

Kémia az ezredfordulón

Kémia, modern vegyipar nélkül nincs fejlett civilizáció, de ezek a környezetvédelem kedvenc botránykövei is egyúttal. Az itt közreadott tanulmányokból kitűnik, hogy környezetünk védelmét, épségének megóvását egyebek között éppen a kémia tudományának és alkalmazásának eredményei szolgálják. Márta Ferenc a tudomány, Szépvölgyi János a vegyipari alkalmazások oldaláról ad helyzetképet és mutat be trendeket a közelgő új század elejére. Zrinyi Miklós részben egy merőben új vonulattal, az intelligens anyagokkal ismerteti meg az olvasót, részben azok hazai kutatási eredményeket is hordozó alkalmazásaival, míg Schön István tanulmánya folytatja a Magyar Tudományban a hazai gyógyszeripari kutatásokkal foglalkozó írások sorát. Biró Zoltán egy igen nagy hasznot hozó technológiát mutat be a kőolaj-iparból, amelyet egyébként a közelmúlt sajnálatos, de szerencsés kimenetelű balesete emelt reflektorfénybe.

Márta Ferenc

A kémia lehetőségei és feladatai

A kémia szerepe a XX. században

A most lezáruló XX. században a kémia, de a természettudomány többi ága is hatalmas mértékben és ütemben fejlődött. E fejlődésnek köszönhetően született eredmények gyakorlati hasznosítása alapvető változást idézett elő az emberek életében, életmódjában, életminőségében.

A kémiai tudomány és az eredményét hasznosító iparágak — elsősorban a vegyipar — vitathatatlanul nagymértékben járultak hozzá az emberiség életkörülményeinek javításához és anyagi jólétének emeléséhez. A növekvő létszámú emberiség a vegyipar termékei nélkül ma már nem tudna boldogulni, a mind nagyobb mértékű

és sokrétűbb anyagfelhasználási igényét nem tudná kielégíteni. A természetben található anyagok sokoldalú átalakításával, valamint mind több — a természetben elő nem forduló — anyag szintetikus úton történő előállításával létrehozott termékek nélkül nehezen tudnánk mindennapi életünket elképzelni. Gondoljunk csak például olyan anyagokra, mint a fémek, ötvözetek, bőr, papír, festékek, kozmetikumok, felület védelmére szolgáló lakkok, szappanok, tisztítószeres, hajtóanyagok, vizlágyítók, víztisztítószeres, fertőtlenítőszeres, mosószeres, kenőanyagok, üzemanyagok, műtrágyák, rovarirtó szeres, gyomirtók, villamos elemes, ragasztók, polimerekből készült különféle szerkezeti anyagok stb.

A különböző szintetikus anyagok előállításában a közönség számára is leginkább érzékelhető fejlődés a *műanyagok* terén következett be. Manapság egyébként oly sokféle polimert gyártanak olyan sokféle célra, hogy egy modern társadalom már nem képzelhető el ezek nélkül. Mindezt az tette lehetővé, hogy a kémikusok a szerves molekulák szintézisére vonatkozóan több évtized alatt szerzett tapasztalatok rendszerezésével és értékelésével, valamint az anyagok makroszkopikus tulajdonságait meghatározó tényezőkre vonatkozó mind mélyrehatóbb ismereteik révén úgy tudták irányítani a polimerizációs folyamatokat, hogy a kívánt felhasználási igénynek megfelelő fizikai és kémiai tulajdonságokkal rendelkező polimer keletkezzék. Vannak alkalmazási területek, amelyeken a műanyagok az elmúlt évtizedek során annyira kiszorították a régebbi hagyományos anyagot, hogy az egykori, helyettesített anyag szinte a feledés homályába került. A szintetikus szerkezeti anyagok műszaki és gazdasági jelentőségére nem is az a legjellemzőbb, hogy bizonyos körülmények között más szerkezeti anyagokat helyettesítenek, hanem az, hogy a hagyományos szerkezeti anyagoktól nagymértékben különböző, különleges tulajdonságaik kombinációival rendkívül kiszélesítették a rendelkezésre álló szerkezeti anyagok választékát.

Közismert, hogy a gépjárműves és repülőgépes gyártásánál a könnyű és nagy szilárdságú szálerezített kompozitokat egyre nagyobb mértékben alkalmazzák üzemanyag-megtakarítás és a biztonság növelése céljából. Ugyancsak közismertek a különböző elektronikus eszközöknél kijelzőként használt folyadékkristályok, amelyek egy- vagy kétdimenziós rendezettségben elhelyezhető szerves molekulák. Az egy dimenziós (lineáris) rendezettségű folyadékkristálynak megfelelő polimerbe történő beépítésével rendkívül nagy (az acélnak mintegy tízszerese) szakítószilárdságú szálak állíthatók elő, amelyek az acélt helyettesíthetik a repülőgépvázról kezdve a golyóálló mellényig. (Ez utóbbit már néhány évtized óta használják.)

A hetvenes évek elején kezdődött el az elektromosan vezető és félvezető szerves polimerek kutatása, amelyben a jelentős előrelépést az a megfigyelés eredményezte, hogy a poliacetilén tiszta állapotban mért igen kis vezetőképessége megfelelő kémiai kezelés hatására mintegy tízenegy nagyságrenddel is megnövekszik. A poliacetilén után számos újabb polimert sikerült előállítani, amelyek vezetőképessége kémiai kezeléssel ugyanúgy szabályozható volt, és fizikai, stabilitási, szerkezeti sajátosságai néhány szempontból még jobbák, mint a poliacetiléné. Lényegében a kutatók leleményességétől és tudásától függött és függ, hogy e polimerek vezetőképességének a polimerek sokféle előnyös tulajdonságával — stabilitás, képlékenység, rugalmasság stb. — való kombinációja révén milyen további alkalmazási lehetőségeket sikerül felderíteni. Ilyen irányú kutatások már bizonyítékot szolgáltatottak arra, hogy ezekből a polimerekből olcsó fotógalvánelemek készíthetők a napenergia elektromos árammá történő átalakítására, továbbá olyan akkumulátorok hozhatók létre, amelyeknek tömege tízed része az ólomakkumulátorokénak, energiasűrűségük ugyanakkor háromszor nagyobb és a feszültséget egy nagyságrenddel rövidebb idő alatt adják le és veszik fel. Eme előnyös tulajdonságokat például a pacemaker akkumulátorok gyártásában már évekkel ezelőtt hasznosították.

A szerves polimerek egy másik — új alkalmazási lehetőséget ígérő — csoportját sikerült felderíteni, amelyekből ún. „önszigetelő” vezetősálak készíthetők. Ezek a

szálak hossztengegyük irányában fémes vezetőként, erre merőlegesen pedig szigetelőként viselkednek, aminek a mikroelektronika területén fontos alkalmazási lehetősége lehet. Egyébként a mikroelektronika létrejöttében és fejlődésében a kémia meghatározó szerepet játszott mind a nagy tisztaságú egykristályok előállításában, mind az integrált áramkörök gyártásánál. (Érdekesség kedvéért említendő, hogy az első integrált áramkört negyven évvel ezelőtt egy kémikus és egy fizikus — G. Moore és R. Noyce — állította elő.)[4]

Szintén jól ismert, hogy a távközlésben a rézhuzalokat az üvegszálak (optikai szálak) váltották fel, amelyek adat- és jelátvitel kapacitása és sebessége nagyságrendekkel nagyobb mint a rézé. Többféle — általában kémiai — módszert használnak az üvegrúd gyártására, amelyekből a hajszálvékony szál húzása történik. A szálát polimerrel vonják be, hogy az erősségét csökkentő mikroszkopikus karcoktól és nedvességtől védjék.

