



Bruckner-termi előadások

Gergely Szilveszter

■ BME Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, NIR Spektroszkópia Csoport

A sárkány és a spektrumok – fejtörők az infravörös spektroszkópia világából

Általános iskolás koromban, a '80-as években – egy-egy megfázásnak köszönhetően – volt szerencsém Sas Elemér (1930–1998) [1] délelőtti iskola tv-béli előadásai közül megnézni egy-két részt. A rezgések és hullámok világával való, feledhetetlen stílusú előadása során agyamba vésődtek a Tacoma folyón átívelő Narrows Bridge-ről készült képsorok, melyek a híd szerkezete – periodikusan jelentkező széllökéshullámai hatására bekövetkező – „behintázását” (innen a híd „galoppozó Gerti” gúnyneve), majd összeomlását rögzítették. Ez az a példa, mellyel hallgatóimnak bevezetem a közeli és közép- (analitikai) infravörös – NIR és (M)IR – tartományba eső elektromágneses sugárzás és az anyag kölcsönhatást, példát mutatva az „óriások” világából arra, amit a „törpék” világában (szubmolekuláris szinten) egyelőre még nem láthatunk. Ugyanis a rezgési spektroszkópia eszközével az atomok közti kötések (mint hidak) és a NIR-, ill. (M)IR-fotonok (mint hullámokban érkező gerjesztőenergiák) közti kölcsönhatásokat rögzíthetjük, így következtetve a vizsgált anyag kémiai (és sok esetben fizikai) tulajdonságaira.

Sir Isaac Newton 1704-ben megjelentetett *Opticks* című művében [2] lefektette az optikai spektroszkópia alapjait is, melyben többek között ismertette a fehér fény prizma általi felbontását különböző színekre. Majd száz év múlva a NIR-ág is megjelent Sir William Herschel német származású angol csillagász – nem mellesleg az Uránusz felfedezője – révén. 1800. február 11-én elvégzett kísérletében a színek hőmérsékletét szerette volna detektálni higanyos hőmérőkkel, de eközben észrevette, hogy a vörösön túl tovább emelkedett a hőmérséklet, annak ellenére, hogy szemmel már nem volt látható fény. A kísérleteiről szóló,

a világ első tudományos folyóiratába – az 1665-ben indult *Philosophical Transactions* periodikába – beadott közleménysorozatával [3] ő lett a névadója az infravörös (latin *infra*: „alatt”) tartománynak is. Újabb száz év telt el, míg William W. Coblentz *Investigation of Infra-red Spectra* könyvsorozatának első tagja megjelent 1905-ben. [4] A maga épített IR-berendezéssel több mint száz anyag spektrumát rögzítette, ami a spektrumonként 2-3 órás méréseket tekintve is hatalmas munka volt. Ezen „spektrumkönyvtáron” túlmutatnak a mérési adatokból levont következtetései, melyek megteremtették a funkciók csoportok rezgésein alapuló, molekulák szerkezetkutatását lehetővé tevő IR-spektroszkópia alapjait. A 20. század világégései és hidegháborúi is hozzájárultak ahhoz, hogy a hadiiparból a polgári alkalmazásba is átkerüljenek a NIR- és (M)IR-technikákkal kapcsolatos fejlesztések. Az egyik ilyen fontos kapocs Karl H. Norris, a „NIR atyja”, [5] aki a '60-as években úttörő szerepet játszott a gázok és tiszta oldatok adigra „rutinná vált” transzmissziós mérése után a porok, a sűrű szuszpenziók, az intakt minták diffúz reflexiós méréstechnikájának kitalálásában és kialakításában – miután letöltötte II. világháborús éveit az indiai Kalkuttában rádiótechnikusként.

Ma már a felhasználók céljainak megfelelően számos lehetőség közül választhatnak, ha a rezgési spektroszkópia eszköztárához fordulnak kérdéseik megválaszolására. Ez a sokféleség megmutatkozik a készülékek felépítésében, mintakezelésében, méréstechnikájában. Elég, ha a bejövő nyersanyag-raktárakban helyszíni méréseket lehetővé tevő, kézben hordozható (ún. handheld), a minőséget ellenőrző laborok asztali (ún. bench-top) vagy a gyártási technológiák in/on-line műsze-

reire gondolunk. Emellett a képalkotó (imaging) technikák is teret nyertek akár mikro-, akár makroszinten – legyen szó kutatólaborról vagy termelőüzemről. [6] A hardverek szolgáltatva közeli és/vagy közép- (analitikai) infravörös – NIR, ill. (M)IR – spektrumok seregébe olyan matematikai, statisztikai, kemometria-i módszerek lehelnek életet, amelyek a nagy adathalmazokban (big data) rejlő információk kinyerésére képesek – akár más, több (pl. csatolt elválasztástechnikai módszerekből származó) adatmátrixszal kombinálva. [7]

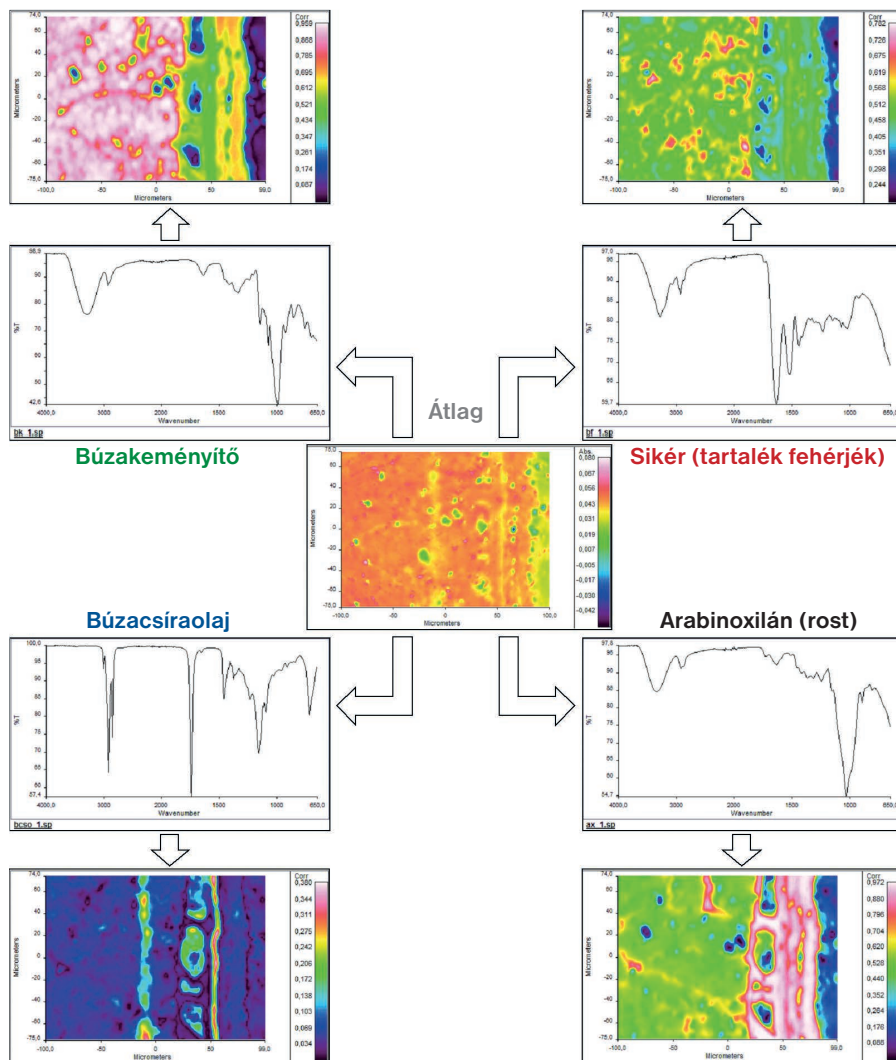
Az alábbiakban az elmúlt közel húsz évből egy-egy fejtörőn keresztül szeretnék egy vékony keresztmetszetet bemutatni arról, hogy a NIR- és (M)-spektroszkópiái technikák hogyan segítettek egy-egy oknyomozásban.

Első feladatom – mely a növényfiziológia, a NIR-spektroszkópia és a kemometria szakterületeinek metszetén alapult – a búza érésdinamikájának nyomon követése volt. A NIR-spektroszkópiával detektálható szabad és kötött vizek közti átmenet ezen élő biológiai rendszerben visszavezethető a kaotróp (vízmolekulák közti hidrogénhidakat a rendezetlenebb állapot felé vivő), poláris jellegű építőkövek (pl. aminosavak, mono- és diszacharidok) átalakulására, „polimerizációjára” kozmotróp (vízmolekulák közti hidrogénhidakat a rendezettebb állapot felé vivő) biopolimerekké (fehérjékké, keményítővé). [8] Vízalapú biológiai rendszerek esetén jóformán az összes kölcsönhatás esetén a részt vevő molekulák először a vízszerkezetükön keresztül „látják” egymást. [9] Természetesen a szárazanyag-tartalom fő részét kitevő szénhidrátok és fehérjék dinamikájának NIR-lenyomatait is vizsgáltuk az érés során, értelmeztük azokat a fiziológiai folyamatok tükrében. [10,11] Ekkor ismer-



tem meg a „hazai NIR atyját”, Kaffka Károlyt (1927–2014), [12] és mutatta meg polár minősítő módszerét, melyet még ezen oknyomozáson túl is számos feladatban sikeresen alkalmaztunk mintázatfelismerő eszközként. Felvetődik a kérdés: vett volna-e a múlt századot végigélő nagyapám NIR-készüléket a sokorói dombok tövében? Valószínűleg nem: átfolyatta a kalászból kimorzsolt magokat markából a tenyerébe figyelvén hangjukat, és ha elég kemények, szárazak voltak az aratáshoz, surrogva, sziszegve koppantak egymáshoz. De a hatalmas amerikai, kanadai, ausztrál búzatermő vidékeken már a késő ’70-es, kora ’80-as évek óta ott vannak ezek a berendezések – sőt, a precíziós mezőgazdaságnak köszönhetően ma már szó szerint a búzamezőkön: a GPS-szel felszerelt arató-cséplő gépekben (amiket a két műveletet kombinálása miatt ma már inkább kombájnoknak hívunk). Az így kapott „on-combine” vagy „on-the-go” berendezésekkel már a betakarítás során osztályozhatóak a magok például a fehérjetartalom alapján, [14] mely beltartalmi paraméter meghatározhatja a malomipari felhasználást, s kenyérhez, tésztához vagy épp sós kekszhez való céllisztet gyárthatunk.

A búzával való foglalatosságunk a „legyen egészséges, ami finom” jegyében az egészségre jótékony hatással bíró (pl. bél-daganatokat megelőző) bioaktív összetevők (alkilrezorcinok, arabinoxilánok, szterolok stb.) fele fordult. Az EU HealthGrain keretprogramjában 2005 és 2010 között a világ több száz gabonafajtaját három termesztési évből, olykor négy ország termőhelyéről vizsgáltuk, hogy mind a genetikai, mind a környezeti (talaj, időjárás stb.) hatásokat beépíthessük kalibrációs modelljeinkbe. [15] Az arabinoxilánok (gyakorlatilag xilóz-gerincről lelógó arabinóz-oldalláncok) egészségvédő szerepe az, hogy csökkentik a vér glükóz- és koleszterinszintjét, megnövelik az ürülék térfogatát csökkentve az áthaladási időt, megkötik a toxikus metabolitokat, karcinogéneket. Ezen túl ún. technofunkcionális tulajdonságokkal is rendelkeznek: azok a lisztek, melyek többet tartalmaznak ezekből a fajta szénhidrát biopolimerekből, a tésztagyártás során több vizet képesek megkötni befolyásolva a viszkozitást, a tészta konzisztenciáját, így a kelesztés során keletkező gázbuborékok visszatartását, ezzel a sütőipari termék textúráját. [16] Vett volna-e nagyapám NIR-készüléket az arabinoxilánok meghatározására? Valószínűleg nem: napkeltétől napnyugtáig megvolt a jó levegőn



1. ábra. Egy búzaszem korrelációs térképei (200×150@1,5625μm) a fő összetevők FT–IR spektrumaival való korreláció szerint hamisan színezve. Jobbról balra haladva a rögzítőgyanta, a korpa, az aleuron, végül a magbelső rétegei figyelhetők meg

a munkája, hozzá az adalékmentes házi kenyere, szalonnája, pálinkája, no és stressz helyett a hite, hogy amit ember nem, Isten majd elrendez. De ma, a rengeteg embert tápláló élelmiszeriparban már a „farm-to-fork” (a gazdaságtól, a tanyától a villáig mint evőeszközig) vagy a „stable-to-table” (istállótól az asztalig) láncot megelőzve, már a növényneveléstől kezdve van olyan gyors, roncsolásmentes eszközök (hisz a vetőmag nem semmisülhet meg a mérések során), amelyek segítenek az adott célra megfelelő búzafajták kiválasztásában. A molnároknak is fontos információ lehet, hogy a magon belül ezek a bioaktív komponensek hol, milyen vastagságban helyezkednek el – ehhez az infravörös alapú kémiai képalkotással (CI) tudunk segítséget nyújtani, például korrelációs térképek segítségével.

