

Kémiai PANORÁMA

2012. évfolyam 1. szám (8. szám)

Ára: 690 Ft

A MÉZ

Folyékony arany

JUNIOR TERMÉSZETTUDOMÁNYI OLIMPIA

Magyar diákok az EU legjobbjai

NAGY SZÉNMOLEKULÁK A VILÁGŪRBEN

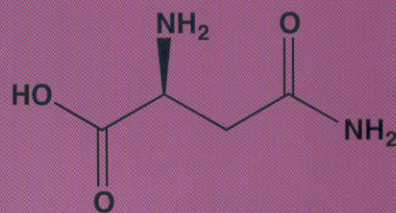
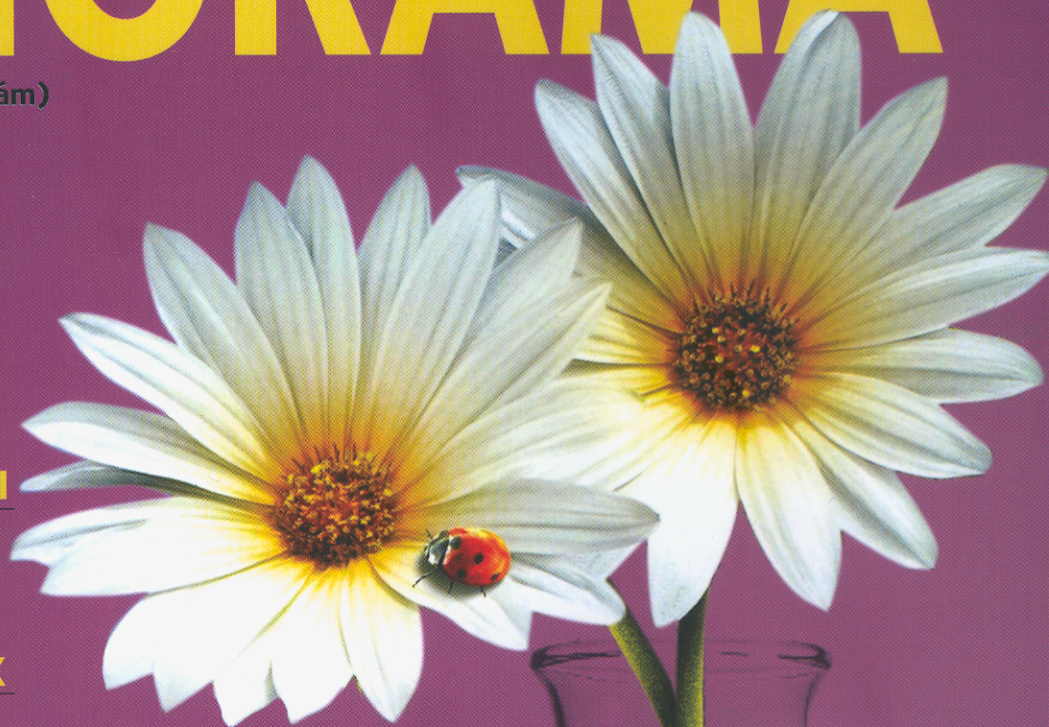
Fullerének csillagászati felfedezése

ILLATOK, TERPÉNEK

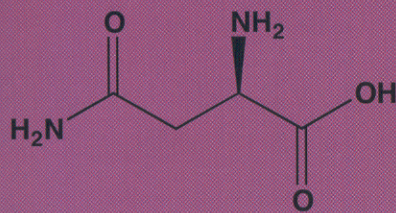
A természet illatmolekulái

LÁNGOK AZ ŪRBEN

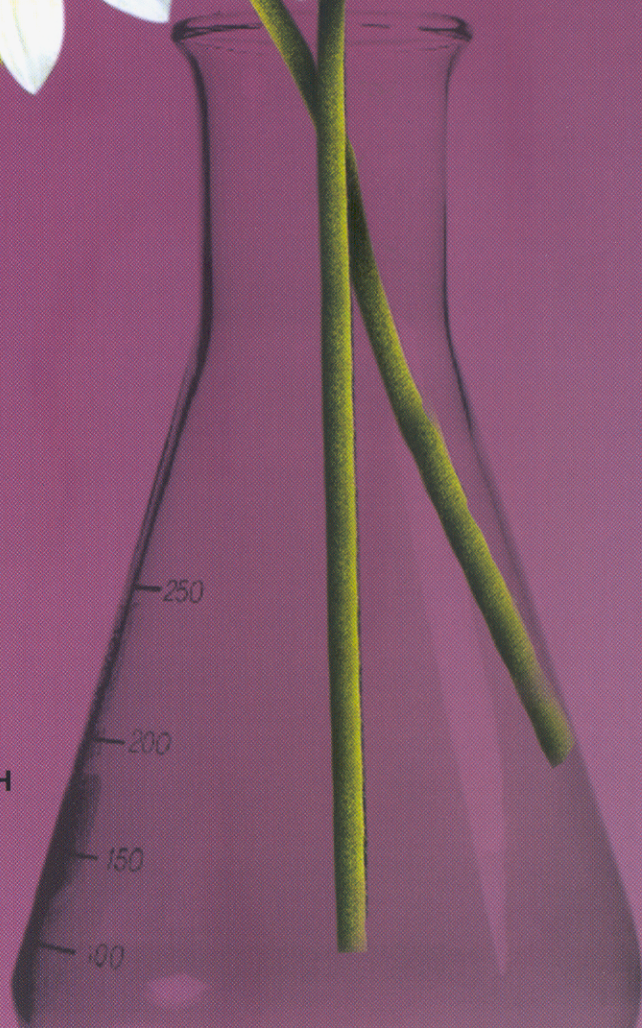
Mikrogravitáció



L aszparagin



D aszparagin



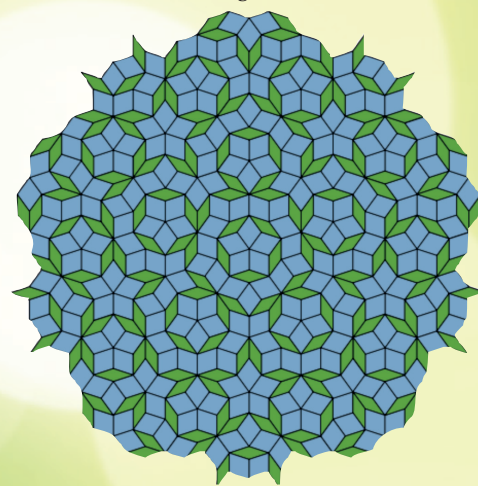
Nyolcadik számunk elé

A Kémia Nemzetközi Éve véget ért, de a kémia itt marad velünk, környezetünkben, használati eszközeinkben, gyógyszereinkben – azaz életfolyamatainkban –, vagyis bennünk is. E folyamatok megismerése, vagy csak jobb megértése nem kampányfeladat, hanem életreszóló program azoknak, akiket a természet titkai érdekelnek és időt szánnak e titkok megfejtésére. Természetesen nem mindenki adja fejét ilyen programra, de legtöbbünket legalább alapszinten érdekel e titkok mibenléte. A Kémiai Panoráma magazinnal azokhoz próbálunk szólni, akik tisztelik a természettudományokat és megpróbálnak belőlük minél többet megérteni. Reméljük, hogy számainkat nyitott szellemmel olvassák azok is, akiknek fő érdeklődése nem éppen a kémia területén található. **Pálinkás Gábor, Simonyi Miklós, Nemes László**

Szent Györgyiről – Szegeden

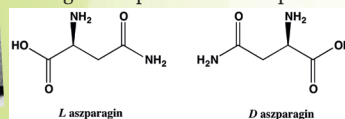
A szegedi egyetem egykori professzora és rektora külföldi tanulmányok és kutatómunka után hazatérve, Magyarországon végzett kutatásaiért kapta meg a Nobel-díjat. Szent-Györgyi Albert 1937-ben a biológiai égésfolyamatok, különösen a C-vitamin és a fumársav-katalízis szerepének terén tett felfedezéseiért kapta meg az orvosi és élettani Nobel-díjat, egyetlen olyan magyar természettudósként, aki Magyarországon végzett tudományos tevékenysége elismeréséül érdemelte ki a kitüntetést. Díjazásának 75. évfordulója alkalmából a március 22-25. között megrendezett nemzetközi konferenciára a világ minden tájáról érkeztek kutatók. A négy napig tartó programsorozat központi helyszíne a szegedi József Attila Tanulmányi és Információs Központ volt, a szekcióülések a Szegedi Tudományegyetem fő kutatási témái köré szerveződtek. A rendezvényre érkező közel ezer vendég közül a legnagyobb figyelem annak a kilenc Nobel-díjas tudósnak jutott, akik elfogadták a szervezők meghívását: Andrew W. Schally 1977-ben, Bert Sakmann 1991-ben, Eric Wieschaus 1995-ben, Peter C. Doherty 1996-ban, Tim Hunt 2001-ben orvosi és élettani Nobel-díjat; Ada E. Yonath 2009-ben, Aaron Ciechanover 2004-ben, John E. Walker 1997-ben, Robert Huber pedig 1988-ban kémiai Nobel-díjat kapott. A Nobel-díjas kutatók az előadások mellett személyesen is találkoztak az egyetem hallgatóival és szegedi középiskolásokkal. Eric Wieschaus orvosi-fiziológiai Nobel-díjas tudós a megnyitón kiemelte: „rendkívül fontos, hogy a fiatalok megtalálják életükben azt a tudományos szakterületet, amin a későbbiekben elhivatottan dolgozhatnak”. (MTA.hu alapján)

4-7 2011. évi kémiai Nobel-díj
Elismerés a kvázikristályok felfedezésért – és az állhatatosságért – Bombicz Petra



8-11 Aszparaginok íze

A sztereoselektivitás felfedezése biológiai receptorokon – Joseph Gal



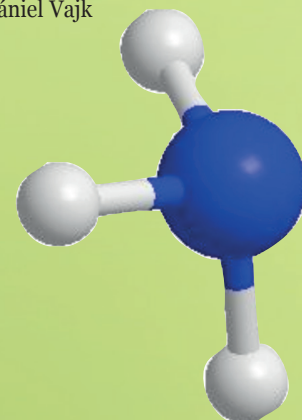
12-16 A folyékony arany

Termett méznek áldott-sága – Wayand Judit



17 Junior természettudományi olimpia – Az EU legjobbjai – Villányi Attila

18-21 Ammóniagyártás
A világ élelmezésének biztosítója – Horváth Dániel Vajk



Köszönjük és várjuk a véleményeket

A Kémiai Panoráma 8. számát tartja kezében. Megköszönjük eddigi érdeklődését és leveleit, amelyeket a panorama@chemres.hu címre küldött. Az olvasói levél megerősít bennünket abban, hogy törekvésünk nem hiábavaló. Kérjük, hogy folyóiratunkat továbbra is kísérvé figyelemmel, és tegye meg észrevételeit, javaslatait. **A szerkesztőség**

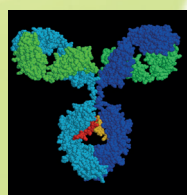
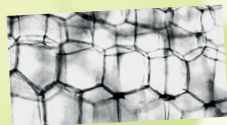
A Kémiai Panoráma magazin az ÚMFT TÁMOP 4.2.3 KMR/1/2008-0006 pályázat keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával (3-6. számok), továbbá az MTA Kémiai Osztálya (4-6. számok) és a Servier Gyógyszerkutató Intézet (5-6. szám) támogatásával valósult meg.





22-23 Gyógyító molekulák a növényekben

Aloe vera – Kószegi Lídia

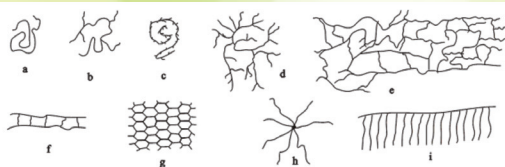


23-25

Immundefestés

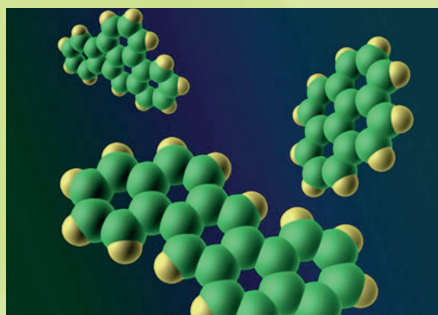
Immundefestés akcióban – Dobolyi Árpád

26-29 Műanyagok stabilizátora



Természetes antioxidáns a polimer védelméért – Tátraaljai Dóra

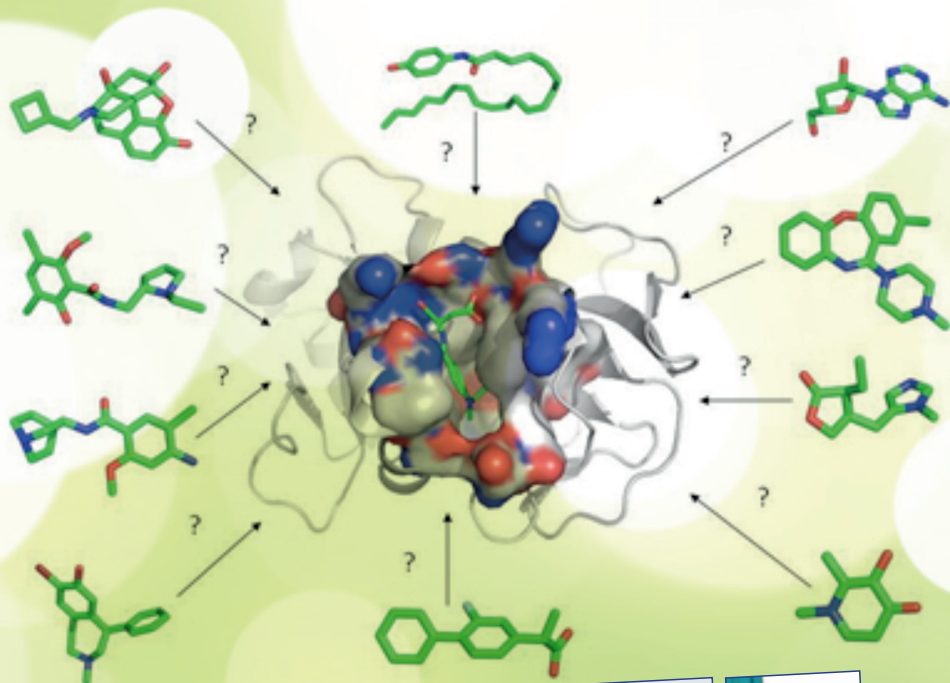
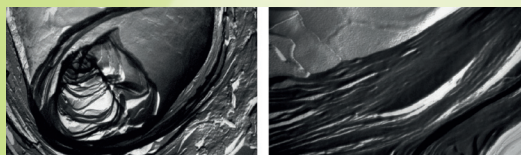
30-33 Fullerének csilagászati felfedezése



Nagy szénmolekulák a világűrben – Nemes László

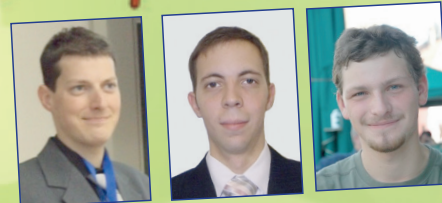
34-39 Modell-membránok

A Tris pufferrendszer hatása – Karácsony Zs.–Mihály J.–Bóta A.



