



TÚL A KÉMIAŊ

Kávéfőzési matematika

A vendéglátóiparban egyre fontosabb lesz, hogy állandó minőségű, kellemes ízű kávét szolgáljanak fel minden körülmények között. A presszókávéről már régóta ismert, hogy íze igen érzékeny az elkészítés körülményeire, eddig ezért elsősorban az emberi tényezőt tartották felelősnek. Egy újonnan kifejlesztett, kísérleti mérésekből kiinduló matematikai modell viszont azt mutatta, hogy az elkészített ital minőségének fenntartása szempontjából a kávédaráló sajátságai és az extraháláshoz használt víz nyomása a döntő fontosságúak. A modelltől kapott eredmények alapján olyan presszókávé-készítési útmutatót dolgoztak ki, amely követésével nagyon állandó minőségű italt lehet készíteni, és ráadásul az egy adaghoz szükséges kávébab mennyiségét is 25%-kal csökkenteni lehet.

Matter 2, 631. (2020)



CENTENÁRIUM



Fritz Ullmann, Achille Conzetti:
Über 1-Oxy-4-chlor-anthrachinon
Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft, Vol. 53, pp. 826–837.
(1920. május 15.)

Fritz Ullmann (1875–1939) német kémikus volt. Genfben szerzett PhD-fokozatot, majd a Berlińi Műszaki Egyetem jogelődjén tanított. Ő vezette be a dimetil-szulfát használatát alkilezési reakciókban. Az általa útjára indított és az ő nevét viselő *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry* mind a mai napig létező kiadvány.

In silico Grignard-reakció

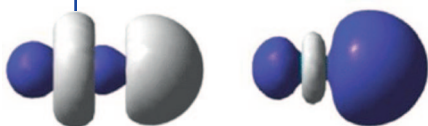
A Grignard-reakció már több mint száz éve ismeretes, a szén-szén kötések létrehozásának egy viszonylag egyszerű módja. Természetesen a mechanizmusát is sokat vizsgálták már, de még korántsem tisztáztak minden részletet. A közelmúltban végzett nagyon részletes kvantummechanikai számítások jelentős új felismerésre jutottak. A metil-magnézium-klorid reakcióját vizsgálták acetaldehiddel és fluorenonnal tetrahydrofuran oldószerben. Versengő gyökös és nukleofil reakcióutak egész sorát tárták fel, amelyek között az aktiválási energia különbsége nagyon kicsi volt. A váratlan megfigyelés az volt, hogy a magnézium köré a szokásos négy ligandum helyett öt tetrahydrofuran-molekula koordinálódott, ezért a fémcentrum elektronszerkezete teljesen megváltozott. Így világossá vált, hogy miért annyira fontos az oldószer szerepe a reakcióban.

J. Am. Chem. Soc. 142, 2984. (2020)



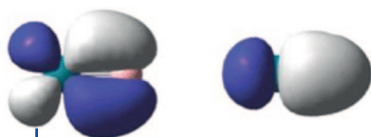
Bór négyes kötésben

Meglehetősen elterjedt nézet, hogy négyszeres kovalens kötés nem fordulhat elő a második periódus elemei között. Ezt a vélekedést cáfolta meg az a kísérleti eredményeket is és elméleti számításokat is tartalmazó munka, amely az RhB₂O⁻ és RhB⁻ ionok kötésviszonyait tanulmányozta. A felfedezés tulajdonképpen a véletlen műve: a szerzők az RhB részecskét tanulmányozták. Ennek a rezgési frekvenciái azt mutatták, hogy a kötés benne rövidebb és erősebb, mint az protonált RhBH⁺ változatban, amelyben viszont jól ismertén hármaskötés van. Kvantumkémiai számítások szerint a négy kötés közül kettő σ, kettő pedig π jellegű.



HOMO-1, 2σ

HOMO-3, 1σ



HOMO-2, 1π

amelyben viszont jól ismertén hármaskötés van. Kvantumkémiai számítások szerint a négy kötés közül kettő σ, kettő pedig π jellegű.

J. Phys. Chem. Lett. 11, 659. (2020)

APRÓSÁG

A 2019-es torontói filmfesztiválon bemutatott *Radioactive* című brit filmben Marie Curie Skłodowska szerepét Rosamund Pike játssza.



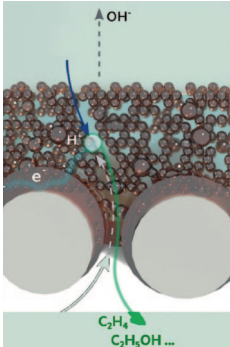
Ha észrevétele vagy ötlete van ehhez a rovathoz, írjon e-mailt Lente Gábor rovatszerkesztőnek: lenteg1206@gmail.com.

