

A TARTALOMBÓL:

- Elméleti kémiai és nemlineáris dinamikai kutatások a Szegedi Tudományegyetemen
- A glyphosate
- Kolloidkémiai oknyomozás



# MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXXIII. ÉVFOLYAM • 2018. JÚNIUS • ÁRA: 850 FT

## 50. Irinyi- verseny



Nemzeti Kulturális Alap

A lap megjelenését  
a Nemzeti Kulturális Alap  
támogatja

A kiadvány  
a Magyar Tudományos Akadémia  
támogatásával készült

# Egy új fejezet a GC/MS-ben:

**Thermo**  
SCIENTIFIC  
A Thermo Fisher Scientific Brand

A **Q Exactive™ GC Orbitrap GC/MS/MS** az érzékenység, a nagyfelbontás és tömegpontosság eddig elérhetetlen kombinációját nyújtja a legnagyobb kihívást jelentő analitikai feladatok megoldásához. Mivel egyedülálló teljesítménye a legkomplexebb minták teljes körű kvantitatív és kvalitatív jellemzését is lehetővé teszi, segítségével egy új fejezet nyílt az élelmiszeranalitikai, bűnügyi, metabolomikai, klinikai és gyógyszeripari vizsgálatokban.

## a Q Exactive™ GC Orbitrap GC/MS/MS

• további információ: [thermoscientific.com/QExactiveGC](http://thermoscientific.com/QExactiveGC)



Kizárólagos képviselő:

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

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

E-mail: [unicam@unicam.hu](mailto:unicam@unicam.hu) • Web: [www.unicam.hu](http://www.unicam.hu)

**UNICAM**  
Magyarország Kft.

# NITROGÉN / FEHÉRJE ANALIZÁTOROK



\* élelmiszerek  
\* talajok  
\* gabonák  
\* növények  
\* bio-iszapok  
vizsgálatához



## Egyedülálló előnyök:

- \* gyors és olcsó mérés: 4 perc/minta (napi >300 minta)
- \* makro bemérés: 1g-ig / 5g-ig, detektálás: 500 mg N abs.
- \* egyszerű felépítés, olcsó üzemeltetés CO<sub>2</sub> gázzal, felügyelet nélkül
- \* önregeneráló redukciós egység: karbantartás 2000 mérésenként
- \* megbízható eredmények, kétfokozatú tökéletes égetés
- \* évekig stabil kalibráció - egyetlen kalibráció minden mintára
- \* extrém hosszú élettartam: a fő egységekre **10 év garancia**
- \* bemérés 5mL-es acéltégelybe, mintaelőkészítés nélkül (MAX)

## MKE-HÍREK

### Rendezvénynaptár – 2018

Időpont	Név	Helyszín
2018. április 6–7.	XVII. Országos Diákvegyész Napok	Sátoraljaújhely
2018. április 13–15.	L. Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny	Szeged
2018. április 23–24.	Analitikai Napok, 2018	Balatonszemes
2018. május 3–5.	II. Young Researchers' International Conference on Chemistry and Chemical Engineering (YRICCCE II)	Budapest
2018. május 9–11.	Biztonságttechnikai Szeminárium, 2018	Siófok
2018. május 28–30.	11 <sup>th</sup> Conference on Colloid Chemistry	Eger
2018. július 8–13.	22 <sup>nd</sup> International Conference on Phosphorus Chemistry	Budapest
2018. aug. 21–24.	Kémia tanárok Nyári Továbbképzése	Eger
2018. aug. 21–25.	Varázslatos Kémia Nyári Tábor	Eger
2018. aug. 26–30.	35 <sup>th</sup> International Conference on Solution Chemistry	Szeged
2018. szept. 24–27.	Chemistry towards Biology: biomolecules as potential drugs in focus (CTB9)	Budapest
2018. szept. 27–29.	Structural biology approaches for drug development (iNext)	Budapest
2018. október 3–6.	61. Magyar Spektrokémiai Vándorgyűlés és Olasz–Magyar Spektrokémiai Konferencia	Budapest
2018. október	Őszi Radiokémiai Napok	Balatonszárszó
2018. november 22.	Kozmetikai Szimpózium, 2018	Budapest
2018. nov. 27–28.	Hungarocoat	Budapest

### 22<sup>nd</sup> International Conference on Phosphorus Chemistry



2018. július 8–13.  
Danubius Hotel Flamenco  
1113 Budapest, Tas vezér u. 3–7.  
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.  
Honlap és online regisztráció:  
<http://www.icpc22.mke.org.hu/>  
TOVÁBBI INFORMÁCIÓ: Schenker Beatrix,  
[icpc22@mke.org.hu](mailto:icpc22@mke.org.hu)

### 35<sup>th</sup> International Conference on Solution Chemistry



2018. augusztus 26–30.  
Hunguest Hotel Forrás  
6726 Szeged,  
Szent-Györgyi Albert u. 16–24.  
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.  
Honlap és online regisztráció:  
<http://mke.org.hu/ICSC2018/>  
TOVÁBBI INFORMÁCIÓ:  
Schenker Beatrix,  
[beatrix.schenker@mke.org.hu](mailto:beatrix.schenker@mke.org.hu)

## A 2017. évi legjobb cikk a Magyar Kémikusok Lapjában

A szavazás ez évben is a szokásos módon, az interneten keresztül történt. A rendelkezésre álló, e-mail-címmel rendelkező tagjaink közül 350 fő szavazott. Ez tagjaink alig 20%-a. Sajnos, a részvételi hajlandóság csökkenő, mert tavaly még 27,1% vett részt a véleménynyilvánításban.

Közöljük a 20 és 20-nál több szavazatot kapott cikkek listáját. A díjazás a szokásos elvek szerint történik.

- 54: 15,43%, Braun Tibor: *Umami: az ízfokozó ötödik alapíz*  
46: 13,14%, Keglevich Kristóf: *Kémia történet a kémia tanításában. Ötletek kémia tanároknak óráik színesítésére*  
45: 12,86%, Lente Gábor: *Vegyeszeledek*  
42: 12,00%, Lente Gábor: *Vízilónaptej és más történetek kémia-ból – részletek*  
41: 11,71%, Lente Gábor: *Híresek és kémikusok (Bud Spencer, Isaac Newton)*  
35: 10,00%, Csupor Dezső: *Sosemvolt vitaminok*  
25: 7,14%, Csupor Dezső: *Miért ne együnk parlagfüvet?*  
24: 6,86%, Kovács Lajos: *Egy teljes élet: Rosenkranz György*  
23: 6,57%, Radnóti Katalin: *150 éve született Marie-Curie*  
21: 6,00%, Braun Tibor: *Kivonatok a nyereg alatti húspuhítás krónikájából*  
20: 5,71%, Huszthy Péter: *In memoriam Oláh György (1927–2017)*

Gratulálunk a szerzőknek! A Szerkesztőség és a Szerkesztőbizottság javaslata alapján az MKE Intézőbizottsága az első három szerzőnek Nívódíjat adományozott, melynek átadására a májusi Küldöttközgyűlésen került sor.

MKL Szerkesztőség és Szerkesztőbizottság

## HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXIII. No. 6. June

### CONTENTS

<i>Theoretical chemistry and nonlinear dynamics research at the Chemistry Institute of the University of Szeged</i>	178
GYULA TASI, GÁBOR CZAKÓ, DEZSŐ HORVÁTH, and ÁGOTA TÓTH	
<i>Personal experiences with George A. Olah</i>	183
CSABA SZÁNTAY, JR.	
<i>Glyphosate. Part I. Application and environmental analytics</i>	186
BÉLA DARVAS and ANDRÁS SZÉKÁCS	
<i>Fabric blueprinting and its chemical aspects</i>	190
CSABA KUTASI	
<i>Why „Pickering emulsions” instead of „Ramsden emulsions”?</i>	
<i>A colloid chemical fact-finding</i>	194
TIBOR BRAUN and MIKLÓS NAGY	
<i>Being ready for acquiring new knowledge, hypotheses and skills. An interview with Professor Onno De Jong. Part II</i>	198
JÁNOS SÁNDOR KAPITÁNY and ZOLTÁN TÓTH	
<i>Chembits</i>	
GÁBOR LENTE	202
<i>News of the Month</i>	204



## Szerkesztőség:

Felelős szerkesztő: KISS TAMÁS  
[SZEKERES GÁBOR] örökös főszerkesztő,  
Olvasószerkesztő: SILBERER VERA  
Tervezőszerkesztő: HORVÁTH IMRE

## Szerkesztők:

ANDROSITS BEÁTA, BANAI ENDRE,  
LENTE GÁBOR, NAGY GÁBOR,  
PAP JÓZSEF SÁNDOR, RITZ FERENC,  
ZÉKÁNY ANDRÁS

Szerkesztőségi titkár: SÜLI ERIKA

## Szerkesztőbizottság:

SZÉPVÖLGYI JÁNOS,  
a szerkesztőbizottság elnöke,  
ANTUS SÁNDOR, BIACS PÉTER,  
BUZÁS ILONA, HANCSÓK JENŐ,  
JANÁKY CSABA, KALÁSZ HUBA,  
KEGLEVICH GYÖRGY, KOVÁCS ATTILA,  
LIPTAY GYÖRGY, MIZSEY PÉTER,  
MÜLLER TIBOR, NEMES ANDRÁS,  
ifj. SZÁNTAY CSABA, SZABÓ ILONA,  
TÖMPE PÉTER, ZÉKÁNY ANDRÁS

Kapják az Egyesület tagjai és a megrendelők  
A szerkesztésért felel: KISS TAMÁS

Szerkesztőség: 1015 Budapest, Hattyú u. 16.

Tel.: 36-1-225-8777, 36-1-201-6883

Fax: 36-1-201-8056

Email: mkl@mke.org.hu

Kiadja a Magyar Kémikusok Egyesülete

Felelős kiadó: ANDROSITS BEÁTA

Nyomdai előkészítés: Planta-2000 Bt.

Nyomás: Pauker Nyomda

Felelős vezető: VÉRTES GÁBOR

ügyvezető igazgató

Terjeszti a Magyar Kémikusok Egyesülete

Az előfizetési díjak befizethetők a CIB Bank

10700024-24764207-51100005 sz.

számlájára „MKL” megjelöléssel

Előfizetési díj egy évre 10 200 Ft

Egy szám ára: 850 Ft. Külföldön terjeszti

a Batthyany Kultur-Press Kft.,

H-1014 Budapest, Szentháromság tér 6.

1251 Budapest, Postafiók 30.

Tel./fax: 36-1-201-8891, tel.: 36-1-212-5303

Hirdetések-Anzeigen-Advertisements:

SÜLI ERIKA

Magyar Kémikusok Egyesülete,

1015 Budapest, Hattyú u. 16.

Tel.: 36-1-201-6883, fax: 36-1-201-8056,

e-mail: mkl@mke.org.hu

Aktuális számaink tartalma,

az összefoglalók és egyesületi híreink,

illetve archivált számaink honlapunkon

(www.mkl.mke.org.hu) olvashatók

Index: 25 541

HU ISSN 0025-0163 (nyomtatott)

HU ISSN 1588-1199 (online)

DOI: 10.24364/MKL.2018.06

A lapot az MTA MTMT indexeli, és a REAL,

továbbá az Országos Széchényi Könyvtár

(OSZK) Elektronikus Periodika Adatbázisa

és Archívuma (EPA) archiválja



Irinyi Jánosról a valamennyire is természettudományosan művelt polgár-  
nak a biztonsági gyufa ugrik be (remélhetőleg). Egy középiskolai kémiataná-  
rának és egy kémia iránt legalább némileg érdeklődő diáknak az Irinyi  
név minden valószínűség szerint főleg az Irinyi-versenyt jelenti, ami a 9–  
10.-es középiskolás korosztály nagy tömegeket megmozgató kémiaversenye.  
Ez a verseny az idén ünnepelte 50. évfordulóját. A verseny Győrben indult  
Várnai György szervezésében, regionális megmérettetésként. Gyorsan ki-  
nőtte magát, és vált a fiatalabb korosztály legfontosabb országos kémiaver-  
senyévé. A verseny szervezése és lebonyolítása hosszú ideig Győrben maradt,  
majd a laborgyakorlatok átkerültek Veszprémbe. Figyelem, a laborgyakorlatok a kezdetektől integ-  
ráns részét képezték a versenynek, még ha eleinte csak az írásbeli döntőn jól szereplő diákok vehet-  
tek is részt a gyakorlati fordulón. Ez nagyon fontos, mert az elméleti és számítási kémia roha-  
mos fejlődése ellenére, a kémiát jórészt ma is a laboratóriumban csinálják. Az utóbbi tizenöt évben  
a verseny szervezését az Egyesület Kémiatanári Szakosztálya vette át a Titkárság hathatós segítsé-  
gével. Ötéves versenyciklusonként, egy-egy egyetem vállalta magára a harmadik, döntő forduló le-  
bonyolítását. Az első és a most zárult harmadik ciklusban ez a Szegedi Tudományegyetem Kémiai  
Intézete volt, a köztes öt évben pedig a Miskolci Egyetem Kémiai Intézete volt a házigazda. A ver-  
seny egyébként háromfordulós. Az első, iskolai fordulón összesen nagyjából kétezren indulnak,  
míg a döntőn a megyei és fővárosi fordulóból továbbjutott mintegy kétszáz diák vesz részt (kb. száz  
9.-es és száz 10.-es). A döntőn van egy elméleti-számítási forduló, egy laboratóriumi gyakorlat min-  
den résztvevőnek, és a legjobbaknak még egy szóbeli is, amelyen kiselőadást kell tartaniuk (öt per-  
cen) egy ott, helyben megadott kémiai témáról. Érdemes megjegyezni, hogy a verseny megszervezé-  
se és lebonyolítása nagyon bonyolult logisztikai feladat, és nem elhanyagolható humán és anyagi  
erőforrást igényel. Az anyagi támogatás eddig nem kis részben kémiával (is) foglalkozó vállalatok-  
tól (főként a MOL és a Richter) érkeztek. Reméljük, hogy a támogatási hajlandóság továbbra is meg-  
marad. A három fordulón versenyzőként szerepelni embert próbáló kaland. Az elméleti-számítási  
feladatok fordulónként nehezdednek, és a döntőn már olyanok is vannak, amelyek bőven túlmutat-  
nak a középiskolás tananyagon, és igénybe veszik a diákok adaptív, feladatmegértő és kreatív kész-  
ségeit. Arról nem is beszélve, hogy még gyakorlatlan előadóként kell beszélni egy frissen megkapott  
témáról, ráadásul közönség előtt és tétre menően, hiszen a végső sorrend még a szóbeli fordulón  
is bőven változhat. Mindezekhez sok érdeklődő diákra van szükség – ez megvan, és sok áldozatkész  
jó tanárra – ez is megvan egyelőre. 2019-től a harmadik forduló Szegedről Debrecenbe költözik, a  
Debreceni Egyetem Kémiai Intézete lesz az újabb ötéves versenyciklus házigazdája. Remélhetőleg  
(bár a remény csak halvány) ez idő alatt a kémiatanárok száma nem süllyed olyan kritikus szint  
alá, amikor már a tárgy tanítása is veszélyben lesz. Nagy kár lenne, mert a kémia át- meg átszövi  
életünket. Nélküle gyorsan visszaköltözhetnénk a fára. Igaz, handabandázni onnan is lehet...

Pálkó István

egyetemi tanár

az Irinyi Versenybizottság leköszönő elnöke

## TARTALOM

## HAZAI KUTATÓMŰHELYEK BEMUTAKOZÁSA

**Tasi Gyula, Czako Gábor, Horváth Dezső, Tóth Ágota:** Elméleti kémiai  
és nemlineáris dinamikai kutatások a Szegedi Tudományegyetem Kémiai  
Intézetében **178**

## OLÁH GYÖRGY EMLÉKE ÉS ÖRÖKSÉGE

**Ifj. Szántay Csaba:** Személyes élmények Oláh György professzorral **183**

## VEGYIPAR ÉS KÉMIATUDOMÁNY

**Darvas Béla, Székács András:** A glyphosate. Első rész.

Alkalmazás és környezetanalitika **186**

**Kutasi Csaba:** A kékfestő textilmintázás és kémiai vonatkozásai **190**

## KITEKINTÉS

**Braun Tibor, Nagy Miklós:** Miért nem Ramsden-emulzióknak nevezik  
a Pickering-emulziókat? Kolloidkémiai oknyomozás **194**

## OKTATÁS

Nyitottan az új tudásra, elméletekre és képességekre.

Beszélgetés **Onno De Jong** professzorral. Második rész **198**

## VEGYÉSZLELETEK

**Lente Gábor** rovata **202**

A HÓNAP HÍREI **204**

## Címlap:

Az 50. Irinyi János

Középiskolai

Kémiaverseny

döntőjén

(fotó: Molyán Gergő)

Tasi Gyula<sup>1</sup> – Czakó Gábor<sup>2</sup> – Horváth Dezső<sup>1</sup> – Tóth Ágota<sup>2</sup><sup>1</sup> SZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék,<sup>2</sup> SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

# Elméleti kémiai és nemlineáris dinamikai kutatások a Szegedi Tudományegyetem Kémiai Intézetében

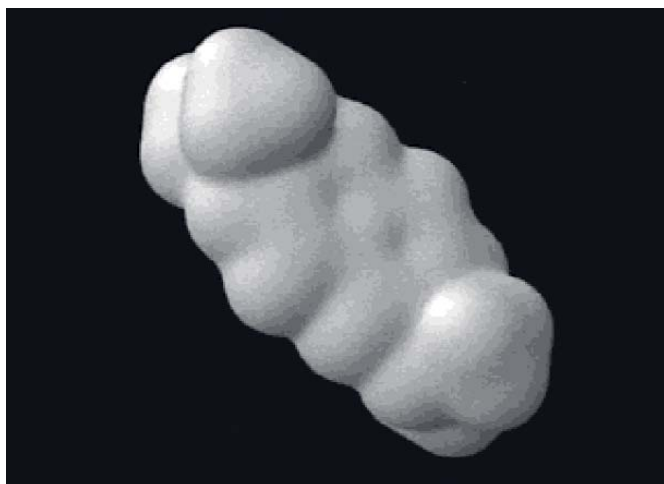
Az elméleti kémiai kutatások közel 50 évre nyúlnak vissza Szegeden, és az Alkalmazott és Környezeti Kémiai (AKKT), illetve az akkori Általános és Fizikai Kémiai Tanszéken folytak. Bán Miklós és Dömötör Gyula kvantumkémikusok szemiempirikus kvantumkémiai számításokat végeztek az 1980-as években – együttműködésben Somorjai Gábor professzorral – egykristályok felületén kialakuló adszorpciós komplexekre. Az együttműködés eredményeként egy FORTRAN nyelvű program (PSD, Program for Surface Design) született *fcc*, *bcc* és *hcp* egykristályok különböző Miller-indexű felületeinek az előállítására [1]. Bán Miklós professzor mutatta be Somorjai Gábort az AKKT tanszéken az 1980-as évek közepén, ahol Fejes Pál, Varga Károly, Kiricsi Imre és Kónya Zoltán professzorok kezdeményezésére létrejött egy elméleti kémiai kutatócsoport adszorpciós jelenségek és kontakt katalitikus reakciók molekuláris szintű elméleti tanulmányozására. Az 1980-as és 90-es években a zeolitikémia volt a tanszék fő szakterülete.

Az 1990-es években – köszönhetően a hamburgi egyetemen és a cukubai AIST intézetben telepített IBM és Cray szuperszámítógépeknek – sikerült értelmezni zeolitokon és egyéb mezopóru-

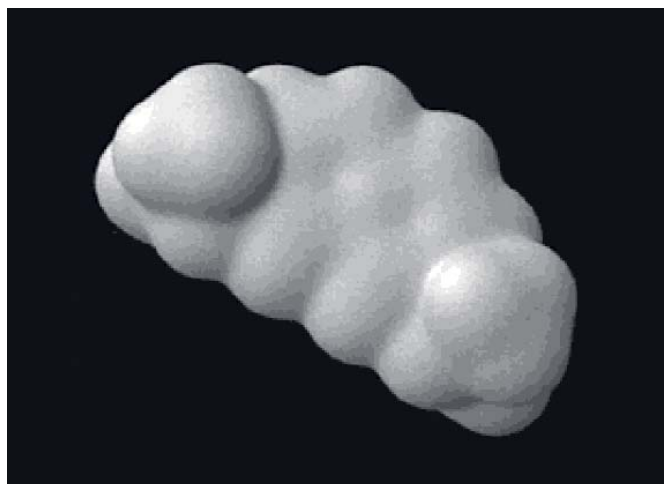
sos anyagokban adszorbeált szpécieszek UV-Vis, IR- és NMR-spektrumait. Az alkenil-karbéniumionok szerkezetére és stabilitására vonatkozó eredményekről összefoglaló munka jelent meg a *Chemical Reviews* folyóiratban [2]. A cikket Oláh Györgynek ajánlották a szerzők, aki 1994-ben kémiai Nobel-díjat kapott a karbokationok területén végzett munkásságáért.

Fujio Mizukami professzor 1994 őszén előadást tartott az AKKT tanszéken. Mizukami professzor akkor a cukubai NIMC intézet Molecular Recognition laboratóriumának volt a vezetője. Az előadása aromás szénhidrogének alakszelektív katalízisével foglalkozott. Kiderült, hogy a professzor nagyon érdeklődik az alakszelektív katalízis molekuláris részletei iránt. Legfontosabb molekuláris jellemzőknek a reaktánsok konformációs flexibilitását és alakját feltételezte. Közös együttműködés eredményeként egy FORTRAN nyelvű program született molekulák alakjának és méretének kvantitatív meghatározására [3]. Az elméleti munka következtetéseit – Kukovecz Ákosnak köszönhetően – kísérleti adszorpciós mérések is alátámasztották. A molekulák alakjának grafikus megjelenítésére – Kónya Zoltán professzor, akkor még egyetemi hallgató, közreműködésével – egy C nyelvű program ké-

1. ábra. A 2,6-DIPN molekula kvantumkémiai modellje



2. ábra. A 2,7-DIPN molekula kvantumkémiai modellje

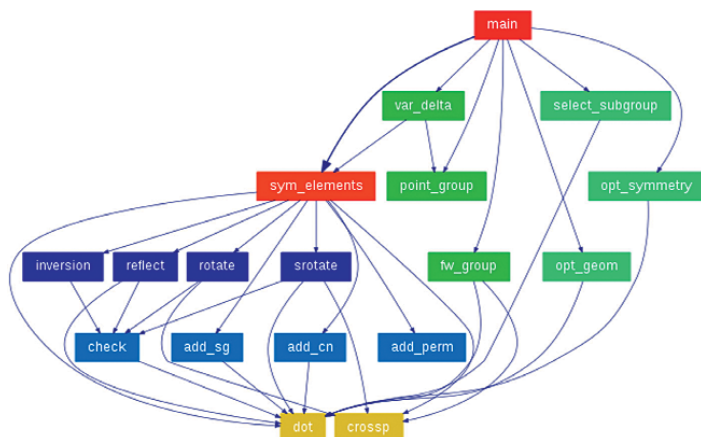




szült. Kiderült, hogy a 2,6- és a 2,7- diizopropilnaftalin- (DIPN) molekulák alakja (1–2. ábra) és mérete jelentősen különbözik, valamint a 2,6-DIPN molekula szelektív képződése HM zeoliton – ellentétben az akkor általánosan elfogadott átmeneti állapot szelektivitási elmélettel – diffúzió-kontrollált alakszelektív katalízis eredménye. A munkát későbbiekben kiterjesztették nagyobb méretű molekulák tanulmányozására is a szerzők.

Elméleti megfontolások – a kísérleti eredményekkel összhangban – azt mutatták, hogy a molekulák konformációs flexibilitása meghatározó szerepet játszhat alakszelektív folyamatok lejátszódásában. Először aromás molekulákhoz kapcsolódó alkilcsoportokra terelődött a figyelem. Nyílt láncú alkánmolekulákra egyszerű szabályokat állítottak fel a lehetséges konformerek leszámolására [4]. A szabályokat később kombinatorikus és gráfelméleti alapon is levezették a szerzők, továbbá nagyobb molekulák konformációs flexibilitásának a leírására is sikerült kiterjeszteni.

Szemiempirikus kvantumkémiai számításokhoz felhasználható programcsomagok készültek az AKKT tanszéken PcMol [5] és SEHMO [6] néven (az előbbi megszületését Náray-Szabó Gábor akadémikus kvantumkémikus inicializálta az 1980-as évek végén). A programok kézikönyveinek elkészítésében Pálinkó István és Halász János professzorok oroszánrészt vállaltak. A PcMol és



3. ábra. A SYVA program felépítése

a SEHMO programok molekuláris elektrosztatikus potenciáltérképek, ún. MEP-térképek generálására is képesek. MEP-térképek révén sikerült kvantitatív magyarázatot adni – Hajós György szerveskémikus-professzorral együttműködve – több elektrofil szubsztitúciós reakció szelektivitására [7]. A MEP-térképek jól alkalmazhatók hasonlósági vizsgálatokban és gyógyszermolekulák tervezésében is [8]. A szerzők új elektronpopulációs analízist is bevezettek atomi töltések számítására, amit a későbbiekben sikeresen alkalmaztak hasonlósági vizsgálatokban is.

Császár Attila és Kállay Mihály professzorok spektroszkópiái és elméleti kémiai kutatócsoportjaival (ELTE és BME) is rendkívül gyümölcsöző kapcsolat alakult ki az évek során. Először egy program (SemiGeo) készült molekulák – kísérleti adatok alapján történő – szemiempirikus egyensúlyi geometriájának a meghatározására. Majd az *ab initio* termokémia területén a szénatommal [9], a formaldehiddel [10], annak származékaival, a butánnal [11] és a pentánnal [12] foglalkoztak. Egyszerű algebrai megoldást adtak sokszögreakciók kinetikai problémájának a megoldására, továbbá elsődrendű kémiai reakcióhálózatokat is tanulmányoztak. Ezek a munkák jelentősen hozzájárultak 8 PhD-t szerzett, illetve annak szerzése előtt álló fiatal kémikus tudományos pályájának az elindításához.

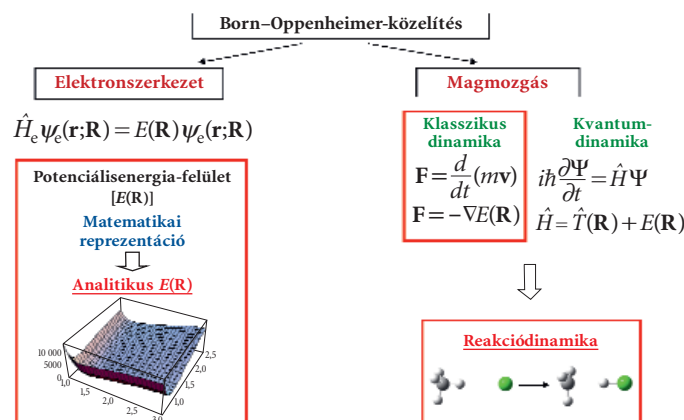
Mayer István kvantumkémikus professzorral együttműködve sikerült a kvantummechanika 1933-ban megfogalmazott viriál-tételét tetszőleges *ab initio* kvantumkémiai hullámfüggvényre kiterjeszteni [13], amely nagy segítséget nyújthat kvantumkémiai bázisok kvantitatív jellemzésében. A számításokhoz egy *ab initio* kvantumkémiai program (DGB) is készült [14], mellyel teljes variációs számítások végezhetők atomokra és molekulákra Hartree-Fock és különböző elektronkorrelációs szinteken.

Molekulák szimmetriájának matematikai tanulmányozására hagyományosan a mátrix- és a tenzoralgebrát alkalmazzák a szakirodalomban. Tasi és mtsai 2013-ban egy új vektoralgebrai módszert mutattak be [15], ami egy számítógépes program (SYVA) formájában alakot is öltött [16]. A 3. ábrán látható, hogy a SYVA program működése vektorok egyszerű skaláris és vektoriális szorzásán alapul. A SYVA pontcsoportokat és vázcsoportokat alkalmaz merev molekulák szimmetriájának a leírására. Jelenleg a program kristályos szilárd anyagokra és felületekre való kiterjesztésén dolgozik.

Körtvélyesi Tamás fájóan korai halála után az elméleti kémiai kutatások megtartására és bővítésére 2015 őszén alakult az Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport Czako Gábor vezetésével a Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszéken. A csoportban végzett reakciódinamikai számítások azt vizsgálják, hogyan megy végbe egy kémiai reakció lépésről lépésre. A fizika törvényeit alkalmazzuk a kémiai rendszerekre, majd a matematika és az informatika eszköztárát felhasználva meghatározhatjuk az atomok és a molekulák mozgását egy kémiai reakció során. Számításaink új reakcióutakat tárhatnak fel, illetve a kémiai folyamatok mélyebb megértéséhez vezethetnek. A reakciódinamikai szimulációk alapján megjósolhatjuk egy reakció kimenetelét, sőt akár irányítani is tudjuk a kémiai átalakulásokat a számunkra hasznosabb termékek felé. Továbbá, számításaink elengedhetetlenek számos kísérleti eredmény értelmezéséhez, illetve új mérések tervezéséhez.

