) – GYÖKÖK SZABADÍTÓJA.

Keveset tudni fiatalkoráról. Annyi bizonyos, hogy családja az ukrán Kirovográdból származik (akkor Elizabetgrad), itt jár gimnáziumba, de a II. Sándor cár elleni merénylet után zsidó származása miatt apja feketelistára kerül, így menekülniük kell. Mindenüket elkobozzák, előbb apa és fia, majd lánytestvére (és talán anyja is) Chicagóba települ. (További testvérekről, ha voltak is, nem tudni biztosat, mint ahogyan arról sem, hogy az akkor 18 éves Mosest is üldözték-e.)



Amerikában alkalmi munkákból tengődnek, s ilyenek leginkább az istállótelepek környékén adódnak. Lassan elsajátítja az angolt, vasakarattal küzd tanulmányai folytatásáért.

1886-ban felvételt nyer a Michigani Egyetemre. Fizikát szeretne tanulni, ezért Carhart professzornál, a

Fizika Tanszék vezetőjénél kilincsel, aki azonban elküldi, mivel nincsenek trigonometriai ismeretei. Három nap múlva Gomberg visszatér, de ugyanazt a választ kapja. Erre Gomberg: „De hát én tanultam trigonometriát.” Carhart erről rövid úton meggyőződhet, hiszen ifjú hallgatója minden kérdésért remekül megválaszolja – három nap tanulás után. BSc-fokozatát 1892-ben MSc, majd 1894-ben PhD követi (A. B. Prescott témavezetésével a kofein reakcióit vizsgálja). Professzora a szerves kémia mellett kiemelkedő analitikus is, sok felkérést kap szakértői vélemények készítésére. Ez kiváló lehetőséget nyújt Gomberg számára, hogy jövedelemhez jusson. Sőt, számos alkalommal törvényszéki szakértőként is csillogtathatja elméjét a körmönfont ügyvédi logikával szemben. Tény, hogy ez a munka kiváló analitikust farag belőle.

1893-tól egészen hetvenéves koráig, tehát 1936-ig az egyetem oktatója marad. Csak néhány alkalommal tölt hosszabb-rövidebb időt Michiganon kívül, ezek közül a legfontosabb a müncheni év Baeyer laboratóriumában és egy rövidebb látogatás Victor Meyer heidelbergi tanszékén. Elhatározza, hogy tetrafenil-metánt állít elő. Azt a vegyületet, amellyel még maga Meyer sem boldogul, mi több, Gomberget is próbálja lebeszélni tervéről. Sikertelenül. Gomberg trifenil-metil-hidrazobenzolt oxidál diazovegyületté, amely termikus bomlással reményei szerint tetrafenil-metánt ad. Ehelyett azonban valami ragacs képződik, amelyből hosszas munkával 0,3 g kristályos terméket nyer. Ez épp csak elegendő elemanalízishez, ennek eredménye viszont összhangban van a számítható összetétellel. Michiganbe visszatérve megismétli a kísérletet. A terméket nitrálja, ebből színezéket nyer, megállapítja, hogy nem reagál káliummal és nátrium-etiláttal, tehát nincs benne „aktív hidrogén”. Bizonyossá válik tehát, hogy a kristályos anyag a tetrafenil-metán.

Innen indul útjára a szabad gyökök kémiája. A következő célvegyület ugyanis a hexafenil-etán, amelyhez tritil-klorid és fémnátrium reakcióján keresztül szeretne eljutni. Mivel nem jár sikerrel, ezüsttel próbálkozik, amellyel azonnal kristályos anyagot kap. A széntartalom azonban jóval elmarad a számított értéktől, így nem marad más, mint hogy a termék oxigént tartalmaz. De honnan kerülhet oxigén a vegyületbe? Először ezüst-oxidra gyanakszik, megismétli a kísérletet cinkkel és higannyal, de az eredmény ugyanaz. Csiszoltos üvegeszközök használatával(!) kizárja a levegő dioxidjénét a reakciótérből, s az így keletkező anyag már a hexafenil-etán összetételét mutatja. Gomberg ismeri Carl Engler tanulmányát az atmoszférikus oxidációról, erre alapozva a terméket trifenil-metil-peroxidként azonosítja. A levegő kizárásával nyert termék ugyanakkor hevesen reagál halogénnel és dioxigénnel. „A kísérleti bizonyítékok alapján arra a következtetésre kényszerülök, hogy szabad gyökkel van dolgunk” – fogalmaz. Ezzel a kijelentéssel alaposan megosztja a tudományos társadalmat, egyre-másra születnek az alternatív magyarázatok (például Ullmanné és Borsumé), de a különböző származékok vizsgálata végül (főleg a hexa-(*p*-bifenil)-etáné, amely szinte teljesen gyöké hasad oldatban) meggyőzően alátámasztja a szabad gyökök létezését.

Gomberg kutatásai számos jelentős eredményt hoznak, kezdve az aromás diazóniumsók C–C kapcsolásától (Gomberg–Bechmann-reakció), az aromások kinoidális szerkezetén át egészen a magnézium–magnézium-jodid elegy redukáló hatásának felfedezéséig. Először alkalmaz fagyálló folyadékot autókban, az I. világháborúban a mustárgáz előállítására használt 2-klór-etanol az általa javasolt módszer szerint készítik. A *bisz*(2-hidroxietyl)szulfid és a *bisz*(2-klóretil)szulfid eltérő élettani hatását gyakran szemlélteti előadásain azzal, hogy az előbbi nyelvére keni. Egy ilyen alkalommal alaposan megegeti száját az ujjára került kénmustárral.

1925-ben tanszékvezetésre kéri fel. Nem szívesen vállalja, de más jelentkező híján rá hárul a feladat, amellyel párhuzamosan, 1931-ig az American Chemical Society elnöki tiszttségét is betölti. Egészen hetvenéves koráig dolgozik. Természetes udvariassága, szerénysége és félnksége éles elmével és barátságos természettel párosul, ugyanakkor pontosan tisztában van kvalitásaival. Híres – mégis keveset utazik, kiváló anekdotázó – mégis keveset tudni róla, kiválóan beszél angolul – mégis marad egy kis oroszos akcentusa. Mindezekből válik igazi egyéniséggé. Nyuga-

Gombergől sok anekdota járta, ő maga is előszeretettel színesítette előadásait ilyenekkel – persze, másokról. Álljon itt egy nem kémiai vonatkozású – róla.

Híresen fiatalos kinézetű volt, nem sokkal nyugdíjazása előtt történt, hogy a városban autózva egy kereszteződéshez ért, de a tábla ellenére nem állt meg, csak lassított. Egy rendőr annak rendje és módja szerint megállította, vezetéstechnikai kiselőadást ezzel zárta: „Legközelebb aztán tessék teljesen megállni!” „Miért, lehet másképp is?” – kérdezte ártatlan szemekkel Gomberg. Erre jött az emlékeztető válasz: „Ne felelszen velem, fiatal barátom!”



A Michigani Egyetem kémia tanszéke, ahol Gomberg az első gyököket azonosította. Az épület 1981-ben leégett

erről sajnos nem készült jegyzet. A róla szóló anekdoták azonban szép számban megtalálhatók a hivatkozott életrajzban.

(Forrás: J. C. Bailar, Jr., *Biogr. Mem. Natl. Acad. Sci.* 1970, **41**, 141–173.)

OLIVER WOLCOTT GIBBS (1822. FEBRUÁR 21.) – A PEDIGRÉ KÖTELEZ. Az akkoriban még csak 150 ezres népességű, épp várossá cseperedő New York szülötte. Apja George Gibbs ezredes, Long Island-i földbirtokos, egyébként pedig lelkes ásványgyűjtő. Az ő tiszteletére kapja az egyik alumínium-hidroxid ásvány (hidrargilit) a gibbszit nevet. Apai ágon tehát tudományos vénát örököl, de anyai ágon sem lehet panasz a felmenőkre: nagypapja pénzügyminiszter, Connecticut állam kormányzójaként vonul vissza, dédapja pedig egyike a Függetlenségi Nyilatkozat aláíróinak. Tizenegy évesen elveszti édesapját, de hála anyja talpraesettségének, biztonságban nőhet föl. Hétéves korától egy bostoni magániskola tanulója, ahol kiváló nevelést és oktatást kap. New Yorkba



12 évesen kerül vissza, majd 1837 és 1841 között a Columbia College hallgatója. A klasszikus képzés mellett (latin, görög, matematika) más tudományokkal alig találkozik, mégis itt születik első publikált tanulmánya, amelyben egy új galvánelemet mutat be. Ennek különlegessége, hogy szénelektrodát tartalmaz. Mindezt egy 18 éves hallgató teszi egy olyan intézményben, ahol nincs is gyakorlati, de még csak elméleti képzés sem természettudományokból.

A diploma megszerzését követően Robert Hare philadelphiai laboratóriumába szegődik asszisztensnek. Célja a doktori fokozat és ezen keresztül egy professzori állás megszerzése, s mivel erre csak az orvosi tudományok terén nyílik lehetősége, beiratkozik a New York-i orvosi főiskolára, ahonnan kikerülve immár orvosdoktorként praktizálhat. Persze, sosem tesz így, de orvostudományi ismereteinek később még hasznát veszi, amikor vegyületek élettani hatását tanulmányozza.

