



Kíváncsiságvezérelt kutatás

Beszélgetés Felinger Attila Széchenyi-díjas professzorral

Felinger Attila az MTA levelező tagja, a Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Karán az Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék tanszékvezető egyetemi tanára és az Általános Orvostudományi Karon a Bioanalitikai Intézet igazgatója. 2018. március 15-én Széchenyi-díjjal tüntették ki „az analitikai kémia területén a kromatográfia mikroszkopikus modelljének kidolgozásával és számos anyagi rendszeren történő alkalmazásával elért, az elválasztástechnika elemi folyamatainak megértéséhez alapvető fontosságú, nemzetközileg is jelentős eredményei elismeréseként”.

Az analitikai kémia megítélése ellentmondásos – ahogy többször is hangsúlyozta. Miből adódik ez az ellentmondás?

Sajnos, a vegyészek között többen csak a fizikai kémiát, az elméleti, a szerves és a szervesetlen kémiát tekintik „kémianak”, az analitikát alkalmazott diszciplínának, a kémia szolgálóanyagának tartják.

Ez korábban is így volt?

Nem feltétlenül. Az elmúlt évtizedekben folyamatosan romlott a helyzet. Elég megnéznünk, hány nagy európai egyetemen maradt meg az analitikai kémia tanszék. A legtöbbször összevonják egy másikkal, vagy megszüntetik. Például a Bécsi Egyetemen Josef Huber hosszú éveken át meghatározó tanszékvezető volt, de amikor az utódja, Wolfgang Lindner is nyugdíjba ment, átalakították az analitikai kémia tanszékét, és az orvosi kémiát helyezték előtérbe. A klasszikus analitikai kémia, amely nem élet-, környezettudományi vagy más alkalmazás, visszaszorulóban van.

Az érem másik oldala, hogy azok a végzősök, akik műszeres analitikára specializálódtak, biztosan kapnak állást, mert az analitikai kémiai tudásnak hatalmas a felvevőpiaca.

Professzor urat pedig a világ egyik „legbefolyásosabb” analitikusának tartják.

Ez túlzó megfogalmazás; arról van szó, hogy az *Analytical Scientist* folyóirat – szavazás alapján – évről évre összeállít egy rangsort, a „Top 100 most influential people” listáját, amire 2013-ban és 2015-ben is felkerültem.

Furcsán hangzik, hogy valaki „befolyásos analitikai kémikus”, de sokan ismernek, mert a kutatás és a tanítás mellett a tudományos közéletben is munkát vállalok. Például 2009 óta a Magyar Elválasztástudományi Társaság elnöke vagyok, és minden évben szervezek egy hazai vagy egy nemzetközi konferenciát. Az elválasztástudományi vándorgyűlésünket két évente rendezzük az ország különböző pontjain, a köztes években pedig a Balaton mellett van nemzetközi konferenciánk, és minden évben tartunk egy egynapos elválasztástudományi ankétot is. Az én szakterületem a folyadékromatográfia, és a HPLC-nek szintén van egy nagy nemzetközi konferenciasorozata, amelyet évente felváltva tartanak Európában és Amerikában, olykor-olykor Ázsiában. 2011-ben szerveztem ilyen konferenciát Budapesten: 1400-an jöttek el. A konferenciasorozatnak tízfős nemzetközi tudományos bizottsága van, amely évről évre javaslatot tesz a konferenciák megszervezésére, lebonyolítására, felügyeli őket; ennek a bizottságnak tagja vagyok – innen eredhet a „befolyásosság”.



Talán nem is a „befolyásos” a jó szó, hanem inkább azok kerülhetnek be a Top 100-ba, akiknek a munkája a legnagyobb hatást gyakorolja a tudományágra.

Én is szívesebben fogom fel így a listát... Persze, a tudományos munka is az értékelés része, nem lehet a kettőt különválasztani.

Szeretném megkérni, vázolja fel ennek a körülbelül negyedszázados, főként elméleti munkának a legfontosabb pontjait.