A kémiai rendszerek leírásához szükséges fizikai törvényeket és matematikai egyenleteket már közel száz éve ismerjük, de az egyenletek megoldása még ma sem lehetséges közelítések alkalmazása nélkül. Az egyik legalapvetőbb közelítés Born és Oppenheimer nevéhez fűződik [17], amely szerint az elektronok pillanatszerűen követik a náluk nagyságrendekkel nehezebb atommagok mozgását. A Born–Oppenheimer-közelítés szerves részét képezi a kémiai gondolkodásunknak, hiszen ezen alapul a molekulák szerkezetének és a kémiai reakciók mechanizmusainak tárgyalása. Továbbá, ez a közelítés osztja fel az elméleti kémiát az

4. ábra. Az elméleti reakciódinamika-kutatás grafikus összefoglalása



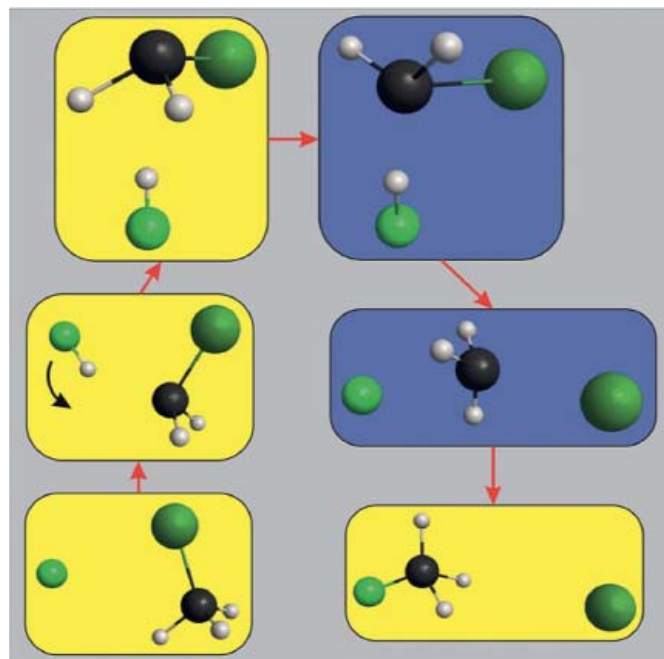


elektron szerkezet-számítás és a magmozgás-számítás területére (4. ábra). Először rögzített magkonfigurációk mellett megoldjuk az elektronok Schrödinger-egyenletét, amely megadja a potenciális energiát. Megjegyzendő, hogy az elektronok Schrödinger-egyenlete csak a hidrogénatomra oldható meg analitikusan, de számos pontosabbnál pontosabb numerikus módszer létezik az elektronok energiájának számítására. A potenciális energia a magok koordinátáinak függvényében adja az ún. potenciálisenergia-felületet (PES, *potential energy surface*), amely a magok mozgását irányítja egy kémiai reakció során. Az atommagok mozgásának pontos leírására használhatjuk a kvantummechanikát, de ez csak néhányatomos rendszerek esetében kivitelezhető. Szerencsére az elektronoknál lényegesen nehezebb atommagok mozgását általában a klasszikus mechanika is jól leírja, ezért gyakran használunk klasszikus, illetve kváziklasszikus módszereket a reakciódinamikai számítások során. Mind a kvantum, mind a klasszikus esetben szükségünk van a PES ismeretére (4. ábra). Kvantumdinamikai számítások esetén a magokra vonatkozó energiaoperátor potenciális energia tagját adja a PES, míg a klasszikus szimulációk során a PES meredeksége (negatív gradiense) adja az erőt, amely az atomokat mozgatja egy kémiai reakció során. Igen népszerű klasszikus módszer az ún. direkt dinamika, amely során a reakció dinamikáját modellező programunkat egy olyan elektron szerkezet-számító programcsomaghoz linkeljük, amely kiszámítja a szükséges potenciális energiát és gradienst minden időlépés esetén. Mivel egy kvantitatív dinamikai szimulációhoz több tízezer reakcióút számítása szükséges, és egy trajektória akár több tízezer időlépésből áll, milliárdos nagyságrendű gradiens számítására van szükség. Ez még a mai szuperszámítógépek használata mellett is csak nagyon alacsony szintű, azaz pontatlan elektron szerkezet-számító módszer alkalmazásával lehetséges. A csoportunkban ezért másik stratégiát követünk, amelynek lényege, hogy egy megfelelő matematikai függvény alkalmazásával reprezentáljuk a PES-t, és az így kapott analitikus PES deriválásával kapjuk a szükséges erőket. Az analitikus PES-t elektron szerkezet-számító módszerekkel kapott energiapontokra illesztjük. Általában néhány tízezer energiapont legkisebb négyzetes illesztése során néhány ezer paramétert határozzunk meg. A módszer nagy előnye, hogy néhány tízezer energiaszámításra sokkal pontosabb módszereket használhatunk, mint a direkt dinamika szimulációhoz szükséges milliárdnyi gradiens meghatározásához. Így nagy pontosságú analitikus PES-eket fejleszthetünk, amelyek hatékony és megbízható dinamikai szimulációk elvégzését teszik lehetővé. Sőt, az analitikus PES-ek a klasszikus szimulációk mellett megnyitják az utat a kvantumdinamikai számítások felé is.

Az Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport munkájának előzményei 2008-ig nyúlnak vissza, amikor Czákó Gábor, a csoport jelenlegi vezetője, posztdoktori ösztöndíjasként kezdte kutatómunkáját a reakciódinamika területén az Egyesült Államok egyik világhírű kutatócsoportjában. Analitikus PES-eket fejlesztettünk a metán ( $\text{CH}_4$ ) különböző atomokkal (F, O, Cl és Br) lejátszódo reakcióira és minden korábbinál pontosabb dinamikai szimulációkat végeztünk a fenti reaktív rendszerekre. Eredményeink a világ legrangosabb tudományos folyóirataiban jelentek meg, ilyenek a *Science* magazin [18], a *PNAS* [19] és a *JACS* [20].

Az atom plusz metán hidrogén-absztrakciós reakciók mellett fontos reakciócsalád a bimolekuláris nukleofil szubsztitúció, amely  $\text{S}_{\text{N}}2$  néven az egyik a legismertebb reakció típus a szerves kémiában, ezért természetesen számos kísérleti és elméleti csoport vizsgálta és vizsgálja ma is az  $\text{S}_{\text{N}}2$  reakciók dinamikáját és

mechanizmusait. Az  $\text{S}_{\text{N}}2$  reakciók szimulációja korábban szinte kizárólag a direkt dinamika módszerrel történt [21]. Mi 2012-ben indítottunk egy, az  $\text{S}_{\text{N}}2$  reakciók esetén újszerűnek számító kutatási irányt, amely során analitikus PES-eket fejlesztettünk  $\text{S}_{\text{N}}2$  reakciókra, és így végeztünk minden korábbinál pontosabb dinamikai szimulációkat. Az első teljes dimenziós *ab initio* PES-t 2013 decemberében publikáltuk a  $\text{F} + \text{CH}_3\text{Cl}$  reakcióra [22]. Később volt munkatársunkkal, Szabó Istvánnal közösen felfedeztünk egy új reakcióutat, amely a dupla inverziós mechanizmus nevet kapta [23]. Ahogy az 5. ábra mutatja, a dupla inverzió első lépése egy proton-absztrakció által indukált inverzió, amit egy szokásos



5. ábra. A  $\text{F} + \text{CH}_3\text{Cl}$   $\text{S}_{\text{N}}2$  reakció dupla inverziós mechanizmusa

Walden-inverzió követ. A két egymást követő inverzió végül retencióhoz, azaz a kiindulási konfiguráció megtartásához vezet. Eredményünk jelentőségét növeli, hogy az  $\text{S}_{\text{N}}2$  reakciók sztereospecifikus Walden-inverziós mechanizmusa már több mint száz éve ismert [24], de a szimulációk mégis feltártak egy új reakcióutat, amely a Walden-inverzióval ellentétben retencióra vezet. A *Nature Communications* folyóiratban közölt eredményeinkről [23] többek között az Index.hu, a *National Geographic Magyarország* és az MTVA is beszámolt.

2015 őszétől reakciódinamikai kutatásainkat az SZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszékén, az újonnan alapított Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoportban folytatjuk. Mára a csoportban több mint tíz hallgató dolgozik, az elmúlt két évben három hallgató védte meg sikeresen a szakdolgozatát. Ebben a tanévben további öt szakdolgozat, illetve diplomamunka van készülében és egy PhD-hallgató is várhatóan abszolutóriumot szerez. Számos nemzetközi együttműködést alakítottunk ki a világ vezető elméleti és kísérleti kutatócsoportjaival. Ezek közül kiemelendő az innsbrucki Roland Wester professzorral és munkatársaival való együttműködés, akik úttörő kutatásokat végeznek az  $\text{S}_{\text{N}}2$  reakciók dinamikájának kísérleti területén. Wester professzor és munkatársai 2008-ban először végeztek keresztesztet molekula/ion sugar kísérleteket  $\text{S}_{\text{N}}2$  reakciókra [25]. A mérési eredmények értelmezéséhez elengedhetetlen az elméleti segítség, így az  $\text{S}_{\text{N}}2$  reakciókra végzett számításaink megteremtették a lehetőséget egy együttműködésre, amely nem várt távozó csoport



effektust tárt fel az  $S_N2$  reakciók során. Eredményeink széles körű kémiai érdeklődésre tartottak számot, hiszen munkánkat egy vezető kémiai folyóirat, a *Nature Chemistry* közölte 2016 elején [26]. Egy másik fontos kísérleti együttműködésünk Kopin Liu professzor tajvani csoportjához kapcsolódik, aki élen jár az atom plusz metán reakciók területén. Több korábbi közös munka után idén olyan módszert dolgoztunk ki, amely először tette lehetővé egy kémiai reakció energiagátjának szögfüggő kísérleti meghatározását, azaz az energiagát alakjának ábrázolását. A módszer kidolgozásában és ellenőrzésében döntő szerepe volt az elméleti munkánknak, amely a második *Nature Chemistry*-cikket [27] eredményezte az Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport számára. A kísérleti együttműködések mellett kiemelendő Hua Guo (USA) és Minghui Yang (Kína) professzorokkal végzett közös elméleti munkánk, amely 2016-ban az eddigi legpontosabb kvantummechanikai szimulációt eredményezte egy  $S_N2$  reakcióra [28].

Kutatócsoportunk hallgató munkatársai is több sikeres projekt megvalósításának voltak aktív részesei, illetve jelenleg is számos elméleti kutatáson dolgozunk. 2017 elején publikáltuk az első nagy pontosságú teljes dimenziós *ab initio* PES-t a  $F + CH_3I$  reakcióra [29], amely megteremtette a lehetőséget a dinamika tanulmányozására, illetve megnyitotta az utat egy újabb gyümölcsözőnek ígérkező kísérleti együttműködés felé. Továbbá, az új PES lehetővé tette a távozó csoport hatásának elméleti tanulmányozását. A Londonban dolgozó Szabó István korábbi munkatársunkkal együttműködve először mutattuk ki kvantitatív módon az előlről támadásos komplex jelentőségét egy  $S_N2$  reakció, nevezetesen a  $F + CH_3I$  során [30]. Számításaink rávilágítottak, hogy a  $F + CH_3I$  reakció esetén az előlről támadásos, azaz a halogén-halogén kötéses komplex képződése jelentős, míg a  $F + CH_3Cl$  reakció esetén elhanyagolható. Ez adta a magyarázatát a korábbi kísérleti megfigyelésnek, miszerint I távozó csoport esetén a reakció indirekt, mert az előlről támadásos minimum eltéríti a reaktánsokat a reaktív hátulról támadásos orientációtól, míg Cl távozó csoport esetén ez az eltérítő effektus nem jelentkezik, így a direkt mechanizmus dominál.

A metil-halogenidek reakciói mellett a közelmúltban elkezdtük az etil-klorid ( $CH_3CH_2Cl$ ) egy  $S_N2$  reakciójának vizsgálatát. 2017-ben közöltük az eddigi legpontosabb *ab initio* energiákat és szerkezeteket a  $F + CH_3CH_2Cl$  reakció stacionárius pontjaira és elsőként találtunk egy dupla inverziós átmeneti állapotot egy etil-halogenid reakciójára [31]. Itt az  $S_N2$  reakció mellett a  $Cl + HF + C_2H_4$  termékekhez vezető bimolekuláris eliminációs (E2) mechanizmus is felléphet. Az egymással versengő  $S_N2$  és E2 reakciók, illetve az esetleges dupla inverzió mélyebb tanulmányozásához elengedhetetlen lesz dinamikai szimulációk elvégzése, amihez az analitikus teljes dimenziós PES fejlesztése jelenleg is folyamatban van. Ez a PES újabb mérföldkő lehet az  $S_N2$  reakciók szimulációi során, és megteremti a lehetőséget kísérleti együttműködésre is. A fent említettek mellett további projekteken is dolgozunk jelenleg: ilyen például a PES-fejlesztés automatizálása, szilícium- és nitrogén-centrumú  $S_N2$  reakciók,  $S_N2$  reakciók összetettebb nukleofilekkel, mód-specifititás tanulmányozása a  $F + CH_3I$  reakció esetén, az oldószerhatás figyelembevétele  $S_N2$  reakciók során, a  $Cl + CH_4$  reakció dinamikája és mechanizmusai nagy ütközési energiák esetén és kis biorendszerek konformációs dinamikája és reakciói.

A közelmúltban az Amerikai Kémiai Társaság neves fizikai kémiai folyóirata, a *Journal of Physical Chemistry A* összefoglalás megírására kért fel minket, amely a fent bemutatott eredményeket emeli reflektorfénybe. A cikket a folyóirat 2017. november 30-án megjelenő száma a címlapján reklámozta [32], ami további

nemzetközi „Lendületet” adhat az Elméleti Reakciódinamika Kutatócsoport munkájának.

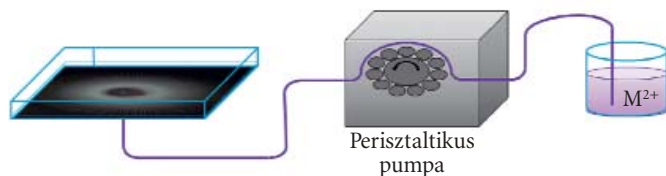
Az elméleti tudásra szintén nagymértékben számító és azt használó nemlineáris dinamika, azaz a reakciók tér- és/vagy időbeli tanulmányozása egyensúlytól távoli rendszerekben az 1980-as évek végén Nagypál Istvánnak az Általános és Fizikai Kémiai Tanszék tanszékvezetőjévé választásával vert gyökeret Szegeden. Nagypál István csoportjával (Bárdi István, Boga Endre, Peintler Gábor, Szirovicza Lajos, illetve ifj. Horváth Attila hallgatóként) szervesen ionok közötti reakciókból kialakítható hidrogénionra nézve autokatalitikus reakciókat vizsgált oldatfázisban [33]. A savfrontok létrehozása mellett a mágneses térnek a front sebességére gyakorolt hatását is leírták [34]. A csapathoz csatlakozott 1995-ben a Nyugat-virginiai Egyetemen Kenneth Showalter irányításával doktori fokozatot szerzett Horváth Dezső és Tóth Ágota, cikkünk két szerzője. Sikeres pályázásaink révén önálló tudományos munkát folytatva mutattuk be a Szegeden kifejlesztett, savkatalizált reakcióban az autokatalitikus reakció diffúzióval történő kölcsönhatásakor keletkező mintázatok szimmetriavesztését két és három térbeli dimenzióban [35]. Az általunk kifejlesztett módszer, amelynek lényege, hogy egy térhálós akrilamid-metakrilát kopolimerben a karboxilátcsoportok mennyiségének szabályozásával tetszőleges mértékben köthető meg a hidrogénion [36], szolgált alapul további módosításoknak [37], egyben lehetővé téve időben állandó Turing-szerkezetek kialakítását is. A kísérleti technika kifejlesztésén túl elméleti úton is levezettük, hogy a szimmetriavesztéshez az autokatalizátor fluxusának csökkentése nemcsak reverzibilis, immobilis megkötés, hanem irreverzibilis, elsőrendű elvonás révén is lehetséges [38]. Ionreakcióknál az elektromos erőtér is egyszerű szabályozási lehetőséget jelent, ugyanis megfelelő erőtér beállításával a szükséges fluxusbeli különbség a reaktánsok gyorsításával is elérhető [39].

Továbbá, mint a közelmúltban az anyagtranszport-folyamatok közül a közeget mozgás hatását tanulmányoztuk. Először Szegeden mutattuk meg és mennyiségileg jellemeztük, hogy izoterm körülmények között a sűrűség növekedéssel járó, exoterm reakciókban egyes fizikai, kémiai paraméterek (pl. oldatvastagság, viszkozitás, összetétel-változtatással hangolható sűrűségkülönbség) hogyan befolyásolják a kezdetben síkfrontok stabilitásvesztését [40]. Továbbá az időben állandósuló mintázatok geometrikus jellemzőire inverzális skálázási törvényeket állítottunk fel, melyekkel tervezetten lehet a kívánt alakzatot előállítani [41]. Ugyanakkor ezen rendszerek olcsó és reprodukálható lehetőséget nyújtanak arra is, hogy a felületi feszültség változása révén létrejövő hatékonyabb anyagátadás mozgástörvényeit is megadjuk csak egyszerűen lehetővé téve a gáz/folyadék határfelület megjelenését a reakcióedény egy felszínének megnyitásával. A jód- arzénessav modellreakcióban a jód felületaktív anyagként vesz részt csökkentve a termék felületi feszültségét. A felületi feszültség és a sűrűség változásából származó hatások elkülönítésére periodikusan modulált gravitációs erőtérben parabolarepüléssel [42], illetve hosszabb időtartamú súlytalanságot garantáló szuborbitális rakétarepülés révén nyílt lehetőség nemzetközi együttműködésben. A kísérletek és a párhuzamosan zajló három térbeli dimenziós számítások alapján egyértelműen megállapítható, hogy a felületi feszültség hatása, a korábbi feltételezésektől eltérően, csak a határfelület közvetlen közelében jelentős. A súlytalanság idején a sűrűségkülönbségből adódó közeget mozgás a határfelülettől távolodva teljes mértékben megszűnik, és kizárólag reakció-diffúzió front alakul ki.

Napjainkban a folyadékfázisban történő önszerveződéshez



kapcsolódó mozgástörvények megértése után a fázisátalakulással járó egyensúlytól távoli rendszerek tanulmányozása a cél. Egyre fontosabbá válik a reprodukálhatóság, az egyensúlytól ismert módon távol tartható rendszerek tervezése, tulajdonságainak jellemzése, valamint numerikus modellezés révén történő predikciója, ugyanis ilyen körülmények között nyílik alkalom a termodinamikai hajtóerőkben (gradiensekben) rejlő lehetőségek felhasználására a természetes folyamatokhoz hasonlóan. Egyszerű technika segítségével a fázisátalakulással járó reakciók reaktánsai közül az egyiket különböző áramlási sebességgel a másikba áramoltatjuk a **6. ábra** szerint, és a kialakuló csapadék térbeli el-



**6. ábra.** Az áramlásvezérelt csapadékképződés kísérleti berendezése (a rajzot Tóth-Szeles Eszter készítette)

oszlását, valamint a szilárd termék összetételét és mikroszerkezetét tanulmányozzuk. Kimutattuk, hogy az áramlás hatására létrejövő koncentrációgradiens révén a termodinamikailag kevésbé stabil kristály kialakítása lehetővé válik [43], illetve oldatelegyekből a különböző kristályok térbeli szétválasztása is megvalósítható [44]. Egyféle kémiai összetételű szilárd termék létezése esetén az áramlással a részecskék méretét és morfológiáját lehet szelektíven szabályozni [45]. A kristályos anyagok mellett, a reaktánsok minőségétől függően, amorf, membrántulajdonságokkal rendelkező anyagok is előállíthatók kontrollált körülmények között [46]. A kutatás a szén-dioxid karbonát formájában történő megkötés vizsgálatával [47, 48] bővült Schusztér Gábor egyetemi tanársegéd csatlakozásával.

A nemlineáris dinamikai kutatócsoport tudományos aktivitását jelzi, hogy a fenti eredmények két MTA doktori és 8 (+2) PhD-értekezés alapjául szolgáltak (és szolgálnak) a számos szakdolgozat és diplomamunka mellett, köztük kettőt a Magyar Kémikusok Egyesülete Nívódíjával jutalmazott. A nemzetközi tudományos elismertséget jelzi, hogy közel 20 év után 2017-ben, másodjára Magyarországon, Szeged adhatott nagy sikerrel ott-hont az évente megrendezésre kerülő Dynamic Days Europe konferenciának. A tématerület legfontosabb konferenciájának (GRC Conferences on Oscillations and Dynamic Instabilities in Chemical Systems) 2014-es rendezése is a csoporthoz kötődött, illetve számos alkalommal vettünk (és veszünk) ott részt meghívott előadóként.



## IRODALOM

- [1] G. Dömötör, M. I. Bán, *Comput. Chem.* (1991) 15, 91.
- [2] Kiricsi, H. Förster, G. Tasi, J. B. Nagy, *Chem. Rev.* (1999) 99, 2085.
- [3] G. Tasi, F. Mizukami, I. Pálinkó, M. Toba, A. Kukovecz, *J. Phys. Chem. A* (2001) 105, 6513.
- [4] G. Tasi, F. Mizukami, I. Pálinkó, J. Csontos, W. Györfly, P. Nair, K. Maeda, M. Toba, S. Niwa, Y. Kiyozumi, I. Kiricsi, *J. Phys. Chem. A* (1998) 102, 7698.
- [5] G. Tasi, I. Pálinkó, J. Halász, G. Náray-Szabó, *Semiempirical calculations on microcomputers.* CheMicro Ltd., Budapest, 1992.
- [6] G. Tasi, F. Mizukami, I. Pálinkó, *Comput. Chem.* (1997) 21, 319.
- [7] G. Hajós, G. Tasi, J. Csontos, W. Györfly, Z. Riedl, G. Timári, A. Messmer, *THEOCHEM* (1998) 455, 191.
- [8] G. Tasi, I. Pálinkó, *Top. Curr. Chem.* (1995) 174, 45.
- [9] G. Tasi, R. Izsák, G. Matisz, A.G. Császár, M. Kállay, B. Ruscic, J.F. Stanton, *ChemPhysChem* (2006) 7, 1664.
- [10] G. Czakó, B. Nagy, G. Tasi, Á. Somogyi, J. Šimunek, J. Noga, B. J. Braams, J. M. Bowman, A.G. Császár, *Int. J. Quant. Chem.* (2009) 109, 2393.
- [11] D. Barna, B. Nagy, J. Csontos, A. G. Császár, G. Tasi, *J. Chem. Theory Comput.* (2012) 8, 479.
- [12] J. Csontos, B. Nagy, L. Gyevi-Nagy, M. Kállay, G. Tasi, *J. Chem. Theory Comput.* (2016) 12, 2679.
- [13] G. Tasi, I. Mayer, *Chem. Phys. Lett.* (2007) 449, 221.
- [14] G. Tasi, A.G. Császár, *Chem. Phys. Lett.* (2007) 438, 139.
- [15] G. Tasi, L. Gyevi-Nagy, R. Tóbiás, T. S. Tasi, *J. Math. Chem.* (2013) 51, 2187.
- [16] L. Gyevi-Nagy, G. Tasi, *Comput. Phys. Commun.* (2017) 215, 156.
- [17] M. Born, R. Oppenheimer, *Ann. Phys.* (1927) 389, 457–484.
- [18] G. Czakó, J. M. Bowman, *Science* (2011) 334, 343–346.
- [19] G. Czakó, J. M. Bowman, *Proc. Nat. Acad. Sci.* (2012) 109, 7997–8001.
- [20] G. Czakó, J. M. Bowman, *J. Am. Chem. Soc.* (2009) 131, 17534–17535.
- [21] P. Manikandan, J. Zhang, W. L. Hase, *J. Phys. Chem. A* (2012) 116, 3061–3080.
- [22] I. Szabó, A. G. Császár, G. Czakó, *Chem. Sci.* (2013) 4, 4362–4370.
- [23] I. Szabó, G. Czakó, *Nat. Commun.* (2015) 6, 5972.
- [24] P. Walden, *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* (1896) 29, 133–138.
- [25] J. Mikosch, S. Trippel, C. Eichhorn, R. Otto, U. Louderaj, J.-X. Zhang, W. L. Hase, M. Weidemüller, R. Wester, *Science* (2008) 319, 183–186.
- [26] M. Stei, E. Carrascosa, M. A. Kainz, A. H. Kelkar, J. Meyer, I. Szabó, G. Czakó, R. Wester, *Nature Chem.* (2016) 8, 151–156.
- [27] H. Pan, F. Wang, G. Czakó, K. Liu, *Nature Chem.* (2017) 9, 1175–1180.
- [28] Y. Wang, H. Song, I. Szabó, G. Czakó, H. Guo, M. Yang, *J. Phys. Chem. Lett.* (2016) 7, 3322–3327.
- [29] B. Olasz, I. Szabó, G. Czakó, *Chem. Sci.* (2017) 8, 3164–3170.
- [30] I. Szabó, B. Olasz, G. Czakó, *J. Phys. Chem. Lett.* (2017) 8, 2917–2923.
- [31] V. Tajti, G. Czakó, *J. Phys. Chem. A* (2017) 121, 2847–2854.
- [32] I. Szabó, G. Czakó, *J. Phys. Chem. A* (2017) 121, 9005–9019.
- [33] L. Szirovicza, I. Nagypál, E. Boga, *J. Am. Chem. Soc.* (1989) 111, 2842–2845.
- [34] E. Boga, S. Kádár, G. Peintler, *Nature* (1990) 347, 749–751.
- [35] Á. Tóth, I. Lagzi, D. Horváth, *J. Phys. Chem.* (1996) 100, 14837–14839.
- [36] D. Horváth, Á. Tóth, *J. Chem. Phys.* (1998) 108, 1447–1451.
- [37] J. Horváth, I. Szalai, P. de Kepper, *Science* (2009) 324, 772–775.
- [38] Á. Tóth, D. Horváth, É. Jakab, J.H. Merkin, S.K. Scott, *J. Chem. Phys.* (2001) 114, 9947–9952.
- [39] Zs. Virányi, D. Horváth, Á. Tóth, *J. Phys. Chem. A* (2006) 110, 3614–3618.
- [40] D. Horváth, T. Bánsági, Á. Tóth, *J. Chem. Phys.* (2002) 117, 4399–4402.
- [41] D. Horváth, Sz. Tóth, Á. Tóth, *Phys. Rev. Lett.* (2006) 97, 194501.
- [42] D. Horváth, M.A. Budroni, P. Bába, L. Rongy, A. De Wit, K. Eckert, M.J.B. Hauser, Á. Tóth, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2014) 16, 26279–26287.
- [43] B. Bohner, G. Schusztér, O. Berkesi, D. Horváth, Á. Tóth, *Chem. Comm.* (2014) 50, 4289–4291.
- [44] E. Tóth-Szeles, B. Bohner, Á. Tóth, D. Horváth, *Cryst. Growth Des.* (2017) 17, 5000–5005.
- [45] B. Bohner, G. Schusztér, D. Horváth, Á. Tóth, *Chem. Phys. Lett.* (2015) 631–632, 114–117.
- [46] J. Pantaleone, Á. Tóth, D. Horváth, L. RoseFigura, W. Morgan, J. Maselko, *Phys. Rev. E* (2009) 79, 056221.
- [47] G. Schusztér, F. Brau, A. De Wit, *Environ. Sci. Technol. Lett.* (2016) 3, 156–159.
- [48] F. Brau, G. Schusztér, A. De Wit, *Phys. Rev. Lett.* (2017) 118, 134101.

## A szerzők:



Tasi Gyula



Czakó Gábor



Horváth Dezső



Tóth Ágota



ifj. Szántay Csaba

■ Richter Gedeon Nyrt., Szerkezetkutatási osztály

# Személyes élmények Oláh György professzorral

A nagy tudósok kétfajta módon hatnak a világra: a munkájukkal és a személyiségükkel. Amíg az első hatás jól dokumentált, bárki számára örökérvényű módon elérhető tudományos eredményekben nyilvánul meg, a második leginkább csak jóval kevesebbek által megtapasztalt élmények és érzések formájában létező, de sokszor mégis sorsfordító jelentőségű inspirációkban mutatkozik. Ha ez utóbbiról nem szólunk, idővel könnyen a feledés homályába vész. A jelen írással Oláh György személyes személyisége emlékének ebből a szempontból szeretnék adózni, néhány személyes emlék felidézésével.

Ahogy a Magyar Kémikusok Lapja sorozatában megjelenő többi írás is tanúsítja, Oláh György professzor úrnak rengeteg élénk és néha nagy múltra visszatekintő kapcsolata volt magyarországi kémikusokkal, barátokkal, illetve kémikus-barátokkal. Ezeket a kapcsolatokat amerikai élete mellett is igyekezett aktívan ápolni, szakmai és szociális értelemben egyaránt. Mint e rövid cikk szerzője, semmiképpen nem szeretném azt a benyomást kelteni, hogy magam is szerves részese voltam a számára ilyen értelemben fontosnak tekintett baráti vagy szakmai körnek. Valójában mindössze néhányszor találkoztam vele, szakmai szempontból pedig csak azokhoz a biszindol-szintézisekhez járultam hozzá munkatársaimmal együtt különböző mágneses magrezonancia spektroszkópiái (NMR) és tömegspektrometriai (MS) szerkezetvizsgálatokkal, amelyeket szellemileg és anyagilag is támogatott, és amelyekről Hazai László professzor ír ebben a sorozatban. Ami azonban talán mégis feljogosíthat arra, hogy a velem való személyes élményekről számoljak be, és ami ezeket az élményeket érdekessé teheti az olvasó számára, az ismeretségünk sajátossága, méghozzá annak szüleimet érintő, meglehetősen bensőséges historikus vonatkozásai miatt.

Oláh Györggyel személyesen először 1994-ben találkoztam, amikor a Nobel-díj átvételét követően feleségével, Jucival együtt szüleim otthonában tettek esti látogatást. Ezt az évet a világ számára egy, az ő Nobel-díjánál összehasonlíthatatlanul kisebb jelentőségű, de számomra mégis fontos esemény is fémjelzte, ugyanis akkor neveztek ki a Richter Szerkezetkutatási Osztálya vezetőjének, ebben a minőségben pedig különösen izgalmasnak találtam a lehetőséget, hogy szüleim révén találkozhatnék Oláh Györggyel és erről a munkatársaimnak is beszámolhassak. Éppen ezért én is „bekéredzkedtem” erre a baráti találkozóra. Ha az az este mindössze abban merült volna ki, hogy egy élő legendával foghatok kezét családias atmoszférában, már önmagában megérte volna. Ennél azonban nagyságrendekkel többnek bizonyult a találkozás!