Az 1850-es évek közepén Amerika nem sok lehetőséget tartogat tudományos indíttatású fiatalok számára, ezért Gibbs áthajózik az öreg kontinensre. Rammelsbergnél tölt néhány hónapot, majd Heinrich Rose, végül Liebig laboratóriuma következik. Né-

metországból Párizsba vezet útja, itt Laurent, Dumas és Regnault előadásain érleli ki kémiai kutatói szemléletét. 1848-ban tér vissza hazájába. Szülővárosa kéri szolgálatait, a „Free Academy of the City of New York” kémiaprofesszora lesz. Ez az intézmény minden társadalmi osztályból fogad diákokat, Gibbs feladata az ő tanításukra korlátozódik. Első számottevő kémiai közleményére ennek megfelelően 1857-ig kell várni, amikor Genthel közlik a kobalt aminkomplexeit (Werner sokat merített e munkából koordinációs elméletéhez). 1851-től az American Journal of Science társszerkesztője, absztrakt-sorozatot indít külföldi kutatások bemutatására, ez önmagában több mint 500 oldalt tesz ki. 1861-től publikál cikkeket a platinafémekről, amellyel nemzetközi hírnevet szerez.

Nem kisebb intézmény, mint a Harvard hívja meg 1863-ban a Rumsford professzori székbe. Ez kiváló lehetőségnek bizonyul képességei kibontakoztatásához, hiszen itt már igazi kutatólabort bízhatnak rá a tanítás mellett. Ráadásul korának kiváló tudósai veszik körül, Asa Gray, a botanikus, Louis Agassiz, a természettudós-geológus (híres mondása, hogy „ne a könyveket, a természet tanulmányozd!”), James Lowell, a költő, hogy csak néhányat említsünk. Gibbs az analitikai módszerek fejlesztésében mélyed el. Számos cikket közöl a fény hullámhosszának méréséről. Réz és nikkal meghatározására elsőként alkalmazza az elektrolitikus leválasztás módszerét, ezzel lefekteti az elektrogravimetria alapjait (*Zeitschrift für analytische Chemie* 1864, **3**, 334., lásd még: F. Szabadváry: „Wolcott Gibbs and the centenary of electrogravimetry”, *J. Chem. Educ.* 1964, **41**, 666.). Épp ebben az időben erősödik fel a gyakorlati képzés iránti igény, emiatt számos hallgató megfordul nála. Tanítási technikája szokatlan, nem hisz a vizsgákban. Azt vallja, hogy még a legjobb képességű hallgató is, ha ideges természetű, bizonytalankodhat a vizsga okozta stressz miatt és könnyen belebukhat a legegyszerűbb kérdésbe is, míg egy jó memóriával megáldott, de gyengén jelölt könnyen kerülhet ki sikeres vizsgákkal az egyetemről, hogy azután

semmire se vigye az életben. Véleményét tehát a mindennapos megbeszélésekre alapozza, amelyeket a laborban, nyugodt körülmények között tart, és amelyek során a legidősebb témák is előkerülnek. Gondolkodásra és cselekvésre ösztönöz, minden diákjával egyenlően bánt, ugyanakkor mérlegeli, hogy valamennyien határozott céllal érkeznek hozzá és neki az a feladata, hogy ezt a célt segítsen elérniük.

Sajnos, a Harvardot 1871-ben átszervezik, így a gyakorlati oktatásból kiesik. Több ideje jut személyes kutatásaira, s mivel tehetséges ember, saját labort épít, privát technikussal. Mai szemmel nézve laboratóriuma inkább emlékeztet konyhára a maga acéltűzhelyével, mint kutatóhelyre. De Gibbs céljainak tökéletesen megfelel. 1887-es visszavonulásáig itt dolgozik, öreg éveit newporti otthonában tölti, egészen 1908-ban bekövetkező haláláig. 1853-ban nőül, de gyermekük nem születik. Az amerikai Nemzeti Tudományos Akadémia alapító tagja és 1895-től 1900-ig elnöke. A Yosemite Nemzeti Parkban a 3895 méter magas Mt. Gibbs viseli nevét.

(Forrás: F. W. Clarke, *Biogr. Mem. Natl. Acad. Sci.* 1910, **VII**, 3–22.)

1854-ben nagy csalódás érte. A Columbia College kémiaprofesszori széke megüresedett és egyértelműen Gibbs volt a poszt esélyese. Mégis, egy jóval szerényebb képességű kollégáját nevezték ki helyette. Utóbb kiderült, hogy egyetlen ok állt a háttérben: Gibbs unitárius vallású volt, és ez szúrta a Columbia döntéshozói-nak szemét.



TÚL A KÉMIAÁN

Begyógyszerezett belső óra



A modern társadalomban egyre közismertebb az angolul „jet lag”-nek nevezett jelenség: a sok időzónát gyorsan átívelő repülőgépek után az emberi szervezetnek több napra van szüksége ahhoz, hogy az időeltolódáshoz alkalmazkodjon. A jelenség annyira természetesnek tűnik, hogy minden bizonnyal csak keveseknek jut az eszébe, hogy az alkalmazkodás gyógyszerrel elősegíthető lenne. Rágcsálókísérletek tanúsága szerint viszont nem reménytelen a szervezet belső órájának külső befolyásolása. Egy japán kutatócsoport génsebészeti beavatkozással olyan egereket állított elő, amelyek agyából hiányoznak a V1a és V1b jelű, vazopresszin nevű neuropeptidet kötő receptorproteinek. Az ilyen egerek az aktivitási és testhőmérsékleti ciklusukat is igen rövid idő alatt hozzáállították nagy, nyolcórás időeltolódásokhoz is. Az eredmények akár emberi gyógyszer kifejlesztéséhez is vezethetnek, bár a vazopresszinnak más, fontos szerepe is van a szervezetben, ezért receptorainak közvetlen elnyomása aligha célravezető stratégia.

Science 342, 85. (2013)

Kasmírhamisítás

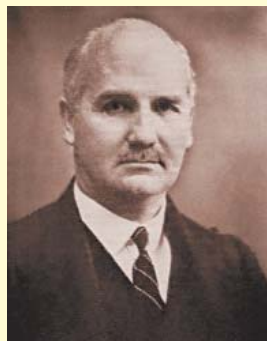
A valódi kasmírgyapjú igen drága anyag, a kasmírkecskék kivételesen puha nyakszőrzetéből készül. Mint minden értékes anyagot, a kasmírgyapjút is hamisítják, gyakran juh- vagy jak-szőröket is kevernek a kasmír néven eladott anyagba. A hamisított és a valódi kasmírgyapjú közötti különbség megbízható kimutatásához korábban fény- vagy elektronmikroszkópokra volt szükség. Proteomikai alapelveken a közelmúltban olasz kutatók egy jóval egyszerűbb eljárást dolgoztak ki: a gyapjúban található keratinban számos fajspecifikus részt sikerült találni; ezek tesztje tömegspektrometriával gyorsan elvégezhető. A sebesség mellett az új módszer további előnye, hogy festett vagy fehérített gyapjúkon is megbízhatóan működik.

J. Mass. Spectrom. 48, 919. (2013)



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

CENTENÁRIUM

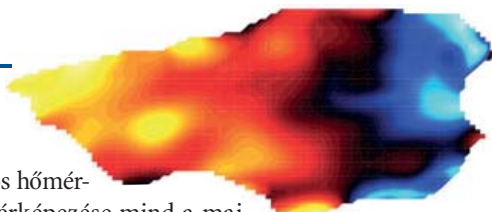


F. A. Lindemann: Atomic Models and X-Ray Spectra *Nature*, Vol. 92, p. 631. (1914. február 5.)

Frederick Alexander Lindemann (1886–1957) angol fizikus volt, sokáig a brit kormányok tudományos tanácsadójaként is szolgált, s különösen nagy szerepe volt

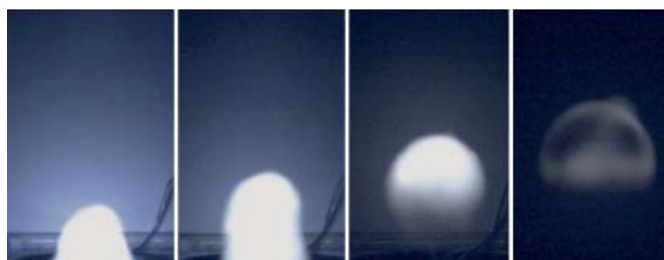
Winston Churchill miniszterelnöksége idején. 1919-től Oxfordban a kísérleti filozófia professzora és a Clarendon Laboratory vezetője volt. A napszél tanulmányozásában úttörő szerepet játszott.