Ha már a búza szóba került, a bor sem maradhat ki. A NIR-spektrumok alapján a

bor, a pezsgő és egyéb szeszes italok (vermutok, likőrök) minősítése, alkohol- és cukortartalmának mennyiségi elemzése volt az a feladat, [17] amely a diffúz reflexiós mérések után a „klasszikus” transzmissziós mérések világával megismerttetett. A legkisebb borvidékeinktől az országos minősítő intézetig ott vannak ezek a NIR- és/ vagy (M)IR-berendezések, hogy gyors döntések születessenek a technológia kézben tartására, a kezelési hibák elkerülésére, vagy épp a hamisítások kiderítésére. Vett volna-e nagyapám NIR-készüléket borainak vizsgálatára? Valószínűleg nem: tudta, milyen szőlőből lett a mustja, megtanulta – olykor saját kárán –, mikor hogy bánjon a fejlődő borral, és annyi volt neki, amennyit beosztva nyár végéig kitartott. De ma – hogy a növényfiziológiához egy példa erejéig visszanyúljunk – akár bogynaként, kézben hordozható „on-field” NIR-eszközökkel, akár tőkenként, távérzékelési mód-



szerekkel kombinált, repülőgépekre telepített NIR-berendezésekkel elemzik a cukrok és az antociánok érés közbeni változását, hogy optimális időpontban történjék meg szüret. [18]

Az élesztők a pékek és borászok barátai is, de fermentációval a biotechnológiai alapú gyógyszeriparban is találkozhatunk, igaz, ott nem gombák, hanem baktériumok vagy emlőssejt-tenyészetek vannak segítségünkre, például egy-egy célzott rák-ellenes szer, kemoterápiás kezelések utáni immunrendszer-erősítő hatóanyag előállításában. Az ipari léptékű bor- és gyógyszeripar fermentációs folyamatait a minőségközpontú fejlesztés, gyártás, ellenőrzés (QbD) szemléletű folyamatlemező technológiák (PAT) kötik össze, melyek egyik esz-köze a NIR-technika. [19,20] 2006-tól működünk együtt szorosabban hazai gyógyszergyárakkal, tanuljuk együtt a rezgési spektroszkópia lehetőségeit és korlátait, ötvözzük sokváltozós adatelemzési ismereteinket a felügyelni kívánt folyamatok, eljárások háttérismereteivel. [21]

Az infravörös-alapú kémiai képalkotás szó szerint új dimenziót nyitott meg e téren is kutatásainkban. Gyógyszeripari példánál maradva a „sikeres” eredeti tabletta mellett előbb-utóbb megjelennek hamis társai is, de „házon belül” szintén adódhatnak olyan gyártási problémák, amely okának felderítéséhez a spektroszkópia és a mikroszkópia ötvöze kínálhat megoldást. [22] A gyógyszer-, élelmiszer-, műanyag-, vegy- és elektronikai iparokból számos olyan feladatot kapunk, ahol a meghatározandó struktúra mérete okán csak a mikroszkóppal – és olykor spektrumkönyvtárakkal – megátogatott NIR/(M)IR spektroszkópiái segít. Ebben a kombinációban bízunk akkor is, mikor a daganatok gyorsabb felismerése, diagnózisa felé kutakodunk kollégáimmal, hallgatóinkkal. [23]

És hogy hol vannak a sárkányok? Nálam – talán a fentiekből kiderülhetett – az infravörös fotonok azok, melyek segítségével bejárhatjuk a spektrumok dombjait és völgyeit. Ugyanúgy, ahogy Alan Alexander Milne versében a papírsárkány segít, merre visz a szél útja. Itt szeretném megköszönni tanárainknak azt, hogy egy-egy szalaggal díszítették sárkányomat, megmutatták a trükköket és fogásokat (vihárban és napsütésben egyaránt), végül a kezembe adták a zsinórt – és engedtek játszani.

Köszönetnyilvánítás. Hálás szívvel emlékül győri gyakorlós és révais, valamint műegyetemi tanárainknak. Köszönöm hallgatóimnak lelkesedésüket, segítő munkájukat.

Alan Alexander Milne Wind on the Hill

No one can tell me,
Nobody knows,
Where the wind comes from,
Where the wind goes.

It's flying from somewhere
As fast as it can,
I couldn't keep up with it,
Not if I ran.

But if I stopped holding
The string of my kite,
It would blow with the wind
For a day and a night.

And then when I found it,
Wherever it blew,
I should know that the wind
Had been going there too.

So then I could tell them
Where the wind goes...
But where the wind comes from
Nobody knows.

Szél a dombon

Senki sem mondja,
Senki sem tudja,
Honnan jön a szél,
S merre visz útja.

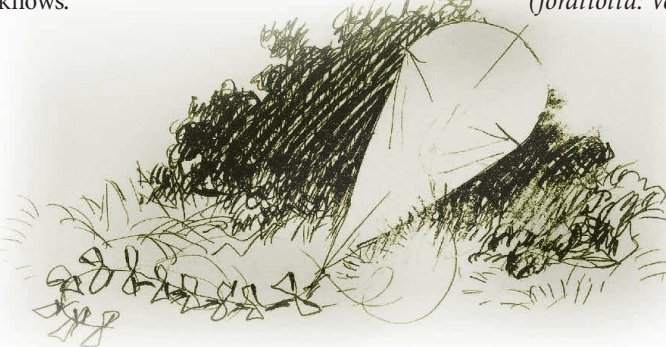
Repül valahonnan,
Szélsebesen lohol,
Ha futnék, még akkor
Sem érhetném utol.

De ha elengedném
Papírsárkányomat,
Elszállna a széllel
Egész éjjel és nap.

S mikor megtalálnám,
Bárhova is esett,
Tudnám, hogy a szél is
Pont arra mehetett.

Akkor elmondhatnám
Merre visz az útja...
De honnan jön a szél,
Azt senki sem tudja.

(fordította: Vogl Anikó)



IRODALOM

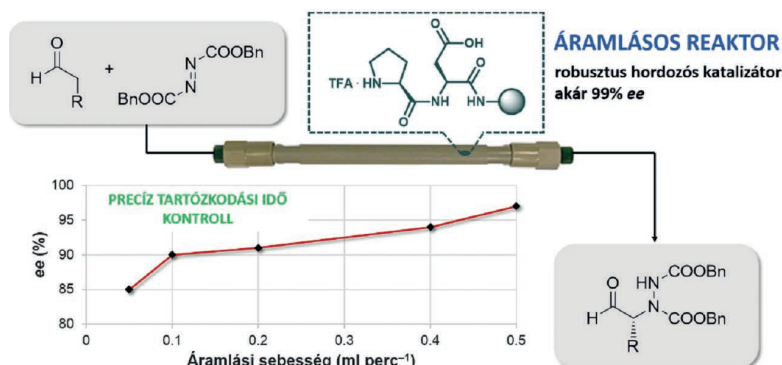
- [1] G. Radnai, *Fizikusok és matematikusok az Eötvös Collegiumban 1895–1950*, ELTE Eötvös József Collegium, 2014.
- [2] I. Newton, *Opticks: or, A treatise of the reflexions, refractions, inflexions and colours of light*, Royal Society, 1704.
- [3] W. Herschel, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* (1800) 90, 284.
- [4] W. W. Coblentz, *Investigations of infra-red spectra*, Carnegie institution of Washington, 1905.
- [5] A. M. C. Davies, *NIR news* (2005) 16, 9.
- [6] E. Stark, K. Luchter, *Diversity in NIR instrumentation*. In: A. M. C. Davies, A. Garrido-Varo (eds.), *Near Infrared Spectroscopy: Proceedings of the 11th International Conference*, NIR Publications, 2004, 569.
- [7] T. Næs, T. Isaksson, T. Fearn, T. Davies, *A user-friendly guide to multivariate calibration and Classification*, NIR Publications, 2002.
- [8] S. Gergely, A. Salgó, *J. Near Infrared Spec.* (2003) 11, 17.
- [9] J. S. Clegg, *Am. J. Physiol.* (1984) 246, R133.
- [10] S. Gergely, A. Salgó, *J. Near Infrared Spec.* (2005) 13, 9.
- [11] S. Gergely, A. Salgó, *J. Near Infrared Spec.* (2007) 15, 49.
- [12] MTA ÉTB, NAIK ÉKI, MÉTE, 358. *Tudományos Kolokvium – Kaffka Károly professzor emlékére*, NAIK ÉKI Tanácsterem, 2015. február 27.
- [13] K. J. Kaffka, L. S. Gyarmati, *J. Near Infrared Spec.* (1998) 6, A191.
- [14] D. S. Long, J. D. McCallum, P. A. Scharf, *Agron. J.* (2013) 105, 1529.
- [15] P. R. Shewry, G. Charment, G. Branlard, D. Lafandra, S. Gergely, A. Salgó, L. Saulnier, Z. Bedő, E. N. C. Mills, J. L. Ward, *Trends Food Sci. Tech.* (2012) 25, 70.
- [16] B. Bucella, D. Molnár, A. H. Harasztos, S. Tömösközi, *J. Cereal Sci.* (2016) 69, 40.
- [17] S. Gergely, K. Farkas, A. Forgács, A. Salgó, *Quantitative and qualitative differentiations of alcoholic beverages by near infrared spectroscopy* in A. M. C. Davies, A. Garrido-Varo (eds.), *Near Infrared Spectroscopy: Proceedings of the 11th International Conference*, NIR Publications, 2004, 569.
- [18] B. Sethuramasamyraja, S. Sachidhanantham, R. Wample, *Int. J. Geomatics Geosci* (2010) 1, 372.
- [19] J. C. Menezes, *PAT in different industries: challenges and opportunities for near infrared spectroscopy (abstract)* in M. Manley, C. M. McGoverin, D. B. Thomas, G. Downey (eds.), *Proceedings of the 15th International Conference on Near Infrared Spectroscopy*, NIR Publications, 2012, 186.
- [20] D. Cozzolino, W. Cynkar, N. Shah, *Near infrared monitoring of wine fermentation* in M. Manley, C. M. McGoverin, D. B. Thomas, G. Downey (eds.), *Proceedings of the 15th International Conference on Near Infrared Spectroscopy*, NIR Publications, 2012, 187.
- [21] S. Gergely, L. Párta, A. Salgó, *Magyar Kémiai Folyóirat* (2013) 119, 40.
- [22] S. Šašić, Y. Ozaki (eds.), *Raman, infrared, and near-infrared chemical imaging*, John Wiley & Sons, Inc., 2010.
- [23] E. Kontsek, S. Gergely, A. Salgó, Z. Schaff, A. Kiss, *Der Pathologie* (2015) 36(S1), 37.

■ SZTE Gyógyszerkémiai Intézet, MTA–SZTE Sztereo-kémiai Kutatócsoport

Gyakorlatilag évszázadok óta gömbömbikban vagy más edényben mechanikusan kevertetve hajtunk végre kémiai reakciókat. Manapság azonban a kémiai szintéziseknek egyre több elvárásnak kell megfelelnie, úgymint fokozott kemo-, regio- és sztereoselektivitás, költséghatékonyság, környezettudatosság, fokozott üzembiztonság, gyorsaság és fenntarthatóság. [1] Ezért az utóbbi években újszerű szintézisteknikai módszerek megjelenése volt megfigyelhető. Ezek közül kiemelkedő jelentőségű az áramlásos kémia, amely során a reakciókat a reagensek folyamatos áramoltatása közben valósítjuk meg szűk csatornáknak vagy töltetes oszlopokon keresztül. [2] Ez a kísérleti elrendezés számos előnnyel jár a hagyományos lombikos eljárásokhoz képest, azonban megvalósítása a kémiai infrastruktúra átalakítását igényli. [3]

Annak ellenére, hogy már az 1970-es években több leírás is született áramlások rendszerek laboratóriumi felhasználásával kapcsolatban, a módszer széles körű elterjedésére csak jóval később került sor. A 2000-es évektől viszont robbanásszerű fejlődésen ment át e tudományterület, melynek háttérében a szintetikus kémiában bekövetkezett szemléletváltás állt. [4] Noha a gyógyszeripar manapság még tipikusan szakaszos gyártásra van berendezkedve, egyre inkább megfigyelhető a nyitás az új módszerek irányába. [5] Az áramlások kémia alkalmazása fenntarthatóbb környezetet és felhasználóbarát kémiát teremthet, sőt bizonyos esetekben teljesen új reakcióutakat és kémiai átalakítási lehetőségeket nyithat.

Királis vegyületek enantiomerjei szélső-
ségesen eltérő biológiai hatással is rendelkezhetnek. Ezért a gyógyszerkémia egyik legfontosabb törekvése az enantioszelektív szintézismódszerek kidolgozása. Aldehid-
ek azodikarboxilát-észterekkel történő
organokatalitikus α -aminálása értékes királis vegyületeket eredményez. [6] A reakció prolin, illetve prolinszerű organokatalizátorokkal jó termelés és enantiomerfelesleg mellett hajtható végre, azonban szilárd hordozós katalizátorokkal nem gaz-



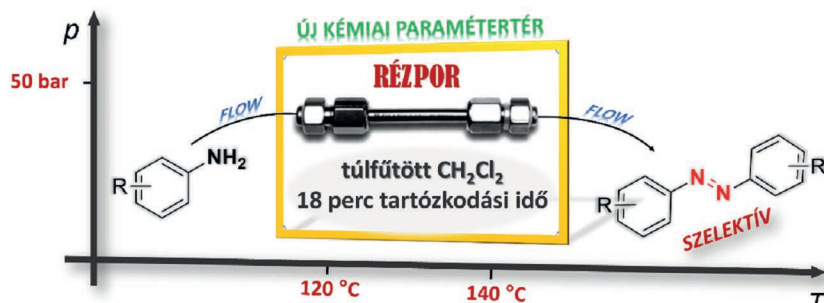
1. ábra. α -Hidrazino-aldehid-szintézis áramlásos reaktorban precíz tartózkodási idő kontroll mellett

daságos, ugyanis az azodikarboxilát komponens bizonyos mellékreakciók útján gyors katalizátor-deaktiválódást okoz. [7] Kutatócsoportunk olyan szilárd hordozós peptid-organokatalizátort fejlesztett ki, amely kellően tartós akár hosszú idejű folyamatos áramú igénybevétel során is. [8] A heterogén katalizátort áramlásos oszlopreaktorba töltve, meglehetősen egyszerű és hatékony szintézismódszerhez jutottunk (**1. ábra**). Előnye e kísérleti elrendezésnek azonban nemcsak egyszerűsége, hanem az is, hogy a katalizátor-szubsztrát kontaktidő (ún. tartózkodási idő) nagyon precízen szabályozható az áramlási sebességgel. [9] Ez azért fontos, mert a peptid-katalizátor túl hosszú kontaktidő esetén racemizálhatja a konfigurációsan labilis α -hidrazino-aldehid terméket, túl rövid kontaktidő esetén viszont nem játszódik le a reakció. Hagyományosan, lombikban végrehajtva a reakciót csak 70% körüli enantiomerfelesleget tudtunk elérni, ugyanis a magas konverzió hosszú reakcióidőt követelt meg. Azonban áramlásos berendezésben a nagy lokális katalizátorfeleslegnek és a precíz tartózkodási idő kontrollnak köszönhetően 90–99%-os enantiomerfelesleg adódott magas konverzió mellett. Eredményeink kiemelik az áramlásos kémia és a precíz tartózkodási idő kontroll jelentőségét konfigurációsan labilis vegyületek organokatalitikus előállításánál.