Oláh Györgyről első benyomásom megdöbbentő közvetlensége és magabiztossággal kombinált szerénysége volt – ma a nagy emberek e (ritka) tulajdonságát sokan úgy hívják: megközelíthe-

tőség. Amikor találkoztunk, első gesztusa az volt, hogy a kezembe adott egy csomag olyan pólót, amelyeken az ő neve és a Nobel-díjával kapcsolatos néhány adat, illetve grafika szerepelt, azaz, hogy ezt osszam szét a munkatársaim között. Szinte hihetetlennek tűnt, hogy ilyesmivel készült erre a találkozóra. A mai napig őrzök néhányat ezekből a pólókból, és mondanom sem kell, egy ideig a munkatársaim is ebben „feszítettek” az osztályon. Ami azonban ennél még meglepőbb és megindítóbb volt, az ennek a négy embernek a múltba visszatekintő beszélgetése, a fellelevenedő közös realitásuk intimitása. Ebből a beszélgetésből tudtam meg, hogy édesanyám (Judit) és Juci az 1950-es évek elején együtt jártak laboránsképző tanfolyamra (Juci akkor már Oláh György felesége volt) a Budapesti Műszaki Egyetemen, és közeli barátok voltak. Oláh György és Szántay Csaba frissen diplomázott pályakezdőként akkoriban egy laboratóriumban (az ún. „szürke laborban”) szintén jóbaráti viszonyban dolgoztak az egyetemen, és a laboránsképző tanfolyam szüneteiben titokban líkőrrel kényeztetették Juditot és Jucit. Habár később Oláh György és Szántay Csaba szakmai útja térben szétvált, életpályuk közös kiindulópontja és hasonlóan markáns jellege egész életükre szóló szoros és különleges köteléket, és ahogy ezekből a beszélgetésekből a számomra kiderült, kölcsönös tiszteletet és inspirációt is jelentett számukra. Ezt az is tanúsítja, hogy a Nobel-díj átvételét követő évek során Oláh György és Juci rendszeresen látogattak Magyarországra, és mindig igyekeztek sort keríteni a szüleimmel való találkozásra, a köztes időszakokban pedig rendszeresen beszéltek egymással telefonon, illetve leveleztek e-mailen. Ennek a köteléknek a mélységét és az életükben való jelentőséget azonban ott, ezen az estén volt módom először megtapasztalni és megérteni...

Úgy véltem, Oláh Györgynek édesapámhoz, Szántay Csaba akadémikushoz való sajátos barátsága lehetett a legfőbb oka annak, hogy a figyelmét azon az estén felém is fordította, de mint kiderült, ennél többről is volt szó. Meglepődve tapasztaltam, mennyire érdeklő őt a Richter, a szerkezetkutatás, ezen belül az NMR-spektroszkópia, valamint az ipari kutatói élet általában. (Ez a fajta kíváncsiság egészen bizonyosan a sikeres kutatói lét egyik kulcsa!) Őszinte, fürkésző figyelmével kísérte azokat a gondolatokat, amiket e témáról nyújtani tudtam a számára – és amelyek, így visszaemlékezve, akkoriban talán még sem túlságosan mélyek, sem túl érdekesek nem lehettek. Akkortájt még csak alakulóban voltak az elképzeléseim arról, hogy milyen működési elvek mentén lehetne egy igazán hatékony szerkezetvizsgáló szolgáltatást megvalósítani a Richterben. Ennek a számos nehézséggel járó és rengeteg kérdést felvető problémakörnek volt, sőt a mai napig van egy mindkettőnk számára központi jelentőségűnek bizonyult eleme: hogyan értelmezendő a tudomány és



az ipari kutatás-fejlesztés viszonya? Ez a látszólag ártatlan, de a valóságban bonyolult és komoly gyakorlati vonatkozásokkal bíró kérdés ipari oldalról úgy merül fel, hogy mennyi teret lehet vagy esetleg kell is adni a publikációkban is megnyilvánuló alap- vagy alkalmazott tudományos tevékenységnek egy elsősorban profit-orientált kutatás-fejlesztési környezetben? A válasz közel sem magától értetődő, de mégis alapvetően meghatározza munkánk szellemiségét és gyakorlatát, sőt a kutatás-fejlesztés más területeire nézve is releváns. Érvelni több módon is lehet. Ha a napi szintű üzleti érdekeltségre helyezük a hangsúlyt, akkor az ilyen jellegű tudományos tevékenység nemkívánatosnak tekinthető, hiszen időt és energiát von(hat) el az üzleti célú K+F munkától. Másrészt, még ha (felső)vezetői oldalról az erre vonatkozó elvi támogatás létezik is, a rendkívül feszített és mindenki számára szerteágazó napi kihívások mellett a K+F munka során felmerülő, tudományos szempontból is izgalmas problémák mélyebb feltárására gyakran már nincs közvetlen „üzleti” igény, pénz, idő, vagy éppenséggel hiányzik a helyi tapasztalat, továbbá gyakran a titkossági szempontok is komoly gátat jelentenek. Ugyanakkor a tudományos munka lehetősége és gyakorlata számos előnnyel is járhat egyéni, szervezeti, és cégszinten egyaránt: komoly vonzóerőt jelent a legkiválóbb kutatók alkalmazásában, vitalitásuk megőrzésében, gondolkodásuk fejlesztésében, motivál a szakirodalom követésére, segíti őket a nemzetközi szakmai közösségekben belüli „láthatóvá” válásban, csökkenti az elvándorlást, rendszer szinten pedig növeli a cég szakmai hitelét az ún. „quality of science” iránti elkötelezettség demonstrálásán keresztül, ezzel előmozdítva a nemzetközi kutatási-fejlesztési együttműködések kialakítását és a cég globális „brand”-ként való megjelenését. Oláh György munkásságában és szemléletében ugyanez a kérdéskör éppen ellenkező perspektívából merült fel: az akadémiai szférában a tudomány művelése során milyen hangsúllyal jelenjen meg az ipari megvalósíthatóság szempontja? Tudvalevő ugyanis, hogy a felfedező jellegű, ún. „curiosity-driven” alap kutatásokat a valóságban gyakran nem könnyű összeegyeztetni azok ipari hasznosíthatóságával, mint elsődleges vagy járulékos céllal, hiszen a két megközelítés más szemléletet és eszközrendszert igényel.

Nos, az ő részéről és az ő szemszögére vonatkozóan Oláh György akkorra már közimert módon grandiózus válaszokat adott erre a kérdésre. Ezt némi pajkossággal illusztrálандó, az első ábra az ő aláírását mutatja a Nobel-díj átvételét követően. A neve alatt szereplő, kézzel írott szövegben az „in chemistry” akár úgy is olvasható, hogy „industry”, talán annak tudatalatti kivételéseként, hogy mennyire fontos volt számára az ipari hasznosulás...

**Oláh György aláírása a Nobel-díj átvételének évéből**  
(forrás: internet)

Munkatársaimmal akkor még előtte álltunk annak, hogy a magunk jóval szerényebb válaszát megadjuk, de azért ez mégis megtörtént a következő évek során. Mindenesetre abban az elhatározásban, hogy a Szerkezetkutatási Osztály tudományos műhelyként is (!) működjön, az az esti beszélgetés Oláh Györggyel, az ő meglátásai és bátorítása döntő jelentőségűek voltak. Ő ugyanis nagymértékben megszilárdította bennem a véleményt, hogy némi tudományos szemlélet katalitikus hatású lehet az ipari K+F minőségére nézve, amennyiben ez nem válik öncélúvá és nem halad meg egy egészséges mértéket (itt az „egészség” szó természetesen üzleti szempontból értelmezendő), hiszen nagy-

ban hozzájárul a tudományos igényességű szakmaiság, a legmagasabb fokú szakmai professzionalizmus eléréséhez. Egy gyógyszeripari cég életében a hozzáadott érték, a know-how teremtő, innovatív gondolkodás, a minőségorientáltság stratégiai szintű elvárások. A tudomány mértékletes, de aktív és folyamatos művelése nagyban segíti ezeknek az elvárásoknak a teljesítését. Fontos kiemelni, hogy szemben sok más gyógyszeripari céggel, a Richter felső vezetése a titkossági szempontok lehetőségein belül mindig is megértő, sőt támogató volt ebben a tekintetben.

A második, hasonlóan családias találkozásom Oláh Györggyel 2008. május 25-én történt, amikor egyik magyarországi látogatásuk kapcsán ő és Juci már közvetlenül az én otthonomba látogattak, ezúttal viszont szüleim voltak a „vendégek”. Csodálatos, nyáriasan meleg vasárnap volt, tökéletesen alkalmas egy kora délutáni kerti beszélgetésre némi almáspite mellett. Minden idilli lett volna, ha a szomszédunknak (aki amúgy roppant kedves fickó) nem éppen akkor jutott volna eszébe füvet nyírni – ami azért volt megdöbbentő, mert erre igazán nagyon ritkán szánta



**Oláh György a szerző otthonában (2008. május 25.)**

rá magát! Jól emlékszem, mennyire abszurdnak éreztem a helyzetet: itt ül egy Nobel-díjas tudós, a pillanat leginkább csendes áhitatot érdemelne, amit azonban hatalmas zúgással tör meg a fűnyíró. Oláh György azonban ezt a helyzetet is a személyére jellemző nagyvonalúsággal és lazasággal kezelve csak nevetett, ami mindenkire átragadt, így aztán nevetve-kiabálva próbáltuk valahogy egymást megérteni.

Ekkor is roppant érdeklődő volt a Richter iránt, viszont most már jóval több tapasztalat birtokában tudtam a kérdésre nyilatkozni. Ez a találkozásunk egy évvel azután történt, hogy a Richter új kutatási épülete megnyílt, aminek kapcsán az osztályunk műszerparkja is megújult, létrehozva az ország legjobban felszerelt nagyműszeres spektroszkópiai centrumát, élén egy 800 MHz-es NMR-spektrométerrel és egy Fourier-transzformációs ultranagy felbontású tömegspektrométerrel. Hosszan beszélgettünk arról, hogy mennyi lehetőség rejlik egy ilyen erőteljes műszerparkban, és hogy ez milyen módokon segíti a cég K+F munkáját és minőségbiztosítását. Elmeséltem neki például, hogy a fentebb említett, rendkívül bonyolult biszindolvegyületek pontos szerkezetmeghatározása elképzelhetetlen modern kétdimenziós (2D) NMR-módszerek alkalmazása nélkül, ami azonban roppant időigényes lenne ilyen nagyterű mágnesek nélkül. Amíg mindössze néhány évvel korábban kb. 80 mg biszindolból négy-öt napig tartott a szükséges spektrumok elkészítése, a 800 MHz-es készülé-



ken ez kevesebb mint 10 mg mintából is néhány óra alatt megtehető. Azt hiszem, ez a témakör elbűvölte, és elmerengett azon, hogy ilyen spektrométerekkel kedvenc karbokationjai ma már mennyivel hatékonyabban lennének vizsgálhatók.

Ez alkalommal újra előkerült a tudomány és az ipar viszonylatának problémaköre. Nagyon érdekelte, hogy az „ipari tudományos műhely” koncepcióját sikerült-e megvalósítanunk, és hogy ez hogyan vált be. Elmondtam neki, hogy megítélésem szerint sikerült, és annak illusztrálására, hogy milyen módokon térülhet meg egy ilyen megközelítés, elmeséltem neki egy néhány évvel azelőtti esetet, amikor a Richter egyik ígéretes kutatási témájában felsővezetői szinten felmerült az együttműködés lehetősége egy neves angol gyógyszeripari céggel. Az együttműködés előkészítéséként az angol cég szakértői auditálták a Richtert (ami kis-sé nyersen megfogalmazva annyit jelent: megvizsgálták, eléggé „jó” vagyunk e?). Ennek kapcsán többek között az osztályunkat is meglátogatták. Első közelítésben meglehetősen pökhendien kezeltek minket, majdhogynem vizsgáztató jelleggel feltéve olyan kérdéseket, mint például meg tudjuk-e mondani, milyen szerkezeti információ nyerhető egy csatolási állandóból a proton NMR-spektrumban? Látva, hogy „ennek a fele sem tréfa”, az ingerültségemet gondosan palástoló válaszmom az volt: „Well...” – és a kezükbe adtunk néhányat az osztályon született nemzetközi NMR-es publikációinkból, aminek megdöbbentő hatása volt! Merem remélni, hogy ez a kis aktus is hozzájárult, hogy a cégünk kutatásának presztízse az audit során jelentősen megnövekedett az angol cég szemében, aminek hatására az együttműködés valóban létre is jött! Emlékszem, Oláh Györgynek módfelett tetszett ez a kis történet, és erősen igazolva látta benne a tudományos publikációs tevékenység helyét az ipari kutatásokban.

Ezt követően még két személyesebb jellegű találkozásunk volt. 2008. június 6-án Oláh György a Richter új kutatási épületében tartott egy páratlanul nagy számú közönséget bevonó előadást. Azt hiszem, ez olyan történelmi, és akár a tudomány és az ipar szingergista kölcsönhatását szimbolizálóan is tekinthető pillanat volt, aminek mindenképpen meg kellett történnie itthon, a cégünk életében, és talán az ő életében is. Az eseményt számomra az tette személyesebbé, hogy végre „élőben” is megmutathattam neki azokat a spektrométereket, amikről korábban annyit beszélgettünk!

Utolsó találkozásom Oláh Györggyel és Jucival ismét intimebb családi körben zajlott 2009. október 11-én, szintén az otthonunkban és szüleim társaságában. Hidegebb októberi nap lévén, a ker-

ti csevegés szóba sem jöhetett, és a fűnyíró zaja is csak emlék volt már, amin ismét neveltünk. Talán a csendesebb atmoszféra miatt, de megint előtörték négyük régi közös pályakezdő emlékei, én pedig újfent csak csodálkoztam, hogy az Oláh Györggyel való első találkozásom óta eltelt 15 év alatt ezek intimitása és intenzitása semmit sem fakult.



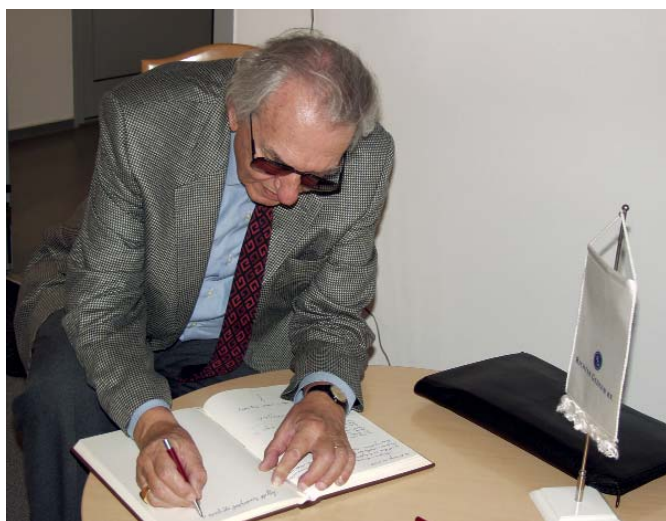
Oláh György a szerző otthonában (2009. október 11.)

Ez alkalommal, most már a Richtert és a műszereinket illető élő tapasztalatok birtokában, a velem való beszélgetés során leginkább az érdekelte őt, hogyan tudjuk a tehetséges fiatalokat bevonni az ipari kutatói életbe, mennyire érzik úgy, hogy ott megtalálják a helyüket, mennyire számít ebből a szempontból a kiváló felszereltség, és mennyiben jelent hátrányt, hogy az igazán ambiciózus kutatóknak kevesebb publikációs lehetőségük van, mint az akadémiai szférában. Aki ismeri Oláh Györgynek az „Életem és a mágikus kémia” című könyvét, tudja, hogy ez a téma, vagyis a tehetséges fiatal kutatók oktatása, inspirálása, mennyire érdekelte őt. A válasz ezekre a kérdésekre nyilván nem egyszerű, és ismét elvezet a tudomány és az ipar kapcsolatának problematikájához. Beszélgetésünk végére azonban kifejezetten felvilágosította és megnyugtatta őt a tudat, hogy a Richter, mint a hazai kémikus kutatói-fejlesztői társadalom egyik legmeghatározóbb tényezője, egyéni habitustól függően reális, sőt kifejezetten vonzó alternatívát jelent a fiatalok számára mind a hazai, mind a külföldi egyetemi-akadémiai életpálya modellekkel szemben.

Összességében, rendkívül szerencsésnek érzem magam, hogy négy ilyen különlegesen közvetlen atmoszférájú találkozásom lehetett Oláh Györggyel, hogy ezeken keresztül talán olyan aspektusból nyerhettem bepillantást pályakezdő életének egy részletébe, ami csak keveseknek adatott meg. A beszélgetéseink során kifejtett véleménye és maga a személyisége valóban nagyban formálták a látásmódomat.

És végül, e rövid visszaemlékezés lezárásaként, köszönöm Keglevich György professzornak, hogy a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kara és Szerves Kémia és Technológia Tanszéke által közösen szervezett, 2017. november 17-én az egyetemen megtartott Oláh György-emlékülésre meghívott előadni, és hogy felkért az ott elhangzottak leírására is. A bevezetőben említettekre ismételtlen visszautalva úgy vélem, amíg egy nagy tudós munkássága a személyiségétől független önálló entitásként önmaga értékén örökké él, személyiségének varázsát azoknak kell megörökíteniük, akik a hatása alá kerültek. Őszintén remélem, hogy ezzel az írással, ha csak kicsit is, sikerült ehhez hozzájárulnom.

**Oláh György a Richterben (2008. június 2.)**



Darvas Béla – Székács András

# A glyphosate

Első rész

## Alkalmazás és környezetanalitika

Több részből álló cikksorozattal számolunk be a meglehetősen sok port kavart glyphosate gyomirtó szer – talán olvasóink a magyarban jobban elterjedt glifozát néven ismerik – történetéről. Én mint fiatal kutató nem szabályos kémiai nevén *N*-foszfonometil-glicin néven emlegettem, amikor a foszfonsavszármazékok fémkomplexeivel foglalkoztam. Magyar vonatkozása a vegyületnek, hogy ez a jól ismert „Glialka” hatóanyaga. Nagyon híres, elterjedt, nagy karriert befutott gyomirtó szer. A Monsanto nemzetközi konszern sikerterméke lett: óriási bevételeket hozott és hoz még ma is a vállalatnak. Az idők múlásával, a tudomány fejlődésével a híres termék hírkedetté kezdett válni, mert egyre több káros hatását ismerték fel. Az Európai Bizottság több alkalommal tűzte a kérdést napirendre, de végül mindig haladékot adott a termék használhatóságának. Új időszakot nyithat a vitáknak az a 2018. kora tavaszi hír, hogy a Bayer cég megvásárolja a Monsanto európai érdekeltségeit. A viták 2018-ban az EU bizottságaiban folytatódnak. Talán nem érdektelen, ha olvasóink kicsit részletesebben megismerkednek ezen sok vihart kavart szer kémiaiájával, biológiai hatásaival és az eddigi jogi történésekkel. Erre vállalkozik a következő háromrészes cikksorozat szakavatott szerzők tolmácsolásában.

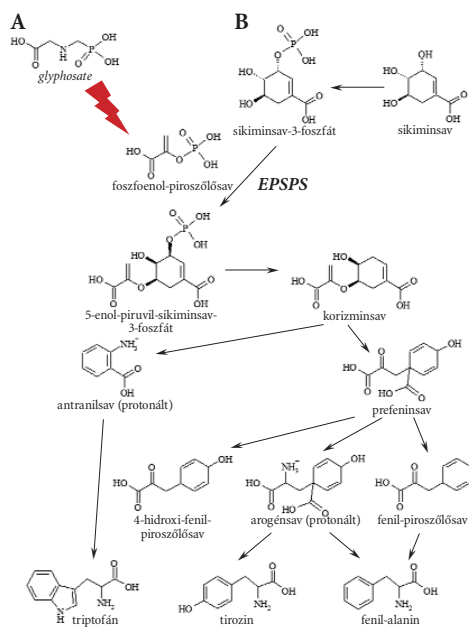
Fogadják cikkeinket szeretettel.

Kiss Tamás  
felelős szerkesztő

**A** glyphosate (amino-metil-foszfonosav, **1. ábra, A**) gyomirtó-szer-hatóanyag korunk legnagyobb jelentőségű növényvédőszer-hatóanyaga. Háromrészes cikksorozatunkban áttekintjük a vegyülettel kapcsolatos alkalmazás és környezetanalitikai (1. rész), toxikológia és ökotoxikológia (2. rész), valamint a sok vitát kiváltó európai újraengedélyezés (3. rész) tényeit.

A hatóanyag írásmódja magyarázatra szorul, mert nem fonetizálható, lévén *ISO* (*International Organization for Standardization*) helyesírású, amely egyik nemzet nyelvén sem íródott – így a kiejtés szerinti fonetizálás sem lehetséges –, illetve az ún. köznap hatóanyagnév (*common name*) helyesírásában is az egységességre kell törekedni. A növényvédőszer-hatóanyagokat ma a *Pesticide Manual* nemzetközi referencia-kézikönyv rendszerezi, így az abban szereplő jóváhagyott név és helyesírása a szabatos [1]. A hatóanyagnevek hazai fonetikus átírási gyakorlatából az évek során számos anomália keletkezett, hiszen egy hatóanyag nevének akár több indokolatlan átírata is született (pl. *dichlorvos*: diklórfosz, diklórfos stb. – miközben az eredeti írásmód nem is indokolja ezt a fajta átírást), megnehezítve a szakirodalmi eligazodást. Esetünkben a gyakorlat „glifozátnak” írja a nevet, de ezt a magunk részéről helytelen szlengnek gondoljuk.

A *herbicide* sem magyar szakszó, és a szerzők sem szívesen használják. A magyar szaknyelv – a felhasználásra összpontosítva – gyomirtónak fordította ezt az elnevezést. Kétségtelen, hogy a fő felhasználási mód itt a gyomirtás (**2. ábra**), azonban az állományszáritás (deszikkálás) elterjedt gyakorlata miatt a kultúr-növény célzott elpusztításáról is szó van, mint a totális hatású



**1. ábra.** A glyphosate gyomirtó-szer-hatóanyag (A) és hatásmechanizmusa (B): a sikiminsav-anyagcseréut, s ezen keresztül az aromás aminosavak bioszintézisének gátlása. A glyphosate a folyamat köztiterméke, az 5-enol-piruvil-sikiminsav-3-foszfát (EPSP) képződését gátolja meg azáltal, hogy a reaktáns foszfoenol-piroszölősav helyett kötődik a reakciót katalizáló EPSP-szintáz (EPSPS) enzimhez



2. ábra. Tarlókezelés *glyphosate*-tal

szereknél mindig. Ez a növényirtó (*herbicide*) szó jogosságát itt felveti.

A *glyphosate* gyomirtó hatását Baird és munkatársai írták le [2]. A US 3.799.758 számú alapszabadalmat (feltaláló: John Franz) – amelyet számos további követett – 1971-ben nyújtotta be és 1974-ben kapta meg a Monsanto Corp. [3]. A hajdani KGST-országokban az eljárási szabadalom intézménye alapján kezdődött gyártás. A *glyphosate* a kilencvenes évek közepére az értékesítési statisztikák élére került. Ma a világon legjobban fogyó hatóanyag: egymaga a teljes növényvédőszer-piac majdnem egynegyedét teszi ki. Ebben jelentős szerepet játszott, hogy 2000 óta generikus hatóanyagként bárki gyárthatja, továbbá hogy a géntechnológiai úton módosított (GM) fajtacsoportok között a legnagyobb kereskedelmi sikert a *glyphosate*-tűrő (GT) növények érték el.

A kínai vegyi gyárak (Zhejiang Wynca Chem. Co., Zejiang Jinfanda Biochem. Co., Nantong Jiangshan Agrochem. Chem. Co., Sichuan Fuhua Agricult. Invest. Grp, Jiangsu Yangnong Chem. Grp, Jiangshu Good Harvest-Welen stb.) szerepe a hatóanyaggyártásban meghatározóvá vált, ráadásul jelenleg a termelési kapacitásuk felét használják csupán ki. Kína arra spekulált, hogy a növényi géntechnológiát Európában is gyorsan bevezették, de nem így történt: nincs az Európai Unióban vetésre engedélyezett GT-fajtacsoport. Az európai tartózkodás nyomán Kína is nagyon visszafogottan halad ezen a területen, és a világ GM-növény vetésterületének csak 2%-a tartozik hozzá.

A *glyphosate* az aminosav-származékok csoportjába tartozó totális gyomirtó, amelyet eredetileg vetés előtti (preemergens) gyomirtásra, valamint ruderális területek gyommentesítésére szántak. Ebben közrejátszott, hogy a növények a leveleiken keresztül a hatóanyagot felveszik, és az a bazipetális transzlokációval lejut a gyökerekbe. Ez tette lehetővé, hogy a nehezen irtható tarackos gyomok ellen is használható. Már a kezdetekben felfigyeltek arra, hogy egyes gyomnövények, így például a selyemmályva, nem érzékenyek a hatóanyagra (3. ábra). Később azt is észrevették, hogy egyes – eredetileg érzékeny – növényfajokból gyorsan *glyphosate*-rezisztens népszerűségek szelektálódnak ki, ami



3. ábra. Selyemmályva-gyomosodás *glyphosate*-tűrő GM-kukoricában

a további védekezés akadályát jelenti. Ilyenkor más hatóanyagokat javasolnak (pl. 2,4-D, dicamba stb.). Az érintett növényfajok a betyárkóró és a lándzsás útifű, amelyeket mára több is követett.

Az eredeti szabadalom és annak számos meghosszabbítása nyomán nyert jogi oltalom lejárta után széles körű generikus forgalmazás (nálunk Agan, Agro-Chemie, Calliope, Cheminova, Pinus, Sinon) következett, de a hatóanyag ma is a Monsanto egyik vezető terméke, amit a GT-növények szabadalmainak köszönhet (Roundup → Roundup Ready). Nemzetközileg ismert főbb gyártók a Dow, a Syngenta és a NuFarm. A GM-növények gazdaságilag legfontosabb csoportjait erre a hatóanyagra tették tűrőképessé, ami jelentősen bővítette (vö. posztemergens felhasználás) a hatóanyag lehetőségeit [4], s ezzel a környezetszennyező hatását is növelte.

### A *glyphosate* hatásmechanizmusa

A *glyphosate* a növényekben az aromás aminosavak bioszintézise során lezajló sikiminsav-anyagsereutat gátolja. A *glyphosate* – amely a glicin származéka – megakadályozza a központi intermedier kialakulását katalizáló enzim, az 5-enol-piruvilsikiminsav-3-foszfát-szintáz (EPSPS) működését oly módon, hogy a foszfoenol-piroszólósav átmenetiállapot-analójaként az enzimhez kötődik (1. ábra, B). Ez az anyagsereút-gátlás a triptofán, a fenil-alanin és a tirozin szintézisét akadályozza meg, ami rövid időn belül a növény pusztulását okozza. Mivel az összes magasabb rendű növényben megtalálható ez a metabolikus út, ezért a hatás elvileg totális. Az *epsp*-gén azonban könnyen mutálódhat, s a *glyphosate* hatóanyagra kevésbé érzékeny változatok (melyekhez a *glyphosate* kevésbé kötődik) jöhetnek létre. Vízőldhatóságának fokozása céljából a hatóanyagot ammónium-, izopropil-amónium-, nátrium-, illetve trimetil-szulfónium- (trimézium) sói formájában hozzák forgalomba [5].

### A *glyphosate* formázása – faggyúamin-származékok (POEA)

A hatóanyag kijuttatásánál megoldásra váró feladat az alkalmazás optimalizálása, amit formázó anyagokkal érnek el. Ezek feladata a növényen való megtapadás fokozása, a lemosódás gátlása, a levél sejtjeibe való belépés segítése. A formázó anyagok könnyített engedélyezési körbe és a gyári szabadalmak körébe tartoznak, melyeknek pontos összetételét és mennyiségét a gyártó nem köteles megadni a termék biztonsági adatlapján sem: a készítmények valóságos összetevői így a kutatók előtt is rejtve maradnak. Növényvédő szerek esetében az alábbiak a gyakrabban használt formázó anyagok: kvaterner-ammónium-vegyületek, lauril-glükózid, lauril-glükóz-karboxilát, nátrium-alkil-poliglükózid-citrát, nátrium-alkil-poliglükózid-szulfoszukcinát, nátrium-dioktil-szulfoszukcinát, nátrium-dodecil-benzol-szulfonát, nonilfenol-polietilén-glikoléter, polietoxilált-alkil-foszfátészter, polietoxilált-faggyúamin (POEA), szekunder-alkohol-etoxilát. Gyártóik erre a területre szakosodott cégek laboratóriumai: BASF, Dow Chem, Kemcare Ltd, Lamberti SpA és Lankem Ltd.

A *glyphosate* hatóanyagnál a tapadást és a felszívódóképességet a kezdetekben faggyúamin-származékokkal fokozták, közülük is a POEA nevű vegyületcsoport széles körben elterjedt. Mindaddig, amíg ki nem derült (lásd a második részben), hogy a formázott készítmény mellékhatása több esetben jelentősebb a tiszta hatóanyagénál. Ma a faggyúamin-csoportot éppen le-



váltják, és hazánk ebben Európában élenjáróan 2016-ban kivonásra jelölte a POEA-tartalmú *glyphosate*-készítményeket. Ezek: Agria Glypho, Amega, Clinic 480 SL, Dominator, Figaro, Gladiator 480 SL, Glialka 480 Plus, Glifostar 480 SL, Glyfogon, Glyfos, Glyphogan 480 SL, Glyphogan Classic, Hardflex 480 SL, NASA, Nufozát, Rodeo, Roundup Classic, Roundup Classic, Roundup Classic Plus, Roundup Forte, Sherif 480 SL, Taifun 360, Uyuni és Vesuvius. Ezzel a *glyphosate* hatóanyag egyidejű védelme mellett – amely gazdasági szempontú – hazánk elismerte a készítményeket ért toxikológiai kritikák jogosságát [6, 7].