A műanyagok térhődtására talán a legkézenfekvőbb példát az öltözködésünkben használt anyagok és a lakberendezési tárgyak szolgáltatják. A különböző műanyag szálak — nylon, acril, poliészter stb. — megfelelő kombinációja a kémiailag kezelt cellulózzal szín- és alaktartó, valamint gyűrészálló anyagok gyártását tették lehetővé. A magas hőmérsékletnek ellenálló polimerekből könnyű védőruhákat készítenek tűzoltók számára, továbbá speciális polimerekből — főleg sportolók részére — olyan szöveteket gyártanak, amelyek az izzadságból keletkező vízpárát átengedik, de az eső vagy a hó a víztaszító szövetfelületen nem tud átjutni.

A kémia által előállított új anyagok körében jelentős helyet foglalnak el azok a biológiailag aktív vegyületek, amelyek hozzájárultak az emberiség élelemmel való ellátásához és egészségének védelméhez.

A kémia döntő szerepet játszott a mai modern mezőgazdaság létrehozásában és fejlődésében. Közismert, hogy a mezőgazdaság jelenlegi terméseredményei nem lettek volna elérhetők a műtrágyák, a különböző növényi hormonok és növekedést szabályozó vegyületek, gyomirtó- és rovarölőszerek alkalmazása nélkül. A mezőgazdasági hozamok növekedésének mintegy kétharmad része a termény minőségét és mennyiségét javító műtrágyák és növényvédőszer alkalmazásának eredménye. A termény tárolására kialakított eljárások, az élelmiszerek romlását megakadályozó adalékok, tárolásukat hosszabb időre biztosító speciális műanyagból készült csomagolóanyagok teszik lehetővé, hogy a lakosság részére minden nap kielégítő mennyiségben, romlatlan és jó minőségű élelmiszer álljon rendelkezésre. Kétségtelen, hogy a mezőgazdaságban használt kemikáliák egyikénél-másikánál nem kívánatos mellékhatás is fellépett, amelyet a biológiai hatásmechanizmusok pontosabb megismerésére folytatott kutatások eredményei révén nagymértékben sikerült csökkenteni.

Az utóbbi néhány évtizedben folytatott kutatások eredményeként, manapság a különböző panaszok, betegségek megelőzésére és kezelésére hatásos *gyógyszerkészítmények* olyan széles választéka áll rendelkezésre, hogy ennek köszönhetően a korábban halálos kimenetelű betegségek jelentős részében megszűntek vagy lényegesen csökkentek. E nagy jelentőségű eredménynek elérésében döntő szerepet azok az egyre bővülő ismeretek játszottak, amelyeket a kutatók az életfolyamatok kémijára vonatkozóan szereztek, és amelyek lehetővé tették annak mélyebb és pontosabb megértését, hogy az elemi kémiai reakciók miként építik fel a biológiai folyamatokat. Ennek megértését kétségtelenül nagy mértékben elősegítette az olyan fontos biológiai molekulák szerkezetének megismerése, mint a DNS, az enzimek, a fehérjék. Talán nem túlzás azt mondani, hogy a modern biológia rendkívüli fejlődése ezzel kezdődött és folytatódott a molekulák szerkezete és biológiai hatása közötti kapcsolat egyre pontosabb felderítésével, mindezzel elősegítve a forradalmi változást jelentő géntechnológia létrejöttét.

teket, kerámiákat, kompozitokat, speciális szerkezeti polimereket alkalmaznak csipő, csukló, szemlencsék, fogak, ín, inszalag, csont, szívbillentyű, sőt magának a szívnek pótlására. A sebészeti pótlás és beültetés minősége, különösen az ideiglenes elhelyezéseknél, lényegesen javult a biológiai és szintetikus anyagok kombinációival, illetve a biopolimerek kémiai módosításával.

A szervetlen anyagok között meglepően fontos szerepet kaptak a *modern szerkezeti kerámiák*. A meglepetés oka, hogy kerámiáról általában mindenkinek a fazekas mesterség termékei vagy a porcelánok jutnak eszébe, amelyek törékenyek. A különböző kémiai komponensekből előállított különböző szerkezeti kerámiákat — oxidok, nitridek, boridok stb. — egyre nagyobb mértékben alkalmazták, mert a fémeknél sokkal könnyebbek, nagyon magas hőmérsékleten, agresszív közegben is jól használhatók, a korrózióval szemben ellenállóak. A kerámiák szerkezeti felépítésére, összetételére, mikrostruktúrájára és ezek által meghatározott fizikai és kémiai tulajdonságaira vonatkozóan végzett kutatások eredményeinek segítségével ma már olyan speciális követelményeket — kémiai, mechanikai, hő- és elektromos vezetés stb. — kielégítő kerámiák állíthatók elő, amelyeket más anyagból eddig nem sikerült. Ezzel magyarázható, hogy a kerámiák már eddig is jelentős szerepet játszottak a távközlésben, a számítógépek és különösen a nagyobb hatásfokú belső égésű motorok gyártásában. Ez utóbbinál a kerámiák azért előnyösebbek, mert a motor súlya kisebb, az üzemi hőmérséklet emelhető (a sugárhajtású motorokban pl. mintegy 500 °C-kal), aminek következtében a hatásfok jelentősen növelhető, és ráadásul még gyengébb minőségű üzemanyag is alkalmazható. Míg eleinte a kerámiákat főleg a motorok fém alkatrészeinek helyettesítésére használták, az utóbbi időben már a motor tervezésénél eleve alkalmazzák a kerámiából készült alkatrészeket. Amerikában és Japánban kerámiából készült szelepekkel, szelepszárakkal, hengerpaláستtal, hengerfejfel, kerámia bevonattal készült dugattyú zárófedéllel gyártanak tehergépkocsikhoz dízelmotorokat, amelyek vízűtés nélkül üzemeltethetők.

Az elektromosan vezető szerves polimerekkel kapcsolatban előzőekben említett teket érdemes kiegészíteni azzal, hogy bizonyos töltésátviteli kristályok 60 K hőmérsékleten éppen olyan jó elektromos vezetőnek bizonyultak, mint a réz szoba-hőmérsékleten.

A szervetlen vegyületek családjában a három elemet tartalmazó molekuláknál sikerült felfedezni viszonylag magas hőmérsékleten szupravezető anyagokat. Ezek közül például a $PbMo_6S_8$ azzal tűnt ki, hogy szupravezető tulajdonságát több ezer gauss erősségű mágneses térben is megtartotta, ami azért fontos, mert a szupravezetők egyik legfontosabb alkalmazási területe a nagy térerejű mágnesek előállítás.

A kémia szerepe az ezredforduló után

Az előzőekben említett példák alapján — ha vázlatosan is — remélhetőleg sikerült bemutatni azt a fejlődést, amelyet a kémia az elmúlt évtizedek során elért. Jóllehet, a kémiai kutatás legújabb eredményei alapján bizonyos mértékig megfogalmazhatók a közeljövőben megoldandó problémák is, arra vonatkozóan azonban nem lehet megbízható előrejelzést tenni, hogy a technika és a rokon tudományok fejlődése milyen új igényeket támaszt a kémiával szemben, továbbá, hogy milyen új — ma még meg sem jósolható — eredmények elérésére ad lehetőséget. Ezzel kapcsolatban tanulságos megemlíteni, hogy 1923-ban amikor *Linus C. Pauling* a Kaliforniai Technológiai Intézet doktoranduszaként közölte az első cikkét a molibdenit kristály szerkezetéről, és amikor a kémia az egyetemeken már doktori fokozat adására jogosult tudományszak volt, a kémikusok még elég vázlatos ismeretekkel rendelkeztek a kémiai kötésről és arról, hogy a kinetika és termodinamika hogyan készíti a molekulákat — egy speciális reakcióúton végighaladásuk során — egymással történő

reakcióra. Jóllehet, a makromolekulák létezése és fogalma már szóba került, a kémikusok többsége még nem fogadta el. A tudománytörténészek megfogalmazása szerint, ami a kémia tudományában napjainkban fontos és meghatározó ismeret, annak 70–80%-áról 1923-ban még nem tudtak. Az elmúlt 75 év alatt óriási változás következett be, csodálatos és nagy áttörést jelentő eredmények születtek a különböző igényeket kielégítő anyagok szintézisében. Ezek nagyrészt annak köszönhetőek, hogy az egyre nagyobb teljesítőképességű kísérleti eszközök, számítógépek segítségével nyerhető információk és elméleti tudásunk gyarapodásával mind mélyebb és pontosabb ismeretekre tettünk szert az anyagok szerkezeti felépítését és reakcióképességét illetően.