NMR-termotérképészet



Az ipari reaktorok pontos hőmérséklet-eloszlásának feltérképezése mind a mai napig jelentős, megoldásra váró probléma. Ebbe az irányba nagy lépést jelent az az eljárás, amelyet amerikai tudósok gáz halmazállapotú reakcióelegyekre fejlesztettek ki a mágneses rezonancián alapuló képalkotás elveit felhasználva. A módszer térbeli és hőmérsékleti felbontása is igen előnyös. Alapötlete az inhomogén mágneses tér használata. Ilyen körülmények között a hidegebb helyeken a jelek szélesebbek, míg a melegebb helyeken keskenyebbek, így a vonalszélesség segítségével egy nagyobb reaktor hőmérsékleti térképe is kirajzolható. Az elv használhatóságát propilén és hidrogén nemesfémalapú katalizátoron végrehajtott reakciójában bizonyították.

Nature 502, 537. (2013)



Gömbvillámkémia

A gömbvillám ritka, mégis ősidők óta ismert meteorológiai jelenség. A villámlásnál sokkal hosszabb ideig tart, de kialakulásának mechanizmusa mind a mai napig ismeretlen. Az Egyesült Államok légierijének kutatólaboratóriuma „gömbvillámszerű légköri nyomásplazmoidok” tanulmányozásáról számolt be a közelmúltban. A jelenséget grafitkatód és réz(II)-szulfát-oldat közötti szikra átütésével sikerült előidézni, s nagy sebességű képrögzítő módszerekkel és infravörös spektroszkópiával tanulmányozni. A plazmoidok élettartama néhány tized másodperc volt, és az elektrolitoldat pH-jának növelése csekély stabilizáló hatással volt rá.

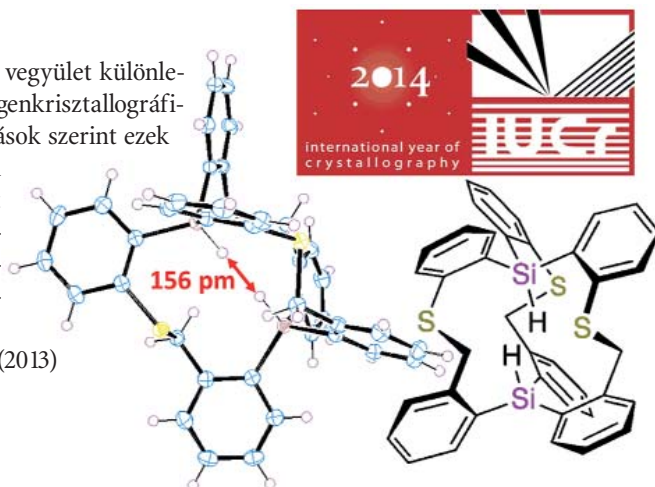
J. Phys. Chem. A 117, 9931. (2013)



A HÓNAP MOLEKULÁJA

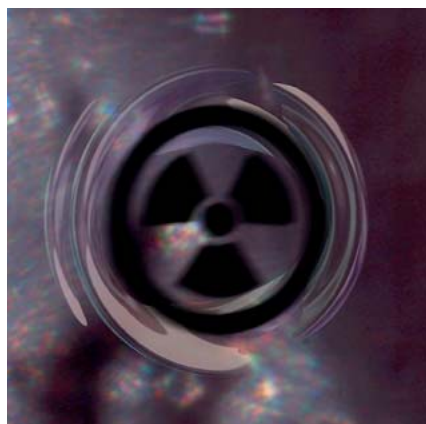
Az ábrán látható makrobiciklusos *in,in*-bisz(hidroszilán) ($C_{39}H_{30}S_3Si_2$) vegyület különlegessége a Si–H kötésekben lévő két hidrogén rendkívüli közelsége: röntgenkristallográfiás adatok alapján végzett becslések, illetve kvantummechanikai számítások szerint ezek mindössze 156 pm-re vannak egymástól. Az egymáshoz kötéssel nem kapcsolódó hidrogének közötti, neutrondiffrakciós mérésekből ismert legkisebb távolság korábban 162 pm volt egy kalitkaszzerű pentaciklo-dekánban. Az ilyen típusú, szélsőséges szerkezetű vegyületek megismerése a kvantummechanikai módszerek kalibrálásához nagy segítséget adhat.

J. Am. Chem. Soc. 135, 13235. (2013)



Fémes asztácium

Az asztácium a legritkább a Földön előforduló elemek közül. A leghosszabb élettartamú izotópjának felezési ideje is mindössze 8 óra. Ennek az a következménye, hogy soha senkinek nem sikerült még előállítania szemmel látható mennyiséget



ebből az elemből, ezért a tulajdonságait sem ismeri jól a tudomány. Új elméleti számítások szerint a fölötté lévő halogénektől eltérően az asztácium elemi állapotban nem kétatomos molekulákat alkot, hanem 300 °C körüli olvadáspontú, sötét, ezüstös színű

szilárd fázist, amely akár fémesnek is tekinthető. A váratlan jelenség alapvető oka az, hogy az elektronok mozgását már relativisztikus hatások is jelentősen befolyásolják. Ugyanez a jelenség áll más, nagy rendszámú fémek kivételes tulajdonságainak – így a higany folyékony halmazállapotának és az arany sárga színének – a hátterében is.

Phys. Rev. Lett. 111, 116404. (2013)

Fluoreszcens selyem

A selyem általában nagy szakítószilárdságú és szövetbarát anyag. Ezek nemcsak a divatszakmában, hanem orvosbiológiai felhasználásban is előnyös tulajdonságok. A selyemhernyók azonban mindeddig kivételesen ellenállóknak bizonyultak a genetikai módosításokkal szemben, így a szálak tulajdonságait gyakorlatilag nem lehetett mesterségesen befolyásolni. Japán tudósoknak végre sikerült leküzdeniük ezt a problémát: genetikailag viszonylag könnyen módosítható, de selymet alig készítő hernyókat kereszteztek az ellenálló, selymekészítő fajtákkal. Így a megfelelő gének bevitelével sikerült zölden, narancsszínű és vörösen fluoreszkáló selymet is készíttetniük.

Adv. Funct. Mater. 23, 5232. (2013)



IDÉZET

„Semmilyen állam nem fejlődhet tudomány nélkül, mert a szomszédai megsemmisítik. Művészet és általános kultúra nélkül az állam elveszíti az önkritika képességét, téves irányzatokat kezd bátorítani, mindinkább képmutatókat és alja embereket terem, az állampolgároknak fogyasztói szemléletet és önteltséget fejleszt ki, s végeredményben megint csak a józan értelmű szomszédok áldozatává válik. Akármennyit üldözhetik a könyvtudókat, betilthatják a tudományokat, irthatják a művészeteket, előbb-utóbb azonban észre kell térni, és fogcsikorgatva bár, de utat nyitni minden számára, ami oly gyűlöletes a hatalomvágyó korlátoltak és tudatlanok számára. És bármennyire lenézik is a tudást ezek a hatalmon lévő szürke emberek, semmit sem tehetnek a történelmi objektivitással szemben, csak lefékezhetik, de meg nem állíthatják. Noha lenézik a tudást és félnek tőle, előbb-utóbb mégis kénytelenek felkarolni, hogy a helyükön maradhassanak. Előbb-utóbb kénytelenek engedélyezni egyetemeket, tudományos társaságok működését, kutatóközpontokat, obszervatóriumokat, laboratóriumokat szervezni, gondolkodókat és tudósokat képezni, olyan embereket, akik már nem állnak ellenőrzésük alatt, akiknek egészen más a lelkiviláguk, egészen mások a szükségleteik, ezek az emberek pedig nem létezhetnek, még kevésbé működhetnek az alantas pénzsóvárság, a parlagi érdekek, a bárgyú önteltség és a merőben testi szükségletek kielégítésének további légkörében.”

Arkagyij Sztrugackij (1925–1991) és Borisz Sztrugackij (1933–2012): *Nehéz istennek lenni* (Трудно быть богом, 1964, Gellért György fordítása)



MEGEMLÉKEZÉS

Tóth Klára (1939–2013)

Életének 75. évében, 2013. december 9-én elhunyt Szepesváryné Tóth Klára akadémikus.

Tóth Klára Galambokon nőtt fel, majd a szentendrei Ferences Gimnáziumban tanult és érettségizett. Figyelme ekkor fordult a természettudományok felé. A Budapesti Orvostudományi Egyetem gyógyszerész karára iratkozott be, és itt szerzett kitüntetéses diplomát 1962-ben. Egyetemi doktori értekezését a Veszprémi Vegyipari Egyetemen készítette. Innen datálódott több évtizedes közös kutatómunkája Pungor Ernő professzorral.



1965-ben két éves tanulmányútra ment Angliába, Ronald Belcher professzorhoz. Itt a sikeres kutatómunka mellett számos élethosszig tartó barátságra tett szert az angol analitikusok körében. Visszaérkezése után adjunktusi kinevezést kapott, majd 1970-ben Pungor Ernő csoportjával a Budapesti Műszaki Egyetemre került át. Itt 1975-től egyetemi docens, majd 1991-től egyetemi tanár volt. Kandidátusi címét 1970-ben, az akadémiai doktori címet 1991-ben nyerte el. 2003 és 2006 között az MTA–BME Műszaki Analitikai Tanszéki Kutatócsoport vezetője, 2007-től ennek kutatóprofesszora volt. Az MTA 1995-ben levelező tagjává, 2001-ben rendes taggá választotta. Az Abo-Akademi University (Turku) díszdoktori címet adományozott neki. Irányításával számos diplomamunka, doktori és kandidátusi értekezés készült.