Az aromás azovegyületeket széles körben alkalmazza a vegyipar, azonban manap-

ság e vegyületsalád egyre inkább előtérbe kerül a gyógyszerkutató és a biotechnológia terén is (pl. gyógyszerhordozó rendszerek, molekuláris motorok, mesterséges izmok stb.). [10] Az aromás azovegyületek előállítására számos eljárás található az irodalomban, azonban a legtöbb módszer jelentős problémákkal küzd. [11] Mivel az azobenzol-származékok egy érzékeny redoxirendszer centrumában találhatók, ezért számos esetben jelent problémát nemkívánatos melléktermékek képződése, ami alacsony kemoselektivitáshoz, csekély atomhatékonysághoz és hulladékképződéshez vezet. Bizonyos reakcióutak esetén reaktivitásbeli problémák is adódnak. Ezeket speciális reagensek és/vagy katalizátorok alkalmazásával ugyan ki lehet küszöbölni, azonban fenntartható alkalmazásuknak gátat szab magas áruk. Megállapítható tehát, hogy az aromás azovegyületek hagyományos szintézismódszerei a „zöld kémia” számos elvárását nem teljesítik. [1] Ezért célul tűztük ki az áramlásos kémia és bizonyos új kémiai paraméterterek segítségével hívását azobenzolszármazékok hatékony és környezettudatos előállítására. [12]

A cölvegyületeket szubsztituált anilinek rézkatalizált oxidatív homokapcsolása útján kívántuk előállítani. [13] Katalizátor-ként egyszerű rézport alkalmaztunk töltetes oszlopreaktorban (**2. ábra**). [14] Ellen-tétben például hordozós ezüst-, arany-vagy platinakatalizátorokkal, a rézpor ol-



2. ábra. Aromás azovegyületek áramlásos szintézise túlfűtött oldószerben

cső és könnyen hozzáférhető, és a felületi oxidréteg következtében katalitikusan aktív Cu(I)-et és Cu(II)-t egyaránt hordoz. [15] Anilinek rézkatalizált homokapcsolását lombikos szintézisek során magas forráspontú oldószerekben (pl. toluol) reflux-körülményeken hajtják végre tipikusan közepes hozam elérése mellett. [13] Azonban megmutattuk, hogy áramlásos reaktorban a túlfűtött diklór-metán sokkal hatékonyabb oldószere a reakciónak, ugyanis azonos körülmények mellett jóval magasabb konverziók adódtak, mint a legelterjedtebb magas forráspontú oldószerekben. [14,16] A reakciókörülmények hatását vizsgálva azt

tapasztaltuk, hogy a hőmérséklet és tartózkodási idő precíz beállítása mellett 100%-os kemoszelektivitással, vagyis melléktermékek képződése nélkül képződnek a kívánt aromás azovegyületek. Az áramlásos módszerrel többszörösen szubsztituált anilinszármazékok reakcióit is sikeresen végezhajtottuk, sőt a reaktor-hőmérséklet emelése után halogén-szubsztituált anilinekkel is jó hozamokat értünk el, amire az irodalomban eddig nagyon kevés példa született.

IRODALOM

- [1] C.-J. Li, B. M. Trost, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. (2008) 105, 13197

- [2] T. Wirth, Microreactors in Organic Chemistry and Catalysis, John Wiley & Sons, 2013.
[3] I. M. Mándity, S. B. Ötvös, G. Szölösi, F. Fülöp, Chem. Rec. 2016, doi: 10.1002/tcr.201500286.
[4] G. M. Keserű, T. Soós, C. O. Kappe, Chem. Soc. Rev. (2014) 43, 5387.
[5] S. V. Ley, D. E. Fitzpatrick, R. J. Ingham, R. M. Myers, Angew. Chem. Int. Ed. (2015) 54, 3449.
[6] T. Válaivan, W. Bhanthumnavin, Molecules (2010) 15, 917.
[7] X. Fan, S. Sayalero, M. A. Pericàs, Adv. Synth. Catal. (2012) 354, 2971.
[8] S. B. Ötvös, A. Szloszár, I. M. Mándity, F. Fülöp, Adv. Synth. Catal. (2015) 357, 3671.
[9] I. M. Mándity, S. B. Ötvös, F. Fülöp, ChemistryOpen (2015) 4, 212.
[10] M. Roldo, E. Barbu, J. F. Brown, D. W. Laight, J. D. Smart, J. Tsibouklis, Expert Opin. Drug Deliv. (2007) 4, 547.
[11] E. Merino, Chem. Soc. Rev. (2011) 40, 3835.
[12] V. Hessel, D. Kralisch, N. Kockmann, T. Noël, Q. Wang, ChemSusChem (2013) 6, 746.
[13] C. Zhang, N. Jiao, Angew. Chem. Int. Ed. (2010) 49, 6174.
[14] Á. Georgiádes, S. B. Ötvös, F. Fülöp, ACS Sustainable Chem. Eng. (2015) 3, 3388.
[15] S. B. Ötvös, F. Fülöp, Catal. Sci. Technol. (2015) 5, 4926.
[16] S. B. Ötvös, Á. Georgiádes, M. Ádok-Sipiczki, R. Mészáros, I. Pálkó, P. Sipos, F. Fülöp, Appl. Catal. A: Gen. (2015) 501, 63.

Köszönetnyilvánítás. A szerző köszönetét fejezi ki a hivatkozott saját közlemények társszerzőinek. A közlemény az MTA Posztdoktori Kutatói Program és a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj támogatásával készült.

Bordácsné Bocz Katalin

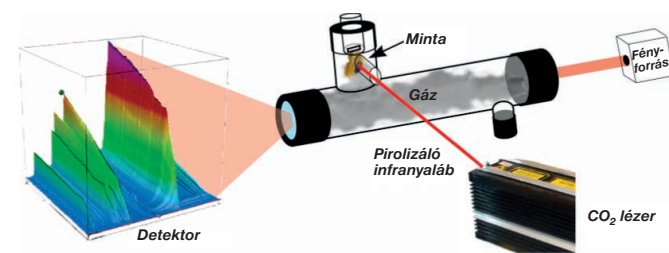
■ BME Szerves Kémia és Technológia Tanszék | kbocz@mail.bme.hu

Az égésgátlás korszerű módszerei

Bevezetés

A műanyagok többsége gyúlékony, s gyors lángterjedéssel ég. A műanyag-felhasználás robbanásszerű növekedésével drámaian megnőtt a tüzesetek száma és veszélyessége, ezáltal mindennapi életünk is kockázatosabbá vált. Az elmúlt évek szigorodó európai uniós normáinak köszönhetően azonban a hatékonysági és gazdaságossági megfontolások mellett ma már a környezetvédelem és a biztonságtechnika is egyre hangsúlyosabb szerepet kap. Ennek egyik következménye, hogy egyre bővül az ipari alkalmazások köre, amelyeknél alapvető követelmény a termékek csökkentett éghetősége, esetleg teljes égésgátlottsága.

Bár ma már többféle lehetőség nyílik a polimerek éghetőségének hatékony csökkentésére, nem hagyhatjuk figyelmen kívül a halogénszármazékok egészség- és környezetkárosító hatását és azt, hogy a – sokszor nagy koncentrációban alkalmazott –



1. ábra. Lézerpirolízis (LP)–FTIR kapcsolt rendszer sematikus ábrája

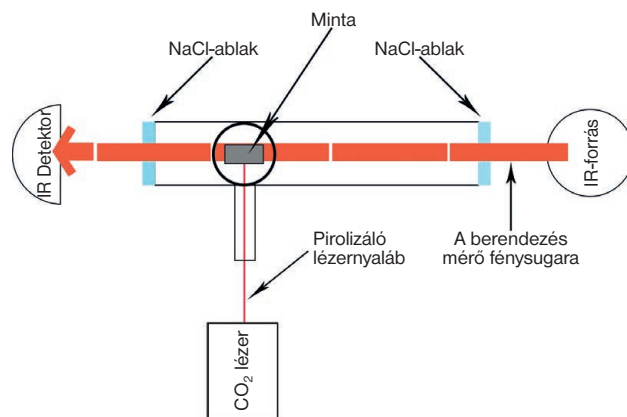
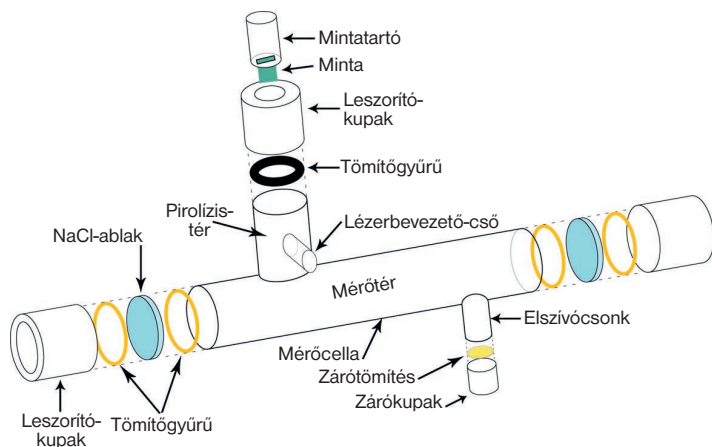
égésgátló adalékok nemcsak jelentősen növelik a termék árát, hanem lerontják azok mechanikai, stabilitási és esztétikai jellemzőit is. A korszerű polimeralapú termékek gazdaságos égésgátlásához ezért új megközelítések alkalmazására, illetve új mechanizmusok kiaknázására van szükség.

Új vizsgálati módszer fejlesztése

Égésgátlott polimer rendszerek fejlesztése során elengedhetetlen a polimer mátrix bomlási jellemzőinek, valamint az adalékok hatásmechanizmusának meghatározá-

sa. A régóta elterjedten alkalmazott vizsgálatok (pl. TGA–FTIR) kialakítása égő minták elemzésére nem optimális. Ezek tapasztalataiból kiindulva egy új vizsgálati módszert fejlesztettünk ki (1. ábra), amely lehetővé teszi a polimerek termikus, illetve termooxidatív bomlási körülményeinek modellezését és az égés során lejátszódó kémiai folyamatok nyomon követését a gázfázisban, hozzájárulva ezzel az égésgátló anyagfejlesztés irányainak meghatározásához.

A vizsgálati rendszer alapját két fő egység alkotja: 1) CO₂ lézer a pirolízis model-



2. ábra. A lézerpirólízis mérőcellája, a sugarak útja (felülnézet)

lezésére, 2) infravörös spektrométer (FTIR) a fejlődő gáz halmazállapotú bomlástermékek detektálására. A spektrométerbe integrált gázteret egy 25 mm átmérőjű és 10 cm hosszú üvegcső képezi, amit a két végén 4 mm vastag NaCl-ablak zár le, melyeket két-két szilikongumi gyűrű közé fogva egyenesen leszorító kupak rögzít (2. ábra). A lézerrel történő kezelés a pirólízistérben történik, melynek következtében a keletkező bomlástermék a mérőtérbe kerül, és ott halmozódik fel. Az analízáló infravörös nyaláb a cső tengelyének irányában halad keresztül a gázcellán, ezáltal valós idejű detektálást tesz lehetővé.

A műszerfejlesztési lépéseket követően a paraméterek beállítását alappolimereken – polipropilénen, etilén-vinil-acetáton – végeztük. A módszerben rejlő lehetőségek felderítésére az égésgátló polimer rendszerek széles skáláját vizsgáltuk meg. Különböző hatásmechanizmusú égésgátló adalékokat hasonlítottunk össze, mint például fém-hidroxidokat, vagy foszfortartalmú felhabosodó égésgátló rendszereket hőre

keményedő és hőre lágyuló polimer mátrixokban egyaránt.

Az új módszer mintaszükséglete, költsége és mérési időigénye több mint egy nagyságrenddel kisebb, mint a jelenleg alkalmazott módszereké. A környezet és az egészségkárosító gázok detektálása mellett új, gázfázisban ható égésgátlók még felderítetlen hatásmechanizmusának meghatározása is lehetővé vált [1]. Az új kapcsolt módszert a kutatás mellett az oktatásba is integráltuk.

Új égésgátló mechanizmus kutatása

Önerősített polimer kompozitok esetében az erősítő szál és az azt beágyazó mátrix azonos anyagcsaládba tartozik. Mechanikai teljesítőképességük és egyszerű újrahasznosíthatóságuk miatt ezek a rendszerek a hagyományos szálerősítéses kompozitok környezetbarát alternatíváit jelentik. Az újonnan kifejlesztett – elsősorban műszaki alkalmazásokra szánt – önerősített kompozitok égésgátlását kizárólag kör-

nyezetbarát, foszfortartalmú égésgátló adalékokkal történő módosítással kívántuk megvalósítani. A kísérleteink során felhasznált ammónium-polifoszfát-alapú (Exolit AP766, Clariant GmbH), felhabosodó égésgátló (intumescent flame retardant, IFR) hatását a kompozitok éghetőségi és mechanikai tulajdonságaira egyaránt széleskörűen vizsgáltuk.

Növekvő mennyiségű (0, 9, 13, 17 és 21%) IFR-t tartalmazó önerősített PP kompozitok (SRC-IFR) éghetőségi jellemzőit azonos kémiai összetételű, azonban erősítetlen PP keverékekkel (PP-IFR) összehasonlítva igen meglepő eredményeket kaptunk (1. táblázat). Azonos égésgátlóadalék-tartalom mellett az önerősített kompozitok esetében rendre jelentősen magasabb oxigén-indexeket (LOI) mértünk, mint az egyszerű bekeveréssel készített égésgátló PP minták esetében. A megfigyelt jelenség talán még jobban érzékelhető, amennyiben az UL-94 éghetőségi vizsgálat eredményeit tekintjük. Látható, hogy önerősített kompozitok esetében mindössze 9% égésgátló adalékkal elértévé vált a kompozit önkioltó viselkedése, azaz a legjobb, V-0 éghetőségi besorolás, míg PP keverékek esetében 18% ugyanilyen típusú égésgátló sem volt elegendő, ez esetben a szakirodalmi adatokkal megegyezően [2] legalább 20–22% IFR alkalmazására volt szükség.

Cone-kaloriméteres [3] vizsgálatok során is megfigyelhettük az önerősített kompozitokban alkalmazott IFR adalék kimagasló égésgátló hatékonyságát. Az égésgátló önerősített kompozitok égését átlagosan 40%-kal alacsonyabb hőkibocsátási maximum és mintegy 25%-kal kevesebb összes kibocsátott hőmennyiség jellemezte (3. ábra).

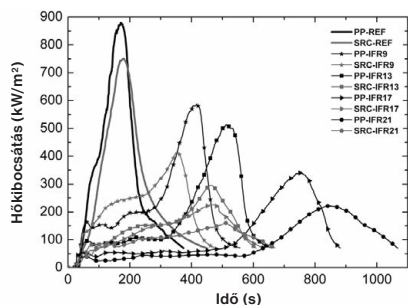
Mivel az előállított keverékek és önerősített kompozitok kémiai összetétele meg- egyezett, arra következtettünk, hogy az ön-

1. táblázat. Növekvő égésgátló- (IFR) tartalmú egyszerű PP keverékek és önerősített PP kompozitok oxigénindexének és szabványos UL-94 éghetőségi vizsgálat szerinti besorolásának összehasonlítása

PP komp.	LOI* (v/v%)	UL-94** Éghetőségi fokozat	SRC önerősített	LOI (v/v%)	UL-94 Éghetőségi fokozat
PP-REF	18	HB	SRC-REF	19	HB
PP-IFR9	24	HB	SRC-IFR9	26	V-0
PP-IFR13	27	HB	SRC-IFR13	30	V-0
PP-IFR17	31	V-2	SRC-IFR17	36	V-0
PP-IFR21	35	V-0	SRC-IFR21	42	V-0

*Oxigénindex: A meghatározott sebességgel áramló oxigén-nitrogén gázelegynek az a minimális oxigéntartalma a térfogatszázalékban kifejezve, amelyben meghatározott vizsgálati körülmények között a meggyulladt anyag égése fennmarad.