## Gyomirtás *glyphosate* hatóanyaggal

Gyomirtásra a növénytermesztés igen korai szakaszában sor kerül, ezért a termésben való szermaradék kialakulásának esélye csekély. Totális gyomirtók csak a kultúrnövény kelése előtt (preemergens módon), esetleg vetés előtt alkalmazhatók, így azokat szakszerű alkalmazás mellett a kultúrnövény jobbára fel se veheti. Más a helyzet a *glyphosate*-tűrő GM-növények esetében, ahol kelés után is alkalmazható ez a hatóanyag, és a tűrőképesség azt jelenti, hogy a felvett hatóanyag és bomlástermékei (metabolitjai) a kultúrnövényben keringenek, így szermaradékként mérhetők vissza. A *glyphosate*-tűrő növények esetében a gyapot az ismert példa, amennyiben argentin tamponokból *glyphosate*-szermaradékot mutattak ki [7].

A gyomirtási célú kijuttatás a talajt és vizeket szennyezi, az ott lévő élővilágra hat, valamint a permetezést végzők számára jelent komoly kitétséget. A felhasználási szabályokat betartó gyomirtási alkalmazás azonban kisebb kockázatot jelent, mint az állományszárítási felhasználás.

## Állományszárítás *glyphosate* hatóanyaggal

Az állományszárítás (deszikkálás) lényege, hogy azon növényi részeket, amelyeket nem szükséges terményként betakarítani, még a termőföldi állományban kémiai kezeléssel elszáritják. A technológia kialakulását két természeti tényező sürgette. Az egyik, hogy ez a gyorsított betakarítási mód lehetővé tette a nagyobb termőképességű, hosszú tenyészidejű fajták választását. Ez Európában észak felé haladva egyre kritikusabb, és az európai *glyphosate*-felhasználás növekedése ennek a technológiának a következménye. Míg az Egyesült Királyságban a gabonaféléket, Németországban a sörárpát (a terület közel 20%-án) ilyen kezelés után takarítják be, addig nálunk gabonafélék esetén nincs erre szükség. Hazánkban a burgonya, az olajlen, a lencse, a napraforgó, a kukorica, a szója és az olajrepe betakarításakor választhatják a deszikkálást (4. ábra). A másik ok az, hogy a kémiai kezeléssel az egyenlőtlen fejlődésű növényállománynál (pl. talajfolt) a még zöldülő egyedeket is gyors száradásra kényszeríthetik, ami



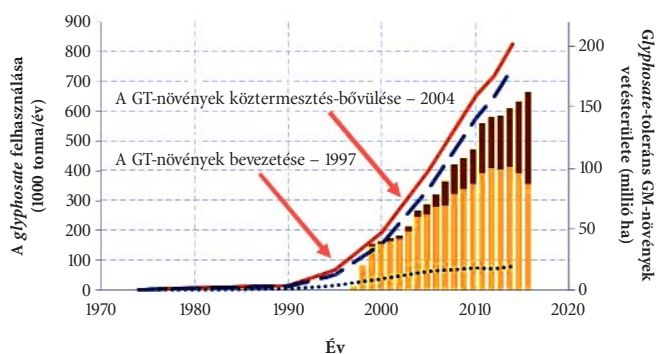
4. ábra. *Glyphosate* hatóanyaggal deszikkált napraforgó betakarítása

csökkenti a betakarítási veszteséget. Kritikus ennél a technológiánál az, hogy az érés közeli állapotban a szermaradék előfordulásának esélye a szemekben is nagy. Totális hatású gyomirtószerek hatóanyagokat használnak erre a célra, így a *diquat*, a *bromoxynil* és a *glyphosate* engedélyezett. Az európai élelmiszer- és takarmánybiztonsági gyorsriasztási rendszer (RASFF) szerint a mért eredmények a lencsében eredményezték a legtöbb intézkedést. A nagyrészt törökországi tételek között biotermék jelzésű is akadt.

## *Glyphosate*-tűrő GM-növények

A *glyphosate* hatóanyag preemergens alkalmazása után a gyomok többsége pár nap alatt elszárad. Ezen a helyzeten változtatott lényegesen a GT-növények megjelenése (szója, gyapot, kukorica, reepe, lucerna és cukorrépa), amelyek a posztemergens *glyphosate*-kezeléseket is tűrik. Közülük a Monsanto fajtacsoportjai a legismertebbek, amelyek Roundup Ready (RR) néven váltak ismertté, utalva arra, hogy ezeknek a növényfajtáknak az esetében a *glyphosate* hatóanyagú, Monsanto által gyártott Roundup gyomirtó szer a növények kelése után is alkalmazható. A Bayer Gly-Tol néven, a Pioneer/DuPont Optimum GAT néven jegyzi fajtaköréit, míg a Syngenta Agrisure GT megnevezéssel. A GT-fajták kifejlesztése során a növényi géntechnológusok kétféle stratégiát alkalmaztak: vagy a célenzim (*epsps*) mutáns génjét használták (*cp4 epsps*, *mepsps*, *2mepsps* – ez utóbbi kettőt kukoricából izolálták), vagy a *glyphosate*-ot lebontani képes enzimet kódoló gént (*gat*, *gox*) vittek be. Ennek következménye, hogy míg az első esetben a túlélő növényekben a *glyphosate* (RR és Agrisure GT fajtakörök), addig a második esetben az *N*-acetyl-*glyphosate* (NAG) (Optimum GAT fajtakör) és az aminos-*metilfoszfonsav* (AMPA – RR és Agrisure GT fajtakörök) bomlástermékek megnövekedett előfordulására számíthatunk a növényekben. Az 1997–1999-es időszakban végzett argentinai vizsgálatok arról számolnak be, hogy egy tenyészidőszakban 2–3 *glyphosate*-kezelés alkalmazása után – erre a gyommagvak elhúzódo kelése miatt van szükség – a betakarítás időszakában az RR-szója levelében és szárában 0,3–5,2 mg *glyphosate*/kg és 0,3–5,7 mg AMPA/kg, míg a termésben 0,1–1,8 mg *glyphosate*/kg és 0,4–0,9 mg AMPA/kg értékek mérhetők [8]. Ma 2,4-D, *dicamba*, *glufosinate*, *glyphosate*, *oxynil*, *isoxaflutole*, valamint szulfonil-karbamid- és

5. ábra. A globális *glyphosate*-felhasználás és a *glyphosate*-toleráns (GT) géntechnológiai úton módosított (GM) növények köztermesztésének alakulása: mezőgazdasági felhasználás (szaggatott vonal), nem mezőgazdasági felhasználás (pontozott vonal), összfelhasználás (folytonos vonal), egyszeres genetikai eseményt (világos oszlopok) és többszörös genetikai eseményt (sötét oszlopok) tartalmazó GT-növények vetésterülete [7]





imidazolinonszármazék hatóanyagokra tűrőképes GM-növények is ismertek.

### A glyphosate hatóanyag forgalma világszerte

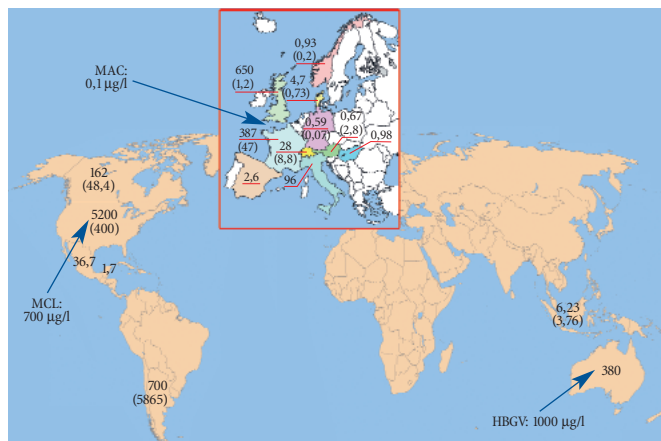
A fent említett technológiák nyomán a glyphosate hatóanyag használata világszerte folyamatosan növekszik, részint az állományszáritási technológia, részint pedig a GT-növényeken a hatóanyag posztemergens használata nyomán (5. ábra). Napjainkra a felhasználás megközelíti az évi egy megatonnát: ilyen hatalmas anyagmennyiség kijuttatása pedig még a legkevésbé toxikus idegen anyag (xenobiotikum) esetében is súlyos környezetterhelést jelent. Bár a hatóanyag kedvező körülmények között viszonylag gyors lebomlású, kedvezőtlen esetben 3–5 hónap is lehet (felezési idő, DT<sub>50</sub>, vízben 1–91 nap, talajban 1–130 nap [1]), így a le nem bomlott hatóanyagot és a bomlástermékeket is magában foglaló szermaradékaik megjelennek a terményekben és a környezeti mátrixokban.

### A glyphosate vízszennyezése

A glyphosate egyes sói jelentős, a szabad foszfonsav hatóanyaghoz képest egy-két nagyságrenddel nagyobb vízdékonysággal (11,6 g/l 25 °C-on) rendelkeznek. A vízdíthatósági sorrend: trimetil-sulfóniumsó ≅ izopropil-ammoniumsó > káliumsó > nátriumsó > ammóniumsó > glyphosate, így a hatóanyag az esővízzel a talaj mélyebb rétegeibe is eljut annak ellenére, hogy bizonyos körülmények között gyorsan bomlik és erős komplexképző tulajdonsága van. Elsődleges bomlástermék növényben, vízben és talajban is az AMPA, mely talajban sokkal mobilisabb, mint a kiindulási hatóanyag.

A glyphosate meghatározására kifejlesztett analitikai módszerek javarészt folyadékromatográfiás (LC) elválasztáson alapulnak, minthogy a gázkromatográfia (GC) e vegyületnél poláros és ikerionos szerkezet miatt csak hosszadalmas minta-előkészítés után használható. A GC-módszerrel növényi mintákban elérhető visszanyerések 70% felettieknek, a kimutatási határ 0,05 mg/kg értékűnek bizonyult. Az újabb LC-módszerek, egyszerűbb minta-előkészítéssel, gyorsabb megoldást nyújtanak a meghatározására, de ezek sem nélkülözhetik a származékképzést, ami a megfelelően alacsony kimutatási határ eléréséhez szükséges. A legújabb LC-MS-ESI-módszerekkel teljesíthetők az EU ivóvizek növényvédőszer-maradékaira vonatkozó, 0,1 µg/l határértékű előírásai. A kromatográfiás eljárások mellett immunanalitikai módszerek is használhatók. Míg a kilencvenes évek elején még úgy tartottuk, a glyphosate ellen nem nyerhető jó antitest, egy évtizedre rá sikerült megoldani az immunizálás nehézségeit [9]. Az enzimjelzéses immunoassay (ELISA) eljárások nyomán immun-szenzorok kifejlesztéséről is beszámoltak már.

2002-ben az Egyesült Államok középnyugati felszíni vizeiben a minták 35–40%-ában mértek glyphosate-ot maximálisan 8,7 µg/l mennyiségben, miközben az AMPA a minták 53–83%-ából volt akár 3,6 µg/l koncentrációban kimutatható. Kanadai mérésekben, a 2004–2005 alatt vizsgált 502 minta 21%-ában mutattak ki glyphosate-szennyezettséget, amelynek maximuma 41 µg/l (AMPA-maximum 30 µg glyphosate-ekvivalens/l) volt. Ezek a mérések figyelmeztető jelzésként értékelhetők arra, hogy felszíni vizeink szennyezettsége kitüntetett figyelmet érdemel. Míg az észak-amerikai glyphosate-eredetű vízszennyezés igen jelentős (6. ábra), addig hazánkban lényegesen alacsonyabb értékeket mérünk [6, 7, 9–11].

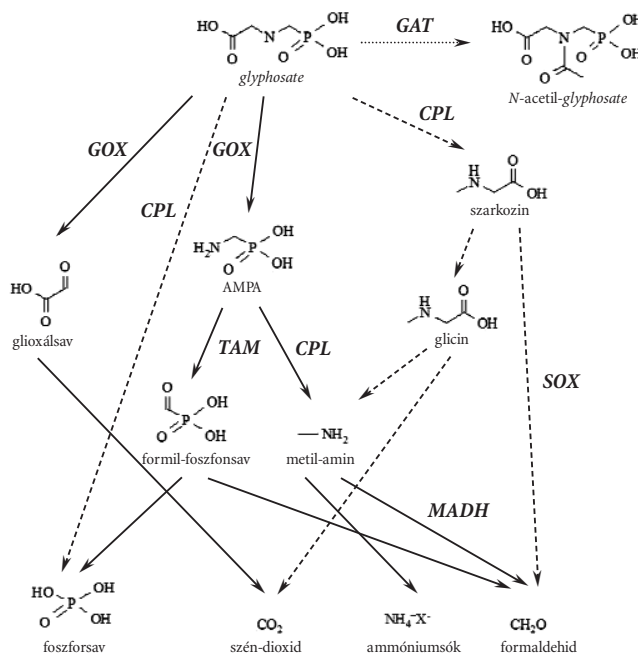


6. ábra. A glyphosate globális felszínvíz-szennyezése: a jelentett legmagasabb felszínvíz- és talajvízszennyezési értékek világszerte [7]. Az ivóvízben megengedett határértékek egyes régiókban: legmagasabb megengedhető koncentráció (maximum admissible concentration, MAC) az Európai Unióban, legmagasabb szennyezősint (maximum contaminant level, MCL) az Egyesült Államokban, egészségügyi alapú irányérték (health-based guideline value, HBGV) Ausztráliában

### A glyphosate talajszennyezése

A glyphosate a talajban egyedi sajátosságokkal rendelkezik. A növényvédő szerek általában a talajok szervesanyag-tartalmához kötődnek, mivel legtöbbjük molekuláiban az apoláris csoportok dominálnak. Az alapvegyület (N-foszfonometil-glicin) és bomlástermék (AMPA) a szokásostól eltérő kémiai viselkedésének eredménye, hogy rutinszerű környezeti vizsgálatokkal nem mutathatók ki [7].

7. ábra. A glyphosate és lehetséges sorsa egyes lebontó enzimek közreműködésével. Oxidatív lebontás (folytonos nyilak), nem hidrolitikus lebontás (szaggatott nyilak), inaktiválás növényben (pontozott nyíl). Jelmagyarázat az átalakító enzimek (dőlt betűvel) neveihez – GOX: glyphosate-oxidoreduktáz, GAT: glyphosate-N-acetiltranszferáz, CPL: C-P-liáz, SOX: szarkozin-oxidáz, TAM: transzamináz, MADH: metil-amin-dehidrogenáz





A *glyphosate* esetében különbségek vannak a laboratóriumban, illetve a szabadföldön mért DT<sub>50</sub>-értékek között. A hatóanyag lebomlását laboratóriumi körülmények között kedvezőnek találták (7. ábra); a DT<sub>50</sub>-érték talajban 47 nap, vízben 91 nap. A molekula felezési ideje szabadföldi körülmények között néhány naptól akár néhány hónapig vagy évig is terjedhet. Ennek oka egyrészt a talajrészecskékhez való kötődés, amelyben a *glyphosate* a talajszemcséken megkötődve fémionokkal (Al, Fe, Mn, Zn) komplexet képez. Másrészt pedig a *glyphosate* lebomlásának mértéke nagyban függ a talaj mikrobiális aktivitásától, amelyben a *Pseudomonas*-fajok szerepét emelik ki. Finn környezetkémikusok alacsony foszfortartalmú észak-európai homoktalajokban az alkalmazás után 20 hónappal a kijutatott mennyiségnek *glyphosate* esetében 19%-át, AMPA esetében 48%-át mérték.

### A *glyphosate* és szermaradék-problémái

A *glyphosate* megjelenése az italainkban (víz, sör, bor) és élelmiszereinkben (brit péksütemények) vezetett oda, hogy vérben, anyatejben (ez esetben csak ELISA-módszerrel mérték) és vizeletben is kimutatták ezeket. Európában a vizsgált személyek 40%-ának vizeletében mérték szennyeződést, ami komoly figyelmeztetés, s ami miatt e hatóanyag szabad felhasználásának korlátozása elkerülhetetlen. Jelenleg előképzettség nélkül vásárolható. A laikus alkalmazók azonban nincsenek tisztában a hatóanyag környezeti és egészségügyi veszélyeivel.

2014-ben 22 európai országban vizsgálva a minták közel 4%-ában találtak *glyphosate*-maradékokat. Ezek között méz- és szójaszószószómintákat is találtak. Az értékek a maximálisan elfogadható szermaradékszint (MRL) alatt voltak, kivéve a szárazbabot (2,3 mg/kg). Az RASFF vizsgálatait tekintve a gyakorisági adatok szerint a lencse, napraforgó, borsó, mustár, len, szója, zab, búza, árpa és rozs említhetők, vagyis azok a kultúrák, ahol állományzári-

tási célra alkalmazzák a *glyphosate* hatóanyagot [7]. Külön ki kell emelnünk, hogy az Egyesült Államokban megengedett *glyphosate*-vízszennyezés hétezerszer magasabb (700 µg/l), mint az Európai Unióban, ami az egyik a legsúlyosabb környezet-egészségügyi ellentmondás.



#### IRODALOM

- [1] MacBean, C. (Ed.): *Glyphosate*. In: *The Pesticide Manual*. 16<sup>th</sup> Edition, Brighton, UK, British Crop Protection Council, 2012, 586–590.
- [2] Baird, D. D., Upchurch, R. P., Homesley, W. B., Franz, J.E.: Introduction of a new broad-spectrum postemergence herbicide class with utility for herbaceous perennial weed control. *Proc. North Cent. Weed Control Conf.* 1971, 26, 64–68.
- [3] Franz, J.E.: N-phosphonomethyl-glycine phytotoxicant compositions. United States Patent Office No. 3,799,758, 1974. <http://cehn-healthykids.org/wp-content/uploads/2017/06/US3799758-1974.pdf>
- [4] Darvas B., Fejes Á., Mörtil M., Bokán K., Bánáti H., Fekete G., Székács A.: A *glyphosate* alkalmazásának környezet-egészségügyi problémái. *Növényvédelem* (2011) 47, 387–401. <http://bdarvas.hu/download/pdf/DBglyph2.pdf>
- [5] Székács A.: 13. Gyomirtó szerek. In: Darvas B., Székács A. (szerk.) *Mezőgazdasági ökotoxikológia*. I'Harmattan, Budapest, 2006, 95–112.
- [6] Székács, I., Fejes, Á., Klátyik, S., Takács, E., Patkó, D., Pomóthy, J., Mörtil, M., Horváth, R., Madarász, E., Darvas, B., Székács, A. Environmental and toxicological impacts of *glyphosate* with its formulating adjuvant. *Int. J. Biol. Vet. Agric. Food Engineering* (2014) 8, 212–218.
- [7] Székács, A., Darvas B.: Re-registration challenges of *glyphosate* in the European Union. *Frontiers Environ. Sci.* (2018) (in press)
- [8] Arregui, M.C., Lenardón, A., Sanchez, D., Maitre, M.I., Scotta, R., Enrique, S.: Monitoring *glyphosate* residues in transgenic *glyphosate*-resistant soybean. *Pest Manag. Sci.* (2004) 60, 163–166.
- [9] Mörtil, M., Maloschik, E., Juracsek, J., Székács, A.: Növényvédőszer-maradékok gázkromatográfiás és immunanalitikai meghatározásának eredményei vizekben és talajokban. In: *Komplex monitoring rendszer összeállítása talaj-mikroszennyezők analitikai kimutatására és biológiai értékelésére a fenntartható környezetért*. MONTABIO-füzetek IV, 2010, 30–37. [http://bdarvas.hu/download/pdf/MONTABIO\\_fuzet\\_IV\\_A5\[1\].pdf](http://bdarvas.hu/download/pdf/MONTABIO_fuzet_IV_A5[1].pdf)
- [10] Mörtil, M., Németh, Gy., Juracsek, J., Darvas, B., Kamp, L., Rubio, F., Székács, A.: Determination of *glyphosate* residues in Hungarian water samples by immunoassay. (2013) *Microchem. J.* 9, 143–151. <http://bdarvas.hu/download/pdf/Mortletal.pdf>
- [11] Székács, A., Darvas B.: Forty years with *glyphosate*. In: Abd El-Ghany Hasaneen, M.N. (Ed.), *Herbicides – Properties, Synthesis and Control of Weeds*. Rijeka, InTech, 2012, 247–284. <https://www.intechopen.com/books/herbicides-properties-synthesis-and-control-of-weeds/forty-years-with-glyphosate>

Kutasi Csaba

# A kékfestő textilmintázás és kémiai vonatkozásai

A régebbi kémiai textilmintázási eljárások egyike a kékfestés, pontosabban a kékfestéssel történő mintás kelme előállítás. *Lényege egy olyan gátló (rezerváló) nyomási eljárás, amelynél a fehér textilanyagra mintásan felhordott védőréteg a későbbi indigókék színezésnél megakadályozza a fehér alap elszíneződését, így fehér mintázat alakul ki. Speciális fémsós pácokkal többszínű minták alakíthatók ki.*

A kékfestés Indiából terjedt el. A kék szín előállítására az ot-tani növényből (*Indigofera tinctoria*) származó festőindigót használták. A 16–17. századi kereskedelmi fejlődés eredményeként – az Afrikát megkerülő hajókaravánok jóvoltából – az indigónövényből nyert, rostmentes és tömbökbe formált színezőanyag eljutott Európába. Így a Franciaországban és Tübingiában termesztett és kevésbé gazdaságos festőnövényt, a csülleget

(*Isatis tinctoria*) felváltotta a tökéletes színezést biztosító indigószínezék.

A 18. században, a keleti kék-fehér porcelánok színhatását kölcsönző „Porzellan Druck” textíliákon megjelenő ún. rezerva-nyomási eljárása különleges külső képű kelméket eredményezett. Hazánkban az 1760-as években honosodott meg az ilyen jellegű vászonmintázás. A legkorábbi, évszámmal jelölt magyarországi kékfestő kelme feltehetően 1783-ból származik és Körmöcbányán készítették. A 18. században többek között Sopronban Kistler Jakab, Pápán Kluge Károly, Óbudán Goldberger Ferenc, Spitzer Gerson működtetett sikeresen kékfestő műhelyt. A 19. század közepén a Goldberger- és a szegedi Felmyer Antal-féle vállalkozás már üzemként gyártotta a kékfestő mintázású kelméket. Jelenleg is több kékfestőmester tevékenykedik hazánkban. A pápai Kékfestő Múzeumban pedig megelevenedik a több mint 230 éves Klu-

ge-féle kékfestő-üzem. Az Óbudai Múzeum Goldberger Textilipari Gyűjteményében szintén tanulmányozhatók a kékfestő mintázás egyes folyamatai.



A kékfestő-mintázás főbb műveletei

### A vászon előkészítése a mintázásra

A nyers vászon (eleinte lenből készült, de ennek nehezebb színezhetősége miatt áttértek a pamutszövetekre) előkészítése hamuzsíros (lúgos, szappantartalmú) fürdőben történő főzéssel kezdődik. Ezzel távolítják el a kelmében levő szennyezőanyagokat, így lesz alkalmas a mintázásra. Az előkészítő, majd színezési műveleteket az ún. fekete konyhában végzik. Nevét a falak sötétre festéséről kapta, miután a főzőüstök füstje és a színes folyadékok falra kerülése eleve a helyiség belsőjének sötétedésével járt volna. A lúgos lefőzést alapos öblítés és szárítás követi. A textilanyagot ezután a fűre terítették, a napfény fehéritőhatását felismerve előnyben részesítették ezt a módszert, az ún. gypfehéritést. A harmatos fűvön a textíliában előforduló víz egy része a napfény ibolyántúli (UV) sugarainak hatására (csekély mennyiségben) hidrogén-peroxiddá alakul. Az ebből felszabaduló aktív oxigén a zavaró, elszíneződést okozó anyagokat elszíntelenítette, így a textília fehérsége fokozódott.

A következő lépésben a mintázás előtti kelmét forró burgonya- vagy kukoricakeményítőt tartalmazó üstben húzzák át. A keményítőfürdőben átnyomkodott textilanyagot a falból kiálló rúdra dobják, majd fából vagy csontból készült karikán áthúzza, a nedves szövetből a felesleges keményítőt szinte kipréselik.

A fehéritett, keményített és mángorolt szövetet ezután a mintázóba (tarkázóba) viszik. A keményfából készült mintázóasztalt posztó, illetve filcréteggel vonják be (a rugalmas alátét biztosítására), majd vékony vászonnal burkolják. Az előkészített kelmét gondosan kisimítva fektetik fel a mintázóasztalra.

### A minta felvitele

A mintázószerszámok általában körtefából faragott mintahordozók, vagy egyéb keményfa alapba szögecseléssel, bádogozással, huzalozással rögzített magasnyomó formák, ezeket módlinak nevezik. A mintázószerszámmal a fehér kelmére a leendő mintázatnak megfelelő helyeken viszik fel – a későbbi színezésnél – a fehér alap megóvását biztosító anyagot. Eleinte viaszt használtak, ami a mintázás során a melegen tartás miatt problémás volt, a végső mosáskor eltávolítása pedig nehézségekkel járt. A 18. század húszas éveiben festőmesterek és kémikusok együttes fejlesztése eredményeként elterjedt a hidegen alkalmazható és könnyen

kimosható, pap elnevezésű szigetelőpép (a német *Papp* kifejezés pépet, ragasztót jelent). Ez a réteg védi meg – részben mechanikai védelemmel, részben kémiai rezerválással – a későbbi kifésztésnél a kék színezéktől a kelme mintás részeit, azaz megakadályozza a mintás helyeken a fehér szövetfelület elszíneződését. A vizes alapú szigetelőpépek réz(II)sókat (réz-szulfát, réz-nitrát, réz-acetát), gumiarábikum sűrítő-ragasztóanyagot, továbbá a sűrítést és fedést fokozó kaolint tartalmaz. Enyhén zöldes színét a rézsóktól kapja. A lúgos színezőfürdőben a rézsók féligáteresztő tulajdonságú réz-hidroxidot képeznek, ami helyi lúgmegkötéssel jár, így az oldott indigó ezeken a részeken kicsapódik, mielőtt átjutna a védőrétegen. A színezést követő savas kémhatású fürdőben a szigetelőanyag kimosható lesz.



Példák a magas nyomószerszámok (módliek) kialakítására

A szigetelőpépet egy tepsyszerű faladában (az ún. sasiban) tárolják, ebben néhány ujjnyi vastagságban helyezkedik el a sűrű pép, felszínén egy molinóval és viaszos vászonnal „befenekelt”, jól illeszkedő keret lebeg. Az így, vagy egyéb módon (pl. széles kéfével) felkent pépbe mártják a mintázószerszámot. A nyomópéppel bevont módlit helyezik a kelmére és a bélyegzőszerűen nyomják a felületre. A minta jellegétől függ, hogy milyen nyomóerőt gyakorolnak. Apró elemekből álló, vékony kontúrú, ritka mintáknál még a nyomószerszám teljes tömegét sem szabad ráen-



Módliek és mintázott kelmevágatok

gedni a textilanyagra. Nagyobb felületű, folszerű részekből felépülő mintázatoknál a kéz élével ütemesen ütögetve használják a módlit. Fokozottabb nyomást igénylő mintáknál tarkázókalapácsot használnak. Ennek az esztergált keményfa eszköznek a közepébe fúrt lyukakba öntött ólom tovább növeli a tömeget, biztosítva a nagyobb nyomóerő-kifejtést. A nyomószerszámmal történő pépfelvitt a kívánt mintának megfelelően ismétlik mindaddig, ameddig a szélesség és hosszirányú kelmefelület teljesen mintázott lesz. A mintázott kelmét végül szárítják (a fehér kelme a mintázatnak megfelelő helyen enyhén zöldes a papban levő réz-sók miatt). Ezt általában a mintázószoba mennyezetgerendáira szögelt lécek segítségével végzik, akár egy végnyi mintázott kelmét tudnak a felhúzott lécezetten tárolni.

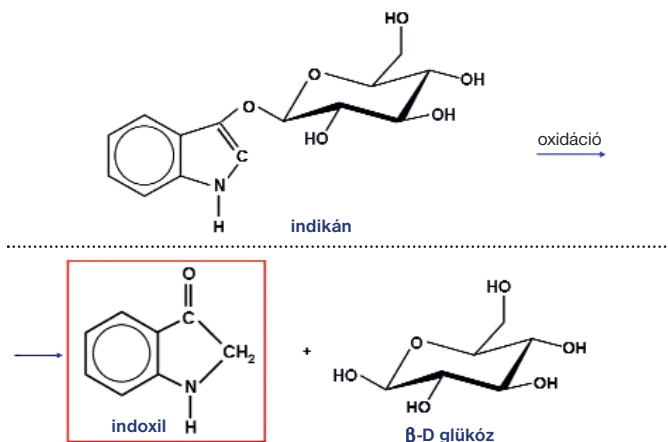
### Az indigó csávázása, majd a kékfestés

Az indigót, mint festőanyagot, a trópusokon termesztett festőnővény, a pillangósok csoportjába tartozó indigó cserjéből (*Indigofera tinctoria*) nyerik.