Tóth Klára az ionszelektív elektródok kutatásában már egész fiatalon nagy nemzetközi sikereket ért el. Kezdetben szilikongumiba ágyazott csapadékalapú elektródokkal foglalkozott, majd később különféle polimerekbe bevitt semleges vázú ioncserélő-alapú membránokat készített és vizsgált. Nagyon sikeres együttműködést folytatott a BME szerves kémikusaival, Tőke Lászlóval, Ágai Bélával és Bitter Istvánnal. Ebből az együttműködésből született többek közt – tanszéki kollegák, így például Lindner Ernő közreműködésével – egy káliumion-szenzor, amelyet egy japán cég megvásárolt és számos klinikai elemzőkészülékbe beépített. Ionszelektív mikroelektródokat vezetett be nemzetközi együttműködésben és hazai munkatársakkal, például Nagy Gézával, a pásztázó elektrokémiai mikroszkópiában. Az ionszelektív elektródok dinamikus viselkedéséről egyedülálló könyvet írtak Pungor Ernővel és Lindner Ernővel. Az elmúlt évtizedben különösen sokat foglalkozott optikai szenzorok fejlesztésével, ismét együttműködésben szerves kémikus kollegákkal, főleg Huszthy Péter csoportjával. Az elektrokémiai szenzorok kutatását is folytatta együttműködve Gyurcsányi Róberttel. Tudományos hagyatéka több mint kétszáz referált folyóiratcikk, két könyv, tizenkét könyvfejezet és tíz szabadalom.

A hazai és nemzetközi tudományos szakmai közéletben aktívan részt vett. Az MTA Analitikai Kémiai Bizottságának elnöke, az IUPAC Analitikai Kémiai Bizottságának tagja volt. 1999 és

2001 között az OTKA Élettelen Természettudományi Kollégiumának elnöke volt.

Számos kitüntetése közül kiemelkedik az Akadémiai Díj (1978) és a Széchenyi-díj (2000).

Horvai György

In memoriam Horváth Károly (1945–2013)

2013. november 29-én elhunyt dr. Horváth Károly okleveles vegyész, spektroszkópus, sokunk jó barátja. Szellemi aktivitását, általános és szakmai érdeklődését, humorát az utolsó napig megőrizte.

1945. január 26-án született Budapest ostroma idején egy kórházi óvóhelyen, gyertyafény mellett. Bombák és lövegek hangja nyomta el az újszülött felsírását. A család történetéről pár éve érdekes és megható riportfilmet készített az Újbuda TV. Karsci



TÖMPE PÉTER FELVÉTELE

mindig büszke volt Donkanyart túlélt édesapja emberségére, 1956-os csepeli munkástanácsi tevékenységére. Az olvasás szeretetét édesanyjától örökölte, gyermekként már „könyvmoly” volt, de ifjúkorában kalapácsvetőként sportolt is. A kémia világa hamar vonzani kezdte. A dunakeszi elemi iskola után a Petrik Lajos Vegyipari Technikumban érettségizett Budapesten, az ELTE TTK-n okl.

vegyészként végzett, majd doktori fokozatot szerzett. Közel tízezer kötetes könyvtárában régi és dedikált példányok, magyar és idegen nyelvű irodalmi-művészeti, filozófiai-vallási kötetek s természetesen szakkönyvek, benne ritkaságok is vannak: egyik kedvence volt Landau és Lifsic *Elméleti fizika* című, többkötetes könyve, amelyet többször is kiolvasott.

Pályáját a Kőbányai Gyógyszerárugyárban (Richter Gedeon Rt.) kezdte, és sokáig a Chinoinban (később Sanofi-Aventis) dolgozott, Korbonits Dezső laboratóriumában, akivel több közleménye is megjelent az Akadémiai Kiadónál és a Journal of Chemical Researchben, de publikált – többek között – Simon Kálmán kollégájával a Journal of The Chemical Societyben is. Sorolhatnánk még tanulmányait, szabadalmait, hazai és külföldi konferencia-előadásait, poszttereit. Még a Chinoinban, Horváth Gábor fizikai kémiai csoportjában két kollégájával kezdett el foglalkozni NMR-spektroszkópiával, a preparatív kutatók által előállított vegyületek szerkezeteit vizsgálták, egy akkor még 90 MHz-es NMR-készüléken. A kémiai szakkönyvtár vezetőjeként is dolgozott. Igen jó felkészültségű, logikusan gondolkodó, derűs kollégaként emlékeznek rá munkatársai. 1998-tól az Egis Gyógyszer-gyár Analitikai Laboratóriumának spektroszkópiai csoportját vezette, nyugdíjba vonulásáig.

Meghatározó élménye volt egyéves angliai ösztöndíja, Norwichban speciális nitrovegyületek szintézisével foglalkozott. Ott ismerkedett meg Alan Katritzky professzorral, a világhírű spektroszkópussal, aki maga után hívta Amerikába (Gainesville, University of Florida), ahol évekig dolgoztak együtt. Ahogy kinti kol-



légája és barátja, Márványos Ede visszaemlékszik rá, „a csendes hétköznapiakba Karcsi már érkezésével friss levegőt hozott. Szeretetre méltó, színes egyéniség volt.” Később, egy számára még érdekesebb, NMR-es állásba átszerződött New Orleansba, a híres Tulane Egyetemre.

Hazatérése utáni tevékenységéből kiemelkedik, hogy a Veszprémi Vegyipari Egyetem Műszaki Kémiai Napok (2002) plenáris előadását ő tartotta, és meghatározó társszerzője volt a Farkas Béla és Révész Piroska szerkesztésében megjelent *Kristályosítástól a tablettázásig. Anyagvizsgálati módszerek és technológiai eljárások kézikönyve* című, igen sikeres, keresetté vált kötetnek is (2007).

A Magyar Kémikusok Egyesületébe 1968-ban, 23 éves korában lépett be. Egyik alapítója volt a Kristályosítási és Gyógyszerformulálási Szakosztálynak, ahol aktív szakmai-közéleti tevékenységet folytatott. Folyóiratunkat, a Magyar Kémikusok Lapját megkülönböztetett figyelmével kísérte, még a kórházba is be-kerke magához nem sokkal halála előtt, más lapokkal együtt, hogy a legfrissebb számát elolvassa.

Horváth Karcsi igazi társasági ember volt. Széles körű nyelvismerete, nagy műveltsége, ugyanakkor szerény természete s adomái, vicceselése mindig, mindenhol jó hangulatot teremtettek.

Idős szüleivel élete végéig törődött. Édesanyja váratlan halála után 90 éven felüli édesapját, hogy az családi körben, megszokott otthonában maradhasson, évekig gondozták párjával, akit korábban szintén komoly betegség támadott meg és felgyógyulása Karcsi önfeláldozó ápolásának is köszönhető. Katinkával jó 30 évet éltek jóban-rosszban, ezüstlakodalmukat együtt tartották szülei gyémántlakodalmával. Jó kapcsolatban volt rokonaival is, a jeles alkalmakat közösen ünnepelték anyósáikkal is.

Sajnos, több súlyos betegséget is szerzett az idők folyamán. A szívszanatóriumból október elején gyógyultként hazaengedték, s kisebb, más problémával került az Irgalmas kórházba, ahol ismét infarktust kapott, de késve került az intenzív osztályra. Édesapja halálának évében ő is örökre elpihent. Akik ismertük, mindannyian szerettük őt. Kegyelettel, szomorúan, kollégáiként is búcsúztunk tőle december 13-án, pénteken reggel. (Anno, az esküvőjükre is a péntek 13-át választották...) Temetése a budapesti Szt. Gellért Plébániatemplom Szent Sír urnatemetője Meszlényi-termében volt. Karcsi, nyugodj békében!

Tömpe Péter

.....

Fonyó Zsolt-emlékülés

Fonyó Zsolt, az MTA rendes tagja, a BME Vegyipari Műveletek Tanszékének egykori vezetője 70. születésnapja alkalmából az MTA Vegyipari Művelési Munkabizottsága (VMMB), Folyamatmérnöki Munkabizottsága és Műszaki Kémiai Tudományos Bizottsága együttes emlékülést tartott a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Schay-termében 2013. december 3-án. Az ülésen megjelent Fonyó professzor úr özvegye, Ildikó is.

Először Mizsey Péter, a VMMB elnöke méltatta Fonyó professzor úr életútját, szakmai sikereit. A méltatás során felelevenedtek a személyes élmények, események is. Ezután Tungler Antal professzor közös gyermekkori élményeiről mesélt.

Az ülés szakmai jellegű előadásokkal folytatódott. Németh Sándor Szeifert Ferencsel közös munkájukban a *sok komponensű elegyek szétválasztásának energetikai vizsgálatáról* beszélt.