**UL-94 éghetőségi vizsgálat: Szabványos éghetőségi teszt, elsősorban a minták gyúlékonyságának jellemzésére, ill. lángterjedési sebességének meghatározására alkalmas. A teszt eredményeként a vizsgált próbatestek jól definiált éghetőségi osztályokba sorolhatók: HB (könnyen éghető) < V-2 < V-1 < V-0 (önkioltó).



3. ábra. Azonos IFR-tartalmú PP keverékek és önerősített kompozitok Cone-kaloriméterrel mért (50 kW/m²) hő kibocsátási görbéi

erősített kompozitok esetében megfigyelt égésgátlási mechanizmusban valamely fizikai jelenség játszik fontos szerepet. Számos paraméterre kiterjedő kísérletsorozat elvégzése után a különleges éghetőségscökkentő effektust a hő hatására kialakuló – az önerősített kompozitok esetében – különleges, kompakt szenes habszerkezet (4. ábra) kiemelkedő égésgátló hatására vezettük vissza [4]. Feltártuk, hogy a speciális, szenes hőszigetelő réteg kialakulásában a nagymértékben nyújtott, orientált PP szálak játszanak kulcsfontosságú szerepet. A hő hatására zsugorodó orientált PP szálak és a hő hatására felhabosodó (táguló) égésgátló adalékrendszer kedvező együttes hatását mint az égésgátlási mechanizmus egy új elemét értelmeztük [5]. Az önerősített kompozitok égésgátlására irányuló kutatásaink azt bizonyítják, hogy a megfigyelt különleges éghetőségscökkentő hatásnak köszönhetően a kívánt éghetőségi szint eléréséhez csak jóval kevesebb égésgátló adalékot szükséges felhasználni, amelynek következtében az égésgátló kompozit megtartja kiindulási, kiváló mechanikai tulajdonságait, s egyúttal a kompozit előállítási költsége is csökken.

Az új mechanizmust kiaknázva kedvező mechanikai tulajdonságú (szakítószilárdság: 80 MPa, perforációs energia: 16 J/mm) önerősített kompozitok állíthatók elő kizárólag másodlagos nyersanyag (vegyes poliolefinhulladék) felhasználásával égésgátló formában is. A műanyag hulladékokból történő kompozitgyártás során egyúttal a felhasznált műanyag hulladékok műszaki és piaci értéke egyaránt jelentősen nő [6]. Az erősített kompozitok egy másik alternatíváján – az önerősített politejsav példáján – azt mutattuk ki, hogy nagy műszaki értékű kompozitok gyárthatók teljes mértékben megújuló, biodegradálható nyersanyagokból kiindulva. Ezekkel egy lépéssel közelebb lehet kerülni a zárt ciklusú erőforrás-gazdálkodás megvalósulásához [7].

Új, multifunkcionális égésgátló adalékok alkalmazása biokompozitokban

Természetes szálakkal erősített biokompozitok égésgátlásához új, foszfortartalmú multifunkcionális adalékokat állítottunk elő. Olyan anyagokat kerestünk, amelyek alapfunkcióik mellett (pl. lágyító, erősítő, kompatibilizáló stb.) égésgátló hatást is kifejthetnek.

Égésgátló termoplasztikus keményítő (TPS) előállítása érdekében foszfortartalmú poliolt, – glicerint és foszfor-pentoxid reagáltatásával előállított – glicerint-foszfátot (GP) alkalmaztunk a keményítő lágyítására. A módosított keményítő megnövelt szenesítő hatást fejtett ki politejsavban (PLA-ban), és ezáltal csökkent éghetőségű PLA/TPS keverékek keletkeztek.

Ezzel párhuzamosan olyan új reaktív felületkezelőszert (PSil) állítottunk elő foszfortartalmú poliolt (OP 560) és 3-(trietoxiszilil)propil-izocianát addíciós reakciójával, amellyel a lenszálakat kezelve a foszfor-szilícium szinergizmus kiaknázható. A PLA/TPS és PLA/TPS-GP keverékek égési oxigénigénye egyaránt csökken, ha erősítőanyagként lenaszálakat választunk. A – szálas anyagokra jellemző, hátrányos – kanóchatás csak akkor szűnt meg teljes mértékben, amikor a szálakat a szintetizált foszfor-szilánal felületkezeltük. A bioszálak esetében nagymértékű szenesedést értünk el (TGA-ban 500 °C-on 47% szenes maradék) anélkül, hogy a cellulóz-alapú szálak hőstabilitása számottevően csökkent volna.

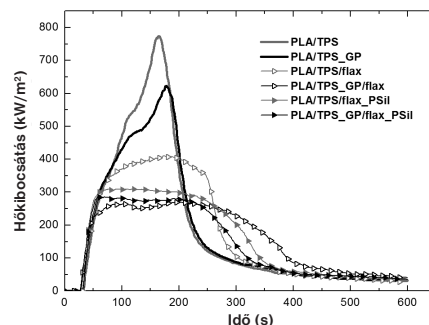
Amikor az égésgátló lágyítót kombináltuk a PSil-kezelt lenaszálakkal, a referencia biokompozitokhoz képest 30%-os hő kibocsátási maximum csökkenést értünk el (5. ábra). Amennyiben az erősítő szálak felületén és a biodegradálható mátrixanyagban egyaránt alkalmaztuk a foszfortartalmú multifunkcionális vegyületeket, megfelelő szilárdságú és merevségű, hatékonyan égésgátló biokompozitokat kaptunk további adalékok alkalmazása nélkül [8].

Összefoglalás

Kutatómunkánk során az „eco-design”, azaz környezetbarát tervezés elveit követve, újrahasznosítható önerősített kompozitokat és megújuló erőforrásból származó és biodegradálható kompozitokat állítottunk elő égésgátló formában. A kompozitfejlesztés során – a versenyképes mechanikai tulajdonságok elérésére való törekvés mellett – biztonsági, környezetvé-



4. ábra. 17% IFR-t tartalmazó egyszerű PP keverék és önerősített kompozit égési maradékai



5. ábra. Lenszál erősítésű PLA/TPS biokompozitok hő kibocsátási görbéi

delmi és gazdasági szempontokat is figyelembe veszünk annak érdekében, hogy az újrahasznosítható és megújuló erőforrásból származó kompozitok a hagyományos kőolajalapú versenytársak valós (vagy jobb) alternatívájául szolgálhassanak. A kutatómunka során kifejlesztett környezetbarát és biztonságos szál erősített kompozitok, a megfigyelt új égésgátló mechanizmus, továbbá az alkalmazott új vizsgálati módszerek tudományos és ipari érdeklődésre egyaránt számot tarthatnak.

IRODALOM

- [1] B. Bodzay, B. B. Marosfi, T. Igricz, K. Bocz, G. Marosi: Polymer degradation studies using Laser Pyrolysis-FTIR microanalysis. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* (2009) 85, 313–320.
- [2] S. Zhang, A. R. Horrocks: A review of flame retardant polypropylene fibres. *Progress in Polymer Science* (2003) 28, 1517–1538.
- [3] C. Huggett: Estimation of rate of heat release by means of oxygen consumption measurements. *Fire and Materials* (1980) 4, 61–65.
- [4] K. Bocz, T. Bárány, A. Toldy, B. Bodzay, I. Csontos, K. Madi, Gy. Marosi: Self-extinguishing polypropylene with a mass fraction of 9% intumescent additive – A new physical way for enhancing the fire retardant efficiency. *Polymer Degradation and Stability* (2013) 98, 79–86.
- [5] K. Bocz, T. Igricz, M. Domonkos, T. Bárány, G. Marosi: Self-extinguishing polypropylene with a mass fraction of 9% intumescent additive II – Influence of highly oriented fibres. *Polymer Degradation and Stability* (2013) 98, 2445–2451.
- [6] K. Bocz, A. Toldy, Á. Kmetty, T. Bárány, T. Igricz, Gy. Marosi: Development of flame retarded self-reinforced composite from automotive shredder plastic waste. *Polymer Degradation and Stability* (2012) 97, 221–227.
- [7] K. Bocz, M. Domonkos, T. Igricz, Á. Kmetty, T. Bárány, G. Marosi: Flame retarded self-reinforced poly(lactic acid) composites of outstanding impact resistance. *Composites Part A* (2015) 70, 27–34.
- [8] K. Bocz, B. Szolnoki, A. Marosi, T. Tábi, M. Władysław-Przybylak, Gy. Marosi: Flax fibre reinforced PLA/TPS biocomposites flame retarded with multifunctional additive system. *Polymer Degradation and Stability* (2014) 106, 63–73.



Braun Tibor

■ ELTE Kémiai Intézet, MTA Könyvtár és Információs Központ | braun@mail.iif.hu

Aiszkhüloszi érzelmek nyomán a kémiában

Vendéglátó-vendég és börtön-rab szupramolekuláris kapcsolatok

Előszó

Mint dolgozatunk címe is jelzi, a továbbiakban a molekuláris vendéglátó-vendég (host-guest) kémiai kölcsönhatásokkal, de azokon túlmenően a börtön-rab kémiai kapcsolatokkal is foglalkozunk, és ez lényegében utal a molekulák, atomok vagy ionok kémiai *rabul ejtésére* (*encarcerating*) is, amit szintén témánkhoz tartozónak vélünk.

Ezen utóbbira vonatkoztatva az alábbiakban nem arról lesz szó, hogy hogyan ejti rabul a kémia a kémiai ismeretekre éhezőkoponyákat. Bár ez utóbbi lehetőség is fennállhat, és e sorok szerzője maga is átesett e folyamaton zsenge ifjúkorában, az, amivel itt foglalkozni kívánunk, magában a kémiában és nem a kémiával történik.

Ezek után valószínűsíthető, hogy lesznek, akik a dolgozat címét fejcsóválva olvassák. Hát már a kémiában is..., mondhatják azok, akik a rabul ejtést kizárólag az élővilágra jellemző jelenségnek hitték. Optimistább alkatúak talán nem is a negatív kicsengést vélik kihallani a rabulejtés mögül, hiszen romantikus emberi kapcsolatok során érzelmileg is rabul ejthető a partner és lélekmelengető írások foglalkoznak ezzel a költészetben és a szépirodalomban. A kémiában azonban mindez másképpen van. A fenti címben kiemeltük a molekulák közötti *börtön-rab* fogalmat, ami a *börtön* (*carcer*) szó felemlítésével már enyhíteni, sőt feledtetni látszik a szívbemarkoló aiskhüloszi vendéglátó-vendég kapcsolatot, amely romantikát és szigorúbb kölcsönhatásokat ígér. Pedig még a kémiában is milyen szépen, barátságosan indult minden.

Bevezetés

1974-ben az egyesült államokbeli *Donald* és *Jane M. Cram* kutatóvegyész házaspár a „vendéglátó-vendég” (host-guest) elnevezést javasolta bizonyos kémiai kölcsönhatások és kapcsolatok (komplex vegyületek) jelölésére [1]. Javaslatukat a már előzőleg megfogalmazott kémiai elvek esztétikai kiegészítéseként *Aiszkhülosz* athéni költő és drámaíró egyik gondolatára is alapozták, aki 2500 évvel ezelőtt írta, hogy „a legkellemesebb (emberi) kapcsolat a vendéglátó és vendégek kapcsolata” [2]. Cramék nézeteiket a következőképpen foglalták össze „az elmúlt 17 évben kutatásaink során a vendéglátó (host) és a vendég (guest) közötti kellemes kapcsolattal foglalkoztunk a szerves molekulák szintjén”. A vendéglátó-vendég, valamint a komplex fogalmát és kötéseit a következők szerint definiáljuk [3]. A komplexek két vagy több molekulából vagy ionból állnak, melyeket egyedi szerkezeti kapcsolat tart össze olyan elektrosztatikus erőkkel, amelyek mások, mint a teljes, igazi kovalens kötések. Molekuláris komplexeket általában *hidrogénkötések*, *ionpárok*, π -savas vagy π -bázisos együttthatók, és *fém-ligandum* vagy *van der Waals* vonzási erők tartanak össze. Magas fokú szerkezeti szervezés általában csak sokszoros kapcsolati helyeken jön létre. Egy vendéglátó-vendég kapcsolat a vendéglátó és vendég kötés helyein létrejövő komplementer sztereoelektronikus elrendezést feltételez. A vendéglátót olyan szerves molekulaként vagy ionként definiálják, aminek a kötési helyei konvergálnak, míg a vendég komponens bármilyen molekulaként vagy ionként jel-

lemezhető, aminek a kötési helyei divergálnak a komplexben. Általában az egyszerű vendégek bőségesen állnak rendelkezésre, míg a vendéglátókat meg kell tervezni és szintetikus úton elő kell állítani [4]. Cram véleménye szerint „egy új terület új terminológiát igényel, melyet ha pontosan definiálnak, analógia segítségével megkönnyíti a gondolkodást a kutatás területén [3]. A Cram házaspár folytatta fent említett kutatásait és későbbi eredményeit egy „Container molecules and their guests” című kötetben foglalta össze [5].

Donald Cram saját kutatásai előzményeinek tekintette *Charles Pedersen* 1967-ben megjelent cikkeit [6, 7], amik a koronaéterek (crown ethers) felfedezéséről és azoknak az alkálifémekkel alkotott komplexeikről számoltak be. Ugyancsak vendéglátó-vendég kémiai kapcsolatok előzményeként kezelte Cram *Jean-Marie Lehn* és munkatársai 1969-ben publikált felfedezését a kriptand-molekulák tervezéséről, szintéziséről és kötési tulajdonságairól [8, 9]. Jean-Marie Lehn az általa tovább folytatott kutatásait egy új területként definiálta, aminek a *szupramolekuláris kémia* elnevezést adta [10]. Itt tartanánk fontosnak megjegyezni, hogy Charles Pedersent, Donald Cramot és Jean-Marie Lehn 1987-ben a Nobel Bizottság kémiai Nobel-díjjal tüntette ki „for their development and use of molecules with structure-specific interaction of high selectivity” (szerkezet-specifikus molekulák és nagy szelektivitású kölcsönhatásaik kidolgozásáért és felhasználásáért) [11–13].