40-41 Kémiai szépségverseny

Vegytan és esztétika – Héja László



42-43

Illatok, terpének

A természet illatanyagai – Varga Szilárd



44-46

Lángok az űrben

Földönkívüli fénycsóvák – Németh András és Baranyai Péter

47 Ahol folytatódik a kémia éve

Refikém – Labancz István



48-49 Versenygyőztesek

Nyertes kémiai diákkörösök – Barta Judit

50-51 Gyógyszerszint

Terápiás gyógyszerszint-monitorozás – Budai Livia – Vékey Károly

52-55 A véralvadás gátlása

Molekuláris csapda trombózis ellen – Komáromi István



56-58 Re-akció

Kémiai panoráma közösségi oldala – Paszternák andrás

59 A kémia nemzetközi éve 2011.

Zárórendezvény Csömörön – Merényi Márta



Elismerés a kvázikristályok – és az állhatatosságért

A kváziperiodikus kristályok felfedezése nyomán a Nemzetközi Krisztallográfiai Unió (IUCr) megváltoztatta a kristály definícióját. A korábbi meghatározás szerint a kristályt felépítő atomok a kristályban három dimenzióban ismétlődő mintázat szerint rendeződnek el, azaz a periodicitás szükséges velejárója a rendnek. 1992. óta kristályon értünk bármely szilárd anyagot, mely alapvetően diszkrét diffrakciós képet mutat, továbbá aperiodikus alatt értünk bármely kristályt, amelyben a három dimenziós rács periodicitása hiányzik [1].

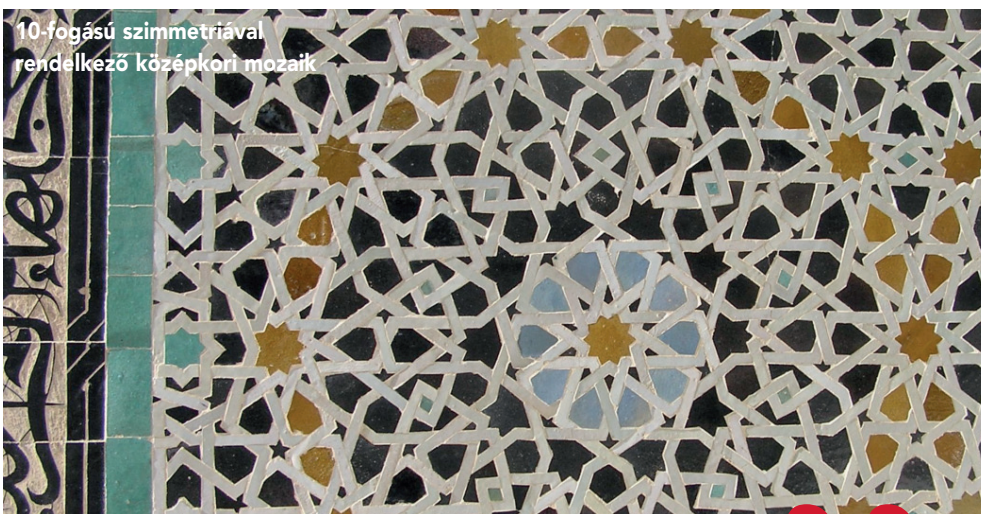
Két év után 2011-ben ismét krisztallográfiai munkáért ítelték oda a kémiai Nobel-díjat, a rövid hivatalos indoklás szerint a „kváziperiodikus kristályok felfedezéséért”. Ez paradigmaváltást

hozott abban, hogyan képzeljük el az atomok és molekulák elrendeződését szilárd fázisban. A díjat Daniel Shechtman, a Technion – Izraeli Műszaki Egyetem (Israel Institute of Technology, Haifa) – Anyagmérnöki Karának 70 éves profesz-

A kémiai Nobel-díj aranymedálja



Utcakő Fezben



10-fogású szimmetriával rendelkező középkori mozaik

szora kapta.

„Ilyen állat nincs” kiáltott fel Daniel Shechtman 1982. április 8-a reggelén az USA Szabványügyi Hivatala laboratóriumában, amikor meglátta a gyorsítottuló alumínium-man-



Daniel Shechtman, a kémiai Nobel-díj 2011. évi kitüntetettje

Ilyen állat nincs – mondta az először látott diffrakciós képre Dan Shechtman

”

gán ötvözet (Mn 25%) elektrondiffrakciós képének tízfogású szimmetriáját. Megszámolta egyik, majd másik irányból is. A kísérletet megismételve



fel fedezéséért

ugyanarra az eredményre jutott. Szerette volna megosztani a váratlan, hihetetlennek tűnő felfedezést valakivel, de nem talált egy kollégát sem a folyosón. Visszament az elektronmikroszkóphoz és a nap folyamán egy sor kísérletet végzett el. Néhány nap alatt a teljes kísérleti munkát befejezte. Az eredmények közzététele azonban még jó két évet váratott magára.

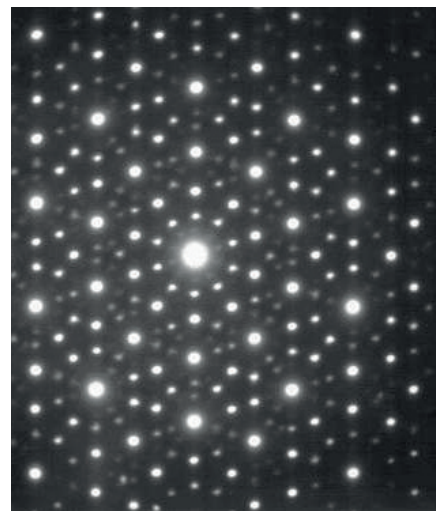
Daniel Shechtman felismerése pontosan 70 évvel azután történt, hogy Max von Laue elvégezte az első diffrakciós kísérletet, bizonyítva egyúttal a sugárzás elektromágneses hullámtermészetét, és az anyag atomi rácsszerkezetét. A 70 év alatt kialakult klasszikus kristallográfia szerint a kristályokban előforduló szimmetria műveletek (szimmetriacentrumra, vagy tükrősíkra történő tükrözés, a forgatás és ezek kombinációi) szabályos, rendezett, periodikusan ismétlődő mintázatot adnak [2]. A megengedett szimmetriaelemek kombinációjával a síkban 17, a térben 230 féle mintázat állítható elő. A hetven év alatt feltárt kb. 50000 kristályszerkezet [3] mind periodikus volt. Az ezeken az elveken nyugvó (leggyakrabban röntgen sugárzást felhasználó)

egy kristálydiffrakció módszerével megismerhetjük szilárd fázisban az anyagok szerkezetét. Atomi felbontású képet kapunk a szervetlen és szerves vegyületek, fehérjék és vírusok kisebb építőelemeiből (ionokból, atomokból, molekulákból, makromolekulákból) történő felépüléséről. **Megtudjuk, hogyan illeszkednek a kristályban a szimmetriák által egymáshoz rendelt egységek.** Mára több mint félmillió anyag szerkezetét ismerjük [3]. Az atomi, molekuláris, molekulák közötti szubmikroszkópikus tulajdonságok kapcsolatba hozhatók az anyag makroszkópikus, fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságaival. Ezen ismeretek birtoában lehetővé válik adott célra megkívánt fizikai-kémiai tulajdonságú anyagok előállítás. A máig fejlődő és virágzó klasszikus egy kristálydiffrakció egy interdiszciplináris tudományág, ami matematikai, fizikai,

kémiai, biológiai és anyagtudományi ismereteket igényel és folyamatosan bővíti azokat.

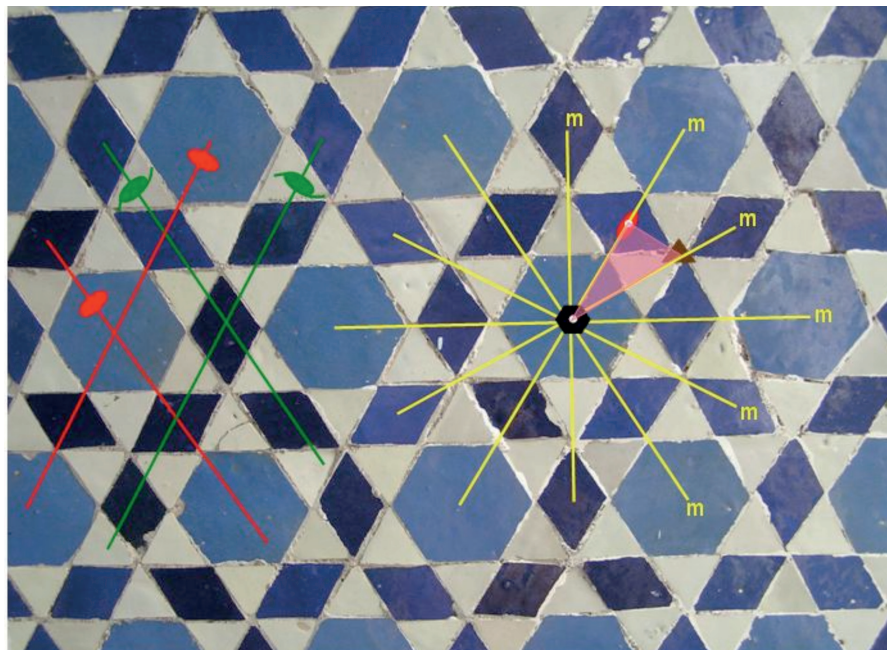
1982-ben senki nem várt új felfedezést, senki nem keresett újat a kristallográfiai szimmetriák területén. A korábbi elképzelések szerint a kristályokban megengedett forgási szimmetriák az 1, 2, 3, 4 és 6 fogású tengely, az ötfogású és a hatnál magasabb szimmetria tiltott a periodikus rendszerekben. Ez azt jelentené, hogy a Daniel Shechtman által megfigyelt ikozaéderes (tízfogású) szimmetria nem létezhetne. Az aperiodikus kristályokban azonban az atomi elrendeződés szabályos, rendezett, matematikai szabályokkal leírható, mégsem ismétli önmagát a végtelenben sem.

A kvázikristályok felismerését és értelmezését több, egymástól függetlenül történt

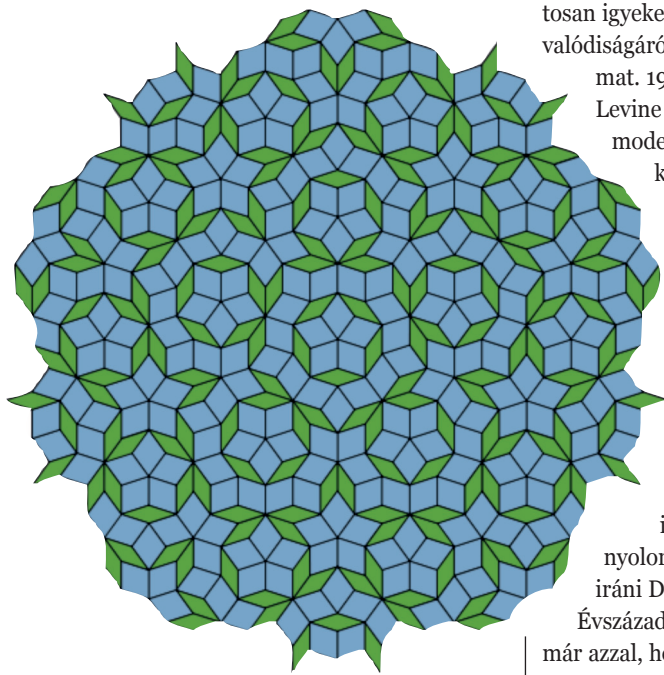


Tízfogású szimmetriával bíró elektronmikroszkópos diffrakciós kép.

esemény szálainak összefonódása tette lehetővé. Az 1970-es évek közepén a matematikus Roger Penrose-nak sikerült aperiodikus mozaikot kiraknia [4]; olyan mintázatot, mely sosem ismétli önmagát, ráadá-



Síkbeli periodikus mintázat. A szabályos háromszögekből, rombuszokból és hatszögekből kirakott csempe eltolással ismétlődő ritmusa könnyen felismerhető. További megtalálható szimmetriák 1. szimmetriacentrum (fehér pont a fekete hatszögben), 2. a lap síkjára merőlegesen: kétfogású tengely (piros ovális), háromfogású tengely (barna háromszög), hatfogású tengely (fekete hatszög) és tükrősík (sárga vonalak) 3. a lap síkjában: kétfogású tengely (piros ovális és vonal) és kétfogású csavartengely, mely a kétfogású tengely és a szimmetriacentrum kombinációjaként áll elő (zöld ovális és vonal). Rózsaszínnel kiemelve az a legkisebb mintarész látható (aszimmetrikus egység), melyből a teljes mintázat a szimmetriák felhasználásával kirakható.



A Penrose csempézet: szabályos, rendezett, de nem ismétli önmagát a végtelenben sem

sul úgy, hogy csak két különböző rombusz alakú építőelemet használt, egy vastagabbat és egy vékonyabbat. A szórakozásból megoldott matematikai feladványnak fontos gyakorlati alkalmazása lett a krisztallográfiában. 1982-ben Alan L. Mackay elméleti diffrakciós mintázatot állított elő. Atomokat jelképező lyukakat ejtett a Penrose mintázat metszéspontjain. A modellt lézerfényvel megvilágítva tízfogású szimmetriát mutató diffrakciós képet kapott. 1982-ben Daniel Shechtman elektronmikroszkópján tízfogású szimmetriájú diffrakciós képet detektált. Ez szemben állt az akkori fel fogás szerint a természet törvényeivel, mert feltételezték, hogy minden kristály periodikus. Shechtman azonban biztos volt benne, hogy a felvétel jó, és nem egy szabályos kristály hibáival, „ikerkristállyal” áll szemben (ikerkristály: egyazon anyagnak két vagy több, mindig bizonyos meghatározott sík szerint összenőtt kristálya). Shechtman és Mackay nem tudtak egymás eredményeiről. Az szerencse volt, hogy Shechtman ráakadt az ikozaédes kristályra, azonban felismerte jelentőségét és attól fogva tudat

osan igyekezett az új, különös eredmények valódiságáról meggyőzni a tudós társadalmat. 1984-ben Paul Steinhardt és Dov Levine kapcsolta össze Mackay modelljét és Shechtman diffrakciós képét, felismerve, hogy az aperiódikus mozaik segítségével lehet megmagyarázni a sajátos diffrakciós képet.

A tudomány, a művészet és a vallás találkozása már évszázadokkal korábban megvalósult: a szabályos mintázatok, melyek nem ismétlődnek, már a középkori arab művészek lenyűgöző mozaikjaiban megjelentek, például a spanyolországi Alhambrában vagy az iráni Darb-i Imam szentélyben.

Évszázadokon keresztül próbálkoztak már azzal, hogy szabályos ötszögekből alakítsanak ki hézagok és átfedések nélkül sík- és térbeli felületeket. Albrecht Dürer élete vége felé szenvedélyesen foglalkozott arányelméleti és geometriai kérdésekkel, 1525-ben jelent meg A mérés tankönyve, 1558-ban pedig az Arányelmélet című értekezése. Azonban az aperiodicitás természetben való előfordulásának felismerése még sokáig váratott magára.