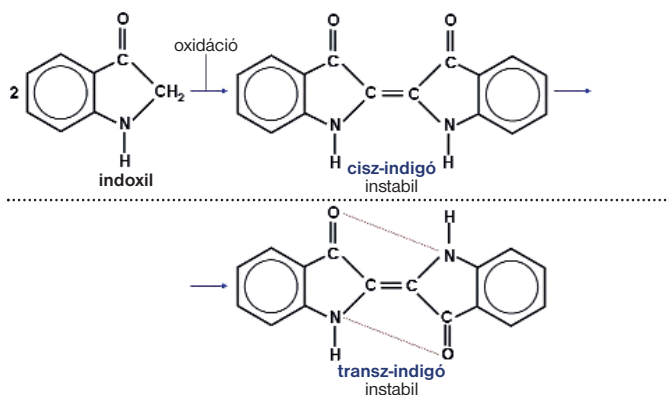
A festőindigó növény (*Indigofera tinctoria*) leveleiből nyerik a színezék alapanyagát

A növény levegőn szárított levelei tartalmazzák az indikánt. A rostmentes indigót tömbökké (kockák, táblák alakjában) formálva szállítják, ezért porrá őrléssel lehet felhasználásra alkalmassá tenni. Ehhez az ún. kockaindigót vasmoszárban, kevés víz hozzáadásával vasgolyók görgetésével porítják. A közvetlenül vízben nem oldódó indigót lúgos redukciós kezeléssel (csávázás) alakítják át vízoldható, átmeneti módosulattá. Ez azért lényeges, mert a cellulózalapú szálakra csak a vízben oldható színezék húz fel.



A festőindigó leveleiből nyert színes indikán oxidációja

#### Az indigó kialakulása



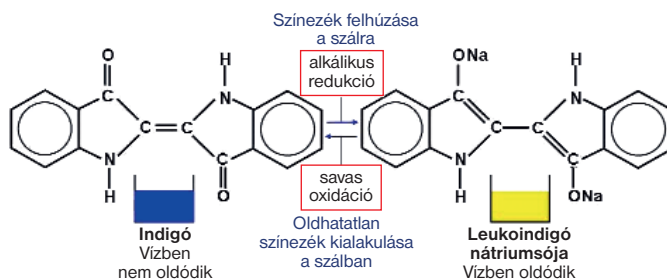
Az elmúlt század elején a festőnővényből nyert színezőanyagot felváltotta a mesterséges indigó (indantrén színezék).



Adolf von Baeyer (1835–1917)

Adolf von Baeyer német kémikus (1835–1917) 1866-tól foglalkozott az indigó mesterséges előállításával, 1880-ban sikerült az indigót szintetizálni. Ipari méretekben 1897-től először a BASF kezdte gyártani a szintetikus indigót.

A kékfestéshez az indigót csávázni kell, azaz az egyébként vízoldhatatlan színezék vízoldható módosulatát kell előállítani lúgos redukcióval. A cellulózalapú szálakból (pamut, len stb.) álló szöveteket csak vízoldható színezékek képesek tartósan színezni, amelyek finom eloszlásban a szál belsejében rögzítődnek. Eleinte erjesztéses módszerrel, fűtött kádakban történt a csávázás, azonban az így készített színezőfürdő eltarthatósága rövid volt. Az időközben kifejlesztett hideg eljárás, a vasgálicos [vas(II)-szulfát], meszes (frissen égetett mész), illetve cinporos (ónhamu) csávázás gyorsan népszerűvé vált. A serfólsáknak is nevezett művelettel az őrölt vagy eleve por alakú indigót meleg vízben keveréssel eloszlatják, ezután kalcium-oxidot és oldott vas(II)-szulfátot adagolnak keverés mellett. Folyamatos keverés és kb. 12 órás pihentetés után az egyébként sötétkék oldat megfelelő csávázás eredményeként sárgás színű lesz (az átmeneti kémiai átalakítás szerkezetváltozással párosul, ennek oka az időleges színváltás). Az így készült hideg csáva hosszú ideig eltartható, a fürdő felületén kialakuló vékony mészkőréteg védi meg a levegő oxidációjától az indigót. Az eszerint előállított színezőfolyadékot akár egy évig is használják úgy, hogy a munkanap végén annyi tömény színezőoldatot adagolnak hozzá, amennyit napközben elhasználtak belőle.

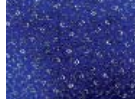


Az indigó csávázása, a színezés lényege

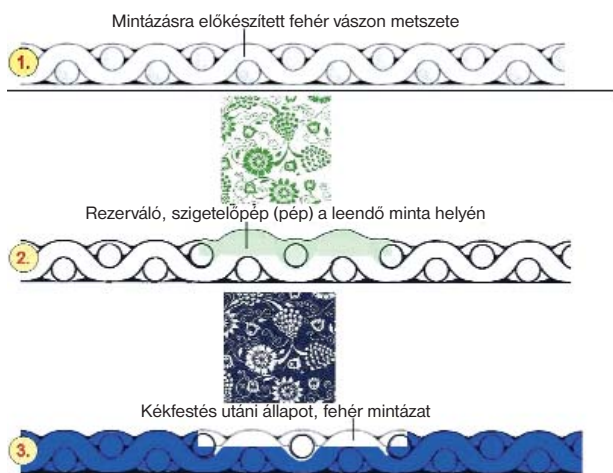
#### Az indigó módosulatai



1  $\rightarrow$  csávázott (vízben oldódó) módosulat  
2  $\rightarrow$  levegőn visszaoxidálódott módosulat



A mintázás után megszártított kelme (amelyen, a minta helyén erősen tapadó, levegőtől is védő réteg helyezkedik el) színezését az ún. küpa-szobában végzik (a német *Küpe* kifejezés a kádban tárolótartályban, ill. színezőmedencében vízdoldhatóvá alakított indigófürdőt, a festőcsávát jelenti). A küpák fölött egy akasztó-faszerű állványon, csigán átvetett kötélén függ a csillagfa. Ennek a fakerészerű eszköznek a kör alakú ráfján, illetve küllőin levő kampókra függesztik egyik szélénél fogva a mintázott kelmét. A ráfok csavarment segítségével mozgathatók, így a feltűzött textilanyag igény szerint feszíthető. A ráaggatott kelmével telt csillagfát a csigán átvetett kötél leengedésével a festőfürdőbe merítik és kb. fél óra elteltével kihúzzák. A kívánt színmélységtől függően a merítést többször megismétlik. Összesen kb. 8–10 kihúzás szükséges a sötétkék szín eléréséhez. A megfelelő színeződést követően játszódnak le a kékfestés csodája, amikor a mintázatlan részek zöldessárga, zöld és végül kék színűvé váltak a levegő oxigénjének hatására és kezd megjelenni a minta.



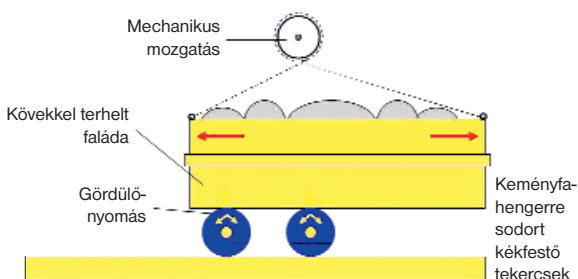
**A kékfestőmintázás fázisai**

A színezés végén a felhúzott ráfon levő textilanyagot – az ún. meszes vásznat – lecsorgás után szárítják.

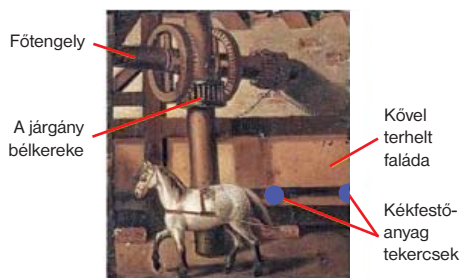
**Befejező műveletek, csinozás**

A már fölöslegessé vált szigetelőpépet híg kénsavas (vagy sósavas) kezeléssel távolítják el a kelmefelületről, így véglegesen megjelenik a gyönyörű fehér minta. A savazott szövet intenzív mosását folyók sodrában, sebes-folyású patakokban végezték régebben. Például Goldbergerék a nedves anyagot rácsos szekrényekbe helyezve, csónakból engedték a Dunába. Sopronban az Ikva-patak partján állt festőház, Pápán a meleg vizű Tapolca-patak szolgáltatva a mosófürdőt, az épület végén épített mosóhidról végezték a kezelést.

**A ládás mángorló működési elve**



A szárított szövet keményítése és mángorlása adja meg az esztétikusan mintázott kelme kedvező külső képét (fényesség, habosság). Nem véletlenül hívták már a korabeli végkikészítési műveleteket *csinozásnak*. A mintázott-festett kelmét keményfa hengerre sodorják fel ráncmentesen, majd a mángorló, kövekkel terhelt ládája alá helyezik a kelmehengereket. A mozgásba hozott szerkezet következtében a láda ide-oda gördül. A gördülőnyomás hatására a fonalközökben is hat a megmunkálás a feltekereselt kékfestő-kelmén.



**Lójárgányos mángorló**

A kezdeti időkben lójárgányt használtak a mozgathoz, de előfordult az emberi erő hasznosítása is. A kendők fényezését külön asztalon végzik, a tapétakészítőktől átvett eszközzel, például fényes kovakővel.



**Példák a színes kékfestő mintázásra**

A kékfestő kelmék kapcsán megemlítenők a többszínű minták is, ezeknél speciális fémsós pácozat alkalmaznak nyomópépként, sárga, piros, zöld stb. színű mintázatok elérésére. A színes pácozat alá olyan rezerváló pépet nyomnak, amely nemcsak az indigófestésre, hanem a pácszínezékre is védőhatást fejt ki. Így a fehér mintázószín nemcsak a kék kelmefelületen, hanem a színes mintaelemekben belül is igény szerint érvényesülhet. Többszínű mintázatok esetén először a fő szigetelő-védő pépet nyomják a kelmére, ezután következik a feketét kialakító nyomópép, majd a vörös szín eléréséhez szükséges vegyületet tartalmazó pép, végül sor kerül a többi szín nyomására. Az így kivitelezett mintázás után a kelmét több napig meleg, nedves helyen függesztik. Ezt követi a rövid idejű kékfestés, amit levegőn történő oxidálás, majd hatékony mosás zár le. Megfelelő öblítés után a vörös szín kifejlesztésére festőbuzér-kivonatos (alizarin) kezelést végeznek.

**IRODALOM**

[1] Domonkos Ottó: A magyarországi kékfestés, Corvina Könyvkiadó Budapest, 1981.  
 [2] Domonkos Ottó: A pápai Kluge-féle kékfestő üzem 200 éves jubileumára, a Textilipari Múzeum évkönyve, Budapest, 1983.  
 [3] Pápa Kékfestő Múzeum, Tájak-Korok-Múzeumok Kiskönyvtára, 205. szám, 1995.  
 [4] Lőrinc Andor, Péter Ferenc: Textilipari színezékek, Műszaki Könyvkiadó Budapest, 1962.  
 [5] Dr. Rusznák István (szerk.): Textilkémia I-II., Tankönyvkiadó, Budapest, 1988.  
 [6] Marosi József, dr. Tánzosz Ildikó: Kémiai technológia I., Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1984.

Braun Tibor<sup>1,2</sup> – Nagy Miklós<sup>1</sup><sup>1</sup> ELTE Kémiai Intézet<sup>2</sup> MTA Könyvtár és Informatikai Központ

braun@mail.iif.hu, miklosnagy@chem.elte.hu

# Miért nem Ramsden-emulzióknak nevezik a Pickering-emulziókat?

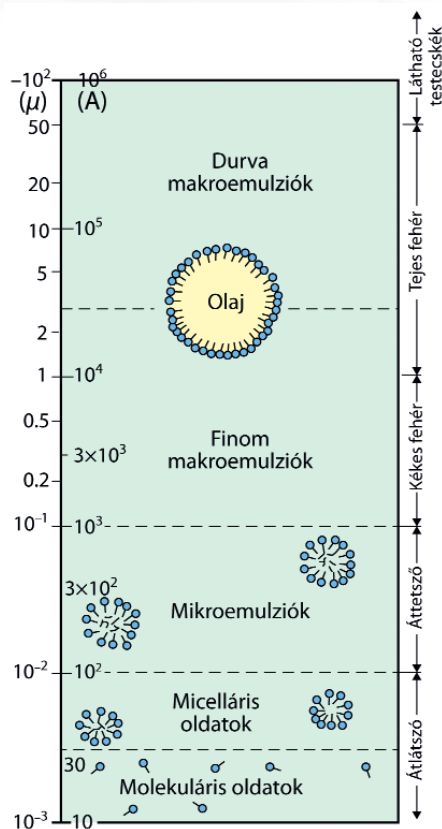
## Kolloidkémiai oknyomozás

### Előszó

A kolloidkémia a legújabb beosztás szerint a lágyszilárd-fizika részének tekintik [1]. E szakterületen belül figyelmünk most bizonyos emulziókra és stabilizálásukra, valamint a stabilizálás felfedezésére irányul. Oknyomozást folytatunk a felfedezésről, beleértve a prioritást, a megkésett elismerést (delayed recognition) és az eponimikus elnevezést.

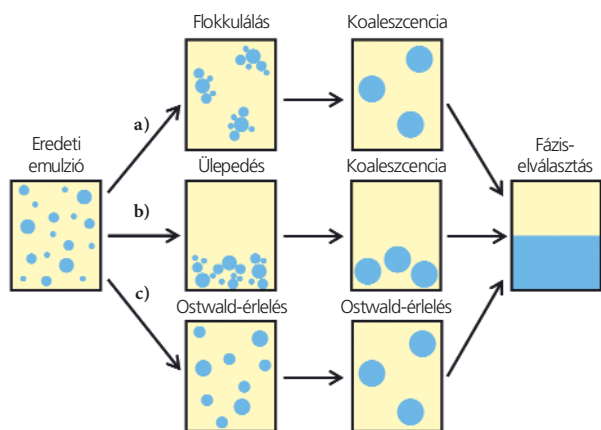
### Emulziók (dióhéjban)

Emulzióknak nevezzük az olyan diszperz rendszert, ami két vagy több nem keveredő folyadékra vonatkozik. Más szavakkal az *emulzió* különleges típusú keverék, ami legalább két, egyébként molekulárisan nem elegyedő folyadékból áll. Az *emulzió* szó a latin nyelvből ered (New Latin emulsio, from Latin emulsus milked out from emulgere to milk out, drain out, from mulgere to milk) [2], az angol magyarázat a tej, illetve tejelés szóra utal, ugyanis a tej példa zsír és víz emulziójára. *Emulzifikálásnak* tekinthetjük egy nem diszperz típusú rendszer emulzióvá alakítását. Bár a *kolloid* és *emulzió* fogalmakat néha felcserélik, az *emulzió*, mint említettük, arra utal, hogy mindkét fázis folyadék, egyik a diszpergált, másik a folyamatos. *Emulziókat* különböző kritériumok szerint csoportosíthatunk. Például a diszpergált fázis cseppmérete szerint megkülönböztethetünk makro- (0,2–50  $\mu\text{m}$ ), mini- (0,1–0,4  $\mu\text{m}$ ) és mikroemulziót (10–100 nm)<sup>3</sup> (1. ábra) [4]. Valamely emulzió létrehozásánál tekintetbe kell vennünk annak stabilitását a cseppek összefolyásával, koaleszcenciájával és makroszkopikus fázisátválásával szemben (2. ábra). Az *Ostwald-érlelés* az a folyamat, amiben a nagy cseppek a kisebbek rovására nőnek és ez az emulzió instabilitásának főbb okozója. Az *Ostwald-érlelés* hajtóereje a nagy és a kis cseppek kapillaris nyomásának különbsége. Ez a folyamat a diszpergált fázis véges oldhatóságát igényli a folyamatos fázisban úgy, hogy a diffúzió a kis cseppektől a nagy cseppekhez megvalósulhasson. A jelenség addig folytatódhat, amíg egyetlen nagy csepp marad, és a folyamat megáll. A (fent említett) koaleszcencia-folyamatok elkerülésére általában amfifilikus molekulákat, legtöbbször felületaktív ve-



1. ábra. Legfelül a diszpergált fázis dimenziói mikrométerben folyadék/folyadék diszperziók esetében. Alul a tipikus diszperzió megjelenik az emulzióban [4]. Középen stabilizált emulziós olaj-cseppek vízben

gyületeket adnak az emulziókhöz a folyadék határfelületi feszültségének csökkentésére. Ezekkel az ún. tenzidvegyületekkel jelen dolgozatban nem foglalkozunk. Részletes adatok találhatóak róluk a [3] hivatkozásban. Azt, hogy a fázisfelületen adszorbeált apró, szilárd részecskék is stabilizálhatják az emulziókat, a fennálló szakirodalom szerint az angol *Walter Ramsden* (1903) [6] és



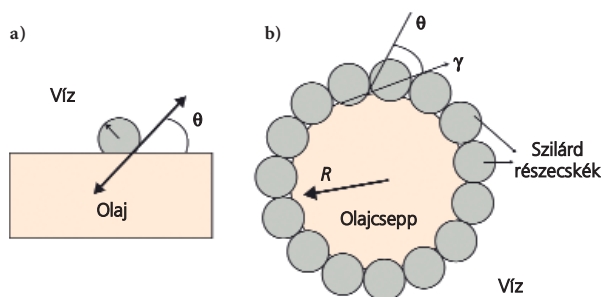
**2. ábra.** Mechanizmusok az emulziók makroszkópos fázisválsához [5]. a) Eredetileg szabadon diszpergált emulziócseppek flokkulálhatnak, azt követően koaleszkálhatnak, és ez folytatódik, amíg két külön fázis nem képződik. b) Az emulziók egyrészt szedimentálódnak vagy krémesednek a diszpergált és folyamatos fázis sűrűségétől függően, majd koaleszkálnak. c) Másik mechanizmus, ami nem igényel koaleszcenciát a fázisválsáshoz, az Ostwald-érelés

a szintén angol *Spencer Umfreville Pickering* (1907) [7] fedezte fel, és ezeket jelenleg Pickering-emulzióknak nevezik. Addig, amíg a Pickering-emulzió elnevezés helyességéről meggyőző bizonyítékot nem találunk, a továbbiakban velük kapcsolatban a *stabilizált emulziók* elnevezést használjuk.

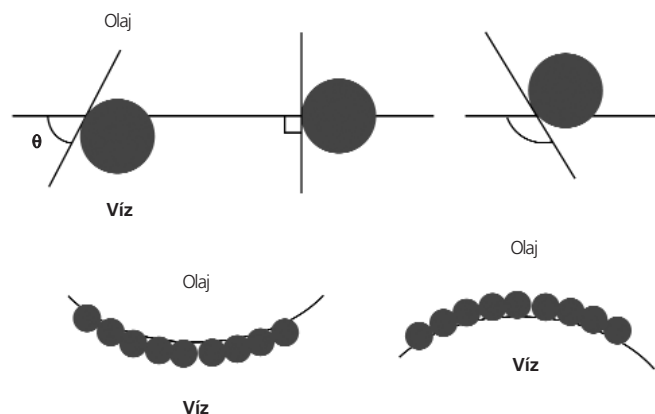
## Emulziók stabilizálása

Stabilizált emulziók előállítására különböző finomra porított szerves és szervetlen részecskéket használnak. Példaként említhetjük a szervetlen szilícium-dioxidot [8], a kalcium-karbonátot [9], az agyagokat [10], az aranyat [11], a szénrészecskéket [12], a szerves latexet [13], az élesztőt [14], a hidrogéleket [15], a kopolimer részecskéket [16], a fehérjéket [17], a baktériumokat [18] és a spórákat [19]. Ezek az utóbbi időben növekvő érdeklődést váltottak ki a koaleszcenciával szembeni jelentős stabilitásuk miatt [20–21]. Stabilizált emulziókat számos iparágban, például a kozmetikai, gyógyszeripari, olajfeldolgozási, kerámiai és élelmiszeripariakban használnak [22]. Az apró szilárd részecskék hatékonysága az emulziók stabilizálására számos tényezőtől függ, ilyen például nedvesedés [23], a részecskék koncentrációja [24], az alak [25] és a szemcseméret [23]. Közülük az emulzió típusát (olaj-vízben vagy

**3. ábra.** a) Szilárd részecske helyzete síkbeli olaj-víz határfelületen  $90^\circ$ -nál kisebb érintkezési szögnél (a vizes fázison keresztül mérve). b) Azonos részecskék megfelelő helyezkedése egy csepp határfelületén szilárd részecske – stabilizált olaj-víz emulziót eredményezve [29]



víz-olajban) meghatározó legfontosabb jellemző a részecskék nedvesedése, amit a szilárd részecske és a folyadék határfelületi érintkezési szöge ( $\theta$ ) [23, 26–27] fejez ki (**3. ábra**) [28]. Azok a szilárd részecskék, amelyek érintkezési szöge  $90^\circ$ -nál kisebb, hidrofílek (kedvezőbben nedvesednek vízzel és hajlanak olaj-víz emulziók stabilizálására), míg a  $90^\circ$ -nál nagyobb érintkezési szögű részecskék hidrofóbak (kedvezőbben nedvesednek olajjal) és víz-olaj emulziók stabilizálására hajlamosak (**4. ábra**) [29]. Ha a ré-



**4. ábra.** Kis gömbölyű hidrofób részecske helyzete olaj-víz határfelületen [30]

szecskéket teljesen nedvesíti az olaj ( $\theta = 180^\circ$ ) vagy a vizes fázis ( $\theta = 0^\circ$ ), azok teljesen diszpergálódnak a másik fázisban [25]. Az optimális érintkezési szög olaj-víz és víz-olaj emulziók stabilizálására  $70^\circ < \theta > 86^\circ$  és  $94^\circ < \theta > 110^\circ$  kell legyen [30].

## Oknyomozás

Az emulziók elnevezésére vonatkozó oknyomozásunkat azzal kezdjük, hogy megkérdőjelezzük a szakirodalomból átvett állítás helyességét, ami szerint Pickering-emulzióknak nevezik a szilárd részecskékkel stabilizált emulziókat. Ugyanis, tudomásunk szerint, a stabilizált emulziókról az angol Ramsden publikált először 1903-ban [6], az angol Pickering hasonló eredményekről beszámolt csak 4 évvel később, 1907-ben jelentetett meg [7]. Ez felveti a felfedezés prioritásának kérdését [31, 32].

## Tudományos elsőbbség

A tudományban az elsőség annak az egyénnek vagy csoportosulásnak jár, aki vagy akik a felfedezést tette vagy tették. A hírnevet és tiszteletet általában az a személy vagy csoport kapja, aki vagy akik új, eredeti megállapítást tettek, és ez érvényes arra az esetre is, amikor különböző kutatók egymástól függetlenül, de egy időben ugyanarra a következtetésre jutnak. Ennek értelmében két vagy több független felfedező közül a törvényes nyerő az, aki először publikált hivatalosan a felfedezésről. Erre a hagyományra gyakran mint *elsőbbségi* vagy *prioritási szabályra* hivatkoznak. Az általunk vizsgált esetben, úgy tűnik, nem kell a fentiek értelmében túl részletes érvelés annak eldöntésére, hogy, mint említettük, „szilárd részecske-stabilizált emulziókról” Walter Ramsden publikált elsőként [6]. A tudományos publikálásban teljesen szokatlan módon Spencer Umfreville Pickering ugyanarról a témáról, mint szintén említettük, csak négy évvel később, 1907-ben publikált. Cikke előszavában a következőket írta: „Ezt a kérdést Ramsden [1903-ban] már vizsgálta, de az ő eredményei, sajnos, nem kerültek jelen szerző figyelmébe addig, amíg az itt



leírtakat nem fejezte be. Azonban nagyon megnyugtató, hogy Ramsden más vizsgálati vonalat követve az emulzifikálás magyarázatára egy olyan megoldáshoz jutott, ami lényegében ugyanaz, mint amit itt megadtunk” [6]. A már fentebb vázolt prioritási kérdést szem előtt tartva enyhén szólva is furcsa és szokatlan ez a kijelentés Pickering részéről. Ugyanis ezek szerint Pickering elismerte, hogy Ramsden évekkel megelőzte őt a stabilizált emulziók felfedezésében.

### Walter Ramsden kutatásainak és alapcikkének rövid összefoglalója

Ramsden a selyemhernyók fehérjéit és a folyadékok felületi jelenségeit vizsgálta. Kollégái a felületkémia területén is briliáns elmének és kiváló kísérletezőnek tartották, de csalódottan állapították meg, hogy kutatási eredményeit ez utóbbiakról nem írta le. Bár elismerten kitűnő vitapartner volt, és szívesen beszélgetett barátai-val munkájáról és ötleteiről, az óvatosság és a vágy a még több tudás elérésére meggátolta eredményei publikálásában.

A cikkben Ramsden összefoglalja számos kísérletét a fehérjeoldatok szabad felületén (levegő-víz) rázással spontán képződött szilárd vagy erősen viszkózus bevonatokról (valószínűleg denaturálódásról) ezeken a határfelületeken és bizonyítja továbbá, hogy hasonló szilárd anyag képződik fehérjét nem tartalmazó kolloid diszperziók felületén is, ezáltal lehetővé téve tartós emulziók képződését. A fentiek szerint Ramsden 1903-ban publikált cikkében elsőként mutatta ki emulziók stabilizálásának lehetőségét szilárd részecskékkel. Többek között részletesen leírta a benzol-víz és a parafin-víz felületén többféle szilárd részecske csatlakozási szögének meghatározását és annak elméleti bizonyítását is.

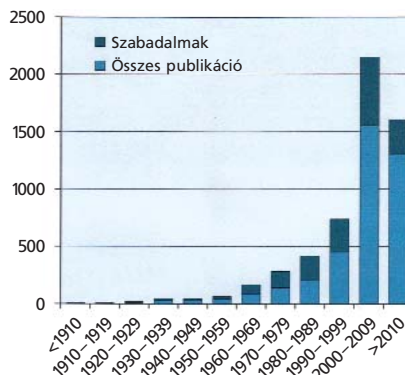
### Percival Spencer Umfreville Pickering kutatásainak és alapcikkének rövid összefoglalója

1905-ben Pickering részletes vizsgálatokat végzett a rovar- és gombairtók területén, különös figyelmet szentelve azok összetételére és használatára. Ez vezetett az emulzifikálás tanulmányozásához, ami során sikerült félszilárd emulziók előállítására 99%-os diszpergált paraffinolajat tartalmazó 1%-os szappanoldatban. Kimutatta, hogy olyan oldhatatlan csapadékok, mint a bázikus vas- és réz-szulfátok helyettesíthetők az általában emulzifikálóként használt szappant, rendkívül stabil emulziókhöz vezetve, amik kitűnően használhatók rovar- és gombairtásra. 1907-ben *Emulsions* című dolgozata kettős céllal készült: hogy olyan emulzifikáló anyagot eredményezzen, amely a szappannál jobb és hogy fényt derítsen az emulzifikálás természetére. Kimutatta, hogy ha réz-szulfát- (egy rovarirtó) és mész- (CaO) részecskék keverékét víz és paraffinolaj emulziójához adják, az emulzió könnyebben képződik és a szappanmolekulákkal stabilizált cseppekkel szemben még kisebb cseppekből áll. A mész hatására a réz-szulfáttal képződött lúgos réz-szulfát-csapadék szilárd emulzifikálóként működött. Az említett emulziót rovarirtóként és gombairtóként használta. Arra is rájött, hogy az nem krémesedett és koaleszcenciát sem mutatott [36].

### Ramsden és Pickering stabilizált emulziókkal kapcsolatos cikkeinek utóhatása

A következőkben arra a kérdésre keresünk választ, hogy említett szerzők stabilizált emulziókkal foglalkozó cikkeinek volt-e hatása szakmai környezetükre, kutatásaikat kortársaik és az utódok

kiegészítették-e vagy továbbfejlesztették-e. Itt meg kell jegyezzük, hogy Ramsden és Pickering életükben más kutatásokkal is foglalkoztak, emulziók stabilizálásáról fejenként csak egyetlen közleményt jelentettek meg. Meglepetésként szolgál a tény, hogy az 1980-as évekig, mint az 5. ábrán látható, a stabilizált emulziók kutatása csaknem 100 éves időszakra nagyjából feledésbe merült, az 1920-as években Ramsden és Pickering nyomán csak néhány dolgozatot publikáltak az emulziók stabilizálásáról. Ilyen például



5. ábra. Pickering-emulziók vagy részecske-stabilizált emulziók kifejezéseket használó cikkek és szabadalmak számának a növekedése [39]

Briggs „Emulsions with finely divided solids” című cikke [37], amiben a részecskék flokkulálását vizsgálta. Nagyon érdekes itt megjegyezni, hogy Briggs, bár Ramsden 1903-beli cikkére is hivatkozik, tévesen említi, hogy Pickering volt az, aki a stabilizált emulziókat felfedezte. Ugyancsak megemlíthető Fincke és munkatársai 1923-ban publikált dolgozata, „The theory of emulsification”, ami a szilárd felületek nedvesedésével foglalkozott. Érdekes, hogy ebben a szerzők, Ramsdent negligálva, csak Pickeringre hivatkoztak [38]. Említésre érdemes még Schulman és Leja 1954-ben publikált „Control of contact angles at the oil-water-solid interfaces. Emulsions stabilized by solid particles (BaSO<sub>4</sub>)” című cikke [26], amiben egyaránt hivatkoznak Ramsdenre és Pickeringre. E néhány cikken kívül az 1903 és 1987 közötti periódusban a stabilizált emulziók kutatása csaknem teljesen szünetelt. A stabilizált emulziók kutatása csak az 1980-as években kapott új erőre, amit megkésett elismerésként (*delayed recognition*) is nevezhetnénk, és az erről publikált cikkek száma exponenciális növekedésben nyilvánult meg. Valamikor ugyanabban az időben kezdtek a stabilizált emulziókat Pickering-emulzióknak nevezni. Nem tudtuk megállapítani, melyik szerző és dolgozat vezette be a Pickering-emulziók elnevezést, de szerzőről szerzőre járt, és az 1990-es évektől az eponimikus Pickering-emulziók elnevezés csaknem általánossá vált.