Annak a bemutatására, hogy mennyire átfedőek voltak Cram és Lehn eredeti né-



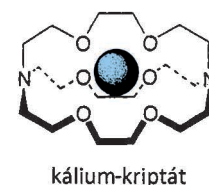
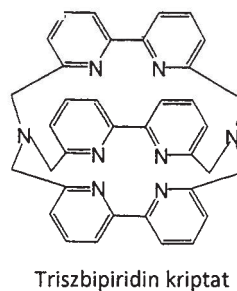
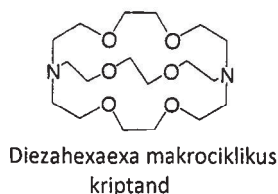
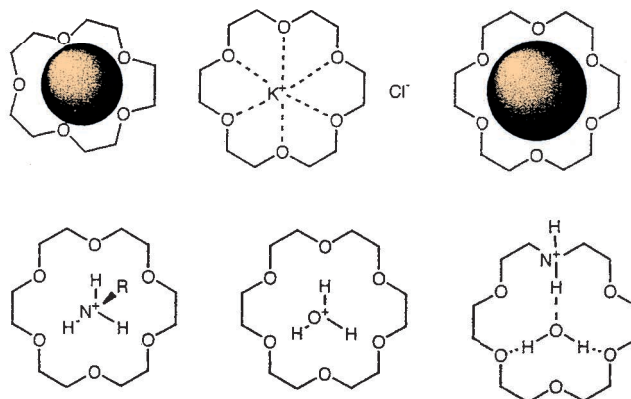
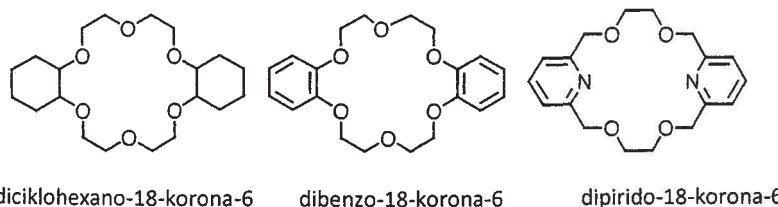
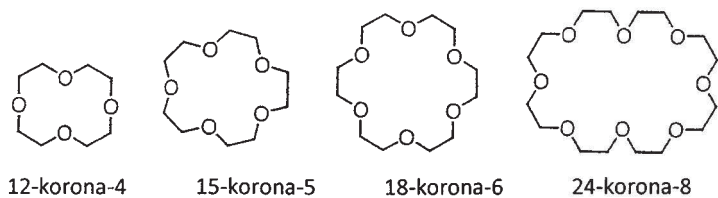
zetei és kutatási szándékai, talán elég itt az e dolgozat elején már szó szerint idézett, Cram-féle vendéglátó-vendég kapcsolatok definícióját összehasonlítani a Lehn Nobel-előadásán elhangzottakkal. „A molekuláris kémia a kovalens kötés kémiájával foglalkozik, illetve azon szabályokkal, amik irányítják, meghatározzák a molekuláris kémiát, és a molekulán túli kémiaként definiálható. Állíthatjuk, hogy a szupramolekulák a molekulának és az intermolekuláris kötéseknek ugyanazok, mint a molekulák az atomoknak és a kovalens kötéseknek.” [13].

Koronaéterek

De térjünk vissza kicsit részletesebben a kezdetekhez, illetve előzményekhez, azaz az 1967-ben Pedersen által felfedezett és általa koronaétereknek nevezett ciklikus poliéterekhez [6, 7]. Ezek a vegyületek nagyszámú, körben, szabályos intervallumokban elhelyezkedő szénatomokból állnak (innen Pedersen „korona” elnevezése), amiket oxigénatomok szakítanak meg (1. ábra). Fémionok hiányában a koronaéter gyűrű petyhüdt (floppy) jellegű. Azonban fémion bevezetésére (amikor a kötés a koronaéter gyűrűjében jön létre), az ion a koronát szervezettebb, sík lapszerű alakúvá teszi. Pedersen ezen felfedezése a kémiai kutatás új irányát jelentette különös hangsúllyal az ionos kötések irányába, valamint utalás, illetve átvezetés a biológiában és a biotikus rendszerekben ismert nagyon gyenge nemkovalens kötések, azaz a gyenge kölcsönhatások felé. Időben még távolabbra visszautalva megemlíthetők *Linus Pauling* 1940-es, gyenge kölcsönhatásokra fókuszáló kutatásai, különösképpen azok, amik a kémiai részleges ionos jellegre utaltak a negativitás fogalmának felhasználásával [14]. 1969-ben Lehn és munkatársai [8] követték és folytatták Pedersen koronaéterekre vonatkozó elveit és vizsgálatait több hivatkozással a koronaéterekhez, s háromdimenziós irányba fejlesztették még stabilabbá téve Pedersen síklapszerű komplexeit.

Kriptandok és szferandok

Ezeket a háromdimenziós policiklusos vegyületeket, mint már említettük, Lehn kriptandoknak [8, 9], illetve azok fémionokkal képzett vegyületeit kriptátoknak, illetve kriptaplexeknek nevezte (2. ábra). Röviddel azt követően, hogy Pedersen, aishühöszi érzelmek nyomán, felfedezte a koronaétereket, azaz vendégfogadásra,



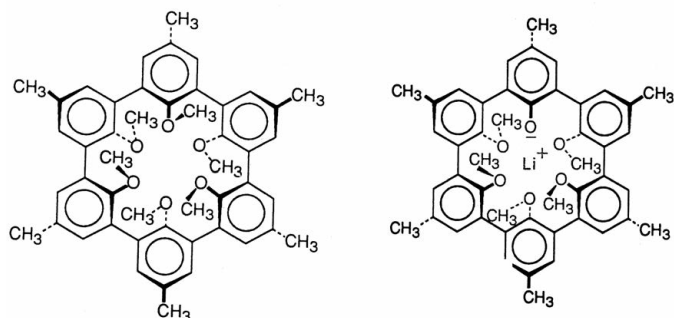
1. ábra. Koronaéterek, kriptátok és vendéglátó-vendég komplexeik [3, 5, 8, 10]

megkötésre szintetikus vendéglátó molekulákat, Lehn folytatta kutatásait újabb vendéglátók, a kriptandok szintézisével, majd 1987-ben újból Cram következett egy új vendéglátó család, a szferandok, illetve ugyancsak vendéglátó-vendég komplexeivel, a szferaplexek szintézisével [5, 12]. Tehát az aishühöszi vendéglátó sor immár a vendéglátó szívéllyesség kémiai megfelelőjével, a kötési affinitással jellemezve a koronaéterek < kriptandok < szferandok sort követte.

Már csak a fejlődés folyamatossága okán is hivatkozhatunk a Cram házaspár e dolgozat elején említett kijelentésére, miszerint a vendéglátó-vendég kapcsolatokhoz „egyszerű vendégek bőségesen állnak ren-

delkezésre, míg a vendéglátókat meg kell tervezni és szintetikus úton elő kell állítani” [4].

E gondolatok jegyében Cram és munkatársai egy csoport olyan új ligandumrendszert terveztek, amelyekben azok már a komplexképzést megelőzően előszerveződtek. Az ilyen előszerveződött vendéglátó-rendszereket Cram és munkatársai, mint már említettük, szferandoknak, illetve azok vendéglátó-vendég komplexeit szferaplexeknek nevezték [15]. A szferandok meglehetősen összetett szintézisének kérdéseivel itt nem kívánunk foglalkozni, de egy vendéglátó szferandmolekulát és egy vendéglátó-lítium vendégmolekulát a 2. ábrán bemutatunk.



2. ábra. Vendéglátó szferand-molekula és szferaplex vendéglátó-lítium komplex [5]

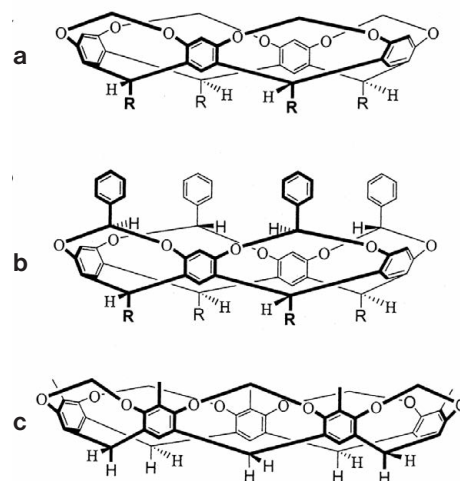
Kavitandok

A fentebb említett vendéglátó szívélyességi affinitási sor további kiegészítéseként említést kell tegyünk Cram újabb vendéglátó molekuláiról, a kavitandokról. Ezek szintetikus szerves vegyületek, amiknek megerősített belső üregei (enforced cavities) eléggé nagyok ahhoz, hogy befogadjanak, komplexáljanak komplementer szerves vegyületeket vagy ionokat [5, 16]. Itt a két kulcsszóra, azaz a „megerősített”-re és az „üreg”-re (cavity), kell hangsúlyozottan gondolni. Az előző, magasan előszervezett merev szerves molekulákra utal, azaz olyanokra, amelyek kevés konformációs vagy mozgási lehetőséggel rendelkeznek. Ebben az értelemben a kavitandok általában többszörös aromás gyűrűből képzett makrociklusos vegyületek, amik magasan konstrikatív módon, kovalensen kötődnek egymáshoz. Az „üreg” szó magától értetődően a topológiában egy egész idomsorra terjedhet ki a konkáv vagy tál alakútól egészen a teljesen bekapcsolódott molekuláris felületig. Amikor Cram bevezette az elnevezést, ő nem tett különbséget e két különböző (konvex-konkáv) görbület között [16]. Viszont a „tál” (bowl) alakú molekulák elterjedésével, azaz az olyan molekulákkal, amelyek tálszerűen teljesen magukba tudtak fogadni vendégmolekulát, a kavitandofogalom a nyitott, konkáv alakú vendéglátók szinonimájává vált. A tál (bowl) alakú vendéglátók legkiemelkedőbb példáját a rezorci[4]arének és a ciklotrivi-

ratrilének jelentik [5]. A 3. ábra tipikus vendéglátó kavitandokra mutat példát.

Karcerandok

Az előbbieken vázolt eredmények és megállapítások, mint írtuk, teljes összhangban lévőnek tűntek az ajszkhüloszi érzelmek alapjára épített vendéglátó-vendég (host-guest) kémiai elvekkel [17]. Azonban 1985-ben felhők kezdtek gyülekezni az ajszkhüloszi vendéglátó-vendég kémia egén. Ugyanis ebben az évben jelent meg Cram és munkatársainak a karcerandok és karceplexek felfedezéséről beszámoló cikke [18]. Cramék dolgozatából szó szerint idézve: „az eddig leírt több millió szerves vegyületen kívül léteznek olyan zárt felületű vendéglátók, amelyek megerősített, belső tere eléggé nagy ahhoz, hogy kovalens rácsok mögé olyan vendégeket tudjanak bebörtönözni (incarcerate), melyeknek mérete a közönséges oldószer-molekuláknak felel meg. Erre a vegyületcsoportra a karcerandok megjelölést alkalmazzuk” (4. ábra). Az ajszkhüloszi érzelmi kapcsolatok feletti felhősödés a fentieket olvasva abból az ezúttal szívszorító tényből származik, hogy a karcerandok és azok komplexei, a karceplexek esetében olyan kifejezések, mint „rács mögött tartás”, „bebörtönzés”, „fogoly” és a még elszomorítóbb „vendég rács mögött” kezdtek feltűnni a molekuláris konténervegyületekkel foglalkozó irodalomban. Ilyen esetekben definiálja Cram: a vendégmolekula vagy ion a kar-



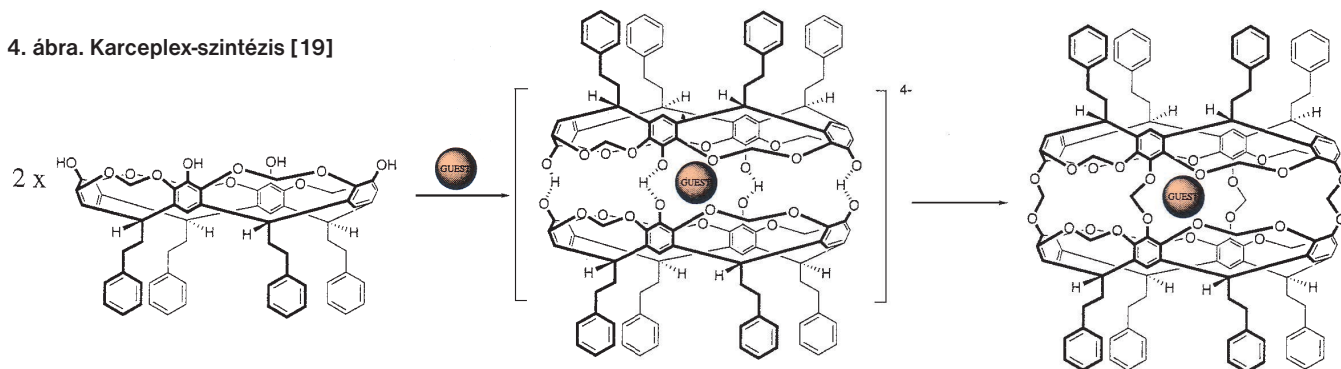
3. ábra. Tipikus vendéglátó kavitandok: a) szabályos kavitand, b) mély üregű kavitand, c) széles aljú kavitand [5]

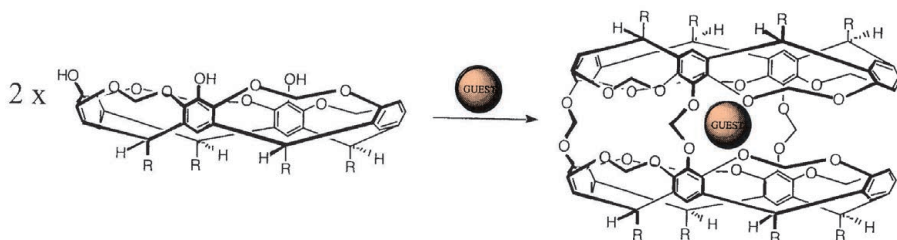
ceplexeiből csak köznapiasan mondvá rácsfűrészeléssel, azaz kémiailag kovalens kötéstöréssel szabadulhat, s ezúttal már nem vendég, hanem rab (fogoly). Nem szükséges túl érzékeny és bonyolult magyarázó nevezéktan ahhoz, hogy az ilyen viszonyok már nem vagy csak nagyon nehezen tekinthetők ajszkhüloszi értelmezésben „kellemes érzelmi kapcsolatoknak”. Az olyan kapcsolatban, amiben a vendég nem tud szabadon jönni-menni, hanem ténylegesen „fogolyként” vagy „rabként” van jelen, azaz „rabul ejtett”, „rács mögötti” vagy bebörtönzött lesz, nem a kellemesség az uralkodó érzés.

Hemikarcerandok

Enyhítően hat mindezekre Cram továbbfejlesztése abban az irányban, hogy megalkotott és előállított olyan kavitandalapú, nagy üregű karcerandokat, amelyek eléggé nagy méretű réseket tartalmaztak ahhoz, hogy azokon keresztül magasabb hőmérsékleten a „vendégek” ezentúl már „rabok”, „foglyok” nem könnyen, de kiszabadulhassanak. Ezeket hemikarcerandok-

4. ábra. Karceplex-szintézis [19]





5. ábra. Hemikarceplex-szintézis [19]

nak, illetve hemikarceplexeknek (5. ábra) nevezte [5, 19]. Mindezek tudatában talán ha mégolyan elszomorodott szívünkkel valamilyen enyhítést keresve bátor kodunk valamilyen közeledést találni a valóban lélekemelő aiszkhüloszi érzelmek és a nem igazán szívderítő bebörtönzési törekvések közé, esetleg megtehetjük, hogy kétféle kapcsolati csoportosítást képzelünk el azáltal, hogy a két extrém állapot, azaz „vendég”, illetve „fogoly” közé a kémiát és a molekulákat is érintő, közbeeső helyzetet, állapotot iktatunk. Ennek értelmében a koraplexeket, kriptaplexeket, szferaplexeket, kriptaszferaplexeket, hemiszferaplexeket, kaviplexeket stb. [5] „látogató”, vagy ha akarjuk, „vizitand” (vizit: látogatás) kapcsolató vegyületeknek tekinthetjük, mivel a „látogatás” folyamán a vendéglátó-vendég aiszkhüloszi kellemes „vizitelő” kapcsolata érvényesül. Ezzel szemben a karceplexek mint „kaptivand” (captivand) vegyületek jelennek meg, ahol a „foglár” molekulák a „foglyokat” a „börtön-rab” kapcsolatban „befogják”, és irreverzibilisen, kovalens rácsok mögött tartják nem igazán kellemes érzelmi, hanem szigorú „fogoly-foglár” érzelmetlen kapcsolatban.