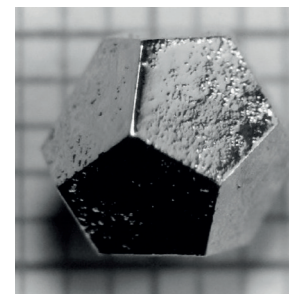
Az öt- ill. tízfogású szimmetria a tudomány 1982-es állása szerint a természet szabályai ellen való volt. Ugyanakkor létezett, de el kellett hitetni a világgal, hogy



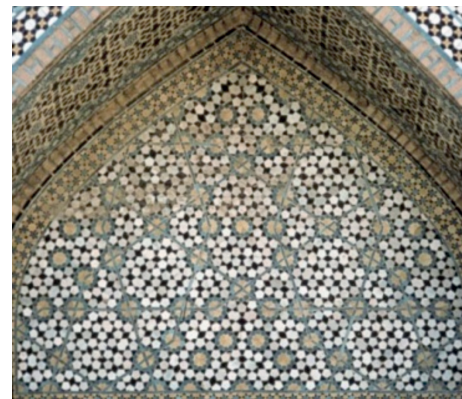
Marokkói középkori szabályosan ismétlődő csempe mintázat rombuszból és négyzetből (mint speciális rombusz),



Ötszögű lapokkal határolt testek a művészetben, és a természetben: Albrecht Dürer (1471-1528) Melankólia című képe,



Ho-Mg-Zn ikozaédes kvázikristály dodekahedron formájában,



Az 1450 körül épült iráni Darb-i Imam szentély kváziperiodikus, szabályos, de sosem ismétlődő díszítése. A transláció, azaz a periodikusság hiánya felismerhető az ötfogású szimmetriával bíró mozaik mintázaton.



valóban léteznek. A klasszikus krisztallográfia szabályai az emberi osztályozás szabályai, nem a természet törvényei voltak.

Daniel Shechtman 1981-ben érkezett az Egyesült Államok Szabványügyi Hivatalába, hogy vendégkutatóként két évet töltsön ott. Olyan ötvözeteket vizsgált, melyek kereskedelmi szempontból hasznosak lehetnek, ugyanakkor munkájához meglehetősen szabadságot biztosítottak. Az újonnan észlelt aperiodikus kristályról készült diffrakciós képet megmutatta kollégáinak. Mindenki rácshibás, ikerkristályokra gondolt, és nem tartották különösebben érdekesnek. A laborvezetőtől kapott egy krisztallográfiai tankönyvet, hogy olvassa el, abból megérti, hogy lehetetlenség, amit állít. A könyvet ismerte, ebből tanulta a röntgendiffrakciót, vizsgázott belőle az egyetemen, sőt később ebből tanított. Biztos volt benne, hogy transzmissziós elektronmikroszkópos felvételeivel bizonyítani tudja, hogy ez most valami új, amit talált. A Szabványügyi Hivatalból eltanácsolták. Miután visszatért a Technionra Ilan Blechhel együtt kerestek olyan térbeli szerkezeteket, ikozaédeser modelleket, amelyek Fourier transzformáltja (bármely szabályos, rendezett függvény – mint pl. az elektronsűrűség a kristályban – leírható a megfelelő amplitúdójú, fázisú és frekvenciájú függvények összegeként) megegyezik a kapott diffrakciós képpel. A tapasztaltakat összefoglaló kéziratot a Journal of Applied Physics folyóirathoz küldték be 1984 nyarán. A szerkesztő azt postafordultával visszaküldte mondván, hogy ez nem érdekli a fizikusokat. Ezután a lerövidített kéziratot, mely ezúttal a modellt nem, csak az elektronmikroszkópos eredményeket tartalmazta a Physical Review Letters-hez küldték be. A cikk novemberben megjelent [5]. A kéziratot még publikálása előtt több kutatónak megmutatták, hogy megvitassák. Az eljutott Paul Steinhardthoz és doktoránsához, Dov Levine-hoz. Ők ismerték fel a kapcsolatot a mért ötfogású diffrakciós kép és Mackaynek a Penrose csempézetéről készült elméleti Fourier transzformáltja között. Cikkük még az év karácsonykor megjelent [6]. A közlemények fordulatot hoztak a krisztallográfiában és az anyagtudomány-

ban. Előkerültek mások mérései, melyeket így már értelmezni tudtak. A kváziperiodikus kristályok kutatásába hirtelen sokan belefogtak. Élete végéig szkeptikus maradt azonban az aperiodikus kristályok iránt Linus Pauling (1901-1994), a modern szerkezeti kémia és molekuláris biológia megalapozója (1954. kémiai Nobel-díj, 1962. Nobel Békedíj). Időről időre találkoztak Shechtmannal, megvitatták a véleményüket, de Pauling fenntartotta álláspontját, hogy az ikozaédeser kvázikristályok köbös kristályok ikrei. A periodikus kristályokban megtalálható szimmetria-szabályok természetesen érvényesek, de nem minden kristály periodikus. Ennek a ténynek a tudós társadalommal való elfogadtatásáért vívott állhatatos harcot Daniel Shechtman.

Ma már a világ számos laboratóriumában folyik kvázikristály kutatás [7]: Franciaországban, Németországban, Oroszországban, Hollandiában, a Cseh Köztársaságban, Spanyolországban, Svédországban, Svájcban, USA-ban, Mexikóban, Ausztráliában, Kínában és Japánban. Felfedezésük óta százával állították elő a kvázikristályokat - ezek mind fémek - ötvözetek fagyasztásával, gázfázisból történő lecsapással, elektrolízissel és szilárd fázisú kémiai reakcióval. A kváziperiodikus kristályok előtt sokrétű felhasználási lehetőségek állnak. A legkeményebb rozsdamentes acél állítható elő belőle. Jóllehet törékenyebb, alkalmazható például borotvapenge, orvosi műszerek, operációhoz használható eszközök bevonására. Rossz hő és elektromos vezetők. Hő- és kopásálló bevonatok, valamint nem tapadó felület kialakítására alkalmasak. Felhasználhatók repülőgép turbinalapát és dizelmotor bevonataként. 2009-ben találták meg az első természetben előforduló kvázikristályt, az ikozahedritet, Kelet-Oroszországban a Katirka folyóban, mely egy alumínium, réz és vas tartalmú ásvány.

Alan L. Mackay az eseményekben gazdag 1982-ben tartott előadást Magyarországon az ötfogású szimmetriáról, ahol a szimulált diffrakciós képet bemutatta [8]. Ekkor még nem tudott Shechtman kísérletéről. Shechtman ugyanekkor már a kísérleti meg-

figyelés birtokában volt, de nem tudott Mackay szimulált diffraktogramjáról. Daniel Shechtman 1995-ben járt Budapesten és tartott előadást a magyar krisztallográfusoknak. Érdekes megemlíteni, hogy az 1980-as évek két Nobel-díjjal is jutalmazott kiemelkedő felfedezése a kváziperiodikus kristályok (1982) és a fullerének (1984) is az ötös szimmetriához kapcsolódik.

Daniel Shechtmant megkérdezték a Nobel-díj odaítélése után, milyen életre szóló tanulságot tud levonni munkásságából: „Ha kutató vagy és hiszel az eredményeidben, akkor harcolj értük, és harcolj az igazságért. Hallgass meg másokat, de harcolj, és higgy az eredményekben!”

2014-ben lesz a Krisztallográfia Nemzetközi Éve.

Bombicz Petra
MTA Természettudományi
Kutatóközpont



Kapcsolódó irodalom

1. International Union of Crystallography, Report of the Executive Committee for 1991. Acta Cryst. A48, 922-946, 1992.
2. International Tables for X-ray Crystallography, A.J.C. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1992.
3. The Cambridge Structural Database: F.H. Allen, Acta Cryst. B58, 380-388, 2002.
4. Gardner M: Extraordinary Nonperiodic Tiling that Enriches the Theory of Tiles. Scientific American, 236, 110, 1977.
5. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J.W. Cahn: Metallic Phase with Long Range Orientational Order and no Translational Symmetry. Phys. Rev. Lett. 53(20), 1951-1956, 1984.
6. D. Levine, P.J. Steinhardt: Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures. Phys. Rev. Lett., 53, 2477-2480, 1984.
7. European Crystallographic Association. Homepage of the Special Interest Group on Aperiodic Crystals: sig3.ecanews.org
8. Hargittai István és Hargittai Magdolna: Szimmetriák a felfedezésben. Tudomány – Egyetem. Vince Kiadó. 148-182, 2003.

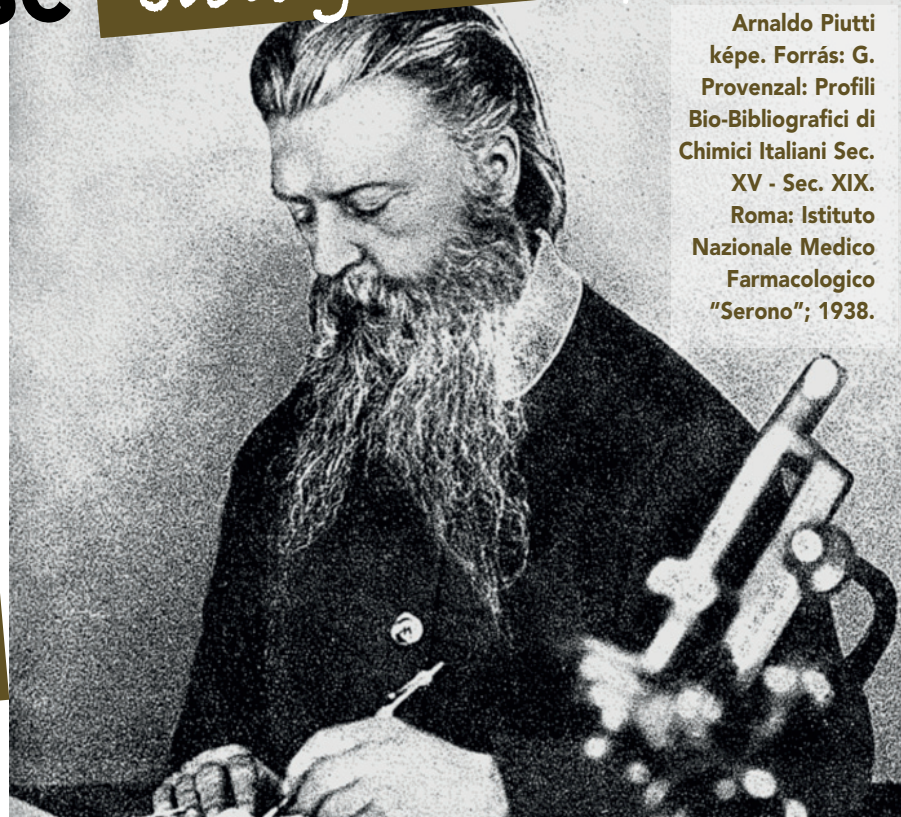
A sztereoselektivitás felfedezése

biológiai receptorokon

A molekuláris kiralitás alapvető jelentőségű egy sor biológiai területen, a biokémiában, fiziológiában, farmakológiában, toxikológiában. Sok királis vegyület biológiai hatásának és bomlásának enantioszelektivitása nagy szerepet játszik a molekulák felismerésében, gyógyszerek hatásának és lebomlásának magyarázatában és új gyógyszerek fejlesztésében.

Egy biológiai folyamat enantioszelektivitásának első megfigyelését Louis Pasteur (1822-1895) végezte el 1857-ben, amikor azt találta, hogy a (+)- és (-)-borkősavakat egy mikroorganizmus különböző sebességgel bontja el (lásd: Pasteur című cikkünket a Kémiai Panoráma 6. számában). Mégis Pasteur felismerése után majdnem három évtizednek kellett eltelnie ahhoz a felfedezéshez, amit ma receptor által közvetített enantioszelektív biológiai hatásnak tekintünk. Ezt az észlelést egy olasz vegyész, Arnaldo Piutti tette meg: elsőként izolálta a D aszparagin aminosavat, összehasonlította az L enantiomerrel és megállapította, hogy az ízük különböző: az L aszparagin ízetlen, míg a D aszparagin erősen édes.

A receptorok olyan makromolekulák, amelyek a sejtek felszínén, vagy belsejében helyezkednek el és a kémiai hírvivők (ingerület átvivők, hormonok, gyógyszerek) biológiai hatását közvetítik (lásd: Kémiai Kommunikáció című cikkünket a Kémiai Panoráma 7. számában). Ma már általánosan elfogad-



Arnaldo Piutti képe. Forrás: G. Provenzal: Profili Bio-Bibliografici di Chimici Italiani Sec. XV - Sec. XIX. Roma: Istituto Nazionale Medico Farmacologico "Seronò"; 1938.

ják, hogy a sztereoselektivitás a receptorok működésének fontos kísérő jelensége és ezért Piutti megfigyelését alapvetőnek kell tekintenünk. Piutti azonban a ma élő kémikusok számára ismeretlen, ezért számos kérdés vetődik fel: ki volt Piutti, mi volt a munkája, mik a felfedezésének részletei és története?

KI VOLT PIUTTI?

Udine mellett született 1857-ben. A Torinói Egyetemen tanult kémiát, Hugo Schiff (1834-1915) német professor előadásait hallgatta, aki pályája nagy részét Olaszországban töltötte és nevét az aromás aminok és aldehidek kondenzációs reakciójában keletkező Schiff bázisok őrzik. 1879-ben Schiff Firenzében lett professor és 1881-ben meghívta Piuttit asszisztensnek, aki itt végezte el aszparaginra vonatkozó felfedezését. Piutti 1886-ban a gyógyszerészeti kémia

professzora lett először a Sassari Egyetemen (Szardínia), majd Nápolyban, ahol 1923-ban a szerves kémia professzorává nevezték ki. Hosszú pályafutása alatt a kémia legszélesebb területeit művelte a gyógyszerek és élelmiszer-termékektől a nemes gázokig, a radioaktivitástól a lipázokig, foglalkozott atomsúlyok meghatározásával, szerves kémiai analitikával, szerves komplexekkel, abszorpciós spektroszkópiával és természetes anyagok vizsgálatával, egyúttal tökéletesítette a kémia tanítását. 1928-ban halt meg.

A FELFEDEZÉS HÁTTERE

Piutti felfedezésének idején a „közönséges“ (L) aszparagin már 80 éve ismert volt: Louis Nicolas Vauquelin (1763-1829) és fiatal munkatársa Pierre Jean Robiquet (1780-1840) a spárga növény (*Asparagus sativus*, Linn) nedvéből izolálta 1806-ban.



125 évvel Piutti felfedezése, az édes aszparagin után a sztereoszelektivitást magyarázó ligand-receptor kölcsönhatás részleteit még mindig nem ismerjük



Vauquelin és Robiquet az izolált új anyag kristályait megküldte koruk ismert krisztallográfusának (René-Just Haüy), aki megállapította a kristályok morfológiáját, de ezek királis jellegét csak Pasteur 1851-ben végzett vizsgálatai derítették ki. Az aszparagin kristályokról Pasteur által készített rajzot az alábbi ábrán mutatjuk be. Pasteur azt is ki-mutatta, hogy az aszparagin vizes oldata balra forgatja a síkban polarizált fényt.