Az *eponíma* kifejezés a görög *epi* (jelentése: -ról, -ről) és *onyma* (jelentése: név) szavakból származik. Az eponímia az a szokás, hogy a kutató nevét odaillesztik az elnevezéshez vagy annak egy részéhez, például Arrhenius-törvény, Lambert-Beer-törvény, Gay-Lussac-törvény, Le Chatelet-elv, Van der Waals-egyenlet. Szabályként kimondható, hogy a nevet a tudományos felfedezéshez nem a tudománytörténész vagy a felfedező kapcsolja hozzá, hanem a gyakorló kutatók közössége. Az eponimát nemcsak a tudományos érdemek vagy eredetiség alapján ítélik meg, hanem a kutatók közösségének el kell ismernie, hogy az valódi érdemen alapszik, nem pedig személyes barátság, nemzeti hovatartozás vagy tudományos iskolák politikai nyomásának hatására jött létre [40–43].



## Stabilizált emulziók szabadalmaztatása

Mint az emulziók stabilizálásánál említettük, ilyen emulziókat az 1970-es évek óta gyakran használnak a kozmetikai iparban, agrokémiai termékek előállítására, gyógyszeripari termékekben és más iparágakban. Ezen gyártmányok kialakítására és védettségére, mint az **5. ábrán** látható, az emulziók kutatását nemcsak tudományos cikkekben írták le, hanem azok tulajdonjogát szabadalmakban is védték. Ezek száma – a tudományos cikkekhez hasonlóan – az 1970-es évektől kezdődően szintén exponenciálisan növekedett.

## További oknyomozás

Ezek után megkísérelhetjük megválaszolni a „Miért nem Ramsden-emulzióknak nevezik a Pickering-emulziókat?” kérdést.

Mint az előbbiekből világosan kitűnt, prioritási szempontból az 1903-ban publikált cikkben Ramsden elsőként fedezte fel az emulziók szilárd részecskével való stabilizálását.

Az, hogy Pickering csak 4 évvel később, 1907-ben publikált cikket írték a későbbi dolgozatokban, adódhat például abból a tényből is, hogy az említett cikkeket két különböző folyóiratban közölték. Valószínűnek tűnik, hogy a Pickering-cikket publikáló *Journal of the Chemical Society* című angol folyóirat sokkal olvasottabb volt a Ramsden-cikket publikáló *Proceedings of the Royal Society of London*-nál. Ezt a folyóiratot 1832-ben létesítették *Philosophical Transactions* címmel, és 1854-ig működött ezen a néven, amikor *Proceedings of the Royal Society of London* lett belőle. 1905-ben ez utóbbit két külön folyóiratra osztották: a *Proceedings of the Royal Society A* a matematikára és a fizikai tudományokra, a *Proceedings of the Royal Society B* az élettudományokra szakosodott. Megjegyzendő, hogy az eredeti, osztatlan *Proceedings of the Royal Society of London* folyóiratban a Ramsden-cikk a folyóirat kettéválása előtt jelent meg, és ez, véleményünk szerint, dokumentálási zavarokat kelthetett azokban, akik később hivatkoztak volna rá. A fentiek miatt az 1849 óta 1980-ig eredeti címmel folyamatosan megjelenő *Journal of the Chemical Society*-t valószínűleg sokkal többen olvasták. Ennek megfelelően az 1907-ben megjelenő Pickering-cikkhez a szerzők könnyebben hozzáférhettek és idézhették, mint az 1903-ban megjelenő Ramsden-cikket. Valószínűleg érdemes itt megemlíteni Ramsden és Pickering publikálási szokásait és eredményeit. Mint az előbbiekből láthattuk, Ramsden aránylag keveset és nagyon visszafogottan publikált. Ezzel szemben Pickering publikálási termelékenysége szokatlanul nagy volt, teljes publikációs listája 162 cikket tartalmaz [36]. Nagyon valószínűnek látszik, hogy a jelentősebb, nagyobb publikálási tevékenység jelentősen hozzájárulhatott Pickering szélesebb körökben való ismertségéhez az emulziókat kutatók körében.

Érdemes megemlíteni az 1980-ban publikált Stigler-eponímiatörvényt [44–45]. Stigler szellemesen kérdésessé teszi azt a szabályt, amely felfedezéseket a fentebb leírt eponímia [40–43] esetében az azokat megalkotó kutatók nevével kapcsolja össze. A törvény legegyszerűbb alakjában így hangzik: „Egyik tudományos felfedezést sem eredeti felfedezőjéről neveztek el.” Stigler megállapítja, hogy egy tudományos felfedezést számos felfedezője közül néha a legilletéktelebbnek tulajdonították. Matematikai statisztikus lévén, törvénye igazolására saját szakterületéről választott példákat. Állítása szerint: *Laplace* leírta a Fourier-transzformációt, még mielőtt azt *Fourier* közölte volna; *Lagrange* már azelőtt bemutatott transzformálásokat, hogy *Laplace* tudományos pályafutását megkezdte volna; *Poisson* a Cauchy-eloszlást 1824-ben publikálta, 29 évvel azelőtt, hogy *Cauchy* véletlenül felismerte, és *Bienaymé* egy évtizeddel előbb állapította meg és bizonyította be, és pedig nagyobb általánosságban a Csebisev-egyenlőtlenséget, mint ahogy *Csebisev* első munkája megjelent. Stigler számos érdekes példát említ a „törvénye” igazolására, azonban a dolgok helyes megvilágítása érdekében azt is hozzáteszi, hogy „ritkán fordul elő, hogy egy eponímiát olyan valakinek adományoznának, aki semmit sem tett, még érintőlegesen sem, a felfedezés érdekében, és még ritkábban olyannak, aki nem járult volna hozzá fontos kutatómunkával az általános tudományos fejlődéshez”. Hadd említsünk a kémia területéről is néhány, a fentiekhez hasonló Stigler-eponímiát [46]. Az Arrhenius-egyenletet elsőnek a holland vegyész, *J. H. van't Hoff* javasolta 1884-ben, öt évvel később, 1889-ben a svéd *Svante Arrhenius* adta meg fizikai értelmezését. A valódi Avogadro-állandót *Jean Baptiste Perrin* fedezte fel körülbelül 50 évvel *Avogadro* halála után. A Bessemer-eljárás *William Kelly* fedezte fel 1851-ben. A Lambert–Beer-törvény felfedezője *Pierre Bouguer* volt. A *Justus von Liebig* által népszerűsített Liebig-hűtőt *Liebig Göttling*nek tulajdonította, de tulajdonképpen egymástól függetlenül *Poissonnier*, *Weigel* és *Gadolin* alkotta meg.

A kolloidkémiaiban használt Pickering-emulziók eponíma teljes mértékben eleget tesz Stigler eponímiatörvényének, azaz a Ramsden-emulziókat illetéktelenül nevezték el Pickering-emulzióknak.

## Utószó

Oknyomozásunk kimutatta, hogy a stabilizált emulziókat a szakirodalomban Pickeringről nevezték el és Pickering-emulziókként említik őket több ezer cikkben. Ennek okát több ténynek tulajdonítottuk: 1. Ramsden prioritásának el nem ismerése a kortársak és az utókor részéről. 2. A stabilizált emulziókat leíró cikk egy kevésbé elérhető folyóiratban való megjelenése. 3. Ramsden publikálási visszafogottsága Pickering publikálási tevékenységével szemben, ami jelentősen növelhette Pickering közismertségét. 4. A Pickering-emulzió elnevezés eddig a szakirodalomban nem ismert, de új példája Stigler eponímiatörvényének. 5. 1907-ben publikált cikkében Pickering, de a témában dolgozó kutatók sem vették tudomásul, hogy nem ő, hanem Ramsden a stabilizált emulziók valós felfedezője.

Jelen dolgozattal példát szerettünk volna bemutatni a tudományos kutatás és publikálás működési mechanizmusának egy érdekes aspektusára. Természetesen tudatában vagyunk annak, hogy a természettudományok esetében a tudományos kutatások többsége az elfogadott mechanizmus szerint működik. Nyilvánvaló azonban, hogy az itt körbejárt esetben homokszemek kerülhettek az elfogadott mechanizmus fogaskerekei közé. Ez azonban semmiben sem befolyásolja a kolloidkémiaiban elért tudás fejlődését és haladását, ugyanis állíthatnánk, hogy nagyjából teljesen mindegy, hogy a stabilizált emulziók felfedezése kinek a nevéhez kötődik. A stabilizált emulziók léteznek, működnek és számos ipari alkalmazásukon keresztül szolgálják a fejlődést. Merjünk remélni, hogy a leírt kolloidkémiai eponíma történelmi háttérének ismertetése – még akkor is, ha az idők végéig Pickering-emulziók néven maradnak fenn, és teljesen reménytelen, hogy fenti érvek alapján Ramsden-emulziókként említsék őket – hozzájárult a tények még jobb megismeréséhez és ezáltal az ismeretek valós fejlődéséhez, valamint a szokatlan részletek jobb átlátásához is. Azért, hogy a jelen munka „happy end”-del végződjön, jelen szer-



zók áthidaló megoldásként a Ramsden–Pickering-emulzió elnevezést javasolják.



## IRODALOM

- [1] [https://en.wikipedia.org/wiki/Soft\\_mater](https://en.wikipedia.org/wiki/Soft_mater)
- [2] Collins English Dictionary, 2000.
- [3] D. G. Dalgleish, Structures and properties of food emulsions, in: Food emulsions S. J. Frieberg, K. Larsson, J. Sjöblom, Fourth Ed., CRC Press, New York, 2003.
- [4] B. W. Davis, Applications in petroleum industry. Encyclopedia of Emulsion Technology, vol. 3. Ed. P. Becher, Marcel Decker Inc. New York, 1988.
- [5] B. P. Binks, Colloidal particles at liquid interfaces, Phys. Chem. Chem. Phys. (2007) 9, 6285.
- [6] W. Ramsden, Separation of solids in the surface-layers of solutions and suspensions, Proc. Roy. Soc. (1903) 72, 156.
- [7] S. U. Pickering, CXCVI – Emulsions, J. Chem.Soc. (1907) 91, 2001.
- [8] J. Frelichowska, M. A. Bolzinger, Y. Chevalier, Pickering emulsions with bare silica, Colloids Surf., A (2009) 343, 70.
- [9] X. Wang, W. Zhou, J. Cao, W. Liu, S. Zhu, Preparation of core-shell CaCO<sub>3</sub> capsules via Pickering emulsion templates, J. Colloid Interface Sci. (2012) 372, 24.
- [10] N. P. Ashby, B. P. Binks, Emulsions stabilized by Laponite clay particles, Phys. Chem. Chem. Phys. (2000) 2, 5640.
- [11] H. Zhiang, I. Hussain, M. Brust, A. I. Cooper, Emulsion-templated gold beads using gold nanoparticles as building blocks, Adv. Mater. (2004) 16, 627.
- [12] A. Gelot, W. Friesen, H. A. Hamza, Emulsification of oil and water in the presence of finely divided solids and surface-active agents, Colloids Surf. (1984) 12, 271.
- [13] B. P. Binks, S. O. Lumsdon, Pickering emulsions stabilized by monodisperse latex particles: effect of particle size, Langmuir (2001) 17, 4540.
- [14] A. Timgren, M. Rayner, M. Sjöö, P. Dejmek, Starch particles for food based Pickering emulsions, Proc.Food Sci (2011) 1, 95.
- [15] T. Ngai, H. Auweter, S. H. Behrens, Environmentally responsiveness of microgel particles and particle-stabilized emulsions, Macromolecules (2006) 39, 8171.
- [16] A. San Miguel, J. Scrimgeour, J. E. Curtis, S. H. Behrens, Smart colloidosomes with a dissolution trigger, Soft Mater (2010) 6, 3163.
- [17] D. S. Home, Protein-stabilized emulsions, Curr. Opin. Colloid Interface Sci. (1966) 1, 752.
- [18] T. Wongkongkatap, K. Manopwishedjaroen, P. Tiposoth, S. Archakunakorn, T. Pongtharangkul, M. Shuphantharika, K. Honda, I. Hamachi, J. Wongkongkatap, Bacteria interface Pickering emulsions stabilized by self-assembled bacteria-chitosan network, Langmuir (2012) 28, 5729.
- [19] B. P. Binks, J. H. Clint, G. Mackenzie, C. Simcock, C. P. Whitby, Naturally occurring spore particles at planar fluid interfaces and in emulsions, Langmuir (2005) 21, 8161.
- [20] S. Abend, N. Bonnke, U. Gutschner, G. Lagaly, Stabilization of emulsions by heterocoagulation of clay minerals and layered double hydroxides, Colloid Polimer. Sci. (1998) 276.
- [21] E. Dickinson, Stabilizing emulsion-based colloidal structures with mixed food ingredients, J. Sci. Food Agric. (2013) 93, 710.
- [22] R. J. G. Lopetinsky, J. H. Mashliyah, Z. Xu, Solid-stabilized emulsions: a review, Colloidal Particles and Liquid Interfaces, (Ed.) B.P.Binks, T.S.Horozov, Cambridge University Press, Cambridge, 2006.
- [23] B. P. Binks, J. H. K. Clint, Solid wettability from surfaces energy components: relevance to Pickering emulsions, Langmuir (2002) 18, 1270.
- [24] S. Tsuji, H. Kawaguchi, Thermosensitive Pickering emulsion stabilized by poly(N-isopropylacrylamide)-carrying particles, Langmuir (2008) 24, 3300.
- [25] E. Vignati, R. Piazza, Pickering emulsions: interfacial tension, colloid-layer morphology and trapped-particle motion, Langmuir (2003) 19, 6650.
- [26] J. H. Schulman, J. Leja, Control of contact angles at the oil-water-solid interfaces. Emulsions stabilized by solid particles (BaSO<sub>4</sub>), Trans. Farad. Soc. (1954) 50, 598.
- [27] E. Dickinson, Food emulsions and foams: stabilization by particles, Current Opinion Colloids Interface (2010) 15, 40.
- [28] S. Melle, M. Lask, G. G. Fuller, Pickering emulsions with controllable stability, Langmuir (2005) 21, 2138.
- [29] B. P. Binks, Particles as surfactants – similarities and differences, Current Opinion, Colloids Interface Sci. (2002) 7, 21.
- [30] L. Akartuna, A. R. Studart, E. Tervoort, U. T. Gonzenbach, L. J. Gauckler, Stabilization of oil-in-water emulsions by colloidal particles modified with short amphiphiles, Langmuir (2008) 24, 7167.
- [31] [https://en.wikipedia.org/wiki/Scientific\\_priority](https://en.wikipedia.org/wiki/Scientific_priority)
- [32] R. D. Vale, A. A. Hymond, Priority of discovery in the life sciences (2016) 5, 16931.
- [33] W. Ramsden, Appendix I.: Theory of emulsions stabilized by solid particles, in: The theory of emulsions and their technical treatment, Ed. W. Clayton, 2<sup>nd</sup> Ed., Churchill, London, 1928.
- [34] <http://www.sharehistory.org/sanlefar/uploads/9292-professor-walter-ramsdens-1869-1947>
- [35] [https://webmail.iif.hu/?\\_task=mail&\\_action=get&\\_mbox=INBOX&\\_uid=39795&\\_part=2&\\_frame=1&\\_extwin=1](https://webmail.iif.hu/?_task=mail&_action=get&_mbox=INBOX&_uid=39795&_part=2&_frame=1&_extwin=1)
- [36] T. M. Lowry, J. Russell, A. Harden, The scientific work of the late Spencer Pickering, London: Printed for the Royal Society, 1927.
- [37] T. R. Briggs, Emulsions with finely divided solids, J.Ind.Chem. (1921) 13, 1008.
- [38] E. Fincke, A. D. Trapper, J. H. Hillebrand, The theory of emulsification, J. Am. Chem. Soc. (1923) 45, 2780.
- [39] M. Rayner, T. Marku, M. Eriksson, M. Sjöö, P. Deimek, M. Wahlgren, Biomass-based particles for the formulation of Pickering type emulsions in food and topical applications, Colloids and Surfaces A, Physicochemical and engineering aspects, (2014) szeptember 20, 458.
- [40] Braun Tibor, Pálos Andrea, Eponimák és eponímia a természettudományban, Magyar Tudomány (1999) 11, 1350.
- [41] Tibor Braun, Andrea Pálos, The name of the game is frame: eponyms and eponymy in chemistry, New J. Chem. (1999) 14, 5959.
- [42] <https://en.wikipedia.org/wiki/Eponym>
- [43] [https://en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_eponymous\\_laws](https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_eponymous_laws)
- [44] S. M. Stigler, Stigler's Law of Eponymy, Trans. N.Y. Acad. Sci. (1980) 39, 147.
- [45] [https://en.wikipedia.org/wiki/Stigler%27s\\_law\\_of\\_eponymy](https://en.wikipedia.org/wiki/Stigler%27s_law_of_eponymy)
- [46] [https://en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_examples\\_of\\_Stigler%27s\\_law](https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_examples_of_Stigler%27s_law)

# Nyitottan az új tudásra, elméletekre és képességekre

Beszélgetés Onno De Jong professzorral

Második rész

*Az interjúban a svédországi Karlstadi Egyetem Kémiai és Orvosbiológiai Intézetének professzor emeritusát kérdeztük életéről és tapasztalatairól, a kémia és a kémiaoktatás jelenlegi helyzetéről.*

*Mit tapasztalt a természettudományok (különösen a kémia) tanításával kapcsolatban a középiskolában és a tanárképzés terén?*

Kutatásom első fele a diákok nehézségeit vizsgálta a bonyolult témák terén, különösen a mól fogalmánál és a sztöchiometrikus számolásoknál [11].

Kutatásom második fele a kémiatanár-jelöltekre koncentrált, különösen a tanárjelölteknek a pedagógiai tartalmakról szerzett tudására. Néhány példa: a) tanárjelöltek pedagógiai tartalmakról szerzett tudása (reakcióhő [12], égés [13]); b) a tapasztalt tanár pedagógiai tartalmakról szerzett tudása (kémiai egyensúly [14], redoxireakciók [15]).



A kutatásom harmadik része a kémiantanár-képzésre fókuszált, azon belül is a tanárjelöltek pedagógiai tartalmakról szerzett tudásának fejlődésére. Néhány példa: a) a tanárjelöltek pedagógiai tartalmakról szerzett tudásának fejlesztése (a kémiai fogalmak sokrétű jelentése [16], részecskemodellek [17]); b) a tapasztalt tanárok pedagógiai tartalmakról szerzett tudásának fejlesztése (vízminőség nyílt, problémaalapú oktatása [2], a pelenkák tulajdonságainak kapcsolata a polimer hálózat struktúrájával [4], arányossági problémák megoldása [18], elektrokémiai cellák [19]).

*Előadásokat és workshopokat tartott tanároknak Ausztráliában, Dél-Afrikában, Tajvanon, Spanyolországban, Malajziában és Argentínában is. Mesélne az ott szerzett tapasztalatairól?*

Egyetemi tartózkodásom ideje alatt, ami 2 és 8 hét között változott, a kémia/természettudományi tanárképzés kutatóintézteiben dolgoztam; ahogy említették, előadásokat és workshopokat tartottam tanároknak és munkatársaiknak. Emellett Malajziában a vendéglátómmal, Lilia Halimmal együtt részt vettem egy nemzetközi konferencia megszervezésében, amely a tanárok pedagógiai tartalmakról szerzett tudására fókuszált. Az előadásokat később kiadtuk [20]. A munkám másik része néhány MD- és PhD-hallgató irányítása volt. Több országban felkereshettem középiskolákat is, ahol kémiaórákat látogattam meg. Ausztráliában ezeket a látogatásokat Allan Harrison, a vendéglátóm készítette elő, témájuk általános kutatóprojekt volt (modellek használata a kémiai egyensúly tanítása terén; a tanárok pedagógiai tartalmakról szerzett tudásának megfigyelése) [21].

Ezeknek a kapcsolatoknak és tevékenységeknek köszönhetően rájöttem, hogy az iskolai tanulás és tanítás kultúráját erősen befolyásolja az adott ország szociokulturális közege és történelme. Ez akkor vált világossá, amikor összehasonlítottam a két ázsiai országban és a négy nyugati országban szerzett tapasztalataimat. A tanításnak és a tanulásnak Tajvanon és Malajziában erős gyökerei vannak a konfucianus kultúrában. Ez az örökség hangsúlyozza a harmónia fontosságát, fenntartja a hierarchikus távolságot az oktatásban, és alacsony szinten tartja az individualizmust, emellett megtanítja, hogy elsődlegesen a társadalmi fejlődéshez kell hozzájárulni. Az egyének, mint a tanár és a diák, fontos részét képezik egy kollektivistá társadalomnak. Ezzel ellentétben Ausztráliában, Dél-Afrikában, Spanyolországban és Argentínában a tanítás és tanulás a zsidó-keresztény kultúrában gyökerezik. Itt az egyéni kiteljesedés az elsődleges vezérlőerő a tanításban és a tanulásban.

Összehasonlítva úgy tűnik, hogy általánosságban az ázsiai kémiantanárok erősebb hierarchiát tartanak fenn az osztályteremben, amiben a tanár a felsőbbrendű és a tudás továbbadója. Általában nem részesítik előnyben a vitás szocio-kémiai/természettudományi témák tanítását a konfucianus kulturális gyökerek miatt, amelyek hangsúlyozzák a harmóniát és a konfliktusok kerülését a párbeszédokban. De úgy látom, hogy ezek a különbségek a kémiantanítás és -tanulás terén lépésről lépésre csökkennek. Mindkét ázsiai országban növekvő érdeklődés mutatkozik olyan tanítás iránt, amely lehetőségeket biztosít a diákok számára, hogy felelősséget vállaljanak a saját tanulmányi folyamatukért. A négy nyugati országban pedig növekvő érdeklődés mutatkozik a csoportban tanulás és a konszenzusra törekedés iránt, amikor szocio-kémiai problémákat vitatnak meg.

*Mit gondol a jelenlegi kémiaoktatásról?*

A változó világ kihívásaira válaszul a jelenlegi kémiaoktatás új ötletek és gyakorlatok széles skáláját fejleszti ki a tanítás és a tanulás számára. A következő trendeket tartom fontosnak a jelenlegi kémiaoktatásban:

*Nyílt problémaalapú oktatás és tanulás.* Ennek a bevezetése lehetőséget nyújt a kémiát tanulók számára az aktív tanulásra: pont annyira együttműködő, amennyire önvezérelt. Ezzel a megközelítéssel a diákokat támogatjuk, hogy értékes tudást és olyan képességeket sajátítsanak el, amelyek szükségesek jövőbeli munkájukhoz és továbbtanulásukhoz.

*Kontextusalapú oktatás és tanulás.* Ennek a gyakorlatnak az alkalmazása új, iskolán kívüli problémákat hoz be az osztályterembe, hogy a tanulók kritikus gondolkodását fejleszthessük. Ezek különböző területekről érkezhetnek: személyes, társadalmi és a kémikus szakmai gyakorlatából. A kontextusok kapcsolódhatnak a kémia központi koncepciójához. Kutatásunk, melynek során azt vizsgáltuk, hogy az oktatók mennyire tartják ezt fontosnak, azt találta, hogy az oktatók előnyben részesítik a kémia elvi nagy ötleteit, amelyben hangsúlyozzák a kémiai azonosságot és a szerkezet-tulajdonság kapcsolati megközelítést. Az oktatók



a következő okokat adták arra, hogy miért részesítik ezt előnyben: i) felkészít a későbbi kémiai megközelítések megértésére, ii) úgy tekint a kémiára, mint a természetes világ vizsgálatának egy különös módjára. A másik oldalról viszont a megkérdézett diákok érdeklődése is a személyes/kémiai tartományba esik, a mindennapi személyes ügyeket hangsúlyozva. A diákok sokkal jobban érdeklődnek a környezetfüggő nagy ötletek, mint az alapfogalmak iránt [22].

*Az IKT használata.* Ezeket az eszközöket azért fejlesztik és terjesztik, hogy támogassák és naprakésszé tegyék a jelenlegi kémiaoktatási gyakorlatot. Ezen eszközök használatával a diákok megtanulnak megbirkózni a (napi) információmennyiség okozta túlterheltséggel.

Véleményem szerint ez a három trend nagyon fontos dolgokkal járul hozzá ahhoz, hogy a kémiaoktatás relevánsabb legyen a diákok, a tanárok és a társadalom számára. Ez a fejlődés csak akkor lesz eredményes, ha a kémiantanárok jól felkészültek. Ezért úgy gondolom, hogy ezt a három trendet ki kell egészíteni a következőkkel:

a) Integrált, tanárjelöltek számára szóló kurzusok, amelyek erősítik a kapcsolatot a tanári kurzusok elméleti anyaga és a tantermi tanítási gyakorlat között.

b) Tanáralapú tantervfejlesztési projektek elindítása, hogy a tapasztalt tanárok elegendő tudást és képességet sajátítsanak el az új tanítási megközelítések beépítéséhez. A közelmúltból a fejlesztő projektek kategóriájára több példa is volt [23]. Az egyik nemzeti tantervi reformprojekttel, a moduláris kontextusalapú kémiaoktatással foglalkozik, amit Hollandiában próbáltak ki. A projekt fő jellemzője a „fejfel lefelé” megközelítés az „új kémia” tanterv tervezésénél. A kémiantanárokat mindegyik fázisba bevonták: a jelenlegi problémák elemzésébe, a megújulás körvonalainak megtervezésébe, a kontextusalapú modulok megtervezé-



sébe és a tanterv kísérleti verziójának tesztelésébe. Néhány moduláris tanulási útvonalat úgy terveztek meg, hogy példaeszközként szolgáljanak a tanárok számára. A moduláris kontextusalapú oktatással kapcsolatban a megkérdezett fejlesztő tanárok körülbelül fele, míg a kísérleti tanárok harmada alakított ki pozitív véleményt. Mindazonáltal negatív véleményt a tanároknak csak kisebb hányada fejezett ki.

*Ön nyolc természettudományi tankönyvnek a társszerzője. Mit gondol a modern természettudomány/kémia tankönyvekről?*

Három kategóriát szeretnék megkülönböztetni a kémiatan-könyvek terén.

1. *Elsődlegesen a kémiatanár-jelöltek számára készült.* Erre példa egy új, kémiaoktatásról szóló tanulmánykötet [24]. Ron Blonderrel és John Oversbyvel közösen írtam egy fejezetet, melynek címe: „Hogyan egyensúlyozzuk a kémiaoktatást a jelenségek megfigyelése és a modellekben gondolkodás között?” Újabb példa a kémiaoktatás relevanciájával foglalkozó tankönyv [25]. Vincente Talanquerrel közösen írtam egy fejezetet, melynek címe: „Miért releváns, hogy megtanuljunk a kémia nagy ötleteit az iskolában?”

2. *Elsődlegesen a kémiatanár-képzésben oktatók számára készült.* Példa erre egy közelmúltban megjelent tankönyv, amely a legjobb gyakorlatokról, a lehetőségekről és a trendekről szól [26]. Írtam benne egy fejezetet egy korábbi diákkal, Van Driellel: „Kémiatanárok tanulásának segítése: Gyakorlat és új kihívások”. Egy másik érdekes tankönyv a kutatásalapú kémiaoktatási gyakorlatokra koncentrál [27].



3. *Elsődlegesen releváns a kémiaoktatás kutatása szempontjából.* Erre példa, szintén a közelmúltból, az a kézikönyv, amely a természettudomány oktatás kutatásával foglalkozik [28]. Keith Taberrel közösen írtunk egy fejezetet, aminek a címe: „A középiskolai kémiaoktatás sok arca”.

Nézőpontom szerint fontos, hogy egyre több tankönyv tűzi ki célul, hogy hozzájáruljon a szakadék áthidalásához:

- a kémiaoktatási kutatások és a kémia oktatása,
- a kémiaoktatási kutatások és a kémiatanárok képzése és
- a kémiatanárok képzési kurzusai (elméleti) és a kémia tantermi tanítása (gyakorlati) között.

*Mondana pár dolgot az Európai Tanárképzési Egyesületben (ATEE – Association for Teacher Education in Europe) és az Európai Kémiai Társaságok Szövetségében (FECS – Federation of European Chemical Societies) vállalt szerepéről?*

Az Európai Tanárképzési Egyesületben alelnöke (1994–1998) és elnöke voltam (1998–2002) a természettudományi és matematikatanárok képzéséért felelős divízióknak. Ennek a divízióknak a tagjai tanárképzési oktatók és kutatók voltak. Az 1980-ban létrehozott divízió célja az volt, hogy emelje a természettudomá-

nyos és a matematika tanárképzés színvonalát Európában. A divízió gyűléseket szervezett az éves ATEE-konferenciákon. Minden évben a divízió körülbelül 20 tagja mutatta be és vitatta meg (kutatási) tapasztalatait. A főbb témák, melyek érdeklődésre tartottak számot: konstruktivista megközelítések kifejlesztése a természettudomány és a matematika oktatása és tanulása terén, valamint a tanárok és tanárjelöltek pedagógiai tartalmi tudása. Több sikeres együttműködés jött létre ezen témák mentén.

Fred Brinkmannel együtt alelnökként részt vettünk a divízióban. Mint meghívott szerkesztők, felelősek voltunk a Tanárképzés Európai Folyóirata (European Journal of Teacher Education) három speciális számának a megjelenéséért az 1990-es években [29]–[31].

Az Európai Kémiai Társaságok Szövetségében a Kémia Oktatási Divízió alelnöke voltam (1997–2000). A divízió tagjait Európa 25 kémiai társasága delegálta. Az 1980-as években alapított divízió célja az volt, hogy támogassa a kutatást és fejlesztést a kémiaoktatás terén. Az évente megszervezett találkozókön jelentést tettünk és megvitattuk a nemzeti kémia tantervek innovációit. A divízió részt vett egy folyamatos európai konferenciasorozat felállításában és felügyeletében, mely a kutatással foglalkozott (ECRICE-konferenciák, az első 1991-ben), amit az oktatással foglalkozó konferenciák követtek (ECCE-konferenciák, az első 1998-ban).