Ez érthető, hiszen az anyagok valamilyen célra (funkcióra) történő használati lehetőségét tulajdonságaik határozzák meg, amelyek az anyag szerkezetében bekövetkező vagy eszközölt változások eredményeként módosulnak. Az *anyag szerkezete—tulajdonsága—funkciója* közötti kapcsolatot egyre részletesebb felderítése és mélyebb megértése alapján lehetett már több esetben előre jelezni, hogy egy adott funkció ellátása milyen szerkezeti felépítésű és tulajdonságú anyagtól remélhető.

A meghatározott tulajdonságú és szerkezetű anyagok előállítására alkalmas folyamatok kialakítása és irányítása – amellyel a három paraméter közötti kapcsolat is szabályozható – nagymértékben függ a *kémiai reakcióképességre* vonatkozó alapvető ismereteinktől, éspedig attól, hogy a kémiai folyamatot felépítő elemi reakciók szerepének felderítésével válaszolni tudjunk arra a kérdésre, hogy a kémiai folyamatok miért és hogyan mennek végbe. Eme alapvető kérdések tisztázásához jelentős mértékben járultak hozzá a *reakciókinetikai- és -dinamikai* vizsgálatok, amelyek korszerű kísérleti berendezések és módszerek, — nagy teljesítményű lézerek, tömegspektrométerek, NMR-ek, lézerindukált fluoreszcencia, rezonancia, fluoreszcencia, lézer villanófény fotolízis, molekula sugárnyaláb módszerek stb.— segítségével olyan információk megszerzését tették lehetővé, amelyeket két-három évtizeddel ezelőtt még remélni sem mertünk. E kísérleti technikák és módszerek segítségével többek között

a) meghatározhatók a nano- és pikoszekundum alatt lejátszódó kémiai reakciók és a rövid élettartamú köztitermékek koncentrációjának időbeli változása,

b) nyomon követhetők a molekulán belüli és molekulák közötti energiaátadási folyamatok, amelyek kompetíciója döntő hatással van a reakció sebességére és termékeinek megoszlására.

Az anyag szerkezetére, tulajdonságára és átalakulását szabályozó törvényszerűségekre vonatkozóan szerzett ismeretek tették és teszik a jövőben is lehetővé új és hatékonyabb reakcióutak kialakítását és ezáltal különböző méretű és alakú molekulák előállítását. A hatékonyabb reakcióút kialakításának és főleg ipari mértékű megvalósításának legfontosabb eszköze a *jó hatásfokú és szelektív katalízis*. Ennek feladata, hogy a kémiai folyamat megfelelő irányításával a kívánt termék maximális hozamban keletkezzék, melléktermékek, hulladékok egyáltalán ne, vagy csak minimális mennyiségben képződjenek, és az egész folyamat megvalósítása minél kisebb energiát igényeljen. Érthető ez a követelmény, hiszen a teljes vegyipari termelésben a katalitikus eljárások részaránya eléri a 70%-ot, amelynek többsége heterogén katalízis. A heterogén katalizátorok hatásfokának javítása a kutatások állandó feladatát képezik, különösen az olyan nagy volumenű eljárásoknál, mint a kőolaj krakkolása üzemanyagra vagy olyan komponensekre, amelyekből azután különböző kemikáliák — közöttük polimerek, műszálak stb. — készíthetők.

A heterogén katalizátorok családjában az új, nagyobb aktivitású katalizátorok létrehozását, illetve a már ismert és alkalmazott katalizátorok hatásfokának javítását — a legutóbbi évek során elért eredmények tanulsága szerint is — döntő mértékben segítik azok az ismeretek, amelyek a felületek állapotának és a felületeken lejátszódó átalakulásoknak a vizsgálatából nyerhetők a ma már rendelkezésre álló korszerű

kísérleti eszközökkel (EELS, AUGER, LEED, SIMS, ESCA, SEM). Ezek által szolgáltatott információk alapján megismerhető a felületen kialakuló molekuláris képződmények szerkezete, kialakulási mechanizmusa, amelynek alapján — megértvén e folyamatok lényegét, — szabályozni lehet a felületeken lejátszódó kémiai folyamatokat.

Ezek figyelembevételével előtérbe került olyan katalizátorok előállítása, amelyek előre meghatározott alakú és méretű üregeket és csatornákat tartalmaznak, ahol a reagáló molekula a reakció számára kedvező konformáció felvételére kényszeríthető. Ilyen és hasonló eljárásokkal készített sztereoszелеktív katalizátorok előnye, hogy nemcsak a reakciók termékeinek eloszlását lehet így szabályozni, hanem a termékek alakját és méretét is.

A homogén katalízisnél a folyadékban oldható katalizátorok — általában átmeneti fémkomplexek és fémorganikus molekulák — alkalmazásával nagyon jó hatásfokkal és szelektivitással lehet a kémiai folyamatot (pl. az egyszerű szénhidrogének polimerekké átalakítását) lejátszani. Ez vetette fel az ötletet; nem lehetne-e a homogén katalízis nagy szelektivitását a heterogén katalitikus rendszer szilárd teljesítő-képességével kombinálni, az aktív centrumoknak a szilárd katalizátor felületén bizonyos rendezettséggel történő elhelyezésével.

A sztereoszелеktív alkalmazása nagyon fontos azokban az esetekben, amikor a kívánt termék mellett keletkező nem kívánatos melléktermék képződését el akarjuk kerülni. Jó példa erre a *királis vegyületek szintézise*. A királis molekula két formában létezik, amelyek nem egymásra illeszhető tükörképei (enantiomerek) egymásnak, éppen úgy, mint a bal és a jobb kéz. Nagyon sok gyógyszer csak az egyik formában fejt ki biológiai aktivitást, a másik enantiomer lehet inaktív, vagy ami rosszabb, toxikus. Ezért alapvető fontosságú az aktív formának nagy tisztasággal történő előállítása, ami klasszikus szintetikus módszerekkel nem sikerül, mert egyrészt a reakcióban mindkét forma közel azonos mennyiségben képződik, másrészt a szétválasztásuk bonyolult és költséges, továbbá a termék fele hasznavethetetlen. A probléma — vagyis az aszimmetrikus szintézis — megoldása az eddig végzett kutatások eredményeként történhet az élő szervezetben előforduló enzimreakciókat utánozva, a biokémiai átalakulás alkalmazásával (amikor is maga az enzim tölti be az enantio-szelektív katalizátor funkcióját) és királis ligandumokat tartalmazó átmeneti fémkomplexekből kialakított nagy szelektivitású katalizátorokkal.

Bonyolult nagy molekulák szintézise és szerkezeti tulajdonságaik kívánt célnak megfelelő szabályozása megvalósítható a nagy bonyolultságú molekuláris rendszerek vizsgálata során szerzett tapasztalatok alapján. Egyre ígéretesebbek és fontosabbak azok a kutatások, amelyek célja az enzimekhez hasonlóan működő katalizátorok előállítása. A természetes enzimek mint biológiai katalizátorok több reakció lejátszódásában fontos szerepet töltenek be. Hátrányuk, hogy csak viszonylag alacsony hőmérsékleten használhatók, ezért nagyon sok, számunkra fontos reakciónál, mondhatni a vegyipari termékek zömének előállításánál, nem használhatók.