HAT ÉS FÉL TONNA BÜKKÖNY

Piutti a megfigyeléséről szóló első beszámolót egy olasz gyógyszerészeti és kémikai folyóiratban közölte „Az aszparagin egy új fajtája” címmel 1886. júniusában. Hivatkozott Pasteur 1851-ben közölt eredményére, miszerint az aszparagin egy királis molekula amelynek tükörképi párját egy napon meg fogják találni, de a D aszparagin ismeretlen maradt, amíg Piutti fel nem fedezte. (Megjegyezzük, hogy Piutti még nem használta az L D megjelölést, mivel azt Emil Fischer csak jóval később vezette be.)

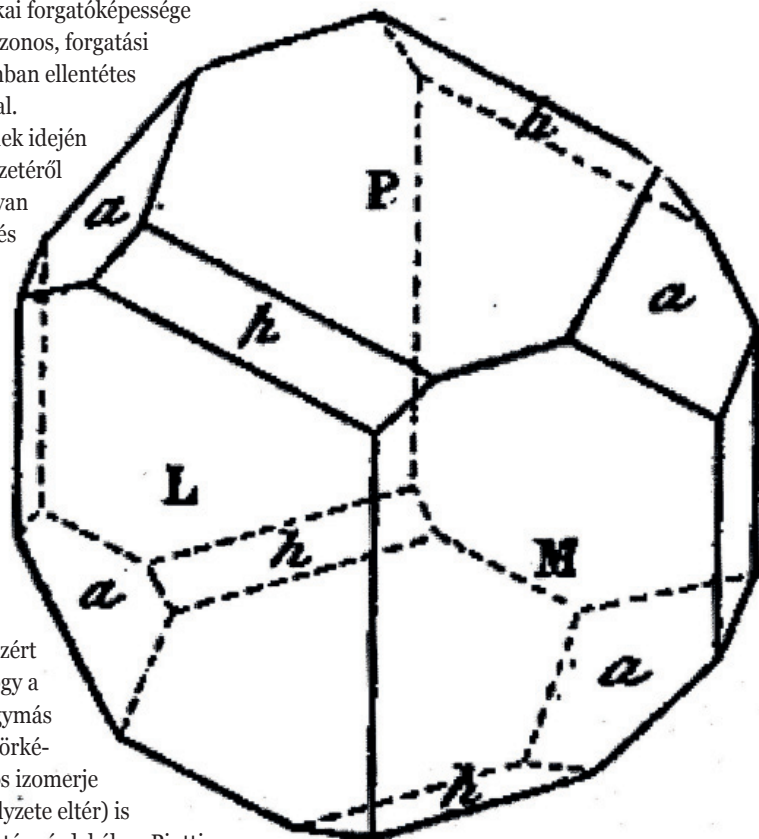
1885. Tavaszán Piutti Sziénában részt vett nagy mennyiségű aszparagin gyártásában. 6500 kg csíráztatott bükköny (*Vicia*) feldol-

gozásával 20 kg nyers balra forgató aszparagint kristályosítottak ki. Az anyalúgból idővel a természetes párolgás által okozott besűrűsödés hatására enantiomorf kristályok keveréke vált ki, amit Piutti szétválogatott és 100 g olyan kristályt nyert, ami az ismert aszparagin tükörképe volt. Az új anyag kémiai tulajdonságai és összetétele megegyezett, vizes oldatának optikai forgatóképessége abszolút értékében azonos, forgatási irányát tekintve azonban ellentétes volt az aszparaginéval.

Piutti felfedezésének idején az aszparagin szerkezetéről annyit tudtak, hogy van benne egy karboxil- és egy kaboxamidcsoport, amelyeket két szénatom választ el egymástól, de az aminocsoport helyzete bizonytalan volt, mert nem lehetett tudni, vajon a karboxillal vagy a karboxamiddal szomszédos szénatomhoz kapcsolódik-e. Ezért Piutti feltételezte, hogy a kétféle aszparagin egymás sztereioizomerje (tükörképe), vagy konstitúciós izomerje (az aminocsoport helyzete eltér) is lehet. A kérdés eldöntése érdekében Piutti a kétféle aszparaginnak több származékát is szintetizálta és királis termékek esetén mindenkor azt találta, hogy az analóg származékok csak egyetlen tulajdonságukban különböztek, a vizes oldatuk forgatóképessége ellentétes irányú volt. Ekkor arra a követ-

keztetésre jutott, hogy az új vegyület az eddig ismert aszparagin tükörképi párja. Az általa 1886-ban izolált D aszparagin egyike volt az először előállított D aminosavaknak.

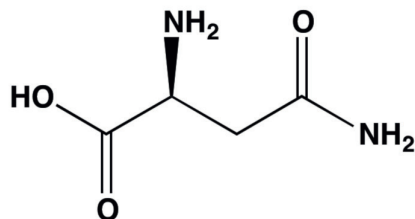
Piutti már az izolálás és tisztítás fázisában észrevette, hogy az új anyag erősen édes ízű, míg Vauquelin és Robiquet az aszparagint „kellemetlen ízű”-nek írta le. Piutti azt is



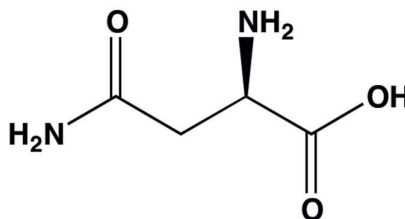
Pasteur rajza az L-aszparagin kristályról (Ann. Chim. 1851, 31, 67-102.)

megjegyezte, hogy az általa ismert tükörképi viszonyban álló vegyületek (pl. borkósav, mandulasav) enantiomerjeinek íze azonos. Így aszparagin az első példája annak, hogy az enantiomerek íze különbözhet, egyúttal a biológiai receptorok enantioszelektivitására vonatkozó első megfigyelés.

Jacobus Henricus van 't Hoff (1852-1911) a kiralitás magyarázatára 1874-ben történelmi jelentőségű tanulmányt írt a szénatom vegyértékeinek a tetraéder négy csúcsa felé eső irányáról és példaként az aszparagint is lerajzolta α -aminosavként. Egyidejűleg a kémiai irodalomban többen is az aszparagint



L aszparagin



D aszparagin

Az aszparagin enantiomerek szerkezete

β -aminosavnak írták le. A dilemma megoldására Piutti a következő reakcióútát választotta:

Az első lépésben dietil-oxalát és etil-acetát kondenzációs reakciójának terméke ketodiészter I. Ez a következő lépésben hidroxil-ammóniával oximmá (II) alakul. Ezután az oximot nátrium-amalgámmal redukálta olyan körülmények között, amikor a két észter-csoport egyike is hidrolizált és a monoetil-aszpartát két izomerjét kapta (III és IV), melyeket külön külön izolálta. Az izomereket etanol ammóniával zárt csőben nyomás alatt ammonolízissel a megfelelő amidokká alakította. Az egyikből megkapta a D és L aszparagin keverékét, míg a másik egy eltérő anyagot produkált (V). Ezután, kihasználva a VI molekula ismert szerkezetét, annak nátrium-amalgámos redukciójával sikerült IV szerkezetét azonosítani és ennek alapján egyértelműen azonosítani a D,L aszparagint, mint α -aminosavat.

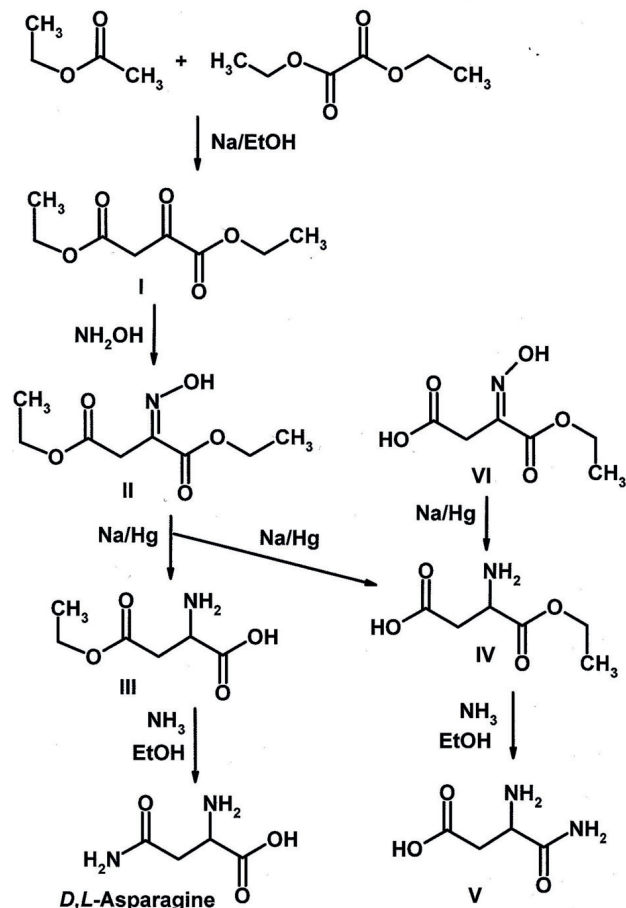
Hans Pringsheim, a Berlieni Egyetem kémia professzora 1910-ben megállapította, hogy L aszparagin vizes oldatát 12 órán át forralva az részlegesen D aszparaginná racemizál és úgy vélte, hogy a Piutti által izolált D aszparagin is a feldolgozás során keletkezett L aszparaginból és valójában D aminosavak nem is fordulnak elő a természetben. Piutti ellenőrizte a felvétést és megállapította, hogy az L aszparagin racemizációja 55°C alatti hőmérsékleten nem következik be. Egyúttal kimutatta, hogy a fehér virágú csillagfürt (*Lupinus albus*) 40°C alatt végzett extrakciójával mind L mind D aszparagin izolálható, tehát a D aszparagin megtalálható a természetben.

Az aszparagin enantiomerek eltérő ízére azonnal reagált Pasteur a rá jellemző tudományos éleslátással. 1886 júliusában a Francia Tudományos Akadémián ismertette Piutti felfedezését a következő megjegyzéssel:

„Erősen hajlok arra, hogy ezt a fiziológiai megfigyelést a kémiai és fizikai tulajdonságaikban megegyező tükörképi molekulákról azok teljesen eltérő viselkedésével kössük össze, amikor ezek egy disszimétrikus (Pasteur szava a királis jelzőre) és optikailag aktív partnerrel találkoznak. Ez az optikailag aktív disszimétrikus anyag, ami az idegi hatás mediátoraként szolgál édes íz

továrbítva az egyik esetben, míg csaknem íztelent a másikban, véleményem szerint nem más, mint maga az ideg anyaga, olyan mint más ősi anyagok: albumin, zselatin, fibrin, stb. De felvetheti valaki, hogyan nem találtunk eddig különböző ízű balra és jobbra forgató anyagokat? Ez nem egy alapos ellenvetés. Eddig az ízek összehasonlítása fel sem merült. De most amikor ez a nagy jelentőségű felfedezés a figyelmet erre irányítja talán megváltozik a helyzet; legalább is ezt remélem.“

Mint látjuk, Pasteur megjegyzése előre vetíti a receptor fogalmát, amit mások csak 15 évvel később fogalmaztak meg (lásd: „Molekuláris izvarázs“ és „Kémiai kommunikáció“ című cikkeinket a Kémiai Panoráma 7. számában).



Piutti szintézisútja az aszparagin szerkezetének igazolására

A BIOLÓGIAI ENANTIOSZELEKTIVITÁS ELSŐ VIZSGÁLATAI

Említettük, hogy a biológiai enantioszelektivitás első észlelője Pasteur volt, amikor megfigyelte, hogy a borköcsav enantiomerjeinek mikrobiális lebontása eltérő sebességgel ment végbe. Piutti felfedezése után kimutatták, hogy a glutaminsav enantiomerjeinek íze is különbözik, továbbá a szerin és hisztidin jobbraforgató enantiomerje határozottan édesebb, mint balraforgató párjuk.

Enantiomer párok eltérő toxikus hatását Arthur Cushny (1866-1926) skót farmakológus mutatta ki 1904-ben: a természetes előfordulású (–)-hyoscyamine bizonyos idegek ingerlésében sokkal hatékonyabb volt az atropinnál (racemát). Cushny azt is igazolta, hogy a (–)-epinephrine (az adrenalin amerikai neve) 12-szer haté-

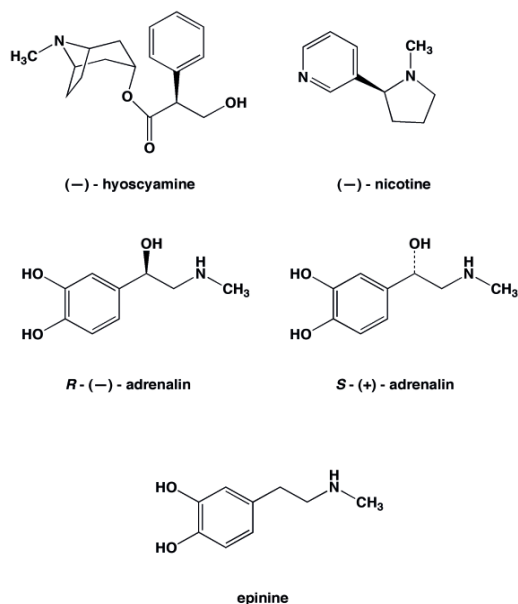


Arthur Cushny.
Forrás: VC Vaughan, „A Doctor's Memories“, The Bobbs-Merrill Co. Indianapolis, 1926.

konyabb a vérnyomás növelésében, mint a jobbraforgató enantiomer. Nem sokkal később mások kimutatták a nikotin optikai izomerjeinek eltérő hatását. A XX. század első évtizedében fektették le az enantioszelektív farmakológia alapjait.