A fentiek további kiterjesztésére feltétlenül megjegyzendő, hogy a „foglár-fogoly”, illetve „börtön-rab” kémia nemcsak az előbbiekben ismertetett különböző típusú és alakú karcerandok, molekulakonténerek, molekulakapszulák képződésével és tanulmányozásával foglalkozhat, hanem azzal az egyáltalán nem elhanyagolható kérdéssel is, hogy vajon milyen jellegű „belső kapcsolatok”, azaz kémiai reakciók játszódhatnak le a „foglár”, a „börtön” molekulák belsejébe bezárt különböző „foglyok” illetve „rabok” között. Helyhiány miatt itt természetesen ezekkel sem foglalkozhatunk.

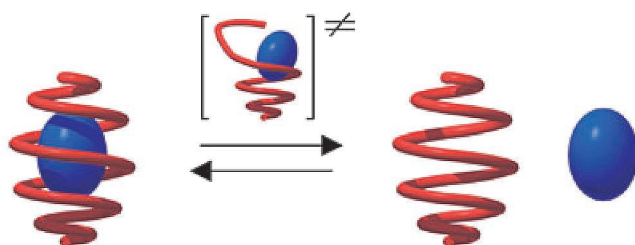
Bár mint már az előzőekben említettük, az aiszkhüloszi értelemben itt említett és leírt vendéglátó molekulák előállításával ebben a dolgozatban nem kívánunk foglalkozni főleg azért, mert ezek szintézise az itt idézett irodalomban bőven megtalálható [5, 10, 20, 21]. Ennek ellenére érezzük úgy, és tényként nagyon érdekesnek véljük, hogy a kémiai értelmezés sze-

rinti Cram-féle karcerandok, illetve börtönök egyikét sem sikerült „üresen”, azaz „rabok” vagy „foglyok” nélkül, illetve azok távollétében előállítani. Ennek Cram szerint entalpiás és entrópiás okai vannak [5]. Aiszkhüloszi értelmezésben a jó hír az, hogy az üres börtönök léte lélekmengetőbb jelenség, mint a rabokkal vagy foglyokkal töltöttek. A rossz hír sajnos azonban az, hogy ilyenek nem léteznek. De mint a megfelelő fentebbi fejezetben leírtuk, léteznek a hemikarcerandok (5. ábra) és ezeket talán börtön helyett átjárhatóbb, illetve enyhébb értelmezésben fogházaknak nevezhetnénk. Még mindig a karcerandok, illetve a börtönök körül időzve rendkívül érdekesnek tartjuk Cram erre vonatkozó összegező nézeteit, amiket a legcélszerűbbnek tartunk szó szerint idézni:

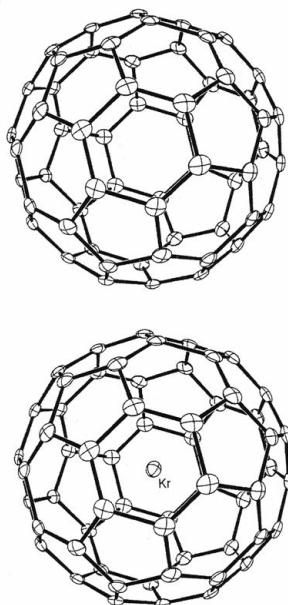
„A karceplexek belseje eléggé unikális, egyedi ahhoz, hogy azt az anyag egy új fázisának (a new phase of matter) nevezhessük. Ezek a komplexek körvonalazható belső terű zárt molekuláris cellák, amik megtartják szerkezeti integritásukat szilárd anyagként, oldott szolútumként vagy még rövid életű (DC–MS-sel mért) gázokként is. Vendégei (jelen szerző szerint foglyai) kiszabadulni csak kovalens kötések feltörésével (jelen szerző szerint rácsfűrészeléssel) tudnak. A karceplexek olyan diszkrét molekuláris tulajdonságokkal rendelkeznek, mint molekulatömeg, térfogat, molekulaképlet, kromatográfiás retenció idő, és kristályszerkezet-vizsgálatoknak is alávetethetők. A karceplexek belseje szabad tér és vendég (jelen szerző szerint rab) által elfoglalt tér, és ezek relatív mennyisége megtervezhető. A bebörtönözhető vendégekre (rabokra) vonatkozó korlátozások azok molekulamérete és térfogata. A vendég (rab) molekulatér fogata kevesebb kell legyen, mint a karcerand (börtön) belse-

jéé. Több mint egy, sőt még egynél többfajta vendég (rab) is lehet egyidejűleg a belső fázisban (börtönben), az egyetlen korlátozás a rendelkezésre álló tér. A vendég (rab) nagymértékben megváltoztathatja a karceplex tulajdonságait. E komplexek oldékonysági tulajdonságai funkcionális csoport manipulálással megváltoztathatók. A karceplexek belső fázisai egyedi helyek, ahol reakciók megvalósíthatók” [5]. Érdekességgé a karceplexekhez hasonlítható olyan börtön-rab kapcsolatot is megemlítenénk, ahol a börtön-üreg (cavity) nem gömbölyű, hanem a börtönrácsokat hámozott almahéjszerű (apple peel) börtönrács alkotja [22] (6. ábra).

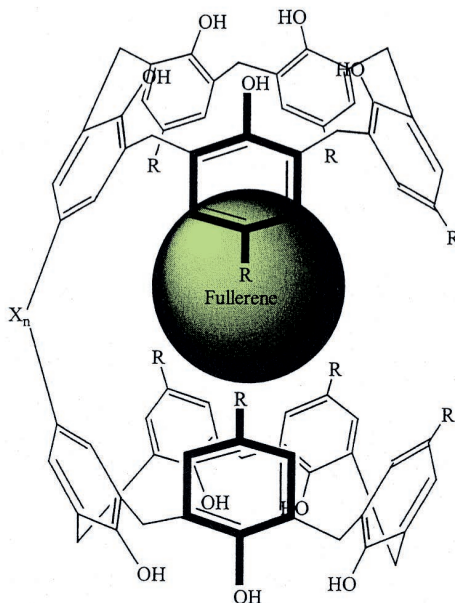
A vendéglátó-vendég, illetve börtön-rab szupramolekuláris kapcsolatok jelentőségét és alkalmazási lehetőségeit a kémiában és a biológiai folyamatok jobb megértésében, modellezésében itt nem kell külön hangsúlyoznunk, elég, ha utalunk a már említett 1987-es kémiai Nobel-díj laudációsövegére. Ellenben szót érdemes és kell ejtenünk a fentiekből kiindult fejlesztésekről. Ezek jobb átlátásához és megértéséhez az újonnan kifejlesztett vegyületek kémiájához, tipológiájához átfogó nomenklaturát, rendszerezést is kidolgoztak [23]. Már csak a fentebb leírt karcerandokra, illetve molekuláris börtönökre vonatkoztatva a Cram által bevezetett konténermolekulák fogalmát, például könyve [5] címéből következő, a témára vonatkozó szakirodalom számos átfedő szinonim elnevezést, mint molekuláris cellák, molekuláris kapszulák, molekuláris edények és számos mást is használ. És persze átfedően, illetve belefoglalóan tekintetbe kell venni az olyan fogalmakat is, mint például a molekuláris önszervezés (molecular self-assembly) [24] vagy molekuláris önfelismerés (molecular recognition) [25]. Ezáltal is világossá válik, hogy mindazt, amiről a fentiekben beszámoltunk, azaz az ismertetett molekulákat olyan nemkovalens erők, mint hidrogénkötés, fémion-koordinálás, hidrofobicitás, van der Waals-kötések, π - π kölcsönhatások és elektrosztatikus, valamint elektromágneses kölcsönhatások és kapcsolatok irányítják. Nyugodtan mondhatjuk, hogy egy világnyi esemény játszódik vagy ját-



6. ábra. Tojás formájú molekuláris bebörtönzése két végén szűkülő spirálbörtönbe [22]



7. ábra. Buckminsterfullerén börtönmolekula és endohedrális kripton rab



8. ábra. Buckminsterfullerén börtön bebörtönzése hidazott kalix[5]arén börtönrácsok mögé [29]

szódhat le például azokban a molekuláris konténerekben (például kavitandokban vagy karcerandokban), amelyeket megfelelő körülmények között a kémiai kapcsolatok és mondhatjuk, mégiscsak aiszkhüloszi érzelmek hoznak létre [26].

Fullerénbörtönök és endohedrális fullerén börtön-fogoly kapcsolatok

A továbbiakban ismertetettéket csak azért említjük röviden itt, mert úgy véljük, hogy szervesen kapcsolódnak az előbbieken vázolt gondolatokhoz. A rövideget az is indokolja, hogy ezekről más vonatkozásban már más helyen is beszámoltunk [27–29]. Ennek értelmében hivatkozunk itt egy másik eseményre, mely ugyancsak hozzájárult az Aiszkhülosz-élmű vendéglátó-vendég kémiai vonatkozások fent említett nevezéktani felhősödéséhez: ez a buckminsterfullerén és oligomerjeinek 1985-ben történt felfedezése volt. Ezek a szén új allotróp módosulatai, melyeknek ugyancsak zárt a felületük, üres gömb alakúak és potenciálisan elég nagy a belső terük ahhoz, hogy atomokat, ionokat vagy kis molekulákat rabként vagy fogolyként börtönszerűen foglyul tudjanak ejteni (7. ábra). A karcerandokhoz viszonyítva, amik, mint már említettük, üres, fogoly nélküli börtönként nem állíthatók elő, a fullerénbörtönök üresen is létrehozhatók, sőt úgy, hogy üres belsejükben vákuum van. Ezek után teljes meglepetésnek nevezhető, hogy a

börtön bebörtönzését is megvalósították [30], mint az a 8. ábrán látható.

Végszó

Befejezésül vissza kell térnünk Pedersen, Cram és Lehn e dolgozatban már említett, 1987-beli kémiai Nobel-díjának indoklására, és azt ki kell egészítenünk szó szerinti idézésben a következőkkel: „A díjazottak kutatásai nagy jelentőségűek a koordinációs kémia, a szerves szintézis, az analitikai kémia és a bioszerves, valamint a bioszervetlen kémia fejlődésére, és ezáltal alapjait képezték a kémián belüli interdiszciplináris területnek, ami jelenleg eljutott oda, hogy vendéglátó-vendég vagy szupramolekuláris kémiának nevezhető” [31]. Úgy véljük, hogy ezeknek a felfedezéseknek és azok továbbfejlesztésének az ebben a dolgozatban bemutatott megközelítése mindennapi emberi érzelmi hangsúlyt ad vagy adhat az azokra vonatkozó kémiai felfedezéseknek. E sorok szerzője azt sem tudja eltitkolni, hogy jelen dolgozat hangulatát jelentős mértékben befolyásolták Eugene Garfield 1986-ban publikált gondolatai [32].



IRODALOM

- [1] D. J. Cram, J. M. Cram, *Host-guest chemistry*, Science (1974) 183, 803.
- [2] Aeschylus (525–416 B.C.), *The Choephore* (translated by Sir G. Murray) taken from J. Bartlett, *Familiar Quotations*, C. Morley and L. D. Everett, Eds. Garden City, N.Y., ed. 11, 1944, 963.
- [3] D. J. Cram, *The design of molecular hosts, guests and their complexes*, Science (1988) 240, 760.

- [4] E. P. Kyba, R. C. Helgeson, K. Madan, G. W. Gokel, T. L. Tarnowski, S. S. More, D. J. Cram, *Host-guest complexation. 1. Concept and illustration*, J. Am. Chem. Soc. (1977) 99, 2564.
- [5] D. J. Cram, J. M. Cram, *Container molecules and their guests. Monographs in supramolecular chemistry*, Royal Society of Chemistry, London, 1994.
- [6] C. J. Pedersen, *Cyclic polyethers and their complexes with metal salts*, J. Am. Chem. Soc. (1967) 89, 2495.
- [7] C. J. Pedersen, *Cyclic polyethers and their complexes with metal salts*, J. Am. Chem. Soc. (1967) 89, 7017.
- [8] B. Dietrich, J.-M. Lehn, J.-P. Sauvage, *Diaza-polyoxa-macrocycles et macrobicycles*, Tetrahedron Lett. (1989) 2885.
- [9] B. Dietrich, J.-M. Lehn, J.-P. Sauvage, *Les cryptates*, Tetrahedron Lett. (1969) 2889.
- [10] J.-M. Lehn, *Supramolecular chemistry. Scope and perspectives*, J. Incl. Phenomen. (1988) 6, 351.
- [11] Ch. J. Pedersen, *The discovery of crown ethers*, Nobel lecture, December 8, 1987.
- [12] D. J. Cram, *The design of molecular hosts, guests, and their complexes*, Nobel lecture, 8 December, 1987.
- [13] J.-M. Lehn, *Supramolecular chemistry, scope and perspectives. Molecules, supramolecules, and molecular devices*, Nobel lecture, 8 December, 1987.
- [14] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, Cornell University Press, Ithaca, NY, 1960.
- [15] D. J. Cram, T. Kaneda, R. C. Helgeson, S. B. Brown, C. B. Knobler, E. F. Maverick, K. N. Trueblood, *Host-guest complexation. 35. Spherands, the first completely pre-organized ligand systems*, J. Am. Chem. Soc. (1985) 107, 3645.
- [16] J. R. Moran, S. Karbach, D. J. Cram, *Cavitands: synthetic molecular vessels*, J. Am. Chem. Soc. (1982) 104, 5826.
- [17] F. Vögtle, E. L. Böschke (Eds.), *Host-guest chemistry, in Topics in Current Series*, vol. 1–3, Springer, Berlin, 1982–1984.
- [18] S. Karbach, Y. H. Kim, L. Baczyński, G. W. Kallmeyer, *Shell closure of two cavitands forms carcerand complexes with components of the medium as permanent guests*, J. Am. Chem. Soc. (1985), 107, 2575.
- [19] B. C. Gibb, *Carcerands and Hemicarcerands*, in *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Eds. Atwood, J. W. Steed, J. Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004, 189.
- [20] J. Atwood, J. W. Steed (Eds.), *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.
- [21] J. A. Bryant, M. T. Blanda, M. Vincenti, D. J. Cram, *Host-guest complexation. 55. Guest capture during shell closure*, J. Am. Chem. Soc. (1991) 113, 2167.
- [22] J. Garric, J.-M. Léger, I. Huc, *Molecular Apple Peels*, Angew. Chem. Int. Ed. (2005) 44, 1954.
- [23] E. Weber, *Classification and Nomenclature of Supramolecular Compounds*, in J. Atwood, J. W. Steed (Eds.), *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.
- [24] <https://en.wikipedia.org/wiki/Self-assembly>
- [25] https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_recognition
- [26] R. J. Hooley, J. Rebek Jr., *Chemistry and catalysis in functional cavitands*, Chem Biol., (2009) 16, 255.
- [27] Braun Tibor, *A fullerénkaliták belvilága és az endohedrális X@C_{2n} vegyületek fizikai kémiája*, Magy. Kém. Lapja (1995) 50, 369.
- [28] Braun Tibor, *A káprázatos C₆₀ molekula*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1996.
- [29] T. Braun Ed., *Advances in fullerene science*, vol. 1–6, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 2000–2007.
- [30] C. L. Ralston, *Complexation of fullerenes*, in J. Atwood, J. W. Steed (Eds.), *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.
- [31] Royal Swedish Academy of Sciences. *Awarded for syntheses of molecules that mimic important biological processes*. 14 October 1987 (Press release)
- [32] E. Garfield, *Further reflections on the poetry-science connection*, Current Contents (1986) 7, 3.