E kutatások terén döntő lépés az enzimekhez hasonló méretű nagy molekulák szintézisének megoldása, méghozzá olyan felületi sajátossággal, amely képes a megfelelő molekulát kiválasztani és úgy kötni a felülethez, hogy az a reakció számára kedvező szerkezeti formát vegye fel. E nagyméretű molekulák (szupramolekulák) révén új típusú reakciók lejátszódása válik lehetővé. Tulajdonképpen *e nagyobb molekulák* lehetnek gyenge kölcsönhatással létrejövő *molekulahalmazok* (supramolecular assemblies), amelyek a molekulák önszerveződése révén jönnek létre és fontos szerepet játszanak nemcsak az élő szervezetek reprodukciós folyamataiban, hanem a kémia más területein is.

Az anyagok szerkezetére, reakcióképességére és a katalizátorok hatásmódjára vonatkozó ismereteink bővülése teszi lehetővé a reakciók mechanizmusának egyre pontosabb megállapítását. Az eddig felhalmozott ismeretanyagunk *a reakciók mecha-*

nízmusának meghatározásában való felhasználását jelentősen megkönnyíti és pontosabbá teszi a számítógépek alkalmazása. Ezért a reakciómechanizmus kutatásokban egyre nagyobb teret kapnak a *számítógépes modellezések*. Elképzelhető, hogy ezek továbbfejlődésével néhány évtized múlva előállítható lesz a teljes reakcióprofil, amely akár egy film — megmutat mindent, ami a reakció lejátszódása során történik. Jelenleg a modellezés eredményét össze kell vetni a kísérleti eredményekkel, mert nem mindig lehet tudni, hogy az mennyire felel meg a valóságnak. Egy idő után bekövetkezhet, hogy minden kontroll alkalmával a modellezés eredményei összhangban lesznek a kísérletekben nyertekkel. Ekkor már előre meg lehet mondani, hogy például milyen reakció játszódhat le két olyan anyag között, amelyeknél ezt még nem vizsgálták, vagy milyen katalizátort kell alkalmazni a reakció kívánt irányban történő terelése érdekében. A számítógépes módszerek és a kombinatorikus kémia egyesítése révén talán létrehozható a különböző speciális célokra tervezett katalizátorok „könyvtára”, amelyből kiválasztható a kívánt cél elérésére alkalmas katalizátor.

Az elmúlt egy-két évben a nemzetközi szakirodalomban több és többféle típusú közlemény foglalkozott a kémiai kutatások jövőbeli feladataival.[1, 2, 3, 10]. Az egyes konkrét feladatokat illetően voltak vélemény eltérések, de ezek összegzéséből azért egyértelműen kirajzolódott az a néhány terület, amely a kémiai kutatások középpontját képezi.

- új, hatékonyabb eljárások kifejlesztése korszerűbb anyagok előállítására,
- az energiafelhasználás optimalizálása és új energiaforrások kialakítása,
- az életfolyamatok alapvető kémiai reakcióinak felderítése,
- környezetvédelem.

Új, hatékonyabb eljárások kifejlesztése korszerűbb anyagok előállítására

A kutatások egy része arra irányul, hogy megszűnjenek a már kifejlesztett és gyártott anyagok használhatóságát csökkentő tényezők, az élettartam növekedjék, a gyártásokra alkalmazott technológia anyag- és energiatakarékos, valamint környezetbarát legyen.

A mezőgazdaságban, az élelmiszeriparban és a háztartásokban használt polimer termékek esetében a hulladék eltávolítását kell megoldani vagy újrafeldolgozásra alkalmas technológia kifejlesztésével, vagy már a gyártásnál egy biodegradálódó komponens beépítésével, ami lehetővé teszi a termékek környezetben történő leépülését.

Az űrhajók, repülőgépek és versenyautók gyártásánál használt könnyű, de nagy szilárdságú kompozitok előállítási költsége túl magas ahhoz, hogy szélesebb körű alkalmazására sor kerülhessen, ezért itt olcsóbb anyagok vagy kevésbé drága technológia alkalmazására van szükség.

A gépkocsik gyártásánál mind nagyobb mértékben használt műanyagok újrafeldolgozásának és feldolgozhatóságának követelményét már a tervezési szakaszban figyelembe kell venni és a technológiát ennek megfelelően kell kifejleszteni. Már utaltunk rá, hogy a kerámiákat jelentős mértékben alkalmazzák a gépkocsik gyártásában. Szélesebb körű alkalmazásukat elsősorban a monolitikus kerámiákat szerkezeti anyagként azonban gátolja az egyébként lényegesen csökkentett, de még mindig meglévő törékenységük. Ennek további csökkentése vagy megszüntetése érdekében intenzív kutatások folytak [5, 6] és várhatóan folynak még egy ideig a kerámia mátrix kompozitokra vonatkozóan, olyan kérdések tisztázása céljából, hogy milyen ezek molekuláris szerkezete, a kompozit különböző komponensei milyen kölcsönhatásban vannak molekuláris szinten egymással, adott specifikus fizikai tulajdonság

milyen molekuláris szerkezettel van összhangban, a kompozit különböző komponensei — kerámia részecskék, kerámia mátrixba ágyazott szilícium-karbid vagy szilícium-nitrid szálak — milyen kölcsönhatásban vannak egymással mikroszkopikus szinten.

A távközlésben jelenleg már használt — szilíciumból készült — szálak valóban forradalmi fejlődést jelentettek. Újabb kutatások eredményeként kiderült, hogy a fluorid üvegekből vagy üvegszerű fluoridból még áttetszőbb szálak nyerhetők. Eltérően a hagyományos üvegekkel, mint fémoxidok, a fluorid üvegek fémfluoridok keverékei, pl. a ZrF_4 , LaF_3 és BaF_2) amelyekből ún. hármas üveg készíthetős. Jóllehet az eddigi vizsgálatok tanúsága szerint még több — és főleg technikai — probléma vár megoldásra, ezekből az új típusú üvegekből készített szálak, legalább is elvileg, az optikai jelek továbbítását több ezer kilométer távolságra lehetővé teszik közvetítő állomás nélkül.

A mikroelektronikában az integráltsági szint az alkotó komponensek méretének csökkentésével és különösen az egyre rövidebb hullámhosszúságú fény (röntgen sugárzás) alkalmazásával volt növelhető. Ez esetben teljesen új fotoreziszt anyagra van szükség. A fotoreziszt anyagok új generációjának optimalizálása a litográfiai folyamatban alkalmazott fény hullámhosszára intenzív kémiai kutatást igényel. Az integrált áramkörök gyártása a jövőben a jelenleg használt litográfiai módszer helyett — amely a fotoreziszt oldékonyságának fény hatására bekövetkező változásán alapul — olyan száraz kezelési technikát igényel, amely valamennyi vákuumos gyártási rendszerrel kompatibilis.

A szerves vegyületek elektronikai tulajdonságainak felderítésére irányuló kutatások eredményei — többek véleménye szerint — új elektronikai eszközök létrehozását segíthetik elő, (kijelzők, memóriatárolók, térvezérlésű tranzisztorok stb.). Richard E. Smalley — 1996-ban kapott megosztva Nobel-díjat a fullerének felfedezéséért — a „carbon nanotubes” (szénecsövecskék) szintézisére és jellemzésére vonatkozó kutatási eredményeik alapján nagyon valószínűnek tartja a molekuláris elektronika kialakulását. Bizonyos szénecsövecskék ugyanis ténylegesen fémes jellegűek és ezért a szerves kémiában lehetőség adódik fémhuzalok előállítására, amelyek kémiai pontossággal történő összekapcsolásával a már meglévő áramkörti elemekkel egyenértékűek hozhatók létre. Az elmúlt hónapokban publikált cikkek arról adtak hírt, hogy szerves oldószerekben oldható bizonyos „szénecsövecskék” polimerek, kopolimerek és kompozitok építőköveiként növelik ezek szilárdságát. [7]

Egy idő óta felmerült a kémia által előállítható anyagok alkalmazása a házépítésben. Az egyik javaslat az aerogélek — porózus szilíciumdioxid habanyag — alkalmazása, amelyek ugyanolyan jó tűzállóak, mint az üvegszálak, de jobb szigetelők. Ezeket repülőgépekben és egyéb nagy értékű berendezésekben már használják. Házépítésnél akkor jöhet szóba, ha az áruk jelentősen csökkenthető.