Divíziótagként én adtam ki először olyan állásfoglalást, melyben a kémiaoktatási kutatások mellett foglaltam állást [32]. Többek mellett én is aktív vendégszerkesztője voltam a természettudományos oktatás nemzetközi folyóirata (International Journal of Science Education) speciális számának, beleértve egy cikket, mely bemutatja a jelenlegi kémiaoktatási kutatások gyakorlatát [33].

*Hogy látja a témához kapcsolódó pedagógiai kutatások helyzetét és jövőjét?*

A kémiaoktatás kutatásának helyzetét alaposan átgondolt tudományágnak tekinthetjük. Véleményem szerint ez a helyzet tükröződik a jelenlegi kutatási célokban, amelyek két oldalról is megközelíthetők. Az elméleti megközelítés oldaláról a cél, hogy jobban megértsük a tanulási és tanítási folyamatokat és kimeneteket, figyelembe véve a kémia sajátosságait. A gyakorlati megközelítés oldaláról, hogy útmutatókat fejlesszünk ki középiskolai és főiskolai kurzusoknak és olyan tanári felkészítő kurzusok számára a kémiaoktatásban, amelyek kutatásokon alapulnak.

Ami a közeljövőt illeti, azt várom, hogy a kémiaoktatási kutatások egyre fontosabbak lesznek a kémiatanár-képzési innovációk tekintetében. Jól ismert tény, hogy sok innovációnak az értéke és a hosszú távú hatása nem mindig tiszta. Az oktatási kutatásoknak fontos szerepük van a helyzet megváltoztatásában. Hasznos kutatási stratégiát ír le a tervezési kutatás. Az új oktatási keretekben és innovatív programokban kidolgozott innovatív ötletek hasznosságának és következményeinek felkutatására koncentrál. A kereteket és programokat több fejlődési és kutatási cikluson keresztül optimalizálják egy ismétlődő folyamattal, melynek elemei a megvalósítás, tesztelés, átnézés és újratesztelés. Ebben az értelemben a kémiaoktatás kutatói közreműködő partnerei lesznek a többi gyakorlónak. Ez komoly fejlődés lesz a kémiatanár-képzés tanulói közösségeiben.

*Mit gondol a kutatás és a mindennapi gyakorlat kapcsolatáról?*

Jól ismert, hogy a kémiaoktatási kutatások és a kémiatanítási gyakorlat kapcsolata problematikus, mind középiskolai, mind egyetemi szinten. Például a kutatók rámutattak, hogy mennyire



nem hatékony az igyekezetük, míg a kémiatanárok azt mondják, hogy a tanításuk számára releváns kutatások hiányoznak. Ezért egy komoly kutatási-gyakorlati szakadék van. Ezzel a szakadékkal kapcsolatban szeretnék rámutatni az alábbi négy magyarázatra.

1. A „*túl kell élni*” faktor. A tanárok nem tudnak elég időt szánni kutatási cikkek olvasására, mert már így is túl elfoglaltak fő tevékenységükkel, ami a tantermi oktatás. A kutatóknak is túl kell élni, ami azt jelenti, hogy magas rangú újságokban publikálnak, amit csak néhány tanár olvas.

2. A „*kölcsönös elvárás*” faktor. A tanárok talán arra hajlanak, hogy a kutatóknak kell őket ellátni végső megoldásokkal a tanítási nehézségeikre. A kutatók pedig hajlanak arra, hogy a tanárok megértik a cikkeiket, és a kutatási kimeneteket át tudják alakítani hasznos ötletké a tanításban.



3. „*Az innovációs stratégia*” faktor. Egészen a közelmúltig sok kémia tantervi innovációs projekt felülről lefelé szerveződő megközelítést alkalmazott. Ebben a nézetben a tanár szerepe csak az új programok végrehajtása. Ennek eredményeképpen éles válaszvonal alakult ki a tanárok és a kutatók között. Ez nem járul hozzá, hogy a tanárok és a kutatók közötti rést áthidaljuk.

4. A „*kutatóparadigma*” faktor. Az elmúlt évtizedekben a kémiakutatási kutatásra erősen hatottak a szabad tartalom teóriák a tanítás és tanulás terén. Ezzel ellentétben a kémiatanárok tartalomalapú nehézségekkel találkoztak a tanításban és a tanulásban. Ez az ellentmondás hozzájárul a kutatók és tanárok közötti szakadék meglétéhez.

Véleményem szerint három kihívást jelentő módon lehet kialakítani szorosabb kapcsolatokat a kutatás és az oktatás között. Először is *fejleszteni kell a kommunikációt* a kutatók és a tanárok között, például ingyenes weblapok használatával, mint az elektronikus CERP újság RSC-oldala. Másodszor *a lentről felfelé szerveződő megközelítést kell használni* a kémia tantervi innovációs projekteknél. Ez a megközelítés arra fókuszál, hogy az osztálytermi gyakorlatban hasznos oktatási anyagokat együtt fejlesztse az elméletekkel, mert ezek a gyakorlatban lettek kifejlesztve. Harmadszor *létre kell hozni kutatói, tantervfejlesztői, tanári és tanárképzési közösségeket* a fejlesztések és az új tapasztalatok, készségek és tudás kicserélése érdekében.

*Mik a jövőbeli tervei?*

Már visszavonultam. Az utolsó cikkem a természettudomány/kémia területén 2016-ban jelent meg, a címe: „Gondolatok a természettudományi tantervi reformokról és tanárképzésről a nyugati országokban és Tajvanon” [34].

Azt tervezem, hogy felnőtteknek tartok előadásokat klubokban és közösségekben. Ezek az előadások a témák széles skáláját lefedik: ilyenek lehetnek például az igazság fogalmának a filozófia jelentései a természettudományok területén vagy a memóriafunkció emelkedésének és süllyedésének neuropszichológiai aspektusai.

**Kapitány János Sándor – Tóth Zoltán**

#### TRODALOM

- [11] De Jong, O., Aufgaben zum Stöchiometrischen Rechnen: Mittel oder Ziel? In: N. Just & H.-J. Schmidt (Eds.). Grundlinien Deutscher Chemiedidaktik, Westarp Wissenschaften, Magdeburg, 1992, 84. o.
- [12] De Jong, O., How to teach the concept of heat of reaction: a study of prospective teachers' initial ideas. Chemistry Education: Research and Practice in Europe (2000) 1, 91. www.uoi.gr/serp.
- [13] De Jong, O., Ahtee, M., Goodwin, M., V. Koulaides, V., Hatzikitina, V., An international study of prospective teachers' initial teaching conceptions and concerns: the case of teaching "combustion", European Journal of Teacher Education (1999) 22, 45.
- [14] Harrison, A., De Jong, O., Exploring the use of multiple analogical models when teaching and learning chemical equilibrium. Journal of Research in Science Teaching (2005) 42, 1135.
- [15] De Jong, O., Acampo, J., & Verdonk, A. H., Problems in teaching the topic of redox reactions: actions and conceptions of chemistry teachers. Journal of Research in Science Teaching (1995) 32, 1097.
- [16] Van Driel, J., De Jong, O., The development of preservice chemistry teachers' pedagogical content knowledge. Science Education (2002) 86, 572.
- [17] De Jong, O., Van Driel, J., Verloop, N., Preservice teachers' pedagogical content knowledge of using particle models when teaching chemistry. Journal of Research in Science Teaching, (2005) 42, 947.
- [18] De Jong, O., Learning experiences of teachers and students: solving proportion problems in science education. In: J. T. Voorbach (Ed.). Teacher Education 11, Research and Developments on Teacher Education in the Netherlands, Academisch Boeken Centrum, De Lier, 1995, 89. o.
- [19] Nakiboglu, C., Karakoc, O., De Jong, O., Examining pre-service chemistry teachers pedagogical content knowledge: influences of teacher course and practice school. Journal of Science Education (2010) 11, 76.
- [20] De Jong, O., Halim, L. (Eds.), Teachers' Professional Knowledge in Science and Mathematics Education: Views from Malaysia and Abroad, National University of Malaysia Press, Bangi, Selangor, 2009
- [21] Harrison, A., De Jong, O., Using multiple analogies: case study of a chemistry teacher's preparations, presentations and reflections. In: K. Boersma, M. Goedhart, O. De Jong, H. Eijkelhof (Eds.). Research and the Quality of Science Education, Springer Publishers, Dordrecht, 2005, 353. o.
- [22] De Jong, O., Talanquer, V., Why is it relevant to learn the big ideas in chemistry at school? In: I. Eilks, A. Hofstein (Eds.). Relevant Chemistry Education: From Theory to Practice, Sense Publishers, Rotterdam, 2015, 11. o.
- [23] De Jong, O., Chemistry teachers as stakeholders of a national context-based curriculum reform project. LUMAT: Research and Practice in Math, Science and Technology Education (2015) 3, 258. www.luma.fi/lumat-en/3863.
- [24] Eilks, I., Hofstein, A. (Eds.), Teaching Chemistry – A Studybook: A Practical Guide and Textbook for Student Teachers, Teacher Trainees and Teachers.: Sense Publishers, Rotterdam/Taipei, 2013.
- [25] Eilks, I., Hofstein, A. (Eds.), Relevant Chemistry Education: From Theory to Practice. Sense Publishers, Rotterdam/Taipei, 2015.
- [26] García-Martínez, J., Serrano-Torregrosa, E. (Eds.), Chemistry Education: Best Practices, Opportunities and Trends. Wiley-VCH Verlag, Weinheim (Germany), 2015.
- [27] Gilbert, J., De Jong, O., Justi, R., Treagust, D., & Van Driel, J. (Eds.), Chemical Education: Towards Research-based Practice. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht/Boston, 2002.
- [28] Lederman, N., Abell, S. (Eds.), Handbook of Research on Science Education: Volume II. Routledge, New York, 2014.
- [29] Brinkman, F., De Jong, O., Science and mathematics teacher education: some themes of general interest. European Journal of Teacher Education (1996) 19, 103.
- [30] De Jong, O., Brinkman, F., Teacher thinking and conceptual change in science and mathematics education. European Journal of Teacher Education (1997) 20, 121.
- [31] De Jong, O., Brinkman, F., Investigating student teachers' conceptions of how to teach: international network studies from science and mathematics education, European Journal of Teacher Education (1999) 22, 5.
- [32] De Jong, O., Schmidt, H.-J., Burger, N., Eybe, H., Empirical research into chemical education, University Chemistry Education (1999) 3, 28.
- [33] De Jong, O., Schmidt, H.-J., Zoller, U., Chemical education research in Europe. International Journal of Science Education (1998) 20, 253.
- [34] De Jong, O., Thoughts on science curriculum reform and teacher learning in Western countries and Taiwan. In: M.-H. Chiu (Ed.). Science Education Research and Practices in Taiwan: Challenges and Opportunities Springer, Singapore, 2016, 387.



TÚL A KÉMIAŊ

## Csillagszemű tengeri csillag



Az *Ophiocoma wendtii* rendszer-tani nevű, testének színét változtatni képes tengeri csillag a látáskutatásban eddig is nagyon fontos szerepet töltött be, mert azt gyanították róla, hogy a teljes testfelszíne érzékeny a fényre és részt is vesz a látásban a krisztályokból képződő mikrolencsék révén. Egy új tanulmányban sikerült jelentősen finomítani a korábban kialakított képet. Nagy felbontású mikroszkópiával és szinkrotrantomográfiával egyértelműen bebizonyították, hogy a tengeri csillag testfelszínének nagy részén valóban találhatók fotoreceptorok, azonban ezek éppen az azonosítható lencsék környezetében hiányoznak. Így aztán a „bőr” fényérzékeny ugyan, de fókuszlás híján a látásban nem tölthet be számottevő szerepet. Valószínűsíthető, hogy ez a jelenség az *Ophiocoma* fajok jelentős részében is tapasztalható.

*Proc. Roy. Soc. B* 285, 20172590 (2018).

## CENTENÁRIUM



Oskar Baudisch: Zur Kenntnis der Amin-oxyde  
*Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft*, Vol. 51, pp 1048–1058 (1918. január–június)

Oskar Baudisch (1881–1950) osztrák kémikus volt, aki pályafutása során sokfelé dolgozott a világban. A mai Csehország területén született, egyetemi tanulmányait Svájcban végezte. Dolgozott Angliában és Németországban is, az első világháborúban a Monarchia hadseregében szolgált. 1920-ban az Amerikai Egyesült Államokba költözött, itt fedezte fel a később róla Baudisch-reakciónak elnevezett folyamatot, amelyben réz(II)katalizátor jelenlétében vízben oldott hidroxilamin-hidroklorid reagenssel benzolból vagy fenolból o-nitrozo-fenolokat lehet előállítani.

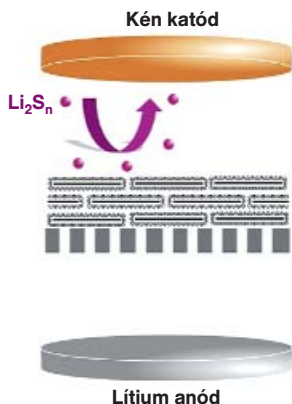
## Szuperhatékony lítium-kén elemek

A lítiumelemek hatékonyabbá tételéhez jelenleg a katód anyaga a kulcskérdés. A fém-oxid katódok megbízhatóak, de nagy a moláris tömegük, így ezen az elven csak viszonylag nehéz elemek készíthetőek. Ilyen szempontból az elemi kén sokkal jobb katódanyag lenne, de ez szigetelő, így elektromosan vezető grafit hordozóra kell felvinni, amely újabb problémák for-

rása: a szén többlettömeget jelent, elektrolitból is többre van szükség, valamint poliszulfidok képződése is csökkenti a hatékonyságot. A közelmúltban több téren is sikerült jelentős haladást elérni. Egy amerikai kutatócsoport megmutatta, hogy a szükséges szén és elektrolit mennyisége megfelelően előkészített grafit alkalmazásával akár egyötödére csökkenthető.

Egy kínai csoport pedig ultravékony, nitrogénnel dópolt szénrészecskéket tartalmazó polipropilént felhasználva elválasztó réteget fejlesztett ki, amelyben a képződő poliszulfidok szulfidokká alakulnak vissza. A két újítás kombinálásával a lítium-kén elemek hatékonysága valószínűleg jelentősen meg fogja haladni a mai kereskedelmi gyakorlatban kapható legjobb lítiumelemekét is.

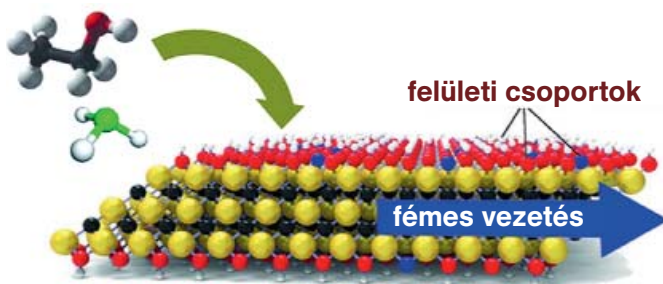
*ACS Energy Lett.* 3, 72. (2018)  
*Joule* 2, 323. (2018)



## Gázérzékelés MX-énekkal

Az anyagtudományban 2011-től az MX-éne csoportjába egyetlen vegyületek, főként karbidok és nitridek néhány atomréteg vastagságú, lényegében kétdimenziós szerkezetű formáit sorolják. Sok érdekes tulajdonsága van ennek az anyagcsaládnak: például a  $Ti_3C_2$  összetételű 3:2 MX-éneből sikerült olyan gázérzékelőt előállítani, amely akár ppb koncentrációnál is működőképes, s mind kimutatási határ, mind jel/zaj arány tekintetében kivételesnek bizonyult. A tesztelést elsősorban az emberi leheletben fontos indikátorszerepet játszó anyagok, pl. aceton, ammónia, etanol és propanal gőzével végezték el.

*ACS Nano* 12, 986. (2018)



## APRÓSÁG

A KRUSTY (Kilopower Reactor Using Stirling Technology) atomreaktor az amerikai űrkutatási ügynökség (NASA) fejleszteti jelenleg az űrkutatásban való felhasználásra.



Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: [lenteg1206@gmail.com](mailto:lenteg1206@gmail.com).

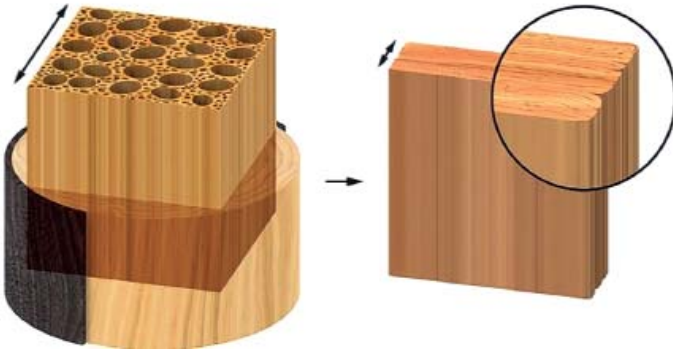
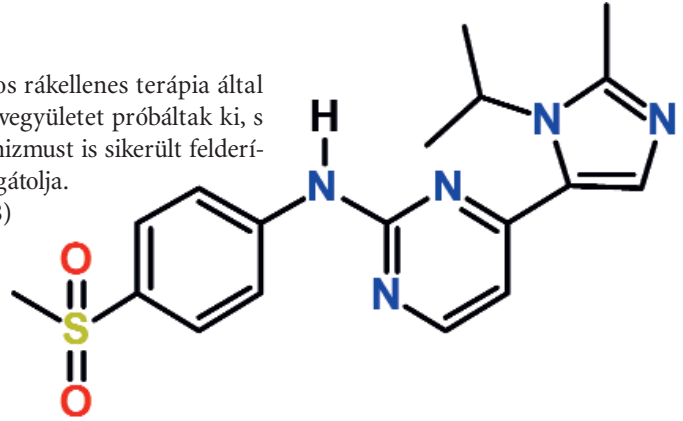
A rovatszerkesztő korábbi írásait is tartalmazó blog elérhető a következő internet-oldalon: [http://lenteg.ttk.pte.hu/ScienceBits/index\\_magyar.html](http://lenteg.ttk.pte.hu/ScienceBits/index_magyar.html)



## A HÓNAP MOLEKULÁJA

Az AZD5438 azonosító jelű molekulát ( $C_{18}H_{21}N_5O_2S$ ) a cisz-platinos rákellenes terápia által okozott halláscsökkenés kezelésére fejlesztették ki. Mintegy 4000 vegyületet próbáltak ki, s az ábrán bemutatott bizonyult a leghatásosabbnak. A hatásmechanizmust is sikerült felderíteni: a molekula a 2-es számú ciklinfüggő kináz enzimet (CDK-2) gátolja.

*J. Exp. Med.* 215, 1187. (2018)



## Acélnál keményebb fa

Egy új, kémiai és mechanikai módszereket kombináló eljárással fából olyan szerkezeti anyagot lehet előállítani, amelynek keménysége az acélét is meghaladhatja, sűrűsége viszont lényegesen kisebb (kb. egyötöde). A módszernél először nátrium-hidroxidot és nátrium-szulfidot tartalmazó oldatban kezelik a faanyagot 100 °C-on, majd ugyanezen a hőmérsékleten a növekedési irányra merőlegesen préselik azt. Így az eredetileg pórusos szerkezetet gyakorlatilag teljesen össze lehet tömöríteni. A kémiai kezelés a faanyagban a cellulózt majdnem változatlanul hagyja, viszont a hemicellulóznak mintegy háromnegyedét, a ligninnek pedig felét eltávolítja. A megfigyelések szerint ez utóbbi játssza a kulcsszerepet a mechanikai tulajdonságok javulásában. A felfedezés kereskedelmi hasznosítása is megindult már; az így előállított terméket az Inventwood nevű cég forgalmazza majd.

*Nature* 554, 224. (2018)

## Átlátszó magyarázat

Habár az üveges anyagokat nagyon régóta használja már az emberiség, az üvegesedési folyamat tudományos megértése mind a mai napig jelentős kihívás. Egy új tanulmányban három különböző rendszerben neutronszórási és dielektromos tulajdonságokat mértek, így összesen tizennégy nagyságrendnyi időtartományt fogtak át a dinamikai mérésekkel. Nyomás-hőmérséklet fázisdiagramon ábrázolva a tulajdonságokat széles tartományban azonos viselkedést mutató vonalakat sikerült azonosítani, így a viselkedést

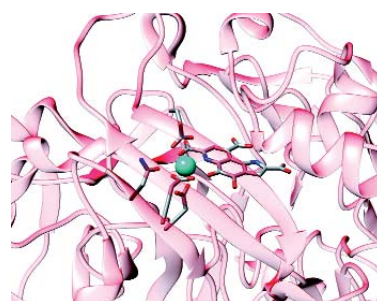
lényegében egydimenziósként leírni. Tehát az eddig bonyolultnak vélt üvegesedési folyamatot a vártnál kevesebb változóval is le lehet írni.

*Nat. Commun.* 9, 518. (2018)

## Új méregcsalád

Az ékes ősdarázs (*Ampulex compressa*) eddig elsősorban különleges szaporodási módjáról volt nevezetes: lárvái élő csótányokban kelnek ki. A csótányok együttműködő-készségét a darázs egy méreganyaggal fokozza, amelynek tömegspektrometriás analízise során egy korábban még nem ismert, a felfedezés után ampulexineknek elnevezett peptidcsaládot sikerült kimutatni. Ezen anyagok érdekessége, hogy sem antimikrobiális, sem citosztatikus hatásuk nincsen, viszont a vele kezelt csótányok idegrendszere érzéketlenné vált az áramütésekkel szemben.

*Biochemistry* 57, 1907. (2018)



## Ritkaföldfém-enzim

Tíz éve olasz tudósok vulkanikus területeken fedezték fel a *Methyldiphilum fumariolicum* baktériumfajt, amelynek igen bizarr tulajdonsága, hogy

csak lantanida elemek jelenlétében életképes. Röntgenkristallográfiai vizsgálatok azt mutatták, hogy a metil-alkoholból formaldehid képződését katalizáló metanol dehidrogenáz enzim (MDH) az, amely ebben a fajban a ritkaföldfémeket tartalmazza. Az MDH kulcsszerepet játszik a metán metabolizmusában. A közelmúltban sikerült az enzim funkcionális modelljét előállítani: a gyanított aktív centrumhoz hasonló szerkezeti részleteket tartalmazó, az eredetinel jóval kisebb, de még mindig nagy molekula a lantanidákat jobban kötötte a kalciumnál, a kötőhely pedig éppen olyan geometriájú, mint az enzimben. A fémkomplex jelentős alkohol-dehidrogénező aktivitást mutatott, amelyet benzil-alkohollal teszteltek.

*J. Am. Chem. Soc.* 140, 1223. (2018)



## OKTATÁS

Az ötvenedik Irinyi János  
Középiskolai Kémiaverseny döntője

2018. április 13–15.

Ebben az ötéves versenyciklusban az utolsó alkalommal adott helyet a Szegedi Tudományegyetem az egyetem Kémiai Intézete és a Magyar Kémikusok Egyesülete Kémia tanári Szakosztálya által közösen szervezett Irinyi János Országos Középiskolai Kémiaverseny döntőjének.

A megnyitót április 13-án tartották az orvoskar Dóm téri épületében található nagyelőadóban, ahogy az egyetemisták hívják, a nagyokiban. A diákokat, felkészítő tanáraikat és a gyerekeket kísérő szülőket Szabó Gábor akadémikus, az egyetem rektora üdvözölte hangos mosolygással sokszor megszakított beszéddel, amelyben elmesélte kémiával kapcsolatos élményét, ami egy rakétakísérlet volt egy olyan diáktárrsal, aki fizikushallgatóból lett kémikus hallgató (ahogy Rektor úr mondta, azért, mert megakadt az analízisszigorlaton). A kísérlet fizikusi szempontból sikertelen volt, mert a rakéta helyben maradt, de kémikusi szempontból a műveletet siker koronázta, mert túztűnemény és hanghajtás – az épület egy részének maradandó alakváltozását eredményezve – tapasztalható volt. Komolyabbra fordítva szót, Rektor úr elmondta, hogy az ilyen versenyek fontosak mind a kapcsolatteremtés, mind a természettudományos gondolkodásmód kialakításában, és ezek jegyében kívánt sok sikert a verseny résztvevőinek. Magát a versenyt Simonné Sarkadi Livia, a Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke nyitotta meg. Wölfling János, a Szervezőbizottság elnöke is köszöntötte a résztvevőket, Pálínkó István, a Versenybizottság elnöke, néhány fontos tudnivaló közlése után, sok sikert és jó szórakozást kívánt a feladatmegoldáshoz, és kifejezte reményét, hogy a versenyzők a feladatok megoldása közben csak pozitív felhanggal fogják az ő anyukáját emlegetni.

Timár Zita kémikus doktorandusz hallgató néhány énekszám-mal szórakoztatta a közönséget. Torma Róbert és Herman Gábor – nem kémikusok – kísérték őt gitáron, illetve cajónon, egy afroperui eredetű ütőhangszeren.

Másnap az írásbeli és gyakorlati fordulókval folytatódott a verseny. A kísérőtanárok, valamint a Kémiai Intézetből szervezett javítók munkájának eredményeképpen estére részleges eredményhirdetésre kerülhetett sor. A hagyományok szerint ezt az eredményhirdetést megelőzi egy „nagyembör” előadása, de mivel az idei verseny volt az ötvenedik, a tudományos előadás helyett most ünnepi ülés volt, amelyen a részt vevő versenyzők és tanárok hallhattak előadást az Irinyi-verseny történetéről (Tóth Imre), egykori irinyis élversenyzők visszaemlékezéseit és életútjuk bemutatását (dr. Molnár József, Prof. Hernádi Klára, Kutus Bence és Bolgár Péter). A visszaemlékezők lefedték az ötven évet, kezdve dr. Molnár Józseffel, aki az első Irinyi-verseny első győztese volt, befejezve Bolgár Péterrel, aki néhány évvel ezelőtt lett Irinyi-díjas. Az egykori versenyzőkön túl elmondta a versennyel és a versenyzéssel kapcsolatos gondolatait dr. Fodor István, aki a győri időszakban volt a Versenybizottság egyik prominens tagja és dr. Igaz Sarolta, aki a Versenybizottság elnöke volt a szegedi-miskolci időszak első hét évében. Az emlékülés szereplőinek szavait a közönség vastapssal köszönte meg.

A szóbeli forduló zsűrijének tagjai Simonné Sarkadi Livia, az MTA doktora, egyetemi tanár (a zsűri elnöke), Ősz Katalin egye-

temi docens, Wölfling János, az MTA doktora, egyetemi tanár és Pálínkó István, az MTA doktora, egyetemi tanár voltak.

A szóbeli fordulót követő ünnepélyes eredményhirdetés után az Irinyi-zászlót átvette a következő ötéves versenyciklust rendező Debreceni Egyetem képviselője (Prof. Várnagy Katalin, aki az ottani Kémiai Intézetet vezeti). A rendezvény zárófogadással fejeződött be.

A verseny két Irinyi-díjasa (a részt vevő 9.-es, illetve 10.-es tanulók legjobb eredményt elérő egy-egy versenyzője) Simon Vivien (ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium, Budapest, felkészítő tanára: Sebő Péter) és Borbás Balázs (Kökönyösi Általános Iskola Gimnázium és Alapfokú Művészeti Iskola, Komló, felkészítő tanára: Mukliné Kostyál Irén) volt.

A rendezvény kiemelt támogatói: A Richter Gedeon Nyrt., az Emberi Erőforrások Minisztériuma és a MOL Nyrt. A program részben az Emberi Erőforrások Minisztériuma megbízásából a Nemzeti Tehetség Program és az Emberi Erőforrás Támogatáskezelő által meghirdetett NTP-TMV-17-0119 kódszámú pályázati támogatásból valósult meg.

A kategóriák legjobbjai és a különdíjasok az alábbiakban olvashatók.

## I.a kategória

1. helyezés	Balogh Zsófia	Révai Miklós Gimnázium	Győr
2. helyezés	Kállay Hanga	Vörösmarty Mihály Gimnázium	Érd
3. helyezés	Tóth-Rohonyi Iván	Fazekas Mihály Gimnázium	Budapest

## I.b kategória

1. helyezés	Simon Vivien	ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium	Budapest
2. helyezés	Jánosik Áron	Radnóti Miklós Kísérleti Gimnázium	Szeged
3. helyezés	Balázs Krisztina	ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium	Budapest

## I.c kategória

1. helyezés	Kucsera Boglárka	Boronkay György Műszaki Szakgimnázium és Gimn.	Vác
2. helyezés	Ecsedi Maja	Petrik Lajos Vegyipari, Környezetvédelmi és Informatikai Szakgimn.	Budapest
3. helyezés	Bátyi Domokos	Boronkay György Műszaki Szakgimnázium és Gimn.	Vác

Az I.a–c kategóriákban a gyakorlati (laboratóriumi) fordulóban legjobb eredményt elért versenyző Tóth Titus (Bányai Júlia Gimnázium, Kecskemét) volt. Ő az Egis Zrt. egyik különdíját kapta.

A I.a–c kategóriákban a legeredményesebb elméletifeladatmegoldó Balogh Zsófia (a Molar Chemicals különdíja), a legeredményesebb számításfeladat-megoldó Simon Vivien (a Unicam Magyarország Kft. különdíja) volt.

## II.a kategória

1. helyezés	Borbás Balázs	Kökönyösi Általános Iskola és Gimnázium	Komló
2. helyezés	Jánosik Áron	Révai Miklós Gimnázium	Győr
3. helyezés	Balázs Krisztina	Eötvös József Gimnázium	Budapest



## II.b kategória

1. helyezés	<i>Robin Balázs</i>	ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium	Budapest
2. helyezés	<i>Almási Balázs</i>	ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium	Budapest
3. helyezés	<i>Kovács Péter Barnabás</i>	Nagykun Református Gimnázium	Karcag

## II.c kategória

1. helyezés	<i>Orosz Adrián</i>	Vegyipari Szakgimnázium	Debrecen
2. helyezés	<i>Veres András Jenő</i>	Petrik Lajos Vegyipari, Környezetvédelmi és Informatikai Szakgimn.	Budapest
3. helyezés	<i>Gubó Dorka</i>	Boronkay György Műszaki Szakgimnázium és Gimn.	Vác

A II. kategóriában a gyakorlati (laboratóriumi) fordulóban legjobb eredményt elért versenyző *Nguyen Thac Bach* (Fazekas Mihály Gyakorló Általános Iskola és Gimnázium, Budapest) volt, és ő az Egis Zrt. másik különdíját kapta.