Kápolnai Zsombor¹ – Vidéki Imre²¹ ELTE Földtudományi Doktori Iskola | kapolnaizsombor@gmail.com² ELTE Társadalom- és Gazdaságföldrajzi Tanszék | videkiimre@caesar.elte.hu

A gyógyszeripar kutatás-fejlesztésben vezető vállalatainak feldolgozóiparon belüli jelentősége

Vizsgálatunk arra irányul, hogy a szakemberek által csúcstechnológiai ágazatnak minősített szektor kutatás-fejlesztési ráfordításait egy megbízható adathalmazból kigyűjtjük, a meghatározó vállalatok kiadásait székhely szerint aggregáljuk és szemléltetés céljából térképen ábrázoljuk. Így érzékelhető a gyógyszeripar fontossága és részesedése a feldolgozóipari K+F fejlesztésekből, és részben lehetővé válik egyes települések kutatásban betöltött szerepének megítélése. Írásunkban a továbbiakban gyógyszeripar alatt a gyógyszer- és biotechnológiai ipart értjük.

Az adatok forrása

Az EU, az OECD és az IBRD szokott kutatás-fejlesztéssel foglalkozó – országokra vonatkozó – adatokat gyűjteni, statisztikákat kibocsátani. Az EU emellett a K+F-re legtöbbet költő 1000 unióbeli – illetve más országokkal együtt 2000 (2013-ban 2500) – vállalat rangsorát is közreadja 2004 óta, az iparági besorolással együtt. Munkánkban az EU Industrial R+D Investment Scoreboard legutolsó kiadványának [1] adatait használtuk.

Ez, ha nem is teljes körű, de megbízható összehasonlítást tesz lehetővé a vállalatok és a feldolgozóipar ágazatai között. A felmérésben szereplő vállalatok az ipari kutatás-fejlesztési ráfordítások kb. 90%-át teszik ki.

Az egyik évről a másikra kialakult rangsor jelentősen változhat, mivel gyakran fordul elő a vállalatok összeolvadása, felvásárlása, ritkábban pedig szétválása.

A kutatás-fejlesztés jelentősége

Azok az országok vagy vállalkozások, amelyek élen járnak ebben a tevékenységben, általában a Föld fejlettebb és hasznuk révén a gazdagabb részéhez tartoznak. A kutatás-fejlesztés eredményeképpen magasabb hozzáadott értéket képesek elérni és versenyképesebbnek bizonyulnak másoknál. A hozzáadott érték fedezi a munkavállalók bérét, a vállalkozók hasznát, a beruházásokat és magát a kutatást-fejlesztést is.

Ahhoz, hogy az EU tagjainak versenyképessége ne maradjon el a világgazdasági központokétól (USA és Japán), a K+F-re fordított kiadások növelése alapvető fontosságú. Az Unió lisszaboni célkitűzése szerint 2010-re a K+F GDP-hez viszonyított arányának 3%-ra kellett volna emelkednie. Ez nem teljesült, a 28 tagországból csak néhányban haladja meg a 3%-os értéket (Finn-, Svédország, Dánia). Az európai gazdaság vezető államában, Németországban 2,84%, míg Franciaországban 2,25%. Ugyanakkor tíz országé nem éri el az 1%-ot sem! A 2004-ben csatlakozott országokat tekintve Szlovénia és Észtország kiemelkedik, 2011-ben elért 2,47%-os és 2,38%-os értékével [2]. Rajtuk kívül Csehország (1,84%) és hazánk (2012-ben 1,3%) mutatója haladja meg az 1%-ot.

2011-ben az EU tagállamaiban a GDP-ből a kutatás-fejlesztésre fordított arány 2,03% volt, jóval alacsonyabb Japán (3,36%) és az USA (2,87%) értékénél.

Más oldalról közelítve: a közösségen belül a K+F-re fordított kiadások összege 2011-ben 257 milliárd euró volt, jelentősen

(42%-kal) meghaladva a 10 évvel korábbi értéket. Ez az USA által K+F-re fordított összegnek kb. a 7/8-a, viszont 1,8-szor több, mint amennyit Japán fordított kutatás-fejlesztésre.

A GDP-ből a kutatásra-fejlesztésre fordított hányad az EU 2020-ig tartó elképzeléseiben az öt kulcsmutató közül az egyik.

A társadalom különböző tevékenységeiben a kutatás-fejlesztés fontossága eltérő módon jelenik meg. Vannak kifejezetten magas kutatás-fejlesztési igényű (az értékesítés legalább 5%-a) tevékenységek, vannak azonban olyanok, amelyekben kisebb (1% vagy az alatti) a kutatás-fejlesztésre fordított összeg. Ezt az összeget a gyógyszergyártásban az éves nettó értékesítéshez szokták viszonyítani. Ezt K+F intenzitásnak nevezik.

A feldolgozóiparban a leginkább kutatás-fejlesztés igényes ágazatok: a gyógyszer- és biotechnológiai ipar, a számítógép-, az elektronikai és optikaipar, valamint a légi- és űrjárműgyártás. Ezek egyúttal a csúcstechnológia (high tech) megvalósítói.

Európában a csúcstechnológiai ágazatok közül a gyógyszeripar rendelkezik a legnagyobb kutatási intenzitással, a legmagasabb egy főre jutó hozzáadottérték-termeléssel és nem utolsósorban a legjelentősebb külkereskedelmi aktívummal.

A gyógyszeripar megítélése és néhány jellemzője

Fentiek miatt a világgazdaság erőközpontjai – így az EU is – különös figyelmet fordítanak az ágazatra. Ráadásul a népesség



korösszetételéből adódóan az előregedő népesség egészségi állapota fokozott kihívást jelent a tagországok többsége számára.

Az előrejelzések szerint 2050-re a 65 évesnél idősebb lakosság a maihoz képest várhatóan háromnegyed résszel fog növekedni. Amennyiben a megnövekedett létszám képtelen, vagy korlátozott mértékben képes dolgozni, az veszélyezteti az egészségügyi és a nyugdíjellátó rendszert. A bármilyen mértékű egészségkárosodás, annak megelőzésére, enyhítésére igénybe vett eszközök, szolgáltatások ugyancsak terhet róhatnak az említett rendszerekre. Fontos felhívni a figyelmet arra, hogy a tagországokban nagy különbségek vannak például a gyógyszerekhez való hozzáférés lehetőségében is. Az Európai Gazdasági és Szociális Bizottság éppen ilyen okok miatt szorgalmazta tavaly a gyógyszeripar szerkezetváltását [3].

A fejlődő országokban egészen más kérdések kerülnek előtérbe. A népességnövekedés lassítása mellett a fertőző megbetegedések megakadályozása vagy visszaszorítása jelent komoly feladatot az ágazat számára.

A meghatározó fontosságú ágazatként való kezelés indoka, hogy az EU és az USA feldolgozóiparában kb. egy évtizede eltérő prioritás észlelhető. Míg az EU-ban a közepes-magas fejlettségű technológiát alkalmazó ágazatok fejlesztése került előtérbe – különösen a közúti jármű- és alkatrészgyártás –, az USA-ban a fejlett technológiát igénylők – az IKT-eszközök gyártása, a gyógyszeripari tevékenységek. Az EU-ban 2013-ban a kutatás-fejlesztési kiadások fele autóipari fejlesztéseket szolgált, egy évtizede csupán a negyede. Az USA-ban viszont az IKT ágazatba jutott a kutatás-fejlesztési pénzek 63%-a, a korábbi 45%-kal szemben.

A csúcstechnológiai tevékenységekben az EU a gyógyszergyártás kivételével lemaradásban van az USA-tól. Különösen szembetűnő ez a biotechnológiai iparban, ahol a kutatásban élenjáró vállalatok száma az ötöde, az általuk K+F-re költött összeg pedig a tizede az USA-val összehasonlítva [1].

Az elmaradás hosszabb távon is megfigyelhető: ha az EU által biotechnológiai kutatásra fordított pénzt összehasonlítjuk a 2005 és 2012 közötti időszakra vonatkozóan az USA-kiadásokkal, azt tapasztaljuk, hogy az csupán a töredékét éri el: 6,7–8,7% között mozog. A gyógyszeripari kutatás-fejlesztésre fordított hányad már jóval magasabb: az USA-beli 78–90%-a.

A gyógyszeripar jellemzői között meg-

említhető a magas K+F ráfordítás mellett a tőkeigényesség: egy új gyógyszer kifejlesztése napjainkban 1,1 milliárd euróra tehető. Jelentős a kockázatvállalás is, mivel egy originális gyógyszer fejlesztése, gyógyszerként való törzskönyvezése, bevezetése 10–15 évig is eltarthat, számos preklinikai, klinikai fázison kell sikeresen megfelelnie [4]. A tapasztalatok szerint 10 000 molekulából 1–2 válik később gyógyszerre.

A kockázat csökkentése, az óriási tőkeigény, a piacszerzés magyarázatul szolgál arra, hogy miért jellemző a jelentős K+F-fel rendelkező gyógyszer- vagy biotechnológiai vállalatok felvásárlása, egyesülése.

A gyógyszeripar jelentősége a gazdaságban

2010-ben az európai uniós gyógyszergyártás 4 ezer vállalata 85,9 milliárd euró hozzáadott értéket termelt. A feldolgozóiparból való részesedése azt mutatja, hogy az alkalmazottak 1,8%-a a hozzáadott érték 5,4%-át állította elő [5].

A vállalkozásokat tekintve jellemző a kevés, ám tőkeerős nagyvállalkozás. Az ágazat két alágazatra bontható: a gyógyszerek, illetve a hatóanyagok előállítására. Mind a foglalkoztatott létszám, mind a hozzáadott érték termelésében a gyógyszergyártás sokkal jelentősebb, mint a hatóanyag készítése.

Az EU–27 gyógyszeripari hozzáadott értékének előállításában a legnagyobb szelet Németországnak jutott (18%), majd Írország (15%), az Egyesült Királyság (12,4%), Franciaország és Olaszország (10–10%) következett. Írország feltűnő adata erős specializációra utal. Az ír hozzáadott értéknek (a nem pénzügyi üzleti ágazatokat tekintve) a 15,8%-át a gyógyszergyártás adta. A tagországok közül Szlovénia 3,6%-kal követi. Az unión kívüli Svájcnak ez a mutatója 5,4%.

Az európai gyógyszergyártásban 2012-ben 690 ezer fő dolgozott [6]. Ez az adat magában foglalja az EU-tagokon kívül – többek között – a Svájcban és Törökországban foglalkoztatottak számát is.

Az USA-ban a gyógyszeripart sikerágazatnak tekintik. 810 ezer főre teszik az ágazatban közvetlenül foglalkoztatottak számát, míg 3,4 millió fő közvetett módon függ az ágazat teljesítményétől. Az ágazat vonzó a munkavállalók számára: az ott dolgozók keresete évente közel 110 ezer USD volt, szemben az átlagos 54 ezerrel [7]. Az USA-ban kiemelik az ágazat gazdasági hasznát is, például a szív- és érrendszeri megbetegedésekre használt orvossá-

gok a számítások szerint 2011-ben 89 ezer fő korai halálát előzték meg, ami 5,8 milliárd USD megtakarításával járt.

Számottevő a gyógyszeripari hozzáadott érték multiplikátor hatása is: hazánkban 1,66 [8], az USA-ban 1,40 [9].

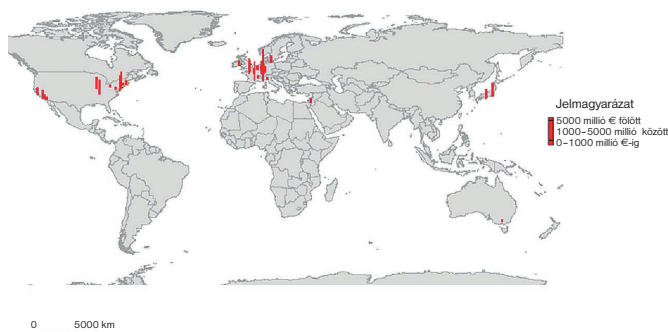
A gyógyszergyártásban, valamint a tőle nehezen elválasztható biotechnológiai iparban a termeléshez tercier tevékenységek sora kapcsolódik (megelőzik a termelést, beépülnek abba vagy utólag nélkülözhetetlenek), amelyek a (profit) nyereségképződés, továbbá a versenyképesség zálogai. A szolgáltatásokkal való kapcsolat nem csupán a csomagolásban, az elosztásban, a promócióban, a tájékoztatásban testesül meg. A termelő- és a szolgáltatótevékenységek egymásra utaltsága, összekapcsolódása olyan mértékű, hogy hovatovább nincs értelme az ipar és a szolgáltatás megkülönböztetésnek. (Az angolban erre a szerkezetű kapcsolatrendszerre több kifejezést is használnak: servification of manufacturing, servicing, manuservice.)

A sok szálon való kapcsolódásnak kiemelkedő a terület fejlődésére gyakorolt hatása. Jól példázza ezt, hogy az Észak-Karolina állambeli Research Triangle Park körzetében, például Durhamben a foglalkoztatottak 30%-a az egészségügyi vagy az élettudományi jellegű vállalkozásokban dolgozik. (Egyebek mellett a BASF, a Bayer, a Syngenta, a Monsanto rendelkezik ott gyártó- vagy kutatóegységgel.) Nem véletlen a város „city of medicine” elnevezése. Ugyanebben az államban, Wake megyében a 25 évesnél idősebb népesség fele felsőfokú végzettséggel rendelkezik.