A rovatszerkesztő korábbi írásait is tartalmazó blog elérhető a következő internet-oldalon: http://lenteg.ttk.pte.hu/ScienceBits/index_magyar.html



A HÓNAP MOLEKULÁJA

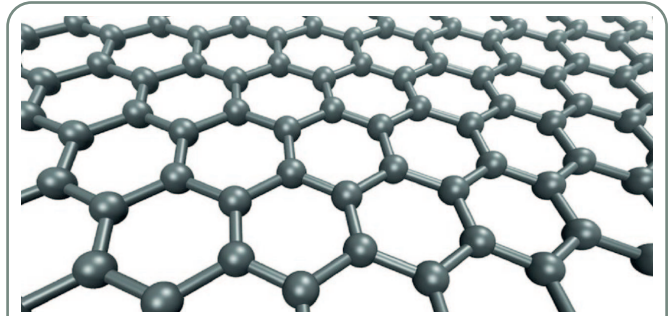
A címlapon látható molekuláris óriáskerék ($C_{1740}H_{2430}F_{36}N_{60}Si_{48}Zn_{12}$) új rekordot jelent az aromás rendszerek méretének (soha meg nem hirdetett) versenyében. Összesen 12 db porfiringyűrű található a külső, nagy körön. A teljes molekulából hat elektront eltávolítva 162 π -elektronból álló rendszer jön létre, amelynek aromás jellegét kísérletileg is igazolták. *Nat. Chem.* 12, 236 (2020).



Elektrolízissal a klímaváltozás ellen

Elektrolitikus módszerekkel termodinamikailag nem kedvezményezett reakciók is kiválthatók, így a szén-dioxid redukciója is. Ez a folyamat ipari léptékben megvalósítva akár az üvegházhatású gáz légköri koncentrációjának csökkentése miatt is jelentős lehet. A jelenlegi módszerek sebesség- s így hatékonyságmeghatározó lépése általában a gáz folyékony elektrolitban történő diffúziója az elektród felszín felé. A közelmúltban sikerült a CO_2 elektrolitikus redukcióját úgy véghez vinni, hogy közben a gázdifúzió, az iontranszport és az elektrontranszport nem egymáshoz csatolódva zajlottak. Az eljárás lényege egy hidrofób és hidrofil funkciókat is tartalmazó ionomer használata: ezzel rézelektrodon erősen lúgos körülmények között (kb. 15-ös pH-n) egyszerre sikerült nagy áramsűrűséget ($1,3 \text{ A/cm}^2$) és jó elektromos energiafelhasználási hatékonyságot (45%) elérni. A közvetlen redukciós termékek nagy része etanol és etilén, de további lépések közbeiktatásával a levegő szén-dioxidjából végső soron akár üzemanyagok is készíthetők.

Science 367, 661. (2020)



Grafén olcsón és gyorsan

Amerikai kémikusok új grafén-előállítási módot dolgoztak ki, amellyel nagy mennyiségű, jó minőségű termékhez lehet jutni nagyon olcsó kiindulási anyagok felhasználásával. A módszer ötlete akkor született meg, amikor egy doktori hallgató a nagyon gyors Joule-fűtésről olvasott (igen rövid idő alatt nagy elektromos áram termel jelentős hőt), s azon kezdett gondolkodni, vajon mi történne a szénporral ilyen körülmények között. Az elmékedést kísérletezés követte, és azt tapasztalták, hogy a legtöbb széntartalmú anyagból grafént lehet előállítani ezzel a technikával: a közleményben pisztáciahéj, gumibroncs, illetve hulladék PET-palack is szerepel kiindulási anyagként. Az eljárásban először tömörítik a széntartalmú anyagot, majd kerámiacsőben két elektród közé helyezik, amelyek között egy kondenzátor segítségével nagy feszültségű kisülést hoznak létre. Így a hőmérséklet egy másodpercen belül 3000 K -t is változhat, és 1 grammnál is több grafént keletkezik.

Nature 577, 647. (2020)



Korrózió a nukleáris hulladékok tárolásában

Az atomerőműveket üzemeltető országok többségében a jelenlegi tervek szerint a nukleáris hulladékot föld alatti tárolókba helyezik majd el kerámia vagy üveg formájában, a tárolóanyag pedig rozsdamentes acél lesz. Egy szimulációs tanulmányorozat eredményei szerint ilyen körülmények között az üveg-acél határfelületen jelentősen gyorsabb lehet a korrózió, mint a korábbi adatok alapján gondolták. Ennek fő oka az, hogy a lokális savasság vagy lúgosság az érintkező felületek közelében nagyon eltérhet attól, mint amit az anyagok belsejében lehet tapasztalni. Valószínű, hogy a tanulmány eredményeit felhasználva újra kell majd tervezni a használt nukleáris üzemanyag hosszú távú tárolására szolgáló eszközöket.

Nat. Mater. 19, 310. (2020)

Mesterséges kígyóméreg

A kígyóméreg számos érdekes vegyületet tartalmaznak, de igen nehéz kellő mennyiségben természetes forrásból beszerezni őket. Ezért számít jelentős új eredménynek az, hogy összejtek felhasználásával laborkörülmények között sikerült miniatűr mérgegyeket növeszteni. Emlősök összejtejének ilyen jellegű kezelése már jól ismert technika, de hüllők esetében még szinte semmi korábbi tapasztalat nem volt az irodalomban. A emlősöknél szokásos eljárás csak annyit módosítottak, hogy a hőmérsékletet a szokásos 37 °C -ról 28 és 32 °C közé csökkentették. Ennek eredeti oka pusztán megérzés volt, ami azon alapult, hogy a kígyók testhőmérséklete nem állandó. Később a részletes vizsgálatok ezt a döntés fényesen igazolták: magasabb hőmérsékleten az összejtek elpusztulnak. A technika segítségével sok kígyófaj mérgéből lehet majd elég nagy mennyiséget előállítani ahhoz, hogy a kémiai összetételüket nagyon alaposan jellemezzék.



Cell 180, 233. (2020)