A szerkezeti anyagok védelme mindig fontos feladatát képezte a kutatás-fejlesztésnek. Ez nagyrészt az anyagok felületének különböző lakkokkal történő bevonásával történt, ami bizonyos mértékben védelmet nyújtott az időjárás, a kopás, karcolások, korrózió stb. ellen. A felületek védelme sokat javult alkalmazott lakkok és egyéb kemikáliák minőségének növekedésével, mind olyan eljárásokkal, amelyek lehetővé tették a felület molekuláris dimenziójú réteggel történő bevonását és ezáltal a védőhatás növelését. Ugyanakkor az új típusú szerkezeti anyagok kifejlesztése, továbbá ezek egyre inkább extrémebb körülmények közötti alkalmazása újabb feladatok megoldását igényli a kémiától.

Végül a katalizátorok hatásfokának és szelektivitásának növelése állandó feladata marad a kutatásnak, mivel az ipar egyre erősebben igényli az olyan technológiákat, amelyek segítségével a termékeket nagyobb kitermeléssel, tisztábban, környezetkímélő módon gyárthatja.

Az energiafelhasználás optimalizálása és új energiaforrások kialakítása

A finomított kőolaj jelenleg megfelel a közlekedés számára szükséges üzemanyagként. A nyersolajban lévő nagyméretű szénhidrogén molekulákat katalitikus krakkoláson (apritás) alapuló finomítási folyamatban tördelik apróbbakká. Az, hogy a nyersolaj hány százalékat sikerül motorbenzinné és dízelolajjá átalakítani, a katalitikus krakkolás hatékonyságától függ.

Az ezredfordulóhoz érve tudomásul kell venni, hogy a szénhidrogén üzemanyagkészlet kimerülőben van, és különösen a hagyományos kőolajforrások bizonyulnak elégtelennek a XXI. század első felében. Az egykor bőségesen rendelkezésre álló könnyű és alacsony kéntartalmú nyersolajforrás csökkenése miatt egyik megoldásként a nehezebb, nagyobb nitrogén- és kéntartalmú nyersolaj feldolgozása is előtérbe kerül. Ennek a nehezebb nyersolajnak az átalakítása (egyik része nagy paraffin tartalmú, a másik része nagy mennyiségben tartalmaz kemény aszfaltot és fémeket) csak új és nagyobb hatásfokú katalizátorok kifejlesztésével valósítható meg. A másik megoldás *új katalizátorok kifejlesztésével* új technológia kidolgozása, amellyel a folyékony üzemanyag földgázból és szénből állítható elő. Ezzel együttjáró fontos feladat a légköri szén-dioxid mennyiségének növekedését — amely elsősorban a szénhidrogén üzemanyagok tartós használatának következménye — megállítani, majd csökkenteni.

A szénhidrogén üzemanyag környezeti hatásának csökkentésére és egyúttal a teljes kimerülésének késleltetésére két út járható. Az első: hogy *növelni kell* a jelenleg még rendelkezésre álló szénhidrogén energiaforrások felhasználásának hatékonyságát. A másik: hogy más energiaforrásokat *kell fejleszteni*. A már néhány év óta folyó kémiai kutatások célja és feladata azoknak a kémiai reakcióknak az optimalizálása, amelyek az *üzemanyag hatékonyabb égését* teszik lehetővé, csökkentik az illékonyágát és az üzemanyag elégeésekor eltávolítják a levegőt szennyező kén és nitrogén atomokat. Jelenleg folynak a kísérletek olyan *reformált benzín gyártási technológiájának* kifejlesztésére, amivel a törvény által meghatározott összetételű benzín állítható elő. A szóban forgó törvény — amelynek bevezetését az Európai Unió is elhatározta — a szennyezés csökkentése érdekében előírja a benzín aromás szénhidrogén tartalmának százalékos csökkentését és a benzínhez szerves oxigéndúsító anyag hozzáadását. Ilyen oxigéndúsító anyag pl. a metil-tercier-butiléter, amely egyrészt kompenzálja az aromás szénhidrogének csökkenése miatt az oktánszámban bekövetkezett veszteséget, másrészt csökkenti az üzemanyag tenzióját és bizonyos mértékig a szénhidrogén és szénmonoxid emissziót a gépjármű kipufogó csövében. Ezeknek az oxigén adalékoknak a többségét jelenleg a kőolaj finomításnál keletkező melléktermékekből állítják elő. A kőolaj árának növekedése esetén ezeket is szénből és földgázból kell előállítani, amihez új katalizátorok szükségesek.

A *nem szénhidrogén alapú energiaforrások* — geotermikus, szél, víz, nap — már napjainkban is alkalmasak helyi igények kielégítésére. A közlekedéshez szükséges szállítható, tárolható, biztonságosan kezelhető energiaforrás a folyékony üzemanyag lesz a belátható jövőben. A hidrogén gazdaságos megoldás lenne, de amíg nem sikerül kompakt és biztonságos tárolására jó megoldást találni, szükség lesz *folyékony üzemanyagra*. Az elektromos energia közlekedésben történő felhasználására már vannak példák, de az akkumulátorok teljesítményében elért fejlődés alapján sem várható a közeli időben tömegessé válása. E tekintetben nagyobb remények fűződtek már néhány évtizeddel ezelőtt az *tüzelőanyag cellákhoz*, amelyek az üzemanyagot direkt oxidáció útján alakítják át elektromossággá. Ezeknél az átalakító folyamat elektrokémiai, és a hatásfok akár 90%-os is lehet. A tüzelőanyag cellák

üzemanyagaként elsősorban metanol vagy hidrogén jön szóba, mely utóbbit metánból, propánból és metanolból állítunk kémiai úton elő. Még jelentős kutató-fejlesztő munka szükséges ahhoz, hogy a tüzelőanyag cellák beváltsák a gyakorlatban is a hozzájuk fűzött reményeket. A kulcskérdés az, hogy megfelelő katalizátort lehessen találni az elektrokémiai folyamat számára, és speciális szerkezeti anyagot a cella konstrukciójára.

Az energiaforrások között jelentékeny szerepet játszanak a *maghasadást* hasznosító atomerőművek, amelyek a fejlett ipari országok villamosenergia-igényének kielégítésében változó mértékben — Franciaországban 75—80%-kal — vesznek részt. A *magfűzés* — a napenergia forrása — potenciálisan kimeríthetetlen energiaforrás, mivel a működéséhez szükséges anyag — a víz hidrogén atomjai — bőséges készletet jelent. További előny, hogy az energia ez úton történő előállítása nem jár jelentős mennyiségű radioaktív hulladék képződésével. Sajnos, a közel fél évszázad alatt folytatott intenzív kutató-fejlesztő munkával a magfűzés biztonságos energiatermelésre történő alkalmazását még nem sikerült megvalósítani.

A napenergia hasznosítása elvileg történhet vagy közvetlenül elektromos energiává történő átalakítással, vagy valamilyen üzemanyag, pl. hidrogén előállításával, olyan folyamatban, amelyiknek nincs káros környezeti hatása. A fotoelektromos eszközök alkalmazása a napenergia közvetlenül elektromos energiává alakítására a magas költség miatt kisebb egyedi esetekre korlátozódik. A fotoelektromos energia termelésére nagy gyűjtőterület és garantált napfény szükséges. A jelenleg rendelkezésre álló napelemekből — amelyek kb. 12%-os hatásfokkal alakítanak napfényt elektromos energiává — közelítőleg kilencezer négyzetméter kellene egy kilowatt energia előállításához egy napfényes nap déli óráiban. Egy ezer megawatt teljesítményű erőmű megépítési költsége kb. tíz négyzetkilométer napelemet igényelne. Ez jelenleg bármely gazdaság részére megfizethetetlen. Az űrhajók energiaelőállításához használt „naptáblák” előállítási költségét az űrkutatás el tudta viselni, de az olcsóbb és megbízhatóan működő napelemek kifejlesztésére irányuló kutatások folytatását az űrkutatás is igényli.