Messzebből kezdeném: 1985-ben végeztem a Veszprémi Vegyipari Egyetemen. Inczedy János doktorandusza lettem, aki abban az időben a vegyipari termelési folyamatokhoz kapcsolódó analitikai módszerek modellezésével, alkalmazásával foglalkozott. Engem azért vett fel, mert már a diplomamunkám is a modellezésre koncentrált. 1988-ban, miután megvédtem a disszertációt, három hónapos ösztöndíjat kaptam Ferrarába, Francesco Dondihoz, akit a kromatográfia molekuláris modellezése érdekelt. Más területen is dolgoztam vele, de ez lett az a kutatás, amelyben hosszú éveken keresztül együttműködtünk, PhD-hallgatókat is küldtünk egymáshoz. A hagyományos makroszkopikus kémiai modellekben koncentrációsávokban gondolkodunk, a mikroszkopikus modellezésben pedig a molekulák útját próbáljuk meg követni, és a befutott útvonalak eloszlása alapján határozzuk meg a kromatogramot.

Mit jelent a követés? Statisztikus módszert használnak?



Nevezük inkább sztochasztikusnak. Kiderült, hogy a módszer nagyon rugalmasan alkalmazható a különböző elválasztási folyamatokra, például a fordított fázisú, a méretkizárásos folyadékkromatográfia, a királis elválasztások modellezésére. Sajnos, ez a folyamatok kevésbé ismert modellje, mert a legtöbbször a koncentrációkat használó, makroszkopikus – determinisztikus – modellekre esküsznek.

Azt gondoltam, hogy éppen a molekuláris szintű modellezéssel szerzett nevet a kromatográfiában.

Elismerik, csak nem feltétlenül követik. Most egy-két PhD-hallgatóval dolgozunk ezeken a modelleken, de mást is csinálunk. Azt mondhatnám, hogy a kromatográfiai elválasztások lelke az oszlop. Sok kísérlet és modellezés segítségével próbáljuk megérteni – hol molekuláris, hol makroszkopikus szinten –, hogy mi történik az oszlopban egy elválasztás során. Ezzel az oszlopgyártóknak – úgy érzem – fontos információkkal szolgálunk, hiszen ők folyamatosan versenyben állnak, hogy egyre jobb tölteteket, oszlopokat állítsanak elő. Több céggel is szorosan együttműködünk; szívesen felajánlják, hogy teszteljük az új oszlopaik prototípusát, mondjuk el, min kellene változtatni.

Elárulhatja, hogy milyen tanácsokat adnak?

Ezek apró hozzájárulások. Az analitikai kémiában a legelterjedtebb elemzési módszer a folyadékkromatográfia, és ennek hatalmas piaca van. Mindegyik oszloptípusnak – a teljesen porózus, a héjszerkezetű és a monolit töltetnek is – megvan a maga előnye, és ma már nincsenek nagy forradalmak a töltetek fejlesztésében. Mi meg tudjuk mondani például a monolit oszlopok előnyös és hátrányos tulajdonságait, összehasonlíthatjuk őket a héjszerkezetű vagy a teljesen porózus töltetekkel. Egyik sem fogja kiszorítani a másikat, hanem majd folyamatosan élnek egymás mellett.

Persze, tizenegynéhány évvel ezelőtt is azt hittük, hogy nem sok változásra számíthatunk, de 2004-ben robbanásszerűen megjelentek a 2 µm-nél kisebb szemcseméretű töltetek. Korábban legfeljebb 400 bart bírtak ki az oszlopok, az új rendszerek 1000 bar fölötti nyomást is elviselnek, és rövidebb oszlopokkal is nagyon gyors elválasztást lehet elérni. A kromatográfiában ugyanaz a jelszó, mint az olimpián – minél gyorsabban, magasabbra, erősebben... Most már az is fontos, hogy minél kevesebb vegyszer felhasználásával jussunk el ugyanannyi vagy még több információhoz, mint korábban.

Időközben nemcsak a töltetek változtak, hanem a módszerben is új elemek jelentek meg, ami szintén „munkát adhat” Önöknek.

Nem sokkal azután, hogy elindult a folyadékkromatográfia nagy hatékonyságú változata az 1960-as évek végén, az 1970-es évek elején, bevezették a fordított fázisú kromatográfiát (amelyben a mozgófázis polárisabb, mint az állófázis). Ez elsősorban apoláris vegyületek elválasztására szolgál. Az elmúlt húsz évben igencsak elterjedt a hidrofíli kölcsönhatású kromatográfia, és már régóta próbál betörni a szuperkritikusfluidum-kromatográfia (SFC), de még most sem találja a helyét.

Miért nem?