MOLEKULÁRIS ALAPOK

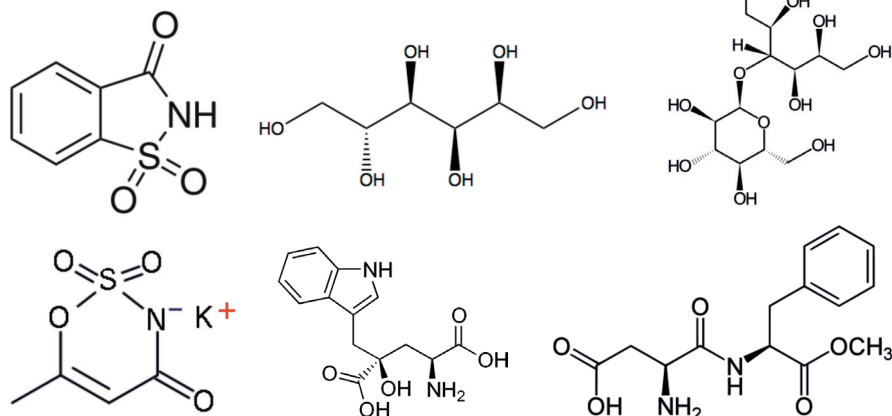
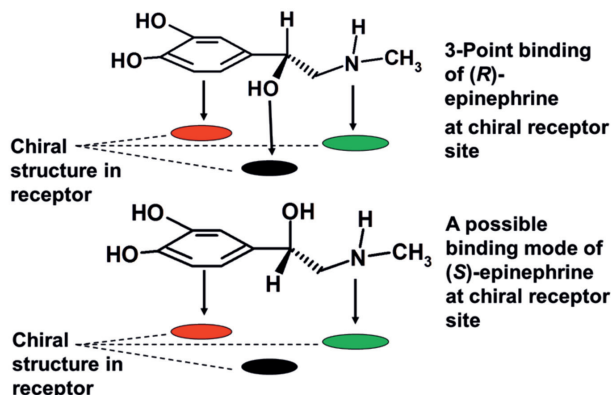
A kémiai szerkezeten alapuló első magyarázatot Esson és Stedman 1933-ban közölte. A (–)- és (+)-adrenalin eltérő vérnyomás-növelő hatásának értelmezésére feltételezték, hogy a receptorhoz az aktív enantiomer három ponton illeszkedik: az



Enantioszelektív biológiai hatás kimutatására használt vegyületek szerkezete

amino-, a benzilhidroxil- és az elektronban gazdag aromás csoporton keresztül. Ha az egyik enantiomer (az R – adrenalin) képes mindhárom csoportjával a királis receptor komplementer helyére kapcsolódni (és kifejteni a teljes biológiai hatást), akkor annak tükörképe (S – adrenalin) erre nem lesz képes, mert csak két ponton kapcsolódhat és ezért biológiai hatása kisebb lesz. Az elmélet igazolására felhasználták az epinint, amiben nincs jelen a kiralitást okozó hidroxilcsoport, ezért csak két ponton illeszkedhet a receptorhoz és a vérnyomás-növelő hatása az S – adrenalinéval egyezik meg.

A fenti modell alapja egy háromdimenziós geometriai megfontolás, ami csak annyit állít, hogy az enantiomerek megkülönböztetéséhez legalább három kölcsönhatási pont



Édesítőszer: szaharin, szorbit, maltit, acesulfám K-sója, monatin, aszpartám

szükséges. Az elv alkalmazható az aszparagin molekulára: három funkciós csoportot tartalmaz (karboxil-, karboxamid- és amino-), amelyek alkalmasak szelektív illeszkedésre az édes íz kiváltó királis receptoron. De az elmélet nem korlátozódik a biológiára; hasonló módon értelmezhetőek enantioszelektív kromatográfiás elválasztások is.

ÉDES ÍZ ÉS SZTEREOSZELEKTIVITÁS

Újabbban az íz biológiája (lásd „Molekuláris ízvarázs” című cikkünket a Kémiai Panoráma 7. számában), különösen az édes ízé nagy figyelmet kap. Ennek oka az, hogy az édességek fogyasztása számos egészségi problémával áll kapcsolatban (pl. elhízás, cukorbetegség, fogszuvasodás, stb). Védekezés céljából sokféle édesítőszer áll rendelkezésre (szaharin, szorbit, maltit, acesulfám, monatin, aszpartám).

Mindazonáltal, a sztereoszelektivitás szerepét az édes íz érzékelésében ma sem értjük

teljesen. A problémát legjobban a monatin és az aszpartám (N-L- α -aszpartil-L-fenilalanin-1-methyl ester) esete jellemzi. Mindkettő négy királis sztereoizomert képezhet, de míg a monatinnál sztereoszelektivitás nem lép fel (valamennyi sztereoizomer édes), addig az aszpartám egyetlen sztereoizomere édes, a többi háromból kettő ízetlen, egy pedig keserű. Utóbbi esetben a keserű íz is biológiai válasz. Ezért a receptoron valószínűleg egynél több kötőhely is található, ill. egynél több receptor közvetítheti az édes ízt.

Talán ironikusan hangzik, hogy 125 évvel Piuttinak az édes aszparaginra vonatkozó felfedezése után a sztereoszelektivitást magyarázó ligand-receptor kölcsönhatás részleteit még mindig nem ismerjük.

**Fordította Simonyi Miklós
JOSEPH GAL**

*Departments of Medicine and Pathology
University of Colorado School of Medicine,
Aurora, CO, USA*

További olvasnivalók

Cushny AR. Further note on adrenalin isomers. *J Physiol* 1909;38:259-262.

Easson LH, Stedman E. Studies on the relationship between chemical constitution and physiological action. V. Molecular dissymmetry and physiological activity. *Biochemical Journal* 1933;27:1257-1266.

Piutti A. Una nuova specie di asparagine. *L'Orosi-Giornale di Chimica, Pharmacia e Scienze Affini* 1886;9:198-202.

(Lásd még: Kiralítás I. és II. című cikkeinket a Kémiai Panoráma 4. és 5. számaiban).

Termett méznek áldottsága

Sűrűség, viszkozitás, oldatok, bepárlás, kristályosodás, szénhidrátok, cukrok, invertálás, redoxi- és enzimekatalizálta reakciók, fertőtlenítés stb. mind-mind olyan fogalmak, folyamatok, amelyeket a köznapi életből jól ismert "folyékony arany", a méz mintáján bemutatni és magyarázni lehet. A tanulók számára így világossá válik, hogy a kémiai fogalmak, folyamatok megértése, elsajátítása és alkalmazni tudása a mindennapokban is segítségükre lehet.

*„Daloljatok a kedvemér’,
Mit érdekel engem, hidegem lesz vagy
melegem,
csak a mézből, a mézből legyen sokam és
elegem.
Nem érdekel a naptár képe,
sokkal inkább a kaptár népe.
Jeget hoz vagy esőt vagy dért és harmatot,
minden adagból nekem juttassatok egy
harmadot.
S daloljatok a kedvemér’,
csak ennyi, mit egy medve kér...”*



– éneкли Micimackó A. A. Milne: *Micimackó* című művében (fordította: Karinthy Frigyes).

De nemcsak Micimackó szereti a mézet, hanem sokan mások is! Manapság ismét kezd visszafoglalni helyét a táplálkozásban és a gyógyításban. Az egészséges táplálkozás egyik elengedhetetlen alkotóeleme, a természetgyógyászatban pedig alternatív édesítőszerként, gyulladáscsökkentőként, köhögés csillapítására, immunerősítőként ajánlják.

A MÉHÉSZET KEZDETEI

Az ember már az ókor előtt is ismerte és fogyasztotta a mézet. Egy kb. 16000 éve keletkezett, a spanyolországi Arana barlang-

Cromagnoni ősember sziklarajza a spanyolországi Arana barlangban (www.tudorinda-3.blogspot.com/2011/10/mezelo-meh.html)





Egyiptomi falfestmény (<http://www.tudorinda-3.blogspot.com/2011/10/mezelo-meh.html>)

ban talált sziklarajz is ezt bizonyítja. A rajz egy lányt ábrázol, aki méhektől körülöngva lépesmézet szed egy üregből. A gyűjtőgető életmódról 8-9 ezer évvel ezelőtt tért át az ember a termelésre és telepedett le egy helyen, főleg nagyobb folyók mentén, ahová magával vitte mindazt, amit a gyűjtőgető életmódja során megszokott, így mesterséges kaptárakat készített és méhészkedni kezdett.

Az asszírok egyik ékírásos tábláján mézzel készült gyógyszerek receptjeit találták. Egyiptomban is jelentős volt a méhészkedés amit templomi domborművek, falfestmények, sírkövek bizonyítanak. A piramisokban mézet és mézes süteményt, méhviaszból készült szobrocskákat találtak. A balsamozáshoz az egyiptomi orvosok mézet, viaszt, propoliszt is használtak.

Az Ószövetségben is írják a méhek gondozásáról és a méz kinyeréséről. Szerelmi erőt is tulajdonítottak a méznek. Az ókori görögök is ismerték és használták. H. Schliemann a trójai ásatások során 2900 éves mézzel és viasszal átitatott bőrmaradványokat és a lépek kicsorgatására használt cserépedényeket talált. A görögök isten ajándékának tekintették. Tudták, hogy a méhek a virágokból nektárt gyűjtenek, de azt gondolták, hogy a nektárt éjszaka az istenek hullatják a virágokra.

A Kárpát-medencében és Magyarországon területén a méhészet már a honfoglalás előtti időszakban ismert mesterség volt. A honfog-

laláskor bejövő magyarok megtanulták és folytatták a mesterséget. Kolostoraink, apátóságaink az Árpádok korában már nagyban méhészkedtek. A méhészet első oktatói a papok voltak. Az emberek a méhészkedés útján jutottak az akkori egyetlen édesítőanyag, a méz birtokába és a világításához szükséges viaszt is a méhészkedés révén

teremtették elő. A kereszténység elterjedésével a templomok gyertyáihoz sok méhviaszra volt szükség, ez is hozzájárult a méhészet fejlődéséhez. Jelentős viaszmenyiség kellett az okiratok pecsétjeire is. Az Árpád-házi királyok a későbbiekben is figyelmet szenteltek a méhészetnek, amelyet írásos dokumentumok támasztanak alá. A középkorban tovább fejlődött a méhészet mestersége. Mátyás király idejében az egy főre jutó méz és viaszforgasztás nagyobb volt, mint napjainkban, és a magyar kereskedők még a környező országokat is ellátták mézzel és méhviasszal. A török háborúk nem sokat ártottak a méhészetnek, mert a törökök is szerették és nagyra becsülték a mézet. A XVI. századtól a méhészkedés lassan hanyatlásnak indult. A reformáció terjedése jelentősen csökkentette a viasz iránti keresletet, egyrészt, mert a protestáns templomokban nem volt szükség

Mézet gyűjtő méhek (<http://www.tudorinda-3.blogspot.com/2011/10/mezelo-meh.html>)





Méhkaptár belseje

A magyar méz világszerte keresett termék

gyertyákra, másrészt Európában egyre több cukorfinomító épült, a kereskedők egyre nagyobb mennyiségben hozták be az országba az új, hatékonyabb édesítőszert, a nádcukrot. Ha a nádcukor édesítőereje 100, akkor a mézé csak 80. Mária Terézia ismerte fel annak szükségességét, hogy a méhészetet támogatni kell. Rendeletet adott ki, hogy se a kezdő méhészek, se a tíz kasnál többel

méhészkedők ne adózzanak, majd végleg eltörölte a méhtizedet. Méhészeti főiskolát is alapított. Intézkedéseivel el is érte azt, hogy a méhészet, a méztermelés új erőre kapjon.

HOGYAN KÉSZÜL A MÉZ?

A mézről szóló szabvány így írja le a méz fogalmát: „A méz a mézelő méhek (*Apis mellifica* L.) által főleg növények nektárjából vagy levelein, hajtásain található édes nedvekből gyűjtött, saját mirigyváladékukkal vegyítve átalakított és lépekbe ömlesztve mézzé érlelt termék. Botanikai eredetét tekintve lehet virág- vagy édeszarmatméz (mézharmatméz).”

A méhek a mézet nektárból, vagy a virá-

gok levelein található mézharmatból készítik. A nektár a virágok cukortartalmú nedve, szacharózt, invertcukrot, cseresavat, almasavat, borkósavat, illat- és zamatanyagokat, valamint kevés színező anyagot tartalmaz. A nektár egy olyan vizes oldat, amelynek cukortartalma tág határok között változik (8-70 százalék). Ezt a híg, cukortartalmú oldatot a méhek a mézhólyagukban (mézgyomor) gyűjtik össze. A mézhólyagban a cukoroldat különböző enzimekkel keveredik és sűrűsödni, érni kezd. Ha a mézhólyag megtelik, a méh visszarepül a kaptárba, ahol a félig kész méz közvetlenül – a nyelőcsövön és a szájon át – a mézgyomorból ürül a méhviasz-

A SZACHARÓZ INVERTÁLÁSA

A szacharóz a poláris fényt jobbra forgatja, optikai forgatóképessége $+66,5^\circ$. A szacharóz savval főzés után szőlőcukorra (alfa-D-glükóz) és gyümölcscukorra (béta-D-fruktóz) bomlik és az optikai forgatóképessége megfordul, balra forgat (inverziót szenved). Ennek oka az, hogy a savval főzés hatására kapott invertcukorban a fruktóz nagyobb mértékben forgat balra (optikai forgatóképessége $-92,4^\circ$), mint a glükóz jobbra (az optikai forgatóképessége: $+52,7^\circ$). Így az invertcukor eredő optikai forgatóképessége:

$-39,7^\circ$. A szacharóz hidrolízisének neve: invertálás. A hidrolízis során nemcsak az optikai forgatóképesség változik meg: a keletkezett keverék redukáló tulajdonságú is lesz, mivel a szabad glükóz és fruktóz laktolgyűrűje felnyílhat, ezért oxidálhatóvá válik. Svante Arrhenius svéd kémikus 1899-ben a szacharóz savas hidrolízisének sebességét mérve alkotta meg a kémiai reakciók sebességének hőmérsékletfüggésére vonatkozó Arrhenius-féle tapasztalati törvényét, amely kimondja, hogy a kémiai folyamatok sebessége exponenciális függvény szerint nő a hőmérséklettel.



Enzim	Funkció
Invertáz	A szacharózt glükózzá és fruktózzá bontja
Amiláz(diasztáz)	A keményítőt dextrinné és cukrokká hidrolizálja
Glükóz oxidáz	A glükózt glukonsavvá és hidrogén-peroxiddá alakítja
Kataláz	A peroxidokat vízzé és oxigénné alakítja
Foszfatáz	A szervetlen foszfátokat szerves foszfátokká alakítja

ból készült, hatszögletű lépekbé, s itt folytatódik a betöményedés és érés.

A méhek a kaptárban szárny-mozgató-sukkal olyan légáramlatot idéznek elő, amelynek segítségével a méz 24 óra leforgása alatt nedvességének 10%-át elveszti. Eközben a méhek testéből származó enzimek hatására végbemegy az érési folyamat. A nektárból származó keményítő és dextrin szőlőcukorrá, a szacharóz pedig invertcukorrá (50% szőlőcukor+ 50% gyümölcscukor) bomlik. A szacharóz- és keményítóbontó enzimek – a diasztáz (más néven amiláz) és az invertáz – a méhek garatváladékából származnak. Amikor a méz nedvességtartalma 14-20 százalékos lesz, a méhek viaszlapocskákkal fedik le a lépet, s így tárolják mind a mézet, mind a virágport. Ha a lépek megtelnek a méhészek kiemelik azokat, ez a lépesméz. A lépekből a viaszfalat felnyitva kicsurgatott méz, a színméz.