Az életfolyamatok alapvető kémiai reakcióinak felderítése

Mint hogy valamennyi életfolyamat — születés, növekedés, szaporodás, öregedés, halál — valamilyen kémiai változás megnyilvánulása, annak megismerése és megértése, hogy az elemi kémiai reakciókból miként épül fel egy biológiai folyamat, végül is az élet megismerésének és megértésének az alapját jelenti. A biológiai folyamatok kémijának megértéséhez nagymértékben hozzájárul a biológiai rendszerek modellezése, amikor is a természetben található komplex rendszer utánzása történik egy kevésbé komplikált kémiai rendszer segítségével. Ezek a *modellezési vizsgálatok* a számítógépek segítségével mind pontosabban és mind több információt nyerhetően végezhetőek el. E módszerek nemcsak a nagyon bonyolult biológiai molekulák szerkezetére nyújtanak felvilágosítást, hanem a biológiai folyamatot meghatározó törvényszerűségekre is, és ezáltal nagymértékben segítik elő a biológiai reakciók kémijának megértését. E kutatások eredményei minden bizonnyal új, hatékony gyógyszerekben, korszerű mezőgazdasági termékekben realizálódnak, és így jelentős mértékben járulnak hozzá az emberiség egészségének védelméhez és élelemmel való ellátásához.

A gyógyszerellátásban várhatóan továbbra is helyet kapnak a természetben található anyagokból előállítható vegyületek. Közismert, hogy sok, jelenleg is használt gyógyszert természeti forrásból származó biológiailag aktív anyagok izolálása és megfelelő gyógyszerhatástani szűrés révén fedeztek fel. Mivel gyakran előfordult, hogy a nagyon hatásos gyógyszer aktív komponensét nem a szükséglet szerinti

mennyiségben lehet a természeti forrásból előállítani, ennek a kémiai szintézisét meg kellett oldani. Ez történt például a tiszafa kérgéből izolálható taxol esetében, amely többféle daganatos betegség (emlő- és petefészekrák, leukémia) kemoterápiás kezelésében bizonyult hatásosnak; egy dél-amerikai békafaj bőréből izolált alkaloid, az epibatidin esetében is, amely a morfinnál kb. kétszázszor erősebb fájdalomcsillapító, és mivel nem opiát receptorokon fejt ki hatását, nem fenyeget a hozzá szokás veszélye.

A kémiai szintézisek terén az utóbbi harminc évben bekövetkezett fejlődést jól mutatja a szintetizált vegyületek nagy számán kívül az olyan komplex molekulák szintézisében elért eredmények, mint a szteroid hormonok és analógjaik, amelyekből kifejlesztett fogamzásgátló-szereknek nemcsak orvosi, hanem társadalmi szempontból is nagy hatása volt. Említésre érdemes, hogy a peptidok szintézisére az 1960-as években történt meg az első, de távolról sem kielégítő kísérlet, jelenleg ez már automatikus berendezéssel történik. A DNS és RNS részek szintézise ma már szintén így valósul meg. Közismert, hogy sok rákellenes gyógyszer céltárgya a DNS, maga a genetikai anyag, vagy az RNS, amely a genetikai információt átviszi az élő sejt különféle folyamataiba. Az *oligonucleotidok* (kis nukleinsav molekulák) új lehetőséget kínáltak a terápia számára. A természetes nukleinsavak szekvenciája a genetikai információ hordozója, a szintetikus oligonucleotidnak azonban ellentétes a szekvenciája (ezért antisense-nek hívják). Ilyen molekulák felhasználásával történik bizonyos genetikai rendellenességből eredő betegségek — herpeszvírus fertőzés, rák és szívbetegség — kezelése. Az antisense szerkezettel rendelkező oligonucleotid tökéletes komplementere a DNS vagy RNS szekvenciájának, és ezért szelektíven, nagyon specifikusan kötődik hozzá. Egy ilyen antisense molekulával hozva össze a fertőzött sejtet, abban hozzákötődik az RNS vagy DNS nukleinsav szekvenciájához, és *gátolja a fertőzést okozó kémiai folyamatot*.

A gyógyszerek általában viszonylag kis molekulák, amelyek 10-től néhány száz atomból állnak, míg a fehérjék több ezer atomból, amelyek komplex háromdimenziós szerkezetben rendeződnek el. A fehérje molekula szerkezete alkalmas arra, hogy a gyógyszer nagyon speciális módon kötődjék hozzá, és ezáltal változásokat idézzon elő a fehérje kémiai tulajdonságaiban. Mivel a gyógyszermolekulának pontosan és „kényelmesen” el kell tudni helyezkednie a fehérje kötőhelyén, a *gyógyszertervezést* nagyon megkönnyítené, ha erről a kötőhelyről pontos képünk lehetne. Sajnálatosan, sem a fehérje, sem a gyógyszermolekuláknak nincs egyedüli és egyértelmű alakja. Ezért a potenciális gyógyszer a és háromdimenziós szerkezetű fehérje korrelációja a kívánt biológiai hatással meglehetősen komplikált. E probléma megoldását a fehérje- és a gyógyszermolekula közötti kölcsönhatás számítógépes tanulmányozása segítette elő. Részletesen lehet vizsgálni ugyanis azt a mechanizmust, amely meghatározza a gyógyszermolekula felismerési és cselekvési magatartását a fehérjemolekula iránt, aminek köszönhetően meg lehet nézni, hogy milyen legyen a gyógyszer molekula alakja, és milyen töltéseloszlásnak kell lennie ahhoz, hogy a fehérjemolekula megfelelő helyére kapcsolódjon. Ez azt jelenti és eredményezi, hogy a gyógyszerkutatókban hagyományosan használt próbálgatási vagy véletlenszerű módszer egyre inkább helyettesíthető a *számítógépes gyógyszertervezéssel*.

A gyógyszerkutatókban nagy reményeket fűznek a közelmúltban bevezetett kombinatorikus kémiai módszerhez, amely nagyszámú anyag tesztelését teszi lehetővé egy speciális biológiai hatásra vonatkozóan, automatikus tesztelő rendszerben.

Az elmúlt néhány évben az érdeklődés homlokterébe került a komplex szénhidrátok szintézise. Az érdeklődést az a megfigyelés váltotta ki, hogy a sejtek felszínén elhelyezkedő poliszacharidok meghatározó szerepet látszanak betölteni a sejtek felismerésében. A baktériumok elpusztítása azon alapszik, hogy a fehérvsejtek képesek testidegen sejtekként felismerni a baktériumokat, a baktérium sejt felszínén lévő poliszacharidok révén. A rosszindulatú daganatok esetében a daganatsejtek

elvesztik a sejtfelszínen lévő poliszacharidjukat, és a daganatsejteket a szervezet nem ismeri fel testidegen sejtekként, így azokat a természetes „killer” sejtek nem tudják elpusztítani. A *daganatterápia* egyik lehetséges útja lehet, ha ezeket a poliszacharidokat vissza lehet juttatni a daganatsejtekbe.

A géntechnológia alkalmazásával lehetőség nyílt a genetikai információ analizisére és olyan módszerek kifejlesztésére, amelyek alkalmasak az élő szervezet analizisére, megértésére és genetikai konfigurációjának pontos módosítására. A kémikusok és biológusok kifejlesztettek egy DNS diagnosztikai, módszert, amely lehetővé teszi a DNS kis szegmenseinek sokszorosítását. Ha a gén szekvencia megfelelően korrigált, vagy kémiailag módosított szegmense bejuttatható a *paciens* DNS-ébe, a genetikai fogyatékoság gyógyítható. Ez utat nyithat a jövő génterápiájához.