Argyelán János a *flyékony radioaktív hulladékok szilárdítása* témáról tartott előadást. Szőke-Kis Anita, Fonyó professzor úr egyik fő és kedvelt tématerületén elért eredményéről számolt be *AV és progresszív desztillációs kőolaj-feldolgozó üzemek energetikai és költséghatékonyságának értékelése* címmel. Végezetül Kovács András *Használt MEROX-lég ártalmatlanítási lehetőségei további hasznosítással* címmel tartott előadást.

Mizsey Péter

.....

TUDOMÁNYOS ÉLET

A Magyar Magnézium Társaság előadóülése

2013. november 21.

Az Elnök bevezetőjében utalt Larsson és munkatársai tanulmányára (Larsson, S. C., Bergkvist, L., Wolk, A.: Magnesium intake in relation to risk of colorectal cancer in women. JAMA. 293, 86–89. 2005), melyben 61 435, 40–75 éves nő átlagosan 14,8 éves megfigyelésének adatait közölték. A napi >210<255 mg Mg⁺⁺-t tartalmazó étrend mellé mindössze 50 mg Mg⁺⁺-t adtak és ez is elég volt a vastagbélrák rizikójának szignifikáns csökkentéséhez. Az életkor és a nem megválasztása az ösztrogén hormon kedvező hatásának kiküszöbölése miatt történt. Az előadó saját közleménye rosszindulatú daganatos betegekről a megfelelő környezeti Mg-ellátottság (szérum Mg-szint 0,9–1,15 mM/l között) fontosságát támasztja alá: a „szupernormális” szérum Mg-szint (>1,15 mM/l felett) nem fordult elő a 92 rosszindulatú daganatban szenvedő betegben (Kiss, Z., Ácsné, K. B.: Az optimális környezeti magnézium-ellátottság daganatellenes hatása. Proc. 17th Intern. Symp. Analyt. Environ. Problems. A. 146–151, 2011).

A Mg daganatgátló hatásában a sejtsztódást elindító kezdeti Ca⁺⁺-áram gátlása/modulálása mellett újabban kiderült, hogy a Mg a centrális szimpatikus tónus csökkentése révén mérsékli a noradrenalin-szint emelkedésével járó állapotokban (tartós pszichés stressz, elhízás, magas vérnyomás, bipoláris elmebetegségek, feokromocitóma) a daganat-előfordulást – hasonlóan a kóros szimpatikus tónust gátló centrális α₂-agonista klonidinhez, a perifériás α₁-blokkoló doxazosinhoz és a β-receptor-blokkolókhöz.

A szívelégtelenség és a pitvarfibrilláció (frekvenciakontroll) kezelésében széles körben alkalmazott glikozidok, a digoxin és a digitoxin a Mg⁺⁺-aktivált Na⁺/K⁺-ATPáz gátlása révén (= Ca⁺⁺-beáramlás a sejtbe, fokozott kontraktilitás, de fokozott mitózis!) mellékhatásként endoplazmás retikulum stresszt okozva, az intracelluláris kalretikulin sejt felszíni expresszióját kiváltva a daganatsejtek immunológiai sejtthallát okozzák. A rosszindulatú daganatok kezelésére széles körben alkalmazott oxaliplatinnak és az antraciclin-származékoknak van, a ciszplatinnak viszont nincs ilyen effektusa. A szívelégtelenség miatt szívglükozidokkal kezelt rosszindulatú daganatos betegeknél (435 eset mell-, vastagbél-, végbél-, fej-, nyak- és májkarcinóma) a túlélést jelentősen hosszabbnak találták.

Paradigmaváltást hozhat a rosszindulatú daganatok kezelésében a Mg-nak a sejt antioxidáns státusát stabilizáló tulajdonsága, hiszen például hasnyálmirigy-ráksejtekben emelkedett antioxidáns-szint van, gátolva a reaktív oxigéngyökök kiváltotta apoptózist, azaz a ráksejtek pusztulását. Fontos a bazális intra-



celluláris Mg^{++} -szintet szabályozó transzporter, a MGT1 szerepe, hiszen veleszületett vagy szerzett károsodásakor az NK és a CD8 T-limfociták citotoxikus hatása csökken és limfóma, leukémia alakulhat ki, pusztán hipomagnézémia esetén is.

Szó esett a szövethárosodás és az idült gyulladásos reakció (korszerűsített beültetése után is felléphet!) szerepéről is. Az idézett saját anyagban a rákos betegekben szignifikánsan többször fordult elő a vonatkozó CRP-emelkedés, mint a kontrollcsoportban.

Összegezve: a komplex hatások feloldják azt az ellentmondást, hogy a csökkent és emelkedett Mg -szint, a daganatokban észlelhető Mg -akkumuláció egyaránt daganatgátló hatású lehet, hasonlóan az ivóvíz csökkent-emelkedett deutériumtartalmához. A magasabb intracelluláris értékek Ca^{++} - és Mg^{++} -beáramlási blokkot okozva fejtik ki antimitotikus hatásukat. A Mg^{++} döntő szerepére utal, hogy ennek a kationnak nincs a vérpálya-sejt közötti tér-intracelluláris tér között lényeges elektrokémiai gradiense, és a sejten belüli riboszomális fehérjeszintézist szabályozó protein kináz (mTOR) szubsztrátja szintén a $MgATP^{++}$, éppen úgy, mint a $Na^+/K^+-ATPáz$ -é, ami tovább hangsúlyozza a megfelelő környezeti Mg -ellátottság szerepét a Mg daganatgátló hatásában.

Az élénk vitában elsősorban az anionok (Cl^- , SO_4^{2-}) kompartmentek közötti koncentrációkülönbségének, illetve állandóságának jelenleg kevésbé ismert szerepéről volt szó.

Kiss Zoltán

KOVÁCS ATTILA FELVÉTELE

lyi Károly (matematika), dr. Lenkei Irén és dr. Lénárd Gábor (biológia), valamint dr. Cs. Nagy Gábor és Oláh Gábor Péter (kémia).

Gratulálunk a díjazottaknak és további sikereket, tehetséges tanítványokat kívánunk pályájukon!

Gábor Dénes-díj

A Gábor Dénes-díjakat minden évben a jelentős tudományos, műszaki-szellemi alkotást létrehozó, kiemelkedő teljesítményű, innovatív kutató, fejlesztő, feltaláló, oktató szakembereknek ítéli oda. Az idei kitüntetettekkel együtt eddig 177-en kapták meg az elismerést.

Az MTA doktorai közül elismerést kapott többek között az MKE előző elnöke, Mátyus Péter is. Mátyus Péter vegyészmér-



KITÜNTETÉSEK

Rátz Tanár Úr Életműdíj

Idén is a Magyar Tudományos Akadémián adták át a Rátz Tanár Úr Életműdíjakat. Az Ericsson Magyarország, a Graphisoft és a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Alapítvány a Magyar Természettudományos Oktatásért 2001 óta ítéli oda az életműdíjat, amely mára a hazai természettudományos oktatás, és egyben a közoktatás egyik legrangosabb elismerésére lett. Az életműdíjat évente két-két matematika, fizika, kémia és biológia szakos tanárnak ítéli oda, akik kimagasló szerepet töltenek be tárgyük népszerűsítésében és a fiatal tehetségek gondozásában. A három vállalat ezzel a díjjal járul hozzá a magyarországi természettudományos oktatásban végzett tanári munka rangjának, erkölcsi és anyagi megbecsülésének növeléséhez.

2013 díjazott tanárai: dr. Halász Tibor és Horváth Gábor (fizika), Brenyó Mihály és Brenyó Mihályné, valamint Káro-

nök, a Semmelweis Egyetem egyetemi tanára, a Szerves Vegytan Intézet igazgatója. A professzornak kimagaslóan innovatív gyógyszerkutatási tevékenységéért, a Parkinson-betegség gyógyszeres kezelésében ígéretes molekulacsoport kifejlesztésében tanúsított alkotó közreműködéséért, a magyar gyógyszerkutató szakemberek nemzetközi hírnevének öregbítéséért, a Bionikai Innovációs Centrum szervezésében vállalt szerepéért, valamint a doktoranduszképzésben nyújtott munkásságáért ítelték oda a díjat.

GYÓGYÍTÁS

Magyar-román kutatóprogram a személyre szabott rákterápiáért

A rák biológiájáról, diagnosizáról, a személyre szabott kezeléssel szülő, egyhetes tanfolyam színhelye volt november 4-től 10-ig Szegeden a tudományegyetem biológiai épülete. Az Európai Unió pályázatán kétfélmillió dollárt nyert közös magyar-román projekt nyertesei, a Szegedi Tudományegyetem Biokémiai és Molekuláris Biológiai, valamint Genetikai Tanszéke, az SZBK és az aradi Vasile Goldis Western Egyetem által rendezett őszi iskolán a két ország biológusai, orvosai, PhD-hallgatói ismerkedtek meg a rákkal kapcsolatos új kutatási irányvonalakkal, a legmodernebb vizsgálati módszerekkel.