A MÉZ ÖSSZETÉTELE

A méz vízből és a benne oldott szárazanyagokból áll. A minőségi méz víztartalma 18% alatti. A méz szárazanyagának legfőbb összetevői a szénhidrátok, amelyek, a méz szárazanyagtartalmának 90-95 %-át alkotják. Ennek nagy része invertcukor, mivel a nektárban levő szacharózt a méhek enzimjeik segítségével invertálják (lásd keretes írásunkat) és fele-fele arányban szőlőcukor és gyümölcscukor keletkezik belőle. A méz kis mennyiségben más cukrokat (maltóz, szacharóz) és szénhidrátokat (dextrineket és keményítőt) is tartalmazhat. A méz jellegzetes összetevői még a szerves savak amelyek jellegzetes ízéért és pH-jáért felelősek. Ezek a glukonsav, citromsav, almasav, borostyánkősav, foszforsav, ecetsav, malonsav, tejsav. Ezen kívül tartalmaz még aroma és festékanyagokat (flavonok, flavonidok), illatanyagokat, aldehideket (acetaldehid, benzaldehid), ketonokat (karvon, propanon), alkoho-

lokot (eugenol, benzilalkohol), fenolokat és észtereket (metil-formiát, etil-acetát). B₁, B₂, B₃, B₅, B₆, K és C-vitamin tartalma is jelentős. Ásványi anyag tartalma nem túl magas, makroelemként kalciumot, foszfort, káliumot, magnéziumot, vasat, cinket, mikroelemként alumíniumot, rezet, mangánt, krómot, bórt, litiumot, szilíciumot, báriumot, stronciumot, ólmot tartalmaz. A nektár eredendően nem tartalmaz fehérjét, a mézben levő 0,5-3%-nyi fehérje a virágporból, illetve a méhek mirigyváladékából származhat. Nitrogéntartalmú szénvegyületek közül aminosavakat (prolin) is tartalmaz kis mennyiségben. A nitrogénvegyületeket az enzimek képviselik a mézben, amelyek enzimkatalizálta folyamatokban játszanak jelentős szerepet. Az enzimek meghatározott (optimális) hőfokon működnek a leghatékonyabban, mert túlzott felmelegítés során bomlanak.

A méz fizikai tulajdonságai (is) erősen függenek az összetételétől. Viskozitása elég magas, de viszonylag tág határok között ingadozik (110 - 1600 mPa.s) és függ a típusától, illetve a méz „korától” is. A viszkozitás a keverés során is változhat, ez a tixotrópia (Lásd: „Mitől folyik, vagy nem folyik a ketchup?” című írásunkat a Kémiai panorá-

ma 2. számában). A viszkozitás hosszabb állás után visszaáll az eredeti értékre. Vannak kimondottan tixotróp típusú mézek pl. az új zélandi hanga- és nanukaméz. A magyar és az amerikai méz nem tixotróp. Felületi feszültsége alacsony, sűrűsége 1,39-1,43 g/cm³. Színe elég változó, a világos, enyhén sárgástól az egészen sötét barnáig többféle lehet. A sötétebb színű mézek több ásványi anyagot tartalmaznak. Cukortartalma miatt erősen higroszkópos tulajdonságú. A méz kristályosodásának mértékét a glükóz-fruktóz arány szabja meg. A glükóz a kristályosodást elősegíti, a fruktóz gátolja azt. A glükóz-fruktóz arány 1 : 1,4-1,7 az akácmez esetében és ezért az nagyon nehezen kristályosodik. A kristályosodást a méz víztartalma is befolyásolja. A méz kémiai tulajdonságait is összetétele határozza meg. A virágmézek pH értéke 3,6 és 4,5 között van, amelyet szerves savtartalma mellett a benne levő aminosavak, ásványi savak, fehérjék és ásványi anyagok is befolyásolnak. A harmatmézek kevésbé savanyúak, a pH-juk 4 és 4,5 között lehet. A méz fertőtlenítő, baktériumölő hatásáért a glükóztartalom enzimatis oxidációjakor keletkező hidrogén-peroxid a felelős. A méz vizes oldata glükóz és fruktóztartalma miatt pozitív ezüsttűkörpróbát és Fehling reakciót ad..

MÉZHAMÍSIÍTÁS, MŰMÉZ

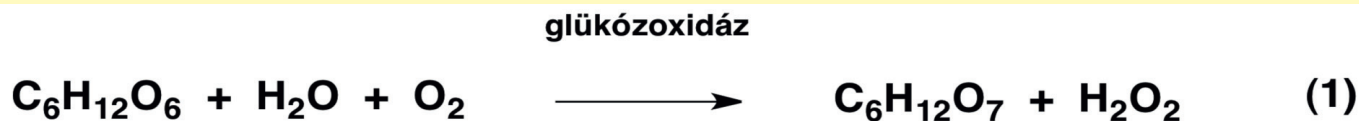
A fogyasztók számára mindig örömet jelent, ha olcsón jutnak hozzá valamilyen termékhez. Előfordulhat azonban, hogy az olcsó méz semmiben sem különbözik a

MŰMÉZ KÉSZÍTÉSE LABORATÓRIUMBAN

1. Hangyasavval: Forrásban levő cukoroldathoz kevés keményítősörpöt, majd hangyasavat adnak, végül mesterséges méz-aromával megillatosítják. Úgy is készítik, hogy a műméz anyagába 10% valódi mézet kevernek. Külföldön használják, nálunk forgalomba hozatala tilos.

2. Sósavval: (régí recept):A tűzhelyen egy lábosban forraljunk vizet. Egy befőttesüvegbe töltünk egy kiló kristálycukrot, öntsünk rá egy csésze erős hársfateát – más virágok forrása is mehet bele – és állítsuk a forró vízbe. Töltünk az üvegbe egy evőkanálnyi, 10 %-os sósavat. Fakanállal kevergessük, amíg méz jellegűvé és sűrűségűvé válik. Látszatra ugyanolyan, mint a valódi méz.

3. Tejsavval: Oldjunk fel 200 cm³ vízben 100 g kockacukrot. Keverjük el benne 1 g tejsavat, s főzzük addig, amíg térfogata 2/3 részére be nem sűrűsödik. Kihűlése után mézszerű, sárgás anyagot kapunk. Bátran meg is kóstolhatjuk.



finomított cukortól, hiszen ennek hozzáadásával készült. Régebben a méz hamisítása melegítéssel feloldott kristálycukor mézhez való adásával történt. Ez az eljárás akkor szorult háttérbe, amikor vizsgálni kezdték a nem enzimes -, hanem hő hatására keletkező bomlási termékek (hidroximetil-furfurol és egyéb ehhez hasonló gyűrűs szerkezetű molekulákból álló anyagokat). Ezek jelenléte a „mézben” hamisításra utal. Újabban a hőkezelés helyett a mézhez adott kristálycukor (szacharóz) invertálásával kísérleteznek. Az invertáz enzim hatására a szacharóz szőlőcukorrá és gyümölcscukorrá bomlik, így éppen olyan elegyet alkot, mint a mézben levő invertcukor. Természetesen az ilyen méz arányosan jóval kevesebb értékes komponenst (vitaminokat, szerves savakat, ásványi anyagokat, enzimeket stb.) tartalmaz. A méhek az összegyűjtött nektárt a testükben lévő enzimek segítségével alakítják át mézzé. A hamisítók lényegében hasonló eljárással csinálnak a répacukorból műmézet. A műméz nem tartalmaz az egészségre ártalmas anyagokat, de azokat sem, amiért a mézet az emberek vásárolják. Invertálással keményítőtartalmú alapanyagokból (pl. burgonya) is előállítható invertcukor (izocukor), amely közvetlenül felhasználható a magas invertcukor tartalmú élelmiszerek, különösen a méz hígítására. Így a vásárló tulajdonképpen „mézárón” vásárol ipari izocukrot. A hamisítás a cukorösszetétel vizsgálatával kimutatható, mivel a mézben a glükóz/fruktóz hányados eltér az 1:1 aránytól és fajtaspecifikus, így megállapítható, ha a mézhez izocukrot adtak, vagy egészében izocukorból áll. Hamis a méz akkor is, ha nem várják meg a teljes betöményedést (a végső szárazanyagtartalom beállását) és így éretlen, nagyobb víztartalmú, folyós, könnyen romló méz kerül az üvegekbe. A

műméz mesterséges készítmény, élvezeti értéke nem éri el a valódiét.

A MÉZ HATÁSA AZ EMBERI SZERVEZETRE

Összességében az emberi szervezet számára a méz kedvező hatású. Erősíti az idegeket, gyógyítja a légzőszervi betegségeket. Megfázás esetén két evőkanál méz langyos teába keverve fertőtlenítő, baktériumölő hatása miatt csillapítja vagy megszünteti a torokfájást. A másnaposság megelőzhető, ha lefekvés előtt megesszünk két kanál mézet, a benne lévő gyümölcscukor ugyanis gyorsítja az alkohol lebontást. Edzés, kirándulás közben együnk meg egy nagy kanál mézet, mert a méz a szervezet közvetlen energiaforrása, hiszen 80-90% gyümölcs- és szőlőcukrot tartalmaz. Horzsolásnál vagy hasonló sérüléseknél külsőleg alkalmazható, mert serkenti a sejtkepződést, és megöli a baktériumokat. Sajnos az utóbbi időben a méhek betegségeire adott antibiotikumok megjelenhetnek a mézben, ami nagyon veszélyes. Magyarországon azonban nem használnak antibiotikumokat és vegyszereket a méhek betegségei ellen, hanem elégetik a fertőző állományt. Ezért a magyar méz világszerte keresett termék a biotáplálkozást folytatók és a tudatos fogyasztók körében.

KÍSÉRLETEZZÜNK MÉZES TEÁVAL!

Miért szünteti meg a torokfájást a mézes tea? A megfázás tüneteinek enyhítésére szolgáló langyos, mézes tea egyik hatóanyaga a hidrogén peroxid, amely a mézben levő glükóz oxidációjakor keletkezik. A hidrogén-peroxid baktériumölő, fertőtlenítő hatású, ezért használható a mézes tea a

torokfájás, köhögés enyhítésére. A glükóz oxidációját a mézben található glükózo oxidáz nevű enzim katalizálja. Az enzimkatalizálta reakció optimális hőmérséklete 40-50°C körül van, ekkor termelődik a legtöbb hidrogén-peroxid, tehát nem a forró, hanem a langyos mézes tea a leghatékonyabb. Kémcsőbe csorgassunk kb. 1 kávéskanálnyi mézet. Öntsünk rá 4 cm³ 2 mol/dm³ koncentrációjú kénsavoldatot, és rázzuk össze a kémcső tartalmát. Melegítsük fel kb 40°C-ra és adjunk az oldathoz 5-10 csepp 0,1 mol/dm³ koncentrációjú kálium-bikromát oldatot. A kémcsőben fokozatos színváltozást tapasztalunk, végül az oldat kék színűre változik. Az enzimkatalizálta reakcióban a méz glükóztartalma glukonsavvá oxidálódik, mellette hidrogén-peroxid képződik. Savas közegben a hidrogén-peroxid és a kálium-bikromát reakciójából, kék színű peroxó-krómsav képződik. Ha a kémcsőbe méz nem kerül, ugyanezen körülmények között színváltozást nem tapasztalunk (vakpróba).

A hidrogén-peroxidot fertőtlenítőként az 1910-es évektől mind szélesebb körben alkalmazták. 1912-ben Richter Gedeon Magyarországon szabadalmat jelentett be szilárd, kristályos, tablettázható, a karbamid – hidrogén-peroxid citromsavval stabilizált komplexének (Hyperol) gyártására.

Wayand Judit
ELTE Kémiai Intézet



Olvasnivalók:

Halász Tibor, Maczelka László, Zöld Gábor: Élelmiszer Áruismeret (Tankönyvkiadó Budapest, 1956)
Dzsida László: 200 kémiai kísérlet (Gondolat Kiadó, Budapest, 1967)
www.hu.wikipedia.org/wiki/Méz
www.magyar-mez.hu
Keretes: Méz, méz, méz, Termett méz



AZ EU LEGJOBBJAI



Nevek balról jobbra: Perez-Lopez Áron, Putti Krisztián, Volford András, Villányi Attila, Gyertyán Attila, Vörös Tamás, Horicsányi Attila, Angyal Péter, Öreg Botond

A 2011. december 1–10. között Dél-Afrikában, Durban városában megrendezett 8. Junior Természettudományi Olimpián (IJSO) Magyarország az Európai Unió legjobb országaként végzett.



A 2004-ben alapított versenyen egyenlő arányban szerepelnek biológiai, kémiai és fizika feladatok, szinte a teljes középiskola tananyagából. A háromfordulós versenyről a magyar csapat minden tagja minden évben éremmel tér haza. A csapat kiutazását a NEFMI, valamint számos, főként gyógyszer- és vegyipari cég támogatja.

A decemberi versenyen 39 ország közel 230 diákja vett részt. Hat fős csapatunk eredményét az alábbi táblázatba foglaltuk össze (magyar honlap: ijso.kemavill.hu):

Ezzel az Európai Unió legjobb eredményét értük el. A világ csapatai közül csak

Oroszország és a természettudományos képzést erősen támogató ázsiai országok előztek meg bennünket. A verseny után egy izgalmas, egész napos szafarin is részt vettünk: rengeteg ragadozó madárral, zsiráffal, kafferbivallyal, orrszarvúval, zebrával és antiloppal találkozunk. Ezzel vált minden csapattag számára felejthetlenné az út.

A verseny válogatójába az előző évi korosztályi természettudományi versenyek döntőiről várjuk a jelentkezőket, akiknek a felkészítése júniustól egészen a versenyre indulásig tart az Apáczai Csere János Gimnáziumban.

Villányi Attila csapatvezető

Öreg Botond, Perez-Lopez Áron, Putti Krisztián, Volford András, Gyertyán Attila, Villányi Attila, Vörös Tamás, Angyal Péter, Horicsányi Attila

AZ ELSŐ 18 ORSZÁG EREDMÉNYE:

	Arany	Ezüst	Bronz	Pontszám
Tajvan	6			18
Tájföld	3	3		15
Oroszország	3	3		15
Szingapúr	3	3		15
Dél-Korea	3	3		15
India	2	4		14
Hong Kong	1	5		13
Magyarország	1	4	1	12
Németország	1	1	4	9
Vietnám		3	3	9
Brazília		3	3	9
Indonézia		3	3	9
Románia		2	4	8
Szerbia		2	4	8
Fülöp-szigetek		3	2	8
Szlovákia		1	5	7
Hollandia		1	4	6
Észtország			6	6

Horicsányi Attila	Dobó István Gimnázium, Eger	arany
Angyal Péter	Ciszterci Szent István Gimnázium, Székesfehérvár	ezüst
Öreg Botond	Fazekas Mihály Főv. Gyakorlóiskola, Budapest	ezüst
Perez-Lopez Áron	Don Bosco Katolikus Általános Iskola, Budapest	ezüst
Volford András	Radnóti Miklós Kísérleti Gimnázium, Szeged	ezüst
Putti Krisztián	ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium, Bp.	bronz

A világ élelmezésének biztosítója



Ha felmerül az a kérdés: melyik a XX. század egyik legnagyobb felfedezése, valószínűleg nem az ammóniagyártás jut először eszünkbe. Pedig ma a világ népességének legalább egy harmadát csak ennek az eljárásnak köszönhetően tudjuk élelemmel ellátni.

A növények a levegő elemi nitrogénjét csak akkor tudják hasznosítani, ha azt az ú. n. **nitrogénfixáló** baktériumok megkötik. Az így megkötött nitrogén a növényekbe jut, majd az állatokba, belőlük kiválasztási folyamatok révén - mint ammónia, illetve emlősök esetén mint karbamid - távozik a szervezetből. A megkötött nitrogén csak a legritkább esetben alakul vissza elemivé. Az ammónia párologás útján kerül a levegőbe, majd az ott jelenlévő különböző savakkal, mint szénsav és salétromsav, sókat alkotva visszajut a földfelszínre. Leggyakrabban vulkánok közelében klorid- vagy szulfát-sóként fordul elő, vagy szerves anyagok anaerob bomlása során keletkezik (például guanóban).