A géntechnológia eredményei hatással voltak a biotechnológia fejlődésére is. A modern biotechnológiai módszereket egyre elterjedtebben alkalmazzák több iparágban terén, ide sorolva többek között a gyógyszer-, élelmiszer-, textil-, papír- és bőripart, valamint környezetvédelmet és a növénytermelést. A biotechnológia alkalmazásának előnye érezhető lesz mindegyik területen, de mindenekelőtt a humán gyógyászatban. A rekombináns DNS technológia lehetővé teszi az oltóanyagok újabb és biztonságosabb módon történő gyártását, úgyszintén a komplex fehérje tartalmú gyógyszereket és fehérjéket is.

Az anyagtudományban az utóbbi néhány évtized alatt bekövetkezett fejlődés fontos részét képezte a *biokompatibilis anyagok szintézise* művegtagokhoz és orvosi eszközökhöz. Új ötvözetek, kerámiák, kompozitok, speciális szerkezeti polimerek és műanyagok a leggyakrabban használt anyagok az emberi test különböző szerveinek helyettesítésére. Bár a sebészeti protetika és az implantáció lényegesen javult a biológiai és szintetikus anyagok kombinációjával, vagy a biopolimerek kémiai módosításával, de még problémát jelent, hogy az anyagok egy részének biodegradációja nem kielégítő.

Jelentős probléma, hogy bármilyen *nagy* is a *biológiai aktivitása* egy molekulának, ez még nem jelenti azt, hogy hatásos gyógyszer is. A gyógyszer hatékonysága attól is függ, hogy az aktív molekula a szervezetben szelektíven és eredményesen *el tudja-e érni a céltárgyat*. Mivel nagyon sok esetben a gyógyszer metabolizmus útján elbomlik a szervezetben, nagy dózis alkalmazása szükséges a kívánt hatás elérése érdekében, ami viszont komoly mellékhatásokkal járhat. Szükséges tehát valamilyen védőkészítményről gondoskodni a gyógyszer számára, ami képessé teszi arra, hogy áthaladjon az „akadályokon” és megvédje a metabolizmus útján történő megsemmisüléstől. Ez például a mikro-kapszulákkal és beültethető biodegradálódó polimerekkel érhető el, amelyek tartalmazzák a gyógyszer molekulát és lassan engedik ki, ezáltal a gyógyszer állandó hatását biztosítva a szervezetben. Remélhető, hogy egy idő múlva a cukorbetegeknek havonta vagy évente egyszer kell inzulin injekciót kapniuk.

A kémia jelentősen elősegítette a mezőgazdaság fejlődését is műtrágyák, gyomirtó- és rovarölőszerek kifejlesztésével és gyártásával. Az eleinte alkalmazott rovar- és gombaölőszerek nagyon jó hatásúak voltak, de túl tartósak voltak, és hatásuk nem volt szelektív. Az újabb kutatások célja ezért olyan anyagok előállítása, amelyek nagyon szelektívek, nagyon kis koncentrációban is hatékonyak és használat után gyorsan degradálódnak a talaj mikroorganizmusai révén, így nem okoznak semmiféle ártalmat az embernek és környezetének.

Egy közelmúltban megjelent cikk [8] szerint olyan változások kezdődtek el, amelyek hatása az ipari forradalomhoz és a számítógépes által előidézett hasonló társadalmi változáshoz hasonlítható. Ez a géntechnológia forradalma. A *géntechnológiának* eddig elsősorban farmakológiai potenciálja került kiaknázásra, de a legnagyobb és az egész világra kiterjedő hatása a növények DNS-ének manipulációjából fog származni. Ennek eredményeként végül is a világ az élelem, az üzemanyag, a

kémia nyersanyagának nagy részét és a gyógyszerek bizonyos részét is a genetikailag módosított növényekből fogja szerezni. Ezzel kapcsolatban azonban merülnek fel kétélyek is, és az esetleg előadódó problémák megelőzése érdekében intézkedések is történtek. A brit kormány például a genetikailag módosított termények kereskedelmi forgalmazására átmeneti — a gyomirtószer-rezisztens terményekre egy évi, a rovar-rezisztens terményekre három évi — moratóriumot rendelt el azzal, hogy a biológiai hatásuk tisztázására irányuló kutatások folytatandók. [9]

Környezetvédelem

A népesség nagymértékű növekedésével, különösen a fokozódó urbanizációval együtt ment végbe az ipar, a mezőgazdaság, a közlekedés hatalmas ütemű fejlődése. A termelési tevékenység minden egyes szakasza fejt ki valamilyen hatást a természetre, kezdve a nyersanyagok kinyerésétől, folytatva a feldolgozással, a termeléssel és szállítással, befejezve a felhasználással és a hulladék eltakarításával vagy újrafeldolgozásával.

Mig korábban hosszú időn keresztül a termelés során és egyéb úton keletkezett hulladék anyagokat a természet meg tudta „emészteni”, addig az exponenciálisan megnövekedett hulladékmennyiséget már nem tudta károsodás nélkül befogadni. Nem tagadható, hogy a tudomány alapján rohamosan fejlődő ipart felelősség terheli az emberi környezetben bekövetkezett romlásért, és érthető, hogy az emberiség környezetérzékenysége, környezetfáltése világszerte nőtt, mert lehetetlen nem észrevenni a természet szemmel látható romlását és az ebből származó veszélyeket. A tudatos és tervszerű környezetvédelem társadalmi mozgalommá alakulván azonban — mint sok más társadalmi mozgalom — nem mentes az indulatoktól, a túlzásoktól, a szubjektív érzésektől. A tudomány, az ipar — különösen a vegyipar — a közvélemény szemében egyre inkább vádoltá válik, annak ellenére, hogy általuk jut élelem mindenkinnek, és az emberek élvezhetik a civilizáció számos előnyét, amiről a legradikálisabb zöldek közül se tudna senki lemondani. Azt is látni kell azonban, hogy a környezet védelmét sem lehet a történelmi fejlődésben visszalépve biztosítani. A már okozott károkat viszont csak a tudomány segítségével lehet kiküszöbölni és a további károsodásokat elkerülni.

Mindezekhez feltétlenül szükség lenne a környezetben lévő különböző vegyületek eloszlásának pontosabb és jobb számítógépes modellezésére, valamint a levegőben, vízben, talajban lévő szennyező anyagok eloszlásának és átalakulásának pontosabb ismeretére. Ugyancsak többet kellene tudni arról, hogy az atmoszférában keletkezett szennyező anyagok milyen módon kerülnek a növényekbe, és arról is, hogy a talajban és növényben lévő szennyezések milyen mértékben jutnak legelés útján az állatokba.

A környezetet szennyező hulladékok és melléktermékek csökkentése mindenekelőtt ezek pontos analizését és ellenőrzését igényli, valamint gondos elemzését és megértését annak, hogy mi ezeknek az anyagoknak a hatása és végül is a sorsa a természetben. Először is azt kell tudni, hogy milyen a szennyező anyag, hol fejt ki hatását, milyen mennyiségben van jelen és mi történik vele. Másodsor, ha a szennyező anyag biodegradálódik, tudni kell, hogy milyen módon és milyen sebességgel történik ez a folyamat, ebben milyen melléktermékek keletkeznek, mi ezeknek a hatása és ha káros, akkor mit és hogyan kell tenni a megszüntetéséért. Annak érdekében, hogy a javító célzattal tett intézkedések hatása jó is legyen, ismerni kell a kemikáliák természetben bekövetkező átalakulásának lehetőségét és útját. A nem megalapozott ismereteken alapuló intézkedések ugyanis csak súlyosbíthatják a helyzetet, mint ez történt például a szmog csökkentésénél először, amikor is a gépkocsi motorjában el nem égett szénhidrogének emissziójának redukciója érdekében növelték a motorban az égési hőmérsékletet, aminek a következménye a nitrogénoxidok

nagyobb mértékű emissziója lett. Ez érthető is, mivel a szmog képződése a szénhidrogének és a nitrogénoxidok között levő meglehetősen komplex kapcsolattól függ és csak az egyiknek a kontrolja nem hozhatta a várt eredményt. Mindezekből levonható az az általános tanulság, hogy a természet védelme érdekében *teendő intézkedések sikere nagymértékben függ azoktól a kutatásoktól, amelyek eredményei elősegítik a természetben lejátszódó kémiai és biológiai folyamatok jobb megismerését és megértését, történjenek ezek akár folyó- vagy tengervízben, talajban, föld alatt vagy az atmoszférában.*