A kutatási program 2013 elején indult a Magyarország-Románia Határon Átnyúló Együttműködési Program (HURO/1101) tá-



mogatásával. A közös munkát Aurel Ardelean professzor, az aradi Vasile Goldis Western University elnöke vezeti. A román koordinátor Anca Hermenean professzor, a Vasile Goldis Western University rektorhelyettese, a magyar koordinátorok: Boros Imre professzor, a Biokémiai és Molekuláris Biológiai Tanszék vezetője, Deák Péter, a Genetika Tanszék vezetője és Krizbai István, az SZBK Biofizikai Intézetének tudományos főmunkatársa.

A szakemberek célja, hogy erősítsék a határ menti régióban működő, és a projektben résztvevő intézmények együttműködését a rákkutatásban. Ennek érdekében szorgalmazzák új kutatóegységek létrehozását, s olyan kutatási projektek elindítását tervezik, amelyek a rák kialakulásában szerepet játszó folyamatok feltárásával a célzott rákterápiához visznek közelebb. A továbbképző kurzusok szervezésével a rákkutatásban és a rákterápiában közvetlenül alkalmazható in vivo és in vitro kísérleti módszerek elsajátítását teszik lehetővé a szakemberek számára.

A program eredményeként már megvalósult a pályázat néhány célkitűzése: az SZTE Genetika Tanszékén létesült egy új, modern konfokális lézerpáztázó mikroszkóppal is felszerelt citogenetikai laboratórium, az SZBK-ban üzembe helyezték az EU támogatásával beszerzett kétfotonos lézerpáztázó mikroszkópot, az aradi Vasile Goldis Nyugati Egyetemen pedig megnyílt egy modern állatház. Az első állomás, az Aradon megtartott, az elméleti eredményekre fókuszáló konferencia után novemberben gyakorlati ismereteiket gazdagították Szegeden a résztvevők. **Ch. Á.**



Magyarország–Szerbia

IPA Határon Átnyúló Együttműködési Program

2013. november 6. napján szegedi és újvidéki kutatók nyitották meg azt a 18 hónapos futamidejű szerb–magyar együttműködésen alapuló projektet (HELICO, HUSRB/I203/214/230), amely a MTA Szegedi Biológiai Kutatóközpont és az Újvidéki Egyetem között jött létre. A projektgazdák kitűzött célja, hogy a *Helicobacter pylori* nevű baktérium ellen hatékony, növényi eredetű, antibakteriális, peptidalapú terápiát fejlesszenek ki. Ezzel a kórokozóval a lakosság jó része még gyermekkorában megfertőződik. Egyéntől függően enyhébb vagy súlyosabb gyomorbántalmakat okoz és a későbbiekben szerepet játszhat a gyomorrák kialakulásában is. Bár kombinált antibiotikum-terápiával jól kezelhető, a szabálytalanul szedett gyógyszereknek, illetve a kórokozó változékonyságának révén egyre több antibiotikum-rezisztens törzssel találkozunk a klinikusok.

A projektet magyar oldalon Buzás Krisztina, szerb oldalon Neda Mimica Dukic vezeti.

Molekuláris biológiai diagnosztika

A TargetEx Kft. 2013. november végén bejelentette, hogy a „Piacorientált kutatás-fejlesztési tevékenység támogatása” című pályázat keretében elnyert támogatással új kutatási projektet indított „Molekuláris biológiai diagnosztikai reagensek termékportfóliójának kialakítása” címmel. A pályázat összköltsége várhatóan 102 millió forint lesz, melyhez több mint 71 millió forint támogatást fog kapni a vállalkozás.

„A támogatás elnyerése fontos előrelépés a cég életében és le-

hetőséget nyújt a cég molekuláris biológiai termékportfóliójának kiterjesztésére, amire az akadémiai kutatásokban és alkalmazott (klinikai) diagnosztika területén jelentős kereslet mutatkozik” – mondta Cseh Sándor, a magyar biotechnológiai kisvállalat ügyvezetője. „Nagy várakozással tekintünk az új projekt végrehajtása elé, amely több irányban is növeli cégünk versenyképességét. A TargetEx Kft. tevékenységének fókuszában a biotechnológiai kutatás-fejlesztés áll, ezen belül kiemelt szerep jut a molekuláris biológiai diagnosztikai termékek fejlesztésére. A projekt keretében célul tűztünk ki egy reagens termékportfólió kialakítását nagy másolási pontosságú polimeráz enzim, bakteriális DNS-mentes Taq polimeráz enzim, valamint a megnövelt hőstabilitással rendelkező reverz transzkriptáz enzim előállítására révén.”

„A Pfu polimeráz enzimet a *Pyrococcus Furiosus* hipertermofil organizmusból izolálták. Különlegessége, hogy 3'-5' exonukleáz aktivitással is rendelkezik, ezért képes kijavítani a DNS-szintézis során keletkező esetleges hibákat. Pontosságára jellemző, hogy átlagosan 1,3 millió bázisonként keletkezik egy hibás átírás, ezért gyakran használják klónozás és mutagenézis során. Az enzim hátrányos tulajdonsága, hogy a Taq polimerázhoz képest lassabb: épp ennek a tulajdonságán szeretnénk javítani.” – magyarázza Lőrincz Zsolt, a TargetEx Kft. tudományos igazgatója. „A DNS polimerázok felhasználásánál értelemszerűen törekedni kell arra, hogy a lehető legkevesebb gazdasejt (pl. *E. coli*) DNS-szennyeződést vigyünk be egy PCR reakcióba. A bakteriális szennyeződés elkerülésének egyik módja lehet, hogy az enzimet élesztőben állítjuk elő. Az RNS-ről történő DNS-átíráshoz használható a reverz transzkriptáz (RT) enzim. Leggyakrabban a rágcső leukémiavírusból származó enzimet használják klónozás során, RNS-szekvenálásra, genomanalízisre. A pályázat során ennek az enzimnek a hőstabilitását szeretnénk növelni.”

„A projekt során a TargetEx Kft. fel tudja használni a molekuláris biológia, a fehérjetervezés, a fehérjetisztítás, a rekombináns fehérje-előállítás és a fehérje funkcionális vizsgálatok területén meglévő széles körű ismereteit, amelyek ezeken a területeken a meglévő korszerű műszaki-tudományos eredmények alkalmazását jelentik. Ezek felhasználásával a projekt során új, a gyakorlatban is hasznosítható, akár szabadalmaztatható szellemi termékek, illetve műszaki-tudományos eredmények jönnek létre, ami kulcsfontosságú a cég versenyképességének fenntartása érdekében” – tette hozzá Dormán György, a TargetEx Kft. új termékek bevezetéséért felelős szakértője.

„Örülünk a Nemzeti Fejlesztési Ügynökségtől kapott pályázati támogatásnak. A 102 millió Ft összköltségű projekt 69%-át valósítjuk meg az Európai Unió és az Európai Regionális Fejlesztési Alap forrásaiból, amely nélkül a projekt nem valósulhatna meg. Projektünk a biotechnológia ágazatban biztosít fejlesztést, amely az ágazatban főtevékenységet végző TargetEx Kft. termékportfóliójának bővítéséhez járul közvetlenül hozzá és ennek révén az Új Széchenyi Terv kitörési pontján keresztül csatlakozik a magyar gazdaság meghatározó céljaihoz. Az Európai Unió Bizottsága, valamint a magyar kormány által meghatározott fenntarthatósági irányelveket figyelembe véve a projekt során társaságunk gondot fordít a környezetvédelemre, és az esélyegyenlőség javításának horizontális szempontjaira is, amely értékeket teremtet a cég, illetve a magyar gazdaság számára.” – egészítette ki Bágyi István, a TargetEx Kft. pályázati igazgatója.

TargetEx Kft.





Vegyipari mozaik

Az MTA új doktorai. 92 kutató vehette át a Magyar Tudományos Akadémia székházában Pálkás József elnöktől az MTA doktora cím megszerzéséről szóló oklevelet. Az akadémiai doktorok száma velük együtt 2792-re bővült.



Az MTA köztestületének kiemelt feladata egy olyan tudományos minősítési rendszer működtetése, amelyben a kimagasló, nemzetközileg is versenyképes eredményeket elért kutatók számára ítéli oda az MTA doktora címet. A Magyar Tudományos Akadémia Doktori Szabályzata szerint a címet azok a kutatók kaphatják meg, akik PhD- vagy azzal egyenértékű tudományos fokozattal rendelkeznek, az általuk művelt tudományágat és szakterületet pedig a tudományos fokozat megszerzését követően jelentős, eredeti tudományos eredménnyel gyarapították.