Az alkimisták már a VIII. századtól használtak különböző ammónia-sókat. A gáz halmazállapotú ammóniát először Joseph Priestley (1733-1804) izolálta 1774-ben, és „alkáli levegő“-nek nevezte, 11 évvel később Claude Louis Berthollet (1748-1822) állapította meg az összetételét.

Justus von Liebig (1803-1873) állapotot-

ta meg az 1840-ben megjelent *A szerves kémia alkalmazása a mezőgazdaságban és az élettanban* című könyvében, hogy a nitrogéntartalmú anyagok, mint az ammónia, illetve a nitrátok a növények növekedéséhez elengedhetetlenül szükségesek. 1845-ben Sir John Bennet Lawes (1814-1900) Rothamstedben végzett munkája ezt megerősítette, **azzal kiegészítve, hogy a nitrogént ásványi formában** (például ammónium-nitrátként) kell alkalmazni. 1890-re világossá vált, hogy a meglévő chilei nátrium-nitrát készletek nem lesznek elegendők a növekvő népesség élelmiszer-ellátásához.

Mint Fritz Haber 1918-ban a Nobel-díja elnyerésekor tartott előadásában elmondta, a nitrogén megkötésnek, azaz ammónia gyártásának azért van különleges jelentősége a mezőgazdaságban, mert - a szintén nélkülözhetetlen foszfátokkal és a káliumsókkal szemben - kevés a növények számára felhasználható természetes nitrogénforrás. A XIX. század elején

Az élet bonyolult!

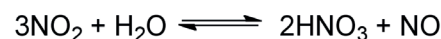
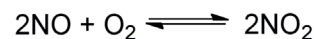
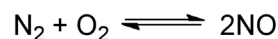
”

az igény a megkötött nitrogénre csak néhány száz tonna volt, de a XX. század elejére ez már milliós nagyságrendre nőtt. Bár létezett eljárás ammónia kinyerésére a kőszén lepárlásának melléktermékeként, ez azonban egyáltalán nem volt gazdaságos és mérete **sem volt növelhető**. A **nyersanyag** azonban adott volt, hiszen a levegő 78%-a elemi nitrogén és ha ezt oxigénnel vagy hidrogénnel egyesítjük, akkor nitrá-

tokhoz vagy ammóniához jutunk.

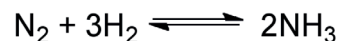
A legkézenfekvőbb megoldás a természet utánzása volt, lemásolva a villámláskor lejátszódó nitrogén oxidációját nitrogén oxidokká. 1903-ban Kristian Birkeland (1867-1917) és Sam Eyde (1866-1940) kifejlesztettek egy eljárást, amely Henry Cavendish (1731-1810) 1784-ben elvégzett kísérletén alapult. Több mint 3000°C-os elektromos ívet hoztak létre két elektród között, melyen levegőt áramoltattak át így jutva több lépésben nitrogén-dioxidhoz, melyet vízben elnyelve salétromsavat kaptak (hasonlóan az előző számban leírt kénsavgyártáshoz, amelynek során kéntrioxidot állítanak elő):

Az eljárás hátránya az óriási (15 MWh/



tonna) energiaigény. Rengeteg erőfeszítés dacára a nitrogén közvetlen oxidációját nem sikerült gazdaságossá tenni, más megoldást kellett keresni.

A másik lehetőség a **nitrogén megkötésére** az ammónia előállítása:



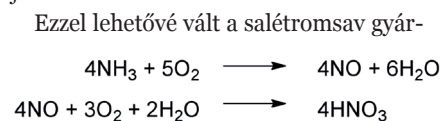
Az első sikeres, ipari léptékű szintézist azonban csak 1913-ban valósították meg. Ekkorra sikerült megismerni és megérteni a reakció termodinamikáját, megtalálni a megfelelő katalizátort és megfelelő nyomásállókészüléket kifejleszteni. Az ammónia szintéziséhez vezető út az első példája annak, hogy az elméleti kutatások vezettek el a legjobb ipari eljárás kidolgozásához.

1884-ben Sir William Ramsay (1852-



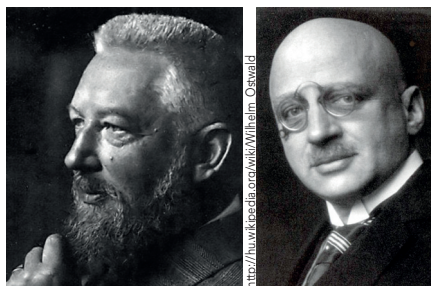
1916) és Sidney Young (1857-1937) az ammónia bomlásának vizsgálatakor megfigyelték, hogy még 800°C-on is megmarad az ammónia egy része, azaz eléri az egyensúlyi állapotot. Először Henry-Louis Le Chatelier (1850-1936) (róla kapta a nevét a Le Chatelier-elv) gondolt arra, hogy az egyensúly befolyásolható a nyomás és a hőmérséklet által. 1901-ben el is kezdett magas nyomású ammónia előállításával foglalkozni, de egy súlyos robbanás után abbahagyta az ilyen irányú munkát.

Wilhelm Ostwald (1853-1932) vas-katalizátor segítségével állított elő jó termeléssel ammóniát légköri nyomáson, azonban az előkezelés során nitrizálta a vasat, ezért visszavonta a szabadalmát. 1902-re Ostwald kidolgozta az ammónia oxidációját:



tása, azonban azt jó részt robbanó anyagok gyártására használták fel.

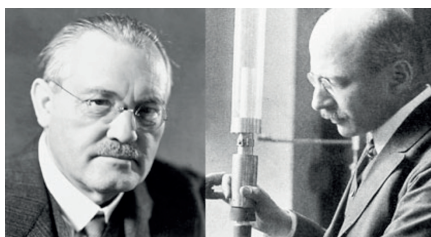
1904-től kezdett el Fritz Haber (1868-1934) és kutatócsoportja ammónia szintézissel foglalkozni a karlsruhei Műszaki Egyetemen. A vas-katalízist alkalmazó kísérletekből kiderült, hogy a légköri nyomás túl alacsony megfelelő konverzió eléréséhez, de a nyomás növelésével a konverzió javítható. Haber kísérleti eredményeit használta fel Walther Hermann



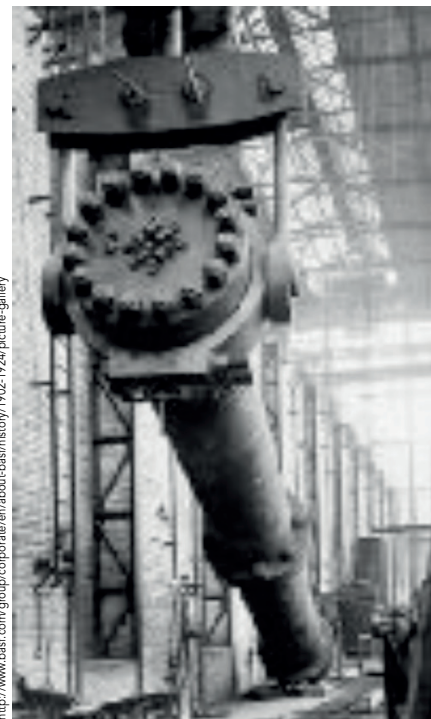
Wilhelm Ostwald Fritz Haber

Nernst (1864-1941) az elméleti számításaihoz, majd gyakorlatba ültetve 75 bar nyomásig menve végzett kísérleteket.

Eredményei nem sok reményre adtak okot, mert a vas- és mangán-katalizátorokkal csak 1% konverziót ért el. Haber az ozmium és urán alapú katalizátorok terén nyert tapasztalatok alapján bizakodó maradt és 200 bar nyomást alkalmazva a konverziót 6%-ig vitte fel. Ez már elég volt egy eljárás kidolgozására, ahol a keletkező ammóniát minden ciklusban eltávolítják, majd a maradék gázt visszavezetik a reak-



Carl Bosch és Fritz Haber az ammóniagyártás feltalálói



1921-ben épült Haber-Bosch ammónia konverter üzembehelyezése (fent) (Ma a karlsruhei egyetemen látható, lent)



Katalizátor tesztelő laboratórium belseje



Ammónium-nitrát (BASF gyártmány)

torba. Az 1908-1909-ban beadott szabadalom a mai modern eljárás legfőbb tulajdonságait már tartalmazta: a gáz halmazállapotú reakcióelegy recirkulációját és a hőcserét a reaktorba belépő, illetve távozó gáz között.

A kereskedelmi eljárás kidolgozásához

1910-től Haber a BASF-fel (Badische Anilin- und Soda Fabrik) működött együtt. A gyár részéről Carl Bosch-t (1874-1940) bízták meg a fejlesztések vezetésével. Kezdetben ozmiumot használtak katalizátornak, mert 550-600°C-on és 200 bar nyomáson sikeresen működött és az ammónia konverziója 6% volt. Azonban mérgező és költséges volt valamint levegőn instablnak bizonyult. Az urán, amit Haber szintén ígéretesnek talált szintén drága volt és a szintézisgázban jelenlévő víz és oxigén nyomok hatására hamar elvesztette hatását. Éppen ezért Bosch egy megfelelő és olcsó katalizátort keresett. Módszeres vizsgálatokba kezdtek, melyhez speciális készülékeket építettek, melyek csak 2g katalizátort igényeltek. Ez óriási előrelépésnek számított akkoriban! A teszteléseket Alwin Mittasch (1869-1953) vezette. Legjobbnak az a svéd magnetit bizonyult, amit Mittasch véletlenül talált a laborjában. Ezt a fajta magnetitet használják ma is és addig használni is fogják, amíg jobbat nem találnak vagy ki nem merül a svéd lelőhely.

Ezt követően promotóereket vizsgáltak. A legjobbnak egy keverék bizonyult, amely alumínium- és kalcium-oxidot (a katalizátor felületének állandó nagyságát biztosítják) valamint káliumot tartalmaz (utóbbival a katalizátor elektronsűrűséget növelik, így fokozva az aktivitását). 1922-re, mikor már

KISLEXIKON

Az ammónia szó az ókori egyiptomi termékenység, majd napisten Ammon nevéből ered. A rómaiak használták a 'sal ammoniacus' (Ammon-sója) kifejezést az ókori líbiai Ammon templom (a mai Szivah-oázis) közeléből gyűjthető ammónium-kloridra. A termékenység isten nevét csak a szentély közelsége miatt kapták, mégis a név rendkívül találó, mert az oázisba víztől megálló látogatók és tevéik ürülékéből és vizeletéből alakult ki a lerakódás. Ezt a római elnevezést vette át a svéd Torbern Olof Bergman 1782-ben, amikor elnevezte a nitrogén-hidridet.

<http://h2g2.com/dna/h2g2/alabaster/A632990>

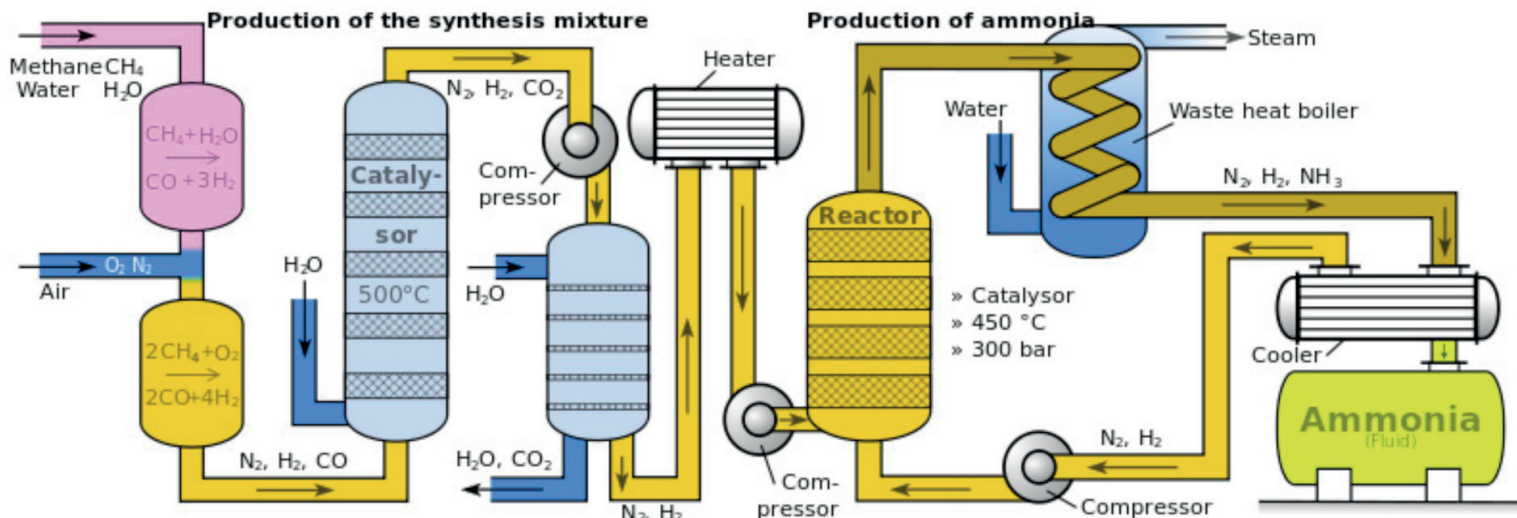
Le Chatelier-elv: ha egy egyensúlyt megzavarnak - változást idéznek benne elő -, olyan folyamatok indulnak meg, amelyek a változás ellen hatnak. A rendszer állapota úgy 'tolódik el', hogy a zavar hatása csökkenjen.

Promóter: Olyan anyag, amely növeli a katalizátor aktivitását, de maga nem katalizál.

Konverzió: Százalékban fejezi ki, hogy a kiindulási anyag hányadrésze alakult át. (Ez nem jelenti azt, hogy mind a kívánt termék lett, a mellékreakciók is fogyasztják a kiindulási anyagot.)

számos teljes méretű ammónia konverter üzemelt több mint 20 000 tesztet végeztek el!

Az eljárás újdonságának dacára már 1909-ben építettek kísérleti reaktorokat, hogy a méretnövelésnél felmerülő problé-



Haber-Bosch ammóniagyártás folyamatábrája (<https://news.slac.stanford.edu/image/haber-bosch-process>)



http://bntontour.p.files.wordpress.com/2010/09/gassebzig.jpg



John Singer őrmester festménye az első világháborús vegyítamadások áldozatainak állít emléket

mákat tanulmányozzák. 1913-ban Oppauban helyezték üzembe az első teljes méretben működő kísérleti konvertert, amely 30 tonna/nap teljesítményre volt képes. 1918-ra a Leunában működő gyár ugyanezt a technológiát alkalmazva már 240 000 tonna ammóniát szolgáltatott évente. A fejlesztések eredményeként egy átlagos ammónia konverter 500-650°C között üzemel, 300-350 bar nyomáson, a kiindulási gázokat nagy felületű vas katalizátor jelenlétében reagáltatják el (amely a már említett promotereket is tartalmazza). A reakcióelegy visszaforgatásával 97%-os konverzió érhető el.