A hulladék anyagok kibocsátása a levegőbe, a vízbe vagy a talajba a környezetre gyakorolt közvetlen hatása miatt is káros, de egyúttal a természeti források potenciális romlását is eredményezi. A kezdeti megoldások eleinte a vegyipar és más iparágak gyártási folyamatából származó és környezetkárosító hatások csökkentése érdekében arra koncentráltak, hogy a gyártelepről a környezetbe kibocsátott szennyvízből az ártalmatlan anyagokat eltávolítsák. Ezt az eljárást még napjainkban is használják, de ha javítják is, csak félmegoldást jelent azzal szemben, hogy olyan új, korszerű technológiák kerüljenek alkalmazásra a termékek gyártásában, ahol nem képződnek szennyezést okozó melléktermékek.

A hulladék anyagok kezelésének növekvő problémái — párosulva azzal a felismeréssel, hogy bizonyos nyersanyagok esetében a rendelkezésre álló források meglehetősen korlátozottak — mind nagyobb nyomatokkal vetették fel a *hulladék újrafeldolgozását*. A fémek és a papír esetében ez már technikailag megoldottan történik sok országban, bár a technológia javítása még szükséges. A műanyagok újrafeldolgozása azonban nagyobb problémát jelent technikailag. A műanyagoknak az egyéb hulladék anyagoktól, majd a különböző műanyagok egymástól történő elválasztása után, ezek eltérő kémiai tulajdonságai miatt más és más újrafeldolgozási eljárás alkalmazása szükséges. A feldolgozó módszer ezért függ a műanyag jellegétől. Néhány műanyag újrafeldolgozható egyszerű olvasztással és formába öntéssel, vagy megfelelő oldószerben történő feloldással és új műanyaggá történő formázással. Néhány esetben azonban komplex eljárás alkalmazása szükséges, pl. a nagy polimer molekulákat katalitikus frakkolással kisebbekké kell átalakítani és ezeket az új polimerke építőköveiként felhasználni. *A jelenlegi újrafeldolgozási technológiánál korszerűbb kifejlesztése komoly kutatást igényel a kémia részéről*, azért is, mert néhány esetben olyan teljesen új polimer kifejlesztése szükséges, amelyeknek molekulaszervezete és kémiai tulajdonsága folytán lehetséges az újrafeldolgozása.

A talajok és vizek elszennyeződése mellett a sztratoszférába került kénvegyületek oxidációja eredményezte a *savas esőt*, a szénhidrogén üzemanyagok elégetése folytán keletkezett nitrogénoxidok és szerves vegyületek kölcsönhatása a troposzférában hozta létre a városokban a *szmogot* és a hűtőgépekben, légkondicionálóknak használt CFC (klórt és fluort tartalmazó szénhidrogén) pusztítja a föld sztratoszférájának *ózonrétegét*. E tények nemcsak a kutatók, hanem a nagyközönség számára is nyilvánvalóvá tették, hogy a *föld atmoszférája változik*. Az atmoszférában lejátszódó kémiai folyamatok elég bonyolultak és jöllehet egy részük felderítésében és megértésében az utóbbi két évtized kutatási eredményei révén jelentős előrehaladás történt, az állandóan napvilágra kerülő új eredmények módosítják ismereteinket, ezért a troposzférában, de még a sztratoszférában történtek értelmezését is. Emlékszünk, hogy az ózonlyuk felfedezése az Antarktisz felett milyen drámai hatást gyakorolt a kutatókra, a közvéleményre. Közismert, hogy az ózon jelen van mind a troposzférában (a réteges szerkezetű légkör legalsó és hozzánk legközelebb eső része), mind a sztratoszférában, és amíg a troposzférikus ózon nagyon kellemetlen, sőt veszélyes lehet, mert erős oxidálószerként az élő anyagban roncsolást okozhat, addig a sztratoszférikus ózon létfontosságú, mert a potenciális bőrrákot okozó ultraibolya sugárzást befogja. Ez a „tudathasadásos” molekula — jót és rosszat is tesz — a föld felszínén lévő élet védelmezője, és jöllehet, úgy véltük, hogy a sztratoszférában lévő ózon

kémiai viselkedését, azaz a különböző molekulákkal való reakcióit jól ismerjük, az újabb kutatási eredmények azt mutatták, hogy ez jóval bonyolultabb, mint eddig gondoltuk. Éppen ezért az itt lejátsszódó fotokémiai és dinamikai reakciók felderítésére és megismerésére irányuló kutatások — az atmoszférában végbemenő változások jobb megértését szolgálván — fontossága életbevágó a bolygónkon lévő élet fennmaradása érdekében.

Hazánk Európai Unióhoz történő csatlakozásának ismert követelményei között komoly nyomatékka szerepel a gazdaság teljesítményének növelése. Gazdasági, valamint tudományos teljesítményünk nemzetközi értékelésére vonatkozó adatok tanúsága szerint a tudományos teljesítmény alapján lényegesen előkelőbb helyet foglalunk el az országok sorrendjében, mint gazdasági teljesítményünk szerint. Nyugodt lelkiismerettel állítható, hogy a tudományos teljesítmény tekintetében nincs szükség külön feltételek és követelmények teljesítésére az Unióhoz való csatlakozás érdekében. A kémiát illetően ez azzal is alátámasztható, hogy a nemzetközileg, és ezen belül az Európai Unió részéről is kiemelt négy — előzőekben ismertetett — területen hazánkban is folynak eredményes kutatások. Ezt igazoló példákat a hazai kémiai kutatóhelyekről hosszan lehetne felsorolni, amitől részben a hely hiánya, részben pedig amiatt tekintek el, mert ezeket — ha röviden is — az Akadémia kémiai intézetei és egyetemen lévő támogatott kutatócsoportjai esetében az MTA Titkársága Természettudományi Főosztálya által 1998-ban megjelentetett kiadvány ismerteti. Roppant sajnálatos viszont, hogy a hazai kémiai kutatások legígéretesebb eredményeinek alkalmazása iránti igény itthon rendkívüli mértékben csökkent — néhány kivételtől eltekintve — a hazai vállalatok körében is. A külföldi érdekeltségű vállalatok pedig a számukra szükséges kutatási feladatok megoldására elsősorban nem a magyar kutatókapacitást veszik igénybe.

IRODALOM:

1. S. Borman, R. Dagan, R. L. Rowls, P. S. Zurer: Chemistry crystallizes into modern science, Chem. and Eng. News, 1998. január 12.
2. R. M. Baum: Chemistry's opportunities, Chem. and Eng. News 1998. január 12.
3. M. Baum: Chemistry's opportunities, Chem. and Eng. News 1998. április 27.
4. M. Johnston: Silicon valley, Nat. Geogr. 162 (4), 459—476 (1982)
5. E. Wilson: New ceramic bends instead of breaking, Chem. and Eng. News 1997. szeptember 8.
6. Y. Waku és munkatársai: A ductile ceramic eutectic composite with high strength at 1,873 K, Nature 389, 49—52, 1997. szeptember 4.
7. R. Dagan: Soluble carbon nanotubes open door on chemistry, Chem. and Eng. News 1998. október 5.
8. Ph. H. Abelson: A third technological revolution, Science 279, 2019, 1998. március 27.
9. E. Masood: UK holds up applications of genetically modified crops, Nature 395, 830, 1998. október 29.
10. Chemistry, Europe and the future, The Royal Society of Chemistry, London 1997. Alliance for Chemical Sciences and Technologies in Europe (All ChemE)