A legtöbb új MTA doktora az Orvosi Tudományok Osztályához, a Biológiai Tudományok Osztályához, illetve a Kémiai Tudományok Osztályához tartozik. Folytatódik az az évek óta megfigyelhető tendencia, hogy az új akadémiai doktoroknak csaknem a fele a korábbi Bolyai-ösztöndíjasok közül kerül ki. A címet megszerzők között a kandidátusokhoz képest egyre nő a PhD-fokozattal rendelkezők aránya is. A tapasztalatok szerint a tudományos fokozatot az élettudományokkal, illetve a természet- és műszaki tudományokkal foglalkozók a társadalom- és bölcsészettudományok művelőinél általában korábban, már a harmincas éveik elején megszerzik, azonban annak odaítélését követően általában tudományterülettől függetlenül ugyanannyi idő telik el az MTA doktori cím megszerzéséig. Az MTA doktorainak

életkora a cím megszerzésekor 50 és 60 év közé tehető. Az oklevelet átvevő kutatók között idén a legfiatalabb csupán 37 éves, míg a legidősebb 80 esztendő.

Az MTA új kémiai doktorai 2013-ban: **Boda Dezső, Borbás Anikó, Janáky Tamás, Kállay Mihály, Lente Gábor, Martinek Tamás, Mastalir Ágnes, Nagy Gábor Mihály, Péter László, Réczey Istvánné (Csorba Katalin).**



Új Lendület-, vendégkutatói és posztdoktori pályázat. Az akadémiai intézmények és egyetemi kutatások dinamikus megújítása, a magyar kutatócsoportok nemzetközi versenyképességének erősítése, valamint a tudományos fokozatot szerzett kiváló fiatal kutatók legjobb hazai tudományos műhelyekben végzett kutatásainak elősegítése érdekében az MTA elnöke három új pályázatot hirdetett meg: a már külföldön is példaértékűnek tekintett *Lendület* programot, a nemzetközileg kiemelkedő külföldi tudósok magyarországi kutatómunkáját lehetővé tévő vendégkutatói meghívást, valamint a posztdoktori pályázatot.

A Magyar Tudományos Akadémia hatodik alkalommal hirdette meg a *Lendület* kiválósági pályázatot. A 2009-es elindulása óta nemzetközileg is ismertté vált program célja az akadémiai intézmények és egyetemi kutatások dinamikus megújítása nemzetközileg kimagasló teljesítményű kutatók és kiemelkedő fiatal tehetségek külföldről történő hazahívásával, illetve itthon tartásával. A *Lendület* a kiválóság és a mobilitás együttes támogatására törekszik, ezért a nyertes pályázókat befogadó akadémiai intézményekben és egyetemeken az új téma kutatására alakuló kutatócsoportok számára biztosít forrásokat, nem pedig a már létező csoportokat támogatja. Az új *Lendület*-kutatócsoportok indítására 2014-ben 400 millió forint áll majd rendelkezésre. Mindkét kategóriában egyaránt lehet pályázni akadémiai intézményekbe és hazai egyetemekre is.

Folytatódik a nemzetközileg kiemelkedő külföldi tudósoknak az MTA kutatóközpontjainak és kutatócsoportjainak tudományos tevékenységébe való bekapcsolódását elősegítő MTA vendégkutatói program is. Az akadémiai kutatóhálózat megújítási programjának új elemeként első ízben 2012-ben meghirdetett pályázat keretében a nemzetközileg elismert kiválóságok közül eddig 10 tudós kapott rá lehetőséget, hogy 3–10 hónapot Magyarországon töltsön. Az MTA kutatóközpontjaiban és kutatóintézteiben működő kutatócsoportokkal, valamint a magyarországi egyetemeken működő, az Akadémia által támogatott kutatócsoportokkal végzendő közös kutatómunkára 2014-ben 120 millió forint áll rendelkezésre. Ebből a keretből néhány olyan aktív, élvonalbeli kutatást végző külföldi kutató meghívására van lehetőség, akinek kutatási teljesítménye világviszonylatban is kiemelkedő. A vendégkutatókkal együttműködésben elkészített, valamint a befogadó intézmény vezetője által jóváhagyott pályázatokat az MTA kutatóközpontjaiban, kutatóintézeteiben és a hazai egyetemeken működő *Lendület*- és más akadémiai kutatócsoportok vezetői nyújthatják be az MTA elnökének címezve.

A kutatói életpálya egyik legfontosabb időszakának számító posztdoktori periódusban nyújt támogatást az a kutatói program, amelyben olyan magyarországi vagy külföldi kutatók vehetnek részt, akik a pályázat keretében való foglalkoztatásuk kezdetekor nem töltik be a 35. életévüket, tudományos fokozattal (PhD- vagy DLA-fokozat) és kutatási tapasztalattal rendelkeznek, valamint nem állnak munkavégzésre irányuló jogviszonyban a befogadó kutatóhellyel. A teljes kutatói pályáív kiépülését, valamint a ku-



1. Boda Dezső
2. Borbás Anikó
3. Janáky Tamás
4. Kállay Mihály
5. Lente Gábor
6. Martinek Tamás
7. Mastalir Ágnes
8. Nagy Gábor Mihály
9. Péter László
10. Réczey Istvánné (Csorba Katalin)



atárcsoportok versenyképességét egyaránt erősítő posztdoktori program nyerteseinek a posztdoktori időszak végéig nemzetközi folyóiratban publikálható tudományos eredményeket kell elérniük, továbbá a támogatott kutatási témában a témavezető kutató szakmai hozzájárulásával nemzetközileg meghirdetett pályázatot kell benyújtaniuk Magyarországon megvalósítandó tudományos projektekre, illetve – tudományterülettől függően – kutatás-fejlesztéssel foglalkozó vállalkozásokkal és egyéb szervezetekkel kell együttműködést kialakítaniuk eredményeik hasznosítására. Az MTA esélyegyenlőségi programja értelmében gyermekként 2 év korhatárkedvezmény adható mind az életkor, mind a tudományos fokozat megszerzésének határidejét illetően. (MTA)



GEDEON RICHTER

Jó hírek a Richtertől. Az Európai Gyógyszerügynökség (EMA) Emberi Felhasználásra Szánt Gyógyszerkészítmények Bizottsága (CHMP) pozitív véleményt adott ki a Richter által benyújtott indikációkiterjesztési kérelemre, és jóváhagyta az 5 mg-os Esmya (uliprisztál acetát) tablettának legfeljebb két, egyenként három



hónapos cikluson keresztül történő alkalmazását a méhmióma kezelésére.

Az uliprisztál-acetát hatóanyagot tartalmazó Esmya, a HRA Pharmától licenccbe vett kémiai vegyület hatásmechanizmusában egyedülálló, szájon át adagolható szelektív progesteronreceptor-modulátor készítmény, mely visszafordíthatóan gátolja a célszövetek progesteronreceptorait. A 12 hétig napi egyszer szájon át adagolható szer (a GnRH-agonista készítmények alkalmazása injekcióval történik, nem szájon át) megakadályozza a méhvérzést, mérsékli a vérszegénység tüneteit, csökkenti a mióma méretét a műtetre való felkészülés során.



Az ún. „II-es típusú módosítás” kérelmet 2013 júliusában nyújtotta be a Richter. A CHMP pozitív véleménye további támogatásra kerül az Európai Bizottság felé, amely előreláthatólag a vélemény kiadásától számított két hónap múlva az Európai Unió valamennyi tagállamára kiterjedő hatállyal módosítja az Esmia 5 mg-os készítmény forgalomba hozatali engedélyét.

Az Esmia 5 mg-os tabletta 2012. február 23-án kapott az Európai Unió valamennyi tagállamára kiterjedő forgalomba hozatali engedélyt. A kezelés időtartama jelenleg három hónapra korlátozódik. A most kiadott CHMP véleményre alapozva lehetőség nyílik egy újabb, három hónapos kezelési időszakra kiterjeszteni az Esmia 5 mg-os tablettára kiadott forgalomba hozatali engedélyt. Az egyik fő növekedési lehetőséget a Richternél jelenleg az Esmia jelenti, az áttörést azonban nem a mostani bejelentéstől, hanem a terápiás kiterjesztéstől várhatjuk majd, aminek hatására 2015–16 környékén, a felfutás évében az Esmia forgalma 200 millió euróra emelkedhet. A Richter 2012 harmadik negyedében indította el az Esmia hosszú távú, periodikus kezelésére vonatkozó fázis III. klinikai vizsgálatokat annak érdekében, hogy a jelenlegi terápiás indikációt kiterjessze, ezáltal több érintett beteg számára is lehetőség nyílhat a sebészeti beavatkozás elkerülésére. A vizsgálatok várható befejezési ideje 2014 második negyedévé, pozitív eredmény esetén a hatás legkorábban 2015 harmadik negyedévében jelentkezhet. (portfolio)

Banai Endre összeállítása

MKE-HÍREK

Konferenciák, rendezvények

16. Labortechnika Kiállítás

2014. március 18–20.

SYMA Rendezvényközpont C épület
(Budapest, XIV. Dózsa György út 1.)

XLVI. Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny

2014. április 25–27.

Szegedi Tudományegyetem

A Versenykiírás a www.irinyiverseny.mke.org.hu honlapon található.

ESCAPE 24 – European Symposium on Computer Aided Process Engineering

2014. június 15–18.

Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1117 Budapest,

Pázmány Péter stny. 1/a

ONLINE REGISZTRÁCIÓ: <https://www.mke.org.hu/conferences/escape24/registration/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Bondár Mónika, escape24@mke.org.hu

ICOS-20 – 20th International Conference on Organic Synthesis

2014. június 29. – július 4.

Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1117 Budapest,

Pázmány Péter stny. 1/a

ONLINE REGISZTRÁCIÓ: <http://www.icos20.hu/>

Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk!

TOVÁBBI INFORMÁCIÓK: Schenker Beatrix, icos20@mke.org.hu

MKE egyéni tagdíj (2014)

Kérjük tisztelt tagtársainkat, hogy a **2014. évi tagdíj** befizetéséről szíveskedjenek gondoskodni annak érdekében, hogy a Magyar Kémikusok Lapját 2014 januárjától is zavartalanul postázhassuk Önöknek. A tagdíj összege az egyes tagdíj-kategóriák szerint az alábbi:

• alaptagdíj:	8000 Ft/fő/év
• nyugdíjas (50%):	4000 Ft/fő/év
• közoktatásban dolgozó kémiantanár (50%)	4000 Ft/fő/év
• ifjúsági tag (25%):	2000 Ft/fő/év
• gyesen lévő (25%)	2000 Ft/fő/év

Tagdíj-befizetési lehetőségek:

- banki átutalással
(az MKE CIB banki számlájára: 10700024-24764207-51100005)
- a mellékelt csekken
- személyesen (MKE-pénztár, 1015 Budapest, Hattyú u. 16. II/8.)

Banki átutalásos és csekkes tagdíjbefizetés esetén a **név, lakcím, összeg rendeltetése** adatokat kérjük jól olvashatóan feltüntetni. Ahol a munkahely levonja a munkabérből a tagdíjat és listás átutalás formájában továbbítja az MKE-nek, ez a lista szolgálja a tagdíjbefizetés nyilvántartását.



Tájékoztatjuk tisztelt tagtársainkat, hogy a
személyi jövedelemadójuk 1 százalékának felajánlásából idén 895 289 forintot
utal át az APEH Egyesületünknek.

Köszönjük felajánlásait, köszönjük, hogy egyetértenek a kémia oktatásáért és népszerűsítéséért kifejtett munkánkkal. A felajánlott összeget ismételtén a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, a 8. Kémikus Diákszimpozium, valamint a 2013-ban ötödször megrendezett Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használtuk fel, valamint arra a célra, hogy kiadványaink (KÖKÉL, Magyar Kémikusok Lapja, Magyar Kémiai Folyóirat) eljussanak minél több, kémia iránt érdeklődő határon túli honfitársunkhoz.

Ezúton is kérjük, hogy a 2013. évi SZJA bevallásakor – értékelve törekvéseinket – éljenek a lehetőséggel, és személyi jövedelemadójuk 1%-át ajánlják fel az erre vonatkozó Rendelkező Nyilatkozat kitöltésével.

Felhívjuk figyelmüket, hogy akinek a bevallás pillanatában

adótartozása van, az elveszíti az 1% felajánlásának a lehetőségét!

Az MKE adószáma: 19815819-2-41

Terveink szerint 2014-ben az így befolyt összeget ismételtén a hazai kémiaoktatás feltételeinek javítására, a Középiskolai Kémiai Lapok, az Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny, a XV. Országos Diákvegyész Napok, valamint a 2014-ben hatodszor szervezendő Kémiatábor egyes költségeinek fedezésére használjuk fel.

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

Előfizetés a Magyar Kémiai Folyóirat 2014. évi számaira

A Magyar Kémiai Folyóirat 2014. évi díja fizető egyesületi tagjaink számára 1400 Ft. Kérjük, hogy az előfizetési díjat a tagdíjjal együtt szíveskedjenek befizetni. Lehetőség van átutalással rendezni az előfizetést a Titkárság által küldött számla ellenében. Kérjük, jelezzék az erre vonatkozó igényüket!

Köszönjük mindazoknak, akik 2013-ban kettős előfizetéssel hozzájárultak a határon túli magyar kémikusoknak küldött Folyóirat terjesztési költségeihez. Kérjük, aki teheti, 2014-ben is csatlakozzon a kettős előfizetés akcióhoz.

MKE Titkárság

Az MKE Intézőbizottság ülése

2013. december

1. A 2014. évi MKE rendezvénynaptárban egyelőre nyolc MKE Titkárság által rendezendő konferencia szerepel, de kettő közülük, az ESCAPE 24 és az ICOS–20 várhatóan jelentős nemzetközi részvétellő esemény lesz.
2. Az Intézőbizottság elfogadta az MKL 2014. évi laptervét.
3. Az IB meghallgatta a Fiatal Kémikusok Fóruma elnökének tájékoztatóját a korosztályos egyesületi szervezet elmúlt egy évi tevékenységéről. További támogatásának kinyilvánítása mellett az IB egyetértett azzal, hogy több kisebb akcióval célszerű a szervezet működését tovább aktivizálni.
4. Az IB megvitatta azt az előterjesztést, amely a jutalom egyéves tagdíjmentes egyesületi tagságot úgy módosítaná, hogy a jutalmazottak az egyesületi kedvezmények megkapása mellett tényleges egyesületi tagságot csak akkor nyernének el, ha a jutalomév után tagdíjbefizetéssel vállalnák a tagjelölt státuszuk tényleges tagságra váltását. A javaslat mellett és ellen különböző érvek hangzottak el, végül az IB többségi véleménnyel nem támogatta a tagjelölt státusz bevezetését ajánló előterjesztést.

5. Az úgynevezett sajtószolgálati szakértői lista összeállítása ügyében az IB a szakosztályoktól fog kérni személyi javaslatokat.

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

Kovács Attila

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXIX. No. 2. February 2014

CONTENTS

Chemical investigation with computers? Nobel Prize in Chemistry 2013	38
GÉZA FOGARASI	
Nobel Prize in Physics 2013	42
DEZSŐ HORVÁTH	
Nobel Prize in Physiology or Medicine 2013	45
TAMÁS DANKÓ	
Flow linear dichroism spectroscopy for the study of nucleases	47
ESZTER NÉMETH	
Safety data sheets. Part XII. Hazard classification and labeling	50
GYULA KÖRTVÉLYESSY	
Teaching chemistry at the Fasori Lutheran Secondary School	52
RITA BENKŐ-DI GIOVANNI	
Visualization of scientific data and knowledge	54
TIBOR BRAUN	
Chemistry calendar (Edited by JÓZSEF SÁNDOR PAP)	58
Chembits (Edited by GÁBOR LENTE)	60
The Society's Life	62
News of the Month	64



Chemspec europe

The fine & speciality chemicals connection

18-19 JUNE 2014
HUNGEXPO
BUDAPEST
HUNGARY

GET READY FOR BUDAPEST

FREE visitor registration is now available online
www.ChemspecEurope.com

With over 400 companies from around the world expected to exhibit, you can count on meeting a unique blend of fine chemical suppliers, both large and small. Whatever your business, if you use chemicals then this is a must attend event for you to find solutions, learn about new innovations and connect with this special industry.

CONNECT AT CHEMSPEC LEARN | MEET | SHARE

FEATURES INCLUDE:

- ▶ Networking and private meeting areas for you to do business
- ▶ REACHReady Regulatory Services Zone and sessions
- ▶ RSC Symposium
- ▶ Pharma Workshops – in association with Scientific Update
- ▶ Agrochemical intermediates conference – in association with Agrow magazine
- ▶ Pharma Outsourcing Panel Discussion – chaired by Dr Magid Abou-Gharbia (Moulder Drug Discovery Centre, Philadelphia)
- ▶ Green Chemistry Workshops
- ▶ Exhibitor Showcases

REGISTER NOW

CONTACT THE SALES TEAM

John Lane | t: +44 (0) 1737 855 076 | e: johnlane@quartzltd.com

Organised by:



In association with:



Incorporating:



Official media partner:



WWW.CHEMSPECEUROPE.COM

vario MICRO

elemanalizátor



elementar
Analysensysteme GmbH

Technologie von Heraeus
für Qualitäts- und Umweltkontrolle

univerzális, egyszerűbb és precízebb
C - H - N - O - S - Cl



a szerkezetkutatás és
a minőségellenőrzés
nélkülözhetetlen eszköze

* vak-mentes mintaadagolás

* 6-10 perc/mérés

* 42 x 55 x 55 cm

* egyszerű kezelés

* 0,02 - 300 mg minta

* kevés karbantartás

* IRMS lehetősége

* égetés 850 - 1400 °C-on

* évekig stabil kalibráció

* 21CFR part 11 szoftver

* felügyeletmentes üzem

* S-mérés 2 ppm-től !

* szilárd és folyadék mintákhoz

* digitális, zavarmentes mérőjel

* 10 év kemence-garancia !

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



AKTIVIT Kft.

1145 Budapest, Pétervárad u. 14.

Tel: +36-(1)-470-0125, 221-7865.

Levél: 1581 Budapest 146, PF.: 104.

Fax: 252-9940, Mail: info@aktivit.hu, web: www.aktivit.hu

Környezetvédelmi műszerek, analitikai eszközök