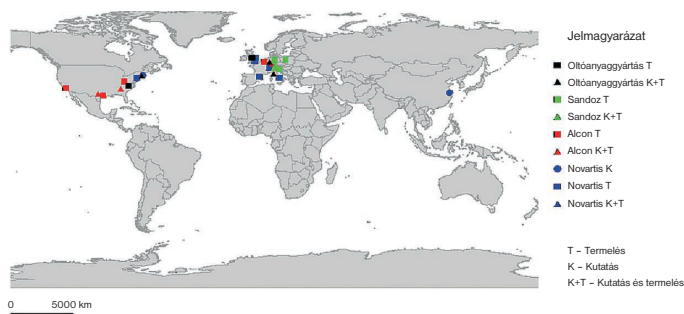
A vizsgálat eredményeinek térképi megjelenítése

Az 1. ábrán – a 2500 cégből – annak az ötven gyógyszeripari vállalatnak a székhelyét tüntettük fel pontszerűen, amelyek 2013-ban a legtöbbet költötték kutatás-fejlesztésre. Ahol több vállalat központja található, ott összevontuk a ráfordításokat. A K+F kiadások konkrét telephelyekre lebontva jóval több és pontosabb információt hordoznának. A vállalatok adatközlése sajnos erre többnyire nem ad lehetőséget. A térképi ábrázolás azonban a koncentráció bemutatására alkalmas. Kirajzolódnak a legfontosabb országok, a legjelentősebb centrumok.

A legtöbb (21 vállalat) székhelye az USA-ban található. Kiemelkedő New York (3) és a keleti part államai (pl. New Jersey (4), Massachusetts (2), továbbá Illinois (3), Indianapolis), illetve a nyugati parton Kali-



1. ábra. A K+F-re legtöbbet költő gyógyszeripari vállalatok székhely szerinti kiadásai, 2013 (The 2014 EU Industrial R+D Investment Scoreboard [1] adatai alapján saját szerkesztés)



2. ábra. A Novartis-csoport fontosabb kutatási és termelési központjai, 2013 ([10] adatai alapján saját szerkesztés)

fornia (5) jelentősége. Japánból 7 vállalat található az első ötvenben, Tokióban (4), míg Oszakában (3). Európában (20 vállalat) az első ötvenben lévő cég kutatási-fejlesztési ráfordítását 100-nak véve a svájci (3) vállalatok költik a legtöbbet, részesedésük 37%. Fontosságukat jelzi, hogy a listán szereplő cégek között az első két helyen svájci vállalkozások állnak. Székhelyük: Bázél. Németországban (4) székhely alapján nem lehet koncentrációt kimutatni. A központok a Rajna–Neckar-vidéken és a déli országrészben – Bajorország – sűrűsödnek. Franciaországban (4) Párizs és tágabb környéke (Ile de France), továbbá Lyon koncentrálna a K+F-re legtöbbet áldozó cégeket. Az Egyesült Királyságban (2) Brentford és London, Írországban (2) Dublin, Dániában (3) ugyancsak a főváros (vagy annak közvetlen környéke) szolgál központként.

A gazdasági erőközpontokon kívül csupán két ország vállalatai kerültek be az 50 legjelentősebb közé. A hazai K+F éllovasa, a Richter Gedeon az 58. helyen áll ebben a rangsorban.

Az 1. ábrán szereplő vállalatok multinacionális cégek. A legjelentősebbek 100 ezer főnél is több munkavállalót foglalkoztatnak, tucatnyi kutatási-fejlesztési, valamint termelési telephellyel rendelkeznek. Sok esetben több központból irányítják tevékenységeiket. A Novartis-csoportnak Bázélben van a székhelye, ám például egyik tagjának, a szembetegségek gyógyszereinek és a szemüveglencse gyártására szakosodott Alconnak Fort Worthban, az oltóanyag-részlegnek pedig ugyancsak az USA-beli Cambridge-ben, az elsősorban generikus gyógyszergyártást folytató Sandoznak a németországi Holzkirchenben van a központja.

A 2. ábrán a Novartis-csoport főbb kutatási és termelési egységeit tüntettük fel. A vállalat 2013-ban a K+F kiadásokban a gyógyszergyártók között az első volt. Az ábrán jól érzékelhető a szerteágazó tevékenységi kör, valamint a Föld számos országában való jelenlét.

Megjegyzésre érdemes: ha a vállalatokat az értékesítés nagysága szerint vagy a foglalkoztatottak száma alapján rangsorolnánk, az az 1. ábrán ábrázoltól eltérő ké-

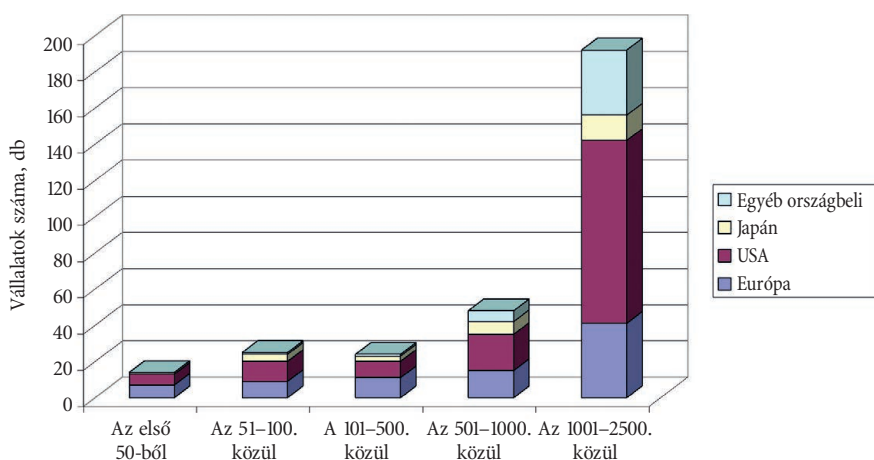
pet mutatna. Vannak olyan nagyvállalkozások, amelyek több vegyipari üzletágban is meghatározóak. Ilyen például a Bayer, amely a gyógyszer- és biotechnológiai iparon kívül a növényvédelemben és az anyagtudományokban is fontos szerepet játszik, vagy a Johnson és Johnson, amely az egészségügyi technológiai berendezések, kellékek előállításában is számottevő bevétellel rendelkezik.

A 3. ábra mutatja be, hogy hány gyógyszeripari vállalat található a K+F-re legtöbbet költő cégek között, valamint tájékoztat országonkénti megoszlásukról. Megállapítható a gyógyszeripar viszonylag nagy jelentősége: az összes – 2500 – vállalat 12,1%-a ebben az ágazatban tevékenykedik. A területi koncentráció ugyancsak nagymértékű, a vállalatok harmada USA-beli székhelyű, közel 85%-a pedig a világ-gazdaság vezető centrumaiban található. Az összes többi ország a cégek alig 15%-ának szolgál székhelyül. Feltűnő Oroszország hiánya vagy Kína szerény jelentősége. Utóbbinak csupán az 1001–2500. közötti kategóriában szerepelnek vállalatai. Ez a tény – bár feltehetően csak rövid ideig lesz igaz – igazolni látszik azt, hogy Kína egyelőre a tömegtermelésben és nem a csúcstechnológiai ágazatokban játszik fontos szerepet.

Indiát tekintve megemlíthető, hogy bár napjainkban vállalatai nem tartoznak a meghatározó gyógyszergyártók közé (az 501–1000. közötti kategóriában 3 cége szerepel), a 600 km² kiterjedésű Genome-Valley Hyderabad közelében már ma is nagy jelentőségű térség a biotechnológiai kutatásokban.

Összegzésképpen megállapítható, hogy a feldolgozóipari ágazatok között a gyógyszeripar rendelkezik a legmagasabb kutatási intenzitással (14,4%), a 2500 vállalat kutatás-fejlesztési kiadásaiából pedig a legmagasabb részesedéssel (18%). Ez 2013-ban kerekén 97 milliárd eurót jelentett.

3. ábra. A gyógyszeripari vállalatok száma a K+F-re legtöbbet költő 2500 vállalatból és megoszlásuk, 2013 (The 2014 EU Industrial R+D Investment Scoreboard adatai [1] alapján saját szerkesztés)





Az USA és az EU gyógyszer- és biotechnológiai iparának K+F kiadásait összehasonlítva szembetűnő, hogy előbbi jelentősen többet fordít ilyen célú kutatásokra. Az EU különösen a biotechnológiai ágazatban van lemaradva versenytársától.

Az ágazat jövőképe biztató, hiszen a népesség korszerkezetében bekövetkezett és jelenleg is érvényesülő tendenciák, az egészségi állapot megőrzésére vagy helyreállítására fordított kiadások növekedése, az új betegségek megjelenése jelentős elvárásokat támaszt a gyógyszeriparral szemben. ●●●

IRODALOM

- [1] The 2014 EU Industrial R+D Investment Scoreboard EU, 2014. ISBN 978-92-79-43861-5
- [2] Science, technology and innovation in Europe 2013 edition, Eurostat pocketbooks, Eurostat, European Commission, 2013.
- [3] Európai Gazdasági és Szociális Bizottság: Ipari szerkezetváltás az európai gyógyszeripari ágazatban, Brüsszel, 2014. április 29. CCMI/119 gyógyszeripar
- [4] Vidéki Imre: A hazai gyógyszeripar gazdaságföldrajzi bemutatása. In: Nyári D. (szerk.): VI. Magyar Földrajzi Konferencia, Szeged, 2012. szeptember 5–7., Tanulmánykötet, 1000–1010.
- [5] Eurostat: Business Economy by Sector, Manufacture of Pharmaceutical Statistics, Nace Rev. 2. 2013. http://ec.europa.eu/eurostat/statistics-explained/index.php/Manufacture_of_pharmaceuticals_statistics_-_NACE_Rev_2

- [6] EFPIA: The Pharmaceutical Industry in Figures, 2014. Brüsszel, p. 28
- [7] European Federation of Pharmaceutical Industries and Associations
- [8] Sípó J. (szerk.): A Magyarországon termelőkapacitással rendelkező gyógyszeripar (Richter Gedeon NyRT, Egis NyRT, Teva, Sanofi-csoport) szerepe a magyar gazdaságban, Magyar Kémikusok Lapja, 2014. május, 139–143.
- [9] PhRMA (Pharmaceutical Research and Manufacturers of America) 2012 profile of pharmaceutical industry, Washington, 2012.
- [10] www.novartis.com

Ipari és kulturális örökség

A MOM Kulturális Központ

A mikor a nyolcvanas években mikulásünnepségre jártunk a MOM-kultúrházba, nem gondoltam, hogy az épületet hamarosan műemlékké nyilvánítják, azt pedig végképp nem, hogy a Magyar Optikai Művek még a századforduló előtt – szinte szó szerint – porrá lesz.

A gazdasági-társadalmi szerkezetváltás miatt – nem csak Kelet-Európában – számos üzem néptelenedett el. Szerencsés esetben a kiürült gyárépületeket újra felhasználják, például kulturális térre alakítják át. Jó példa erre Helsinki régi kábelgyára vagy Budapesten a Ganz-telepi Millenáris.

A korábbi szocialista országokban eleve épültek kultúrházak a nagy gyárak szomszédságában. Ezek részben megmaradtak – néha olyankor is, amikor a gyárakat bezárták –, és kulturális funkciójukat is megőrizhették. Megkockáztatjuk, hogy nemcsak a kulturális, hanem az ipari örökségnek is részét képezik – különösen akkor, ha elfogadjuk azt a definíciót, amely az ipari örökség fogalmához társítja az iparhoz kapcsolódó társas tevékenységek helyszíneit is. [1] A nevezetes „gyári” kultúrotthonok közé tartozik, többek között, a Fővárosi Művelődési Ház és – mai nevén – a MOM Kulturális Központ.

Mikor és miért keletkeztek ezek az épületek? A kultúrházak történetének magyarországi kezdeteit 1949-re teszik. A művelődési otthonok létesítése a szovjet példán kívül hazai hagyományokra is támaszkodott. Ezek pedig az úri kaszinóban gyökereztek: „... ez az intézmény volt a példája a legkülönfélébb más köröknek, társasági és művelődési egyesületeknek, gazdaköröknek, iparos köröknek, olvasóköröknek stb. Számuk rohamosan szaporodott, a múlt [19.] század végére már behálózták az egész országot.” [2]

A következő néhány idézet a kultúrház-alapítás körülményeit érzékelteti. 1950. június 21-én az MDP KV¹ Titkársága javaslatot

fogadott el „kultúrotthonok hálózatának kifejlesztésére”, és határozatot hozott, hogy „kiindulópontként az év végéig 50 üzemi és 300 falusi és városi kultúrotthon létesítendő.” [3] A határozat végrehajtásáról a Politikai Bizottságnak (PB) tettek jelentést a következő tavaszon, és a PB megállapította, hogy „pozitív, egészséges, az egész szocialista építésnek használó mozgalom a kultúrotthon-mozgalom... A szakszervezetek gondoskodjanak róla, hogy az üzemi kultúrházakban klubok alakuljanak és a munkásság nagyobb számban látogassa ezeket.” [4] Egy 1952-es jegyzőkönyv szerint a PB „a szovjet vállalatok kultúrotthonainak fejlesztésére fordítandó 14 millió forint beruházási összeget jóváhagyja”. [5]

Miért támogatták az MDP „szovjet vállalatok”-at? A második világháború után, a potsdami egyezmény értelmében, szovjet tulajdonba ment át a magyarországi német vagyon. Mivel számos gyár részvénytársasági formában működött, jelentős német érdekeltséggel, 1946-ban a német részvények is szovjet kézbe kerültek. Magyarországon kb. 400 gyár vált részben vagy teljesen szovjet tulajdonná. [6] Közéjük tartozott a Magyar Optikai Művek Rt. is.

A Magyar Optikai Művek (MOM) története a 19. század utolsó negyedében kezdődött. A kolozsvári egyetem új „gépészállomása”-nak vezetésével a marburgi Ferdinand Süsst bízták meg. Alkalmazása mellett máig ismerősen hangzó érveket hozott fel Braszai Sámuel, az egyetem dékánja: „Nem állítjuk, hogy az egyetemi mechanikus ezentúl minden fizikai, vegytani, élettani stb. apparátusát fogja az egyetemnek elkészíteni, de azért a javításon kívül sok újat is fog jutányos áron kiállítani műhelyéből és így különböző helybéli iparosnak (úm. asztalosnak, sárgaréz-öntőnek stb.) foglalkozást adni.” [7] Ferdinand Süss néhány év múlva Baross Gábor kérésére Budapesten állított fel mechanikai tanműhelyt. A Mozsár, majd Alkotás utcai műhely bér munkát is vállalt. [8] Geodéziai, erdészeti, bányászati, tengerészeti műszereket

¹ Magyar Dolgozók Pártja Központi Vezetőség.