A II.a–c kategóriákban a legeredményesebb elméletifeladat-megoldó *Borbás Balázs* (a Molar Chemicals különdíja), a legeredményesebb számításfeladat-megoldó *Kapdos Ádám* (Debreceni Fazekas Mihály Gimnázium, a Unicam Magyarország Kft. különdíja) volt.

Kiemelkedő tehetséggondozó munkájukért az alábbi felkészítő tanárok kaptak elismerést: *Csatóné Zsámbéky Ildikó* és *Pőheimné Steiningér Éva* (mindketten Révai Miklós Gimnázium és Kollégium, Győr; mindketten a Richter Gedeon Nyrt. különdíját kapták),



*Szabó Ünige* (Székely Mikó Kollégium, Sepsziszentgyörgy; Richter Gedeon Nyrt. különdíj).

Minden kategória első helyezetteje Oláh György „Életem és a mágikus kémia” című önéletrajzi könyvét kapta dr. Nagy Ferenc, felelős kiadó felajánlásából.

Kiemelkedő tehetséggondozó munkájukért az alábbi iskolák kaptak elismerést:

*Révai Miklós Gimnázium és Kollégium, Győr* (MOL-küldő), *Kökönyösi Általános Iskola, Gimnázium és Alapfokú Művészeti Iskola, Komló* (Reanal-vegyszer-csomag).

Kiemelkedő tehetséggondozó munkájukért az alábbi szervezők részültek az MKE különdíjában: *Németh Veronika* mestertanár, *Mótyán Gergő* tudományos munkatárs, *Szabados Márton* tudományos munkatárs, *Galbács Gábor* egyetemi docens, *Wölfling János* egyetemi tanár és *Pálinkó István* egyetemi tanár.

A következő öt éves ciklusban a verseny a Debreceni Egyetemen lesz, és a Versenybizottságnak élén is változás történt: az új elnök Ősz Katalin egyetemi docens.

**Pálinkó István**

egyetemi tanár

a Versenybizottság (leköszönő) elnöke





## 52. Mengyelejev Diákolimpia

Ugyan az idei Mengyelejev Diákolimpia már az 52. számot viselte, ez a verseny jóval kevésbé formálisan szerveződik, mint a pápíron fiatalabb, épp 50 éves Nemzetközi Kémiai Diákolimpia. Ez utóbbin a 80 részt vevő ország mellett elengedhetetlen a részletes szabályozás, hosszú évekre előre eldőlnek a rendezés helyszínei. A Mengyelejev-verseny szervezője nem egyszer csak egy-két hónappal a kezdés előtt véglegesítődik. Így volt ez az idén is, márciusra érkezett meg a végleges meghívó Minszkbe, Belarusz fővárosába, a vízum pedig alighogy elutazás előtt készült el.

Nem meglepetés, hogy elűt a két verseny jellege, hisz a Mengyelejev-nél az első közel 30 évben a Szovjetunió kémiaversenyéről volt szó, és az után is jó ideig a „közel-külföld”, a volt tagköztársaságok részvétele tette nemzetközivé. Újabb fejlemény csupán, hogy kezdenek ráébredni más országok is arra, hogy ez a tavasz végi verseny ideális felkészülés, gyakorlat a nyári olimpiára. Így aztán intenzív növekszik az érdeklődés. Magyarország 2012-ben még korai fecske volt, mostanra pedig már a 15 egykori köztársaság mellett 7 további országból is érkezett a 135 versenyző.

A magyar csapatba 7 fő is bekerülhetett, mégpedig a 2017-es év diákolimpiai válogatóján mutatott eredménye alapján, a tanulmányi versenyek ugyanis a nevezési időszakban még nem zárulnak le, és bizony a versenyen bőven akad a középiskolán is túlmutató anyag. Ezek elsajátításában remélhetőleg sokat segít az ELTE Kémiai Intézete által, az EMMI támogatásával szervezett felkészítő-válogató. Ide az Országos Középiskolai Tanulmányi Verseny (OKTV) és a Középiskolai Kémiai Lapok (KÖKÉL) legjobbjaikat hívtuk meg. A volt olimpikonok, kutatók, ELTE-oktatók által tartott intenzív kéthetes elméleti és laborkurzus után alakul ki a rangsor, ami alapján mindkét olimpia csapata feláll.

A Mengyelejev-olimpiára az utazás költsége és a részvételi díj számottevő összeg. Ezt az Emberi Erőforrás Minisztérium Nemzeti Tehetség Programjának NTP-NTMV-17-B-0010 kódszámú pályázatán elnyert támogatásból a Magyar Kémikusok Egyesülete fedezte. A diákok kiváló eredményei nagyon jó támogatást adtak a pályázathoz, amelyet évek óta sikerül elnyerni. Az egyhetes versenyre (április 22–29.) közvetlen járattal utaztunk.

Az idő legnagyobb részét egy fenyőerdőben elhelyezkedő valamikori úttörőtáborban kialakított hotelben töltötte a csapat. Itt került sor a két elméleti fordulóra, a feladatok javítására, fordítására, az étkezésekre. Sok turisztikai programra az elzárt helyszínen nem volt mód, igaz, idő sem, de a csapatok közti barátkozás, beszélgetés intenzíven zajlott. A megnyitó és a díjkiosztó mellett az egyetlen nagyobb program a külszíni bányákban dolgozó hatalmas dömpereket gyártó üzem (a világ 3 ilyen üzeméből az egyik) meglátogatása volt. Egy-egy rövid program során a város és egy skanzen meglátogatása azért még befért.

Adott ugyanis elegendő elfoglaltságot a versenyprogram. A hat nappal háromra jutott egy-egy ötórás versenyvizsga. A két elméleti fordulóból az egyiket még súlyosbítja, hogy öt részterület (szerves, szervetlen, analitika, fizikai kémia, biológia és makromolekulák) 3-3 feladatából még választaniuk is kell a versenyzőknek egyet, amit teljesen kidolgoznak. A feladatok között vannak kívülállónak megdöbbentően összetettek, nehezek. Utólag, a megoldások ismeretében el lehet hinni, hogy néhány alaptörvény ismeretében megoldható a legtöbbjük, de ehhez komoly kreativitás és problémamegoldó gyakorlat szükséges. Az idei verseny elméleti kérdései talán az utóbbi évtized legnehezebbjeire sikerültek. Ezért is tekintjük ezt a versenyt csupán felkészülésnek, hiszen mindig sokat számít a szerencse, hogy az adott napon az



A díjkiosztó után: Sajgó Mátyás, Mihalicz Ivett, Arany Eszter, Czako Áron, Juhász Benedek, Magyarfalvi Gábor, Botlik Bence, Boros Dániel

adott problémákkal ki hogyan boldogul, de ez a nehéz, ötletet igénylő feladatoknál még inkább hangsúlyozódik.

Az utolsó versenynapon laboratóriumi munka várt a diákokra. Savmegkötő gyógyszer minőségi és mennyiségi jellemzését végezték el, klasszikus kémcsőreakciókkal, titrálásokkal. Ez nem volt könnyű, de nem volt szokatlan sem, a legtöbben tisztas eredményt értek el benne. A versenyzők elfoglaltsága mellett a mentor sem unatkozott, ugyanis a feladatokat mindenki írhatja anyanyelven. Az eredetileg orosz feladatokról születik angol fordítás, de ez nem lektorált, általában előnyösebb átvizsgálni. Csakhogy a szervezők kényesek arra, hogy a szerzőkön kívül más ne ismerhesse meg a feladatokat, így a fordításra csak egy bezárt irodában, közvetlen a verseny előtt éjjelen kerülhet sor.

A végső pontokat a diákok maguk vitathatják meg a feladat-szerzőkkel. Az így kapott rangsor alapján kap a résztvevők legjobb 10-20-30 százaléka arany-, ezüst-, illetve bronzérmeket. A díjkiosztón növekvő pontszám szerint hívják fel a színpadra a versenyzőket, így egyre nagyobb az izgalom, ahogy nőnek a pontok. Az idén is szépen csillogó érmek kerültek a magyarok nyakába:

*Sajgó Mátyás*, Földes Ferenc Gimnázium, Miskolc, tanára: *Endrész Gyöngyi*; ezüstérem

*Botlik Bence*, ELTE Apáczai Csere János Gimnázium, Budapest, tanára: *Villányi Attila*; ezüstérem

*Arany Eszter*, Lovassy László Gimnázium, Veszprém, tanára: *Kiss Zoltán*; ezüstérem

*Boros Dániel*, Fazekas Mihály Gimnázium, Budapest, tanára: *Keglevich Kristóf*; bronzérem

*Juhász Benedek*, ELTE Apáczai Csere János Gimnázium, Budapest, tanára: *Sebő Péter*; bronzérem

*Czako Áron*, Krúdy Gyula Gimnázium, Nyíregyháza, tanára: *Némethné Horváth Gabriella*; bronzérem

*Mihalicz Ivett*, Révay Miklós Gimnázium, Győr, tanára: *Póheimné Steininger Éva*; dicséret

Közülük még ketten (Benedek és Ivett) jövőre is versenyben lehetnek. Arról a helyszínről már most megszületett a döntés, a periódusos rendszer évében, Mengyelejev felfedezésének 150. évfordulóján Szentpéterváron lesz a Mengyelejev-olimpia. A szer-



vezőbizottság egy javaslattal is megkeresett. Örömmel vennék, ha 2020-ban, elsőként az Európai Unióban, Magyarországon lehetne a verseny. A rendezés anyagi hátterét is tudják a verseny szpon-

zorai támogatni. Remélhetően Magyarországon is lesz az ötletnek támogatottsága, mind a kormány részéről, mind a vállalati szférában.

Magyarfalvi Gábor



EMBERI ERŐFORRÁS  
TÁMOGATÁSKÉZELŐ



## PÁLYÁZAT középiskolásoknak

Az ENSZ 2019-et a Periódusos Rendszer Évének nyilvánította. Ez alkalomból a Magyar Kémikusok Egyesülete (MKE) nyilvános pályázatot hirdet középiskolásoknak

### A periódusos rendszer és a XXI. század vagy az

#### Elemi tudás (érdekes, hasznos elemek)

témakörben. 2–5 ezer karakter terjedelemben várjuk fiataljainktól, hogy számukra milyen élményeket, használható ismereteket, tudást jelent, nyújt a kémiai elemek periódusos rendszere. Az írást illusztráció (videóanyag, animáció stb.) is kísérheti.

A pályázatokat szakmai zsűri bírálja el. Az első három helyezett 15–15 ezer Ft díjazásban részesül. A legjobb munkákat a Magyar Kémikusok Lapja közli.

A pályázatokat az MKE Titkárságára, az mkl@mke.org.hu e-mail-címre kell benyújtani elektronikusan csatolt file-ban,

**periodusos\_palya\_nev file-névvel 2019. február 15-ig.**

Eredményhirdetés a 2019. évi Küldöttközgyűlésen,  
2019 májusában.



## FELHÍVÁS középiskolai tanároknak, egyetemi oktatóknak

Az ENSZ 2019-et a Periódusos Rendszer Évének nyilvánította. Ez alkalomból a Magyar Kémikusok Egyesülete (MKE) nyilvános pályázatot hirdet középiskolai/egyetemi előadás megírására a

### Gondolatok a periódusos rendszer tanításáról a XXI. században

témakörben, beleértve néhány elem/elemcsoport tanításának kérdését is. Az előadás terjedelme 1–4 folyóiratoldal lehet (egy te- leírt oldalon szóközökkel 7000 karakter fér el, ábrák nélkül). A történeti előzményeket kérjük minimálisra szorítani.

Az előadásokat szakmai zsűri bírálja el. Az első három helyezett 50–50 ezer Ft díjazásban és 2 éves MKE-tagságban részesül. A legjobb munkákat a Magyar Kémikusok Lapja közli.

Az írásokat az MKE Titkárságára, az mkl@mke.org.hu e-mail cím- re kell benyújtani elektronikusan csatolt file-ban,

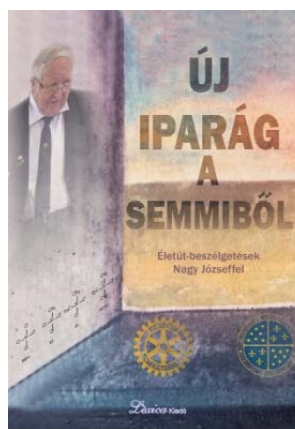
**periodusoselo\_nev file-névvel 2019. február 15-ig.**

Eredményhirdetés a 2019. évi Küldöttközgyűlésen,  
2019 májusában.

## KÖNYVISMERTETÉS

### A „Magyar Tudósok” sorozat IX. kötete

*(Új iparág – a semmiből. Életút-beszélgetések Nagy Józseffel. Az interjúkat készítette: Silberer Vera. Lexica Kiadó, Budapest, 2017)*



Dr. Nagy József 1963-tól 1991-ig vezette a Budapesti Műszaki Egyetem Szervetlen Kémia Tanszékét. Sokan úgy ismerték őt, mint a „szilikonpápát”, hiszen kémiai érdeklődésének középpontjában mindig is a szilícium-kémia, a szilikonok álltak. Ebben a könyvben könnyed beszélgetések formájában mesélt életéről, amely a megjelenés után néhány hónappal, sajnos, véget ért. A halálához vezető autóbaleset előtt mindennap bejárt a Tanszékre és – 92 éves

korában is – ott állt a készülékek mellett, dolgozott, kutatózott, aktívan részt vett a szilikonokkal kapcsolatos fejlesztésekben és a vegyész-mérnök-hallgatók oktatásában.

A könyvből megismerhetjük a fiatal gyermeket, akit édesanyja nevel egyedül, és akit tanítónője – rosszul értelmezett erkölcsi szempontjai miatt – már tanulmányai kezdetén igen nehéz helyzetbe hoz. A fiatal kamaszt, akit minden érdekel, barkácsol, kísérletezik, de érdeklődése középpontjába már ekkor a kémia kerül. A fiatal, aki kémikus akar lenni, és – bár először Sopronba kell mennie kohómérnök-hallgatónak – töretlen elszánással tanul, míg fel nem veszik a Műegyetem Vegyész-mérnöki Karára. Megismerhetjük az egyetemistát, akit professzora olyan komolyan vesz, hogy alkalmazza kutatócsoportjában, és aki olyan sikeresen kutat, hogy – tanáraival együtt – Kossuth-díjat kap. Később tanszékvezetőként erős kézzel, sikeresen vezeti a tanszékét, majd mint nyugdíjas professor emeritus folytatja kutatásait.

A könyvet olvasva megismerhetjük életének minden fontos mozzanatát, családját – amelynek életében a kémia szintén főszerepet játszik –, barátait, kollégáit. Megismerhetjük véleményét a minket körülvevő világról, és elgondolkozhatunk elképzelésain, kritikai megjegyzéseink, iránymutató gondolataink.

Ez a könyv tehát elgondolkoztató olvasmány mindazok számára, akik ismerték. Arckép egy olyan emberről, akit soha nem a hírnév, csak a tudomány iránti szeretet hajtott, akinek egészen haláláig számtalan új ötlet jutott eszébe.

Wagner Ödön



**HÍREK AZ IPARBÓL**

**Vegyipari mozaik**

**Tovább bővítené nőgyógyászati portfólióját a Richter.** A választás éves közgyűlésén a részvényesek döntöttek arról, hogy a cég részvényeként 68 forint osztalékot fizet idén, a tavalyi eredménye után. A közgyűlés jóváhagyásával a törzsrészvényekre összesen 12,673 milliárd forint osztalékot fizetnek. A szerdai záróárral számolva 1,3 százalékos osztalékhozamot nyújtanak a Richter papírjai.

Az eseményen Bogsch Erik arról beszélt, hogy a Richter egyeztetéseket folytat arról, hogy új termékekkel bővítsen nőgyógyászati portfólióját. Bogsch reméli, hogy már idén lezáródhatnak az egyeztetések, de azt is elmondta, hogy az esetleges akvizíciók jóval kisebbek lehetnek, mint amiket a Richter az elmúlt években végrehajtott. A lehetőségek között szerepel az is, hogy a gyógyszergyártó licenstmegállapodásokat kössön. (*portfolio.hu*)



RICHTER GEDEON

**A Richter elindította 2 milliárd forint értékű pályázati projektjét, amely biológikumok gyártásának támogatását szolgálja.** A fejlesztés véhetően 2021-ig tart. A projekt költségvetéséből 1,48 milliárd forint a Nemzeti, Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból származó támogatás. A program megvalósításán, ehhez kapcsolódóan a molekuláris biológiai, mérnöki és analitikai alkalmazott gyógyszerfejlesztési tudás erősítésén, a Richter konzorciumi formában együtt dolgozik a BME-vel, az ELTE-vel és az MTA TTK-val.



**94 milliárdos osztalékról döntöttek a MOL éves közgyűlésén.**

Az egy részvényre jutó osztalék (DPS) 9 százalékkal, 85 forintra emelkedett a tavalyi 78 125 forintra. Ez azt jelenti, hogy a MOL tovább folytatja a fokozatos osztaléknövelés politikáját, amelyet tavaly kezdett el. Továbbá a részvényesek jóváhagyták az igazgatóság azon javaslatát is, miszerint a társaság rendkívüli osztalék formájában ossza meg részvényeseivel a 2017-es eredeti terveket meghaladó szabad cash flow-t, amely az alaposztalék 50%-a, részvényenként 42,5 forint. Eszerint a részvényesek részvényenként 127,5 forint teljes osztalék kifizetését fogadták el a 2017-es üzleti évre vonatkozóan.

A közgyűlés újválasztotta Hernádi Zsoltot mint Igazgatósági tagot. Hernádi Zsolt 1999-től tagja a MOL igazgatóságának, 2001 óta pedig elnök-vezérigazgatóként vezeti a társaságot, és irányítása alatt fejlődött a térség meghatározó vállalatává a MOL-csoport. A Felügyelő Bizottság tagjává választották Áldott Zoltánt és Prof. Dr. Láncki Andrást. A részvényesek jóváhagyták továbbá, hogy Szabó Csaba a munkavállalók képviselőiként bekerüljön a Felügyelő Bizottságba. (*mol.hu*)

**Ritz Ferenc összeállítása**



**PÁLYÁZAT  
MOL Tudományos Díjra**

**Előzmények:** A Magyar Tudományos Akadémia és a MOL Nyrt. 1998-ban Tudományos Díjat alapított, amelyet 2014. március 28-án megújított azon „szakemberek, kutatók jutalmazására, akik a magyar olajbányászat és feldolgozás terén végzett tevékenységükkel maradandót alkottak”. A MOL Tudományos Díjat a Kuratórium döntése alapján a MOL Nyrt. vezérigazgatója adja át 2018 novemberében a Magyar Tudomány Ünnepe nyitórendezvényén.

**A pályázat feltételei:**

1. Alkalmanként egy díj kerül kiosztásra, a díj várható összege bruttó 500 ezer Ft, amely magában foglalja a pénzjutalom kifizetéséhez kapcsolódó összes terheket (adók, járulékok stb.).
2. A tudományos díjra három formában lehet pályázatot benyújtani:
  - a) Előnyt élveznek az egyéni tudományos eredmények alapján születtek egyéni pályázatok.
  - b) Amennyiben valamely pályázó egy kollektív tudományos eredményt nyújt be saját pályázataként – tehát több szerző, de csak egy pályázó van –, akkor a pályázat alapjául szolgáló tudományos eredményben a pályázó egyéni részesedésének meg kell haladnia az 50%-ot.
  - c) Csoportosan benyújtott pályázat esetén – amikor mindegyik szerző egyben pályázó is –, a pályázó személyek létszáma korlátozott, legfeljebb 4 fő lehet. Ebben az esetben a pályázat alapjául szolgáló tudományos eredményben a pályázók egyéni részesedése nem lehet kevesebb 15%-nál.

Az utóbbi két esetben a pályázat benyújtásának feltétele a pályázók – ez b) esetben egy, c) esetben legfeljebb 4 személyt jelent – hiánytalan, egyénienkénti, előzetes írásos nyilatkozattétele a pályázat alapjául szolgáló tudományos eredménybeli részesedésükről (ún. társszerzői nyilatkozat). A nyilatkozattétel a pályázat benyújtási határidejének lejártát követő utólagos pótlása nem lehetséges, a benyújtás elmulasztása esetén a pályázat elbírálására nem kerül sor. Csoportosan benyújtott pályázat (c) díjazása esetén a díj összege egyenlő arányban megoszlik a nyertes pályamunkát benyújtott pályázók között.

3. A pályázatnak tartalmaznia kell:
  - a pályázó(k) személyi adatait (név, születési adatok, szakképesítés, cím stb.),
  - a téma megnevezését,
  - a téma gyakorlati megvalósításának, ipari jelentőségének dokumentumait, és hazai és nemzetközi visszhangját,
  - a pályázó(k) tudományos munkásságát és annak hazai és nemzetközi elismertségét bemutató dokumentumokat,
  - szükség esetén (lásd: 2.b és 2.c pont) társszerzői nyilatkozat(ok);
4. A pályázat maximális terjedelme 5 oldal, amit 3 kinyomtatott példányban és elektronikus formában is meg kell küldeni.
5. Előnyben részesülnek azon szakemberek pályamunkái, akik a MOL Tudományos Díjat még nem kapták meg. Annak a személynek a pályázata, aki egyénileg már megkapta a MOL Tudományos Díjat, sem önállóan, sem megosztva nem kerül elbírálásra. Azon pályaművek, amelyek szerzői megosztva már kétszer is részesültek a díjban, csak kivételes esetben kerülnek elbírálásra.
6. Pályázatot nem küldünk vissza; a Kuratórium döntéséről a pályázó értesítést kap. Az eredménytelen pályázók a következő évben témájukat megújítva ismétlenül pályázhatnak, de legfeljebb három alkalommal.

A pályázat beküldési határideje: **2018. szeptember 1.**

A pályázat beküldési címe (szakterülettől függetlenül): MTA Földtudományok Osztálya, 1051 Budapest, Nádor utca 7., e-mail-cím: [fold@titkarsag.mta.hu](mailto:fold@titkarsag.mta.hu).

A pályázatot a MOL Tudományos Díj Kuratóriuma bírálja el. Olyan pályaműveket vár, amelyek a MOL Nyrt. tevékenységét támogató, új tudományos eredményeket mutatnak be. A díjat a szakterülettől függetlenül legjobbnak ítélt munka nyeri el.

**A MOL Tudományos Díj  
Kuratóriuma**



## MKE-HÍREK

## Rendezvénytár – 2018

Időpont	Név	Helyszín
2018. április 6–7.	XVII. Országos Diákvegyész Napok	Sátoraljaújhely
2018. április 13–15.	L. Irinyi János Középiskolai Kémiaverseny	Szeged
2018. április 23–24.	Analitikai Napok, 2018	Balatonszemes
2018. május 3–5.	II. Young Researchers' International Conference on Chemistry and Chemical Engineering (YRICCE II)	Budapest
2018. május 9–11.	Biztonságttechnikai Szeminárium, 2018	Siófok
2018. május 28–30.	11 <sup>th</sup> Conference on Colloid Chemistry	Eger
2018. július 8–13.	22 <sup>nd</sup> International Conference on Phosphorus Chemistry	Budapest
2018. aug. 21–24.	Kémiantanók Nyári Továbbképzése	Eger
2018. aug. 21–25.	Varázslatos Kémia Nyári Tábor	Eger
2018. aug. 26–30.	35 <sup>th</sup> International Conference on Solution Chemistry	Szeged
2018. szept. 24–27.	Chemistry towards Biology: biomolecules as potential drugs in focus (CTB9)	Budapest
2018. szept. 27–29.	Structural biology approaches for drug development (iNext)	Budapest
2018. október 3–6.	61. Magyar Spektrokémiai Vándorgyűlés és Olasz–Magyar Spektrokémiai Konferencia	Budapest
2018. október	Őszi Radiokémiai Napok	Balatonszárszó
2018. november 22.	Kozmetikai Szimpózium, 2018	Budapest
2018. nov. 27–28.	Hungarocoat	Budapest

22<sup>nd</sup> International Conference on Phosphorus Chemistry

2018. július 8–13.  
Danubius Hotel Flamenco  
1113 Budapest, Tas vezér u. 3–7.  
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.  
Honlap és online regisztráció:  
<http://www.icpc22.mke.org.hu/>  
TOVÁBBI INFORMÁCIÓ: Schenker Beatrix,  
[icpc22@mke.org.hu](mailto:icpc22@mke.org.hu)

35<sup>th</sup> International Conference on Solution Chemistry

2018. augusztus 26–30.  
Hunguest Hotel Forrás  
6726 Szeged,  
Szent-Györgyi Albert u. 16–24.  
Kiállítók jelentkezését szeretettel várjuk.  
Honlap és online regisztráció:  
<http://mke.org.hu/ICSC2018/>  
TOVÁBBI INFORMÁCIÓ:  
Schenker Beatrix,  
[beatrix.schenker@mke.org.hu](mailto:beatrix.schenker@mke.org.hu)

A 2017. évi legjobb cikk  
a Magyar Kémikusok Lapjában

A szavazás ez évben is a szokásos módon, az interneten keresztül történt. A rendelkezésre álló, e-mail-címmel rendelkező tagjaink közül 350 fő szavazott. Ez tagjaink alig 20%-a. Sajnos, a részvételi hajlandóság csökkenő, mert tavaly még 27,1% vett részt a véleménynyilvánításban.

Közöljük a 20 és 20-nál több szavazatot kapott cikkek listáját. A díjazás a szokásos elvek szerint történik.

54: 15,43%, Braun Tibor: *Umami: az ízfokozó ötödik alapíz*

46: 13,14%, Keglevich Kristóf: *Kémia történet a kémia tanítási-számban. Ötletek kémiantanároknak óráik színésítésére*

45: 12,86%, Lente Gábor: *Vegyészletek*

42: 12,00%, Lente Gábor: *Vízilónaptej és más történetek kémia-ból – részletek*

41: 11,71%, Lente Gábor: *Híresek és kémikusok (Bud Spencer, Isaac Newton)*

35: 10,00%, Csupor Dezső: *Sosem volt vitaminok*

25: 7,14%, Csupor Dezső: *Miért ne együnk parlagfüvet?*

24: 6,86%, Kovács Lajos: *Egy teljes élet: Rosenkranz György*

23: 6,57%, Radnóti Katalin: *150 éve született Marie-Curie*

21: 6,00%, Braun Tibor: *Kivonatok a nyereg alatti húspuhítás krónikájából*

20: 5,71%, Huszthy Péter: *In memoriam Oláh György (1927–2017)*

Gratulálunk a szerzőknek! A Szerkesztőség és a Szerkesztőbizottság javaslata alapján az MKE Intézőbizottsága az első három szerzőnek Nívódíjat adományozott, melynek átadására a májusi Küldöttközgyűlésen került sor.

MKL Szerkesztőség és Szerkesztőbizottság



# HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXIII. No. 6. June

## CONTENTS

<i>Theoretical chemistry and nonlinear dynamics research at the Chemistry Institute of the University of Szeged</i>	178
<b>GYULA TASI, GÁBOR CZAKÓ, DEZSŐ HORVÁTH, and ÁGOTA TÓTH</b>	
<i>Personal experiences with George A. Olah</i>	183
<b>CSABA SZÁNTAY, JR.</b>	
<i>Glyphosate. Part I. Application and environmental analytics</i>	186
<b>BÉLA DARVAS and ANDRÁS SZÉKÁCS</b>	
<i>Fabric blueprinting and its chemical aspects</i>	190
<b>CSABA KUTASI</b>	
<i>Why „Pickering emulsions” instead of „Ramsden emulsions”?</i>	
<i>A colloid chemical fact-finding</i>	194
<b>TIBOR BRAUN and MIKLÓS NAGY</b>	
<i>Being ready for acquiring new knowledge, hypotheses and skills. An interview with Professor Onno De Jong. Part II</i>	198
<b>JÁNOS SÁNDOR KAPITÁNY and ZOLTÁN TÓTH</b>	
<i>Chembits</i>	
<b>GÁBOR LENTE</b>	202
<i>News of the Month</i>	204

# NITROGÉN / FEHÉRJE ANALIZÁTOROK



- \* élelmiszerek
- \* talajok
- \* gabonák
- \* növények
- \* bio-iszapok vizsgálatához



**elementar**  
Analysensysteme GmbH

EXCELLENCE IN ELEMENTS



**AKTIV INSTRUMENT Kft.**

ANALITIKAI BERENDEZÉSEK, AUTOMATA ANALIZÁTOROK  
1145 Budapest Pétervárad u. 14.  
Tel.: (1)-789-2778, Fax: (1)-785-8489  
Mail: kozpont@aktivinstrument.hu  
web: www.aktivinstrument.hu

## Egyedülálló előnyök:

- \* gyors és olcsó mérés: 4 perc/minta (napi >300 minta)
- \* makro bemérés: 1g-ig / 5g-ig, detektálás: 500 mg N abs.
- \* egyszerű felépítés, olcsó üzemeltetés CO2 gázzal, felügyelet nélkül
- \* önregeneráló redukciós egység: karbantartás 2000 mérésenként
- \* megbízható eredmények, kétfokozatú tökéletes égetés
- \* évekig stabil kalibráció - egyetlen kalibráció minden mintára
- \* extrém hosszú élettartam: a fő egységekre **10 év garancia**
- \* bemérés 5mL-es acéltégelybe, mintaelőkészítés nélkül (MAX)