Ennek a módszernek az az előnye, hogy szén-dioxid eluenssel működik. Az élelmiszer-minőségű szén-dioxid – a sörcsapoláshoz használt, palackba zárt szén-dioxid – nekünk is jó. Mivel szuperkritikus állapotban van, nagyon kicsi a viszkozitása (ezért kis nyomásesés mellett használható) és nagy a sűrűsége; jók az



oldószer-tulajdonságai és gyors elválasztásokat lehet vele megvalósítani. Hogy miért nem szorítja ki a HPLC-t? Azt mondom, azért nem, mert a HPLC olyan jól sikerült, és annyira beágyazódott a gyógyszergyárak mindennapjaiba, hogy nem lehet kiszorítani. Amire pedig a gyógyszeripar nem harap rá az analitikai kémiában, az nem terjed el.

Most mégis dolgoznak az SFC-módszer elméletén.

A kutatásaim jó része kíváncsiságvezérelt: értsük meg, mi történik. Szerencsére, az egyik műszergyártó cég ingyen a rendelkezésünkre bocsátott egy SFC-készüléket, és csak annyit kért, hogy olyan eredményeket publikáljunk, amelyek rávilágítanak az előnyeire. Ehhez a drága berendezéshez

nem jutottunk volna hozzá különben.

Annak a gyümölcse lehet, hogy a Top 100-ba tartozik.

Ilyesmit valóban nem ajánlanak fel minden tanszéknek. De be kell vallanom, nem vagyok „rendes” analitikai kémikus: nagyon ritkán határozzuk meg egy sokkomponensű minta összetételét, hatóanyag-tartalmát, szennyezettségét. Mi az analitikai eszközöket, a vegyészmérnöki modelleket, az analitikai kémiai módszerekkel nyert információkat használjuk arra, hogy minél inkább megértsük az általunk alkalmazott módszereket. Tehát olyan modelleket és mérési eljárásokat dolgozunk ki, amelyek szerint a lehető legjobban tudjuk megérteni az elválasztási folyamatokat.

Miért hangsúlyozza a vegyészmérnökséget?

A kromatográfia preparatív válfajában az a cél, hogy – gyakran nagy mennyiségben – megtisztítsunk egy anyagot, izoláljunk egy gyógyszerhatóanyagot: ilyenkor az elválasztott komponensek jelentik az értéket. A másik, „vegyészi” alkalmazás számára a jel, az információ fontos: melyik komponensből mennyi van jelen egy mintában, mert mondjuk el kell dönteni, hogy kivonjanak-e egy élelmiszert a forgalomból. A gyógyszergyári preparatív kromatográfiában hatalmas térfogatokkal, anyagmennyiségekkel dolgoznak, túlterhelik az oszlopot, ezért a termodinamika, a kinetika sokkal bonyolultabb, mint kis koncentrációk esetén. Mára rengeteg tudás gyűlt össze arról, hogy hogyan lehet beépíteni az elválasztási folyamatokat egy „vegyészmérnöki” modellbe, és ezek a modellek sokat segítenek abban, hogy az elválasztások mechanizmusát megértsük. Ezen már az 1940-es évek elkezdtek dolgozni, amikor a folyadékkromatográfia még gyerekcipőben járt.

Az is előfordul, persze, hogy laboratóriumi együttműködésben veszünk részt: az egyetemen dolgozó biológusok vagy orvosok már többször megkerestek bennünket egy-egy problémával, amelynek a megoldásához nem voltak meg az eszközeik.

Érdekes, hogy a pécsi Kémiai Intézetben a szerves, az analitikai és a fizikai kémia dominál; a szerves kémiát máshol tanulják a hallgatók.

Az egyetemintegráció pozitív hozadékkal is járt: például nincsenek párhuzamos tanszékek. Az Általános Orvostudományi Karon van Szerves és Gyógyszerkémiai Intézet, így az ottani kollégák tanítják a kémia BSc- és a vegyész MSc-szakos hallgatókat.

Pécsen „kicsi a kémia”. Nincs sok hallgatónk, a TTK Kémiai Intézetében is kevesen dolgozunk – és lassan beszűkül az egyetemünk vonzáskörzete. Azt gondolnánk, legalább a teljes Dél-Dunántúlról hozzánk jönnek tanulni, de nem így van.

Külföldre mennek?

Vagy az ELTE-re és a Műegyetemre. A kémia máshol sem túl vonzó: a BSc-képzésre nagyon alacsony pontszámmal be lehet jutni. A mi sikerünk azon múlik, hogy találunk-e jó PhD-hallgatókat.

Silberer Vera