Az ammóniagyártás szép példája annak, hogy a termék iránt növekvő igény miként ösztönözte a kutatásokat. Először az elmé-

leti és kísérleti eredmények megmutatták, hogy az eljárás megvalósítható. Az ezt követő módszeres kutatás-fejlesztés eredményeként megtalálták a megfelelő, olcsó katalizátort és megalkották a szükséges magas nyomású készülékeket és eljárásokat. Haber, Bosch és Mittasch úttörő munkájának köszönhetően létrejött az az ammóniagyártási eljárás, amely többé-kevésbé változatlan formában a mai napig használatos.

Azonban meg kell jegyezzük, hogy Haber életének sötét oldala is van! (Lásd *Tudósok felelőssége* c. írásunkat keretben).

Európában 1913 végére majdnem az összes előállított ammóniát – az Ostwald-féle oxidációval tovább alakítva – robbanó szerek előállítására használták fel.

Jelenleg a Haber-Bosch módszert alkal-

mazva 500 millió tonna ammóniát állítanak elő, amelyhez a föld éves energia felhasználásának 1-2%-át fordítják! A termelt ammónia több mint 80%-át műtrágya gyártásban (például: ammónium-nitrát) használják fel. **Csak így lehet ellátni élelemmel a Föld népességének több mint egy harmadát!**

Az élet bonyolult!

Horváth Dániel Vajk
MTA Természettudományi
Kutatóközpont

TUDÓSOK FELELŐSSÉGE

Haber az I. Világháború alatt hazafias érzelmektől táplálva csatlakozott a német gázfegyvereket fejlesztető „Kémiai Hadászati Szolgálat” (Strategischdienst für Chemie). A klórgáz hatására egy üzemi baleset hívta fel a figyelmet, ami Haber munkatársának fulladásos halálát okozta. Haber maga irányította a klórgáz első hadászati bevetését Ypermben, 1915-ben.

Haber felesége, Clara Immerwahr – az első német nő, aki egyetemen doktorált – mélyen elítélte, hogy férje a tudományt a tömeggyilkosság eszközüvé tette és a „sikeres” klórgáz-bevetés után férje szolgálati fegyverével öngyilkos lett, ezzel tüntetve a kémiai tömeggyilkoló fegyverek ellen.

1991-ben az Orvosok Nemzetközi Szervezete a Nukleáris Háború Megelőzéséért Clara Immerwahr-érmel alapított olyan személyek részére, akik munkájuk folyamán aktívan tevékenykednek a háború és a fegyverkezés ellen. 2011-ben a Berlini Műszaki Egyetem (TU Berlin) és a BASF Clara Immerwahr-díjat alapított fiatal kutatók számára, akik kiemelkedő eredményeket értek el a katalízis kutatásban.

Haber a vesztes I. Világháború után attól tartott, hogy háborús bűnösként felelősségre vonják, ehelyett 1918-ban erősen vitatott kémiai Nobel-díjat kapott a háború előtti munkásságáért.

* Források:

- L.Loyd: *Handbook of industrial catalysts, Chapter 2 :The first catalysts, Springer Science and Busines Media, LLC 2011*
- B. Lindström, L. J. Pettersson: *A brief history of catalysis, Cattech, Vol. 7, Nr. 4, August 2003, 130-138*
- Fritz Haber: *The synthesis of ammonia from its elements, Nobel Lecture June 2, 1920*
- <http://www.kfki.hu/chemonet/hun/eloado/alapok/kislex.html>
- wikipedia.org/wiki/Fritz_Haber#Fritz_Haber_szerepe_az_I._vil.C3.A1gh.C3.A1bor.C3.Baban
- http://hu.wikipedia.org/wiki/Clara_Immerwahr
- http://www.chemistryviews.org/details/news/1361493/Clara_Immerwahr_Award.html



AZ

ALOE VERA

Az Aloe vera pozsgás (szárazságtűrő) évelő növény, virágai sárgák. Húsos lándzsa alakú levelei 40-50 centiméter hosszúságúra is megnőhetnek, az egész növény magassága elérheti a másfél métert is. A pozsgások ezen igen mutatós nemzetségének élőhelyei Afrika meleg, száraz éghajlatú vidékei, a Földközi-tengertől Dél-Afrikáig. Mintegy 300 fajt sorolnak az Aloék nemzetségébe. Egy részük idős korára fatermetű, elágazó törzsű növényre fejlődik, de vannak törzs nélküli, alacsony növésű, levélrózsás Aloék is.

Régóta ismeretes, hogy az Aloe nemzetség legtöbb tagjának húsos, lédús leveleiből nyerhető nedv felgyorsítja a bőr sérüléseinek regenerációját, különösen az égési sérülések gyógyulási idejét rövidítve le. Napjainkban találkozhatunk vele krémek, kenőcsök, tabletták, kapszulák, folyadékok formájában.

Az irodalomban ellentmondó adatok találhatóak a gél biológiai aktivitásáról. Számos adat jelzi a gél immunerősítő, antibakteriális, gyulladást gátló, sérülések begyógyulását gyorsító, antidiabetikus, antioxidáns sőt kemoterápiás hatását is. Ugyanakkor más klinikai kísérletek arra mutattak, hogy a gél felsorolt biológiai hatásai nem mérhetőek ki. Az ellentmondó eredmények oka talán az, hogy a növények – amelyekből a gél kivonták – különböző földrajzi helyekről származtak, eltérő kémiai összetételük volt és nem utolsósorban különböző izolációs módszereken mentek át. **Másrészről a gélben fellelhető poliszacharidok nem stabilak.** Érzékenyek a hőre, enzimaktivitásra és a pH-ra. Az ellentmondások feloldására az Aloe gél termékek előállításának standar-



A pozsgások olyan növények, amelyek szárazságtűrőek, vagyis nem vízigényesek (pl kaktuszok és sok sivatagi növény). A pozsgásokhoz tartoznak a Magyarországon élő kövirózsák is.

AZ ALOE GÉL ÖSSZETEVŐI

A poliszacharidok mellett hemicellulózt, víz- és zsírolható vitaminokat, enzimeket, proteineket, lipideket, aminosavakat, fenolokat és szerves savakat tartalmaz. Az irodalomban a gél összetevőinek százalékos összetételére eltérő adatokat találhatunk, mivel az összetétel jelentősen függ a szezonális időszaktól és a termőterülettől.

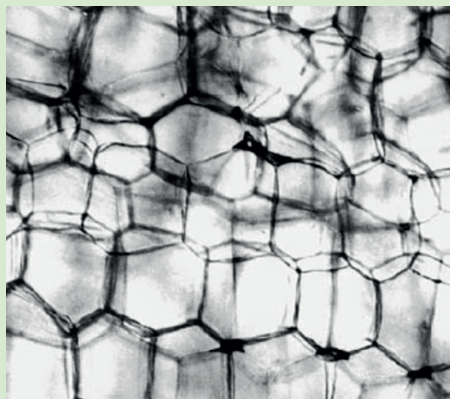
A valóban jó hatású Aloe vera tartalmú készítmények mellett sok olyan szer is kapható, amely jótékony hatást nem fejthet ki, mivel bennük az Aloe nedve csak igen kis mennyiségben van jelen. Több mint 75 anyagot azonosítottak az Aloe leveléből származó gélből. A komponensek vagy származékaik közül többen (nagyobb dózisban) gyógyzó hatóanyagok. Magát a növényi kivonatot azonban a mai napig nem sikerült kétséget kizáróan kapcsolatba hozni a gyógyhatással, amit leginkább a poliszacharid tartalommal magyaráznak. **Valószínűbb azonban, hogy a biológiai aktivitás az Aloe összetevőinek szinenergikus hatásán alapszik.** A kérdés továbbra is megoldásra vár.

dizálása, a poliszacharidok lebomlásának megakadályozása nyújtana megoldást.

Az Aloe levélnek két fő része van, a külső zöld héj és a levél **belső részében található sűrűn folyó, kocsonyás gél.** Ez utóbbival szokták az Aloe verát sokszor azonosítani. A

héj és a géles rész közötti sárgás, keserű ízű pép szárításával nyerik az *Aloe latexet* (tejnedvet). A levél belső központi részének három komponense van a sejtfal 14-17%, az organellumok (sejtszervecskék) 0,5-1% és viszkózus folyadék (80-83%) a sejteken

Antrakinonok	aloe-emodin, aloesav, antranol
Szénhidrátok	mannóz, glükóz, mannán, acetilezett mannán, hemicellulóz
Enzimek	alkalikus foszfatáz, amiláz, kataláz
Aminosavak	alanin, arginin, asparaginsav, glutaminsav, glicin, hisztidin, izoleucin, leucin, lizin, prolin, tirozin,
Vitaminok	B1, B2, B6, C, β -karotin, kolin, folsav
Egyéb szerves vegyületek	lipidek: szteroidok, koleszterol, trigliceridek, szalicilsav
Szervetlen vegyületek	kalcium, klór, króm, réz, vas, magnézium, mangán, kálium, foszfor, nátrium, cink

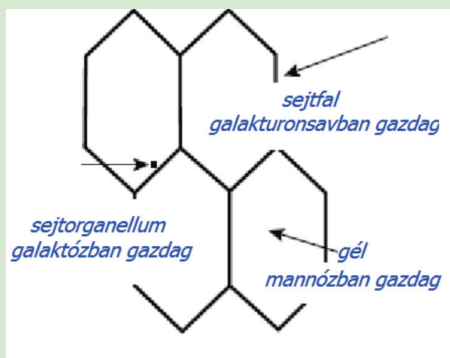


SAV A MALÁRIA ELLEN

A glükonsav képlete $C_6H_{12}O_7$. Vizes oldatban, semleges pH értéken glukonát-iont alkot, sőt glukonátoknak nevezik. A természetben számos helyen jelen vannak, mert a glükonsav és a glukonátok a glükóz oxidációja során keletkeznek. Számos észtere is előfordul, például a kinin-glukonátot a malária ellen szereként, izomszövetbe adott injekcióként szokták alkalmazni.

belül. A három komponens eltér egymástól mind a morfológiájukban, mind poliszaharid tartalmukban. A sejtfa gazdag galakturonsavban, glükonsavban, a mikrorészecskék galaktózban. A gél 97-99,5 százalékban vizet és 0,5-3 százalék szárazanyagot tartalmaz, ami poliszaharidokban, elsősorban mannózban gazdag. A mannóz oldható poliszaharid és a gél viszkoelasztikus tulajdonságaiért felelős.

Kőszegi Lídia



✳ Olvasnivalók:

Josias H. Hamman
Molecules 13, 1599-1616, 2008,

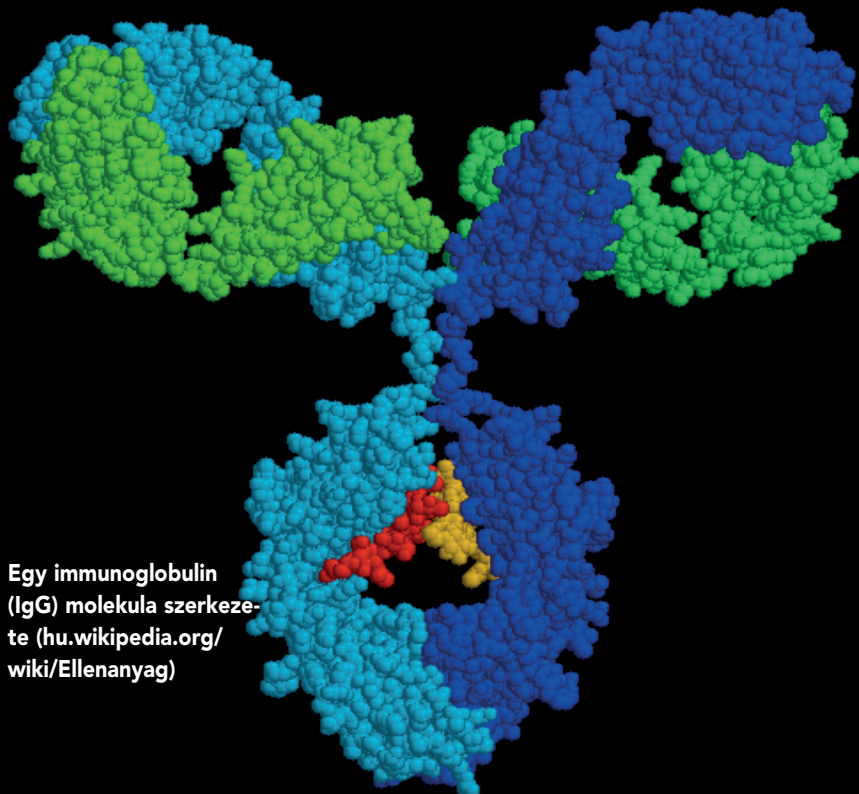
Y. Nia., D. Turnerb, K.M. Yatesa, I. Tizardb
International Immunopharmacology 4
1745-1755, 2004

Yun Hu, Juan Xu, and Qihui Hu
J. Agric. Food Chem., 51, 7788-7791,
2003

Immunfehérjék akcióiban

2012-t az UNESCO Szentágothai emlékévvé nyilvánította. A legendás neuroanatómus és egyetemi tanár emléke előtt tisztelegve egy olyan vizsgálati technikát mutatunk be, amelynek segítségével láthatóvá és megérthetővé válhatnak a Szentágothai János kutatásának is középpontjában álló neuronális hálózatok, azok funkcionális anatómiája

Az immunfestés, más néven immunhisztokémia a jelenleg használt leggyakoribb módszer arra, hogy egy fehérje elhelyezkedését meghatározzuk agyszövetben, vagy bármely más élő szövetben. Bár a módszer alapjai az 1970-es évekre nyúlnak vissza, az elmúlt évtizedek alatt jelentős fejlődésen ment keresztül. A lényeg viszont nem változott, egy antitestet kell termelni, ami a vizsgálni kívánt fehérjéhez hozzá tud kötődni, miközben a szövetben lévő más fehérjékhez nem kapcsolódik. A vizsgálandó fehérjére specifikus antitestek gyártására még



Egy immunoglobulin (IgG) molekula szerkezete (hu.wikipedia.org/wiki/Ellenanyag)

Immundeférvjék akcióiban

Folytatás a 23. oldalról

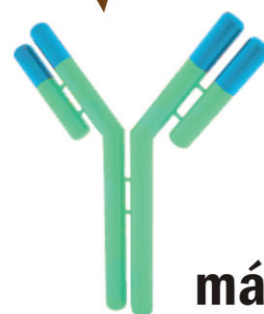
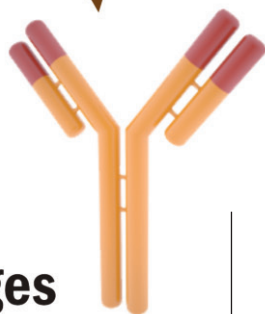
jelenleg is egy biológiai folyamatot használunk, ez az immunválasz és innen ered az immunfestés elnevezés. A keresett fehérjét, vagy annak egy darabját állatok, praktikus szempontokból elsősorban nyúl vagy egér szervezetébe juttatják.

Az állat immunrendszerre felismeri a számára idegen fehérjét, és immunválasz keretében néhány hét alatt kitermeli az arra specifikus antitestet, egy immunoglobulin fehérje molekula-

tet. Tapasztalat szerint a direkt immunhisztokémia, amikor a primer antitestre kémiai festéket vagy enzimet viszünk fel, nem elég érzékeny ahhoz, hogy valóban láthatóvá tegyünk a fehérjét mikroszkópos elemzés számára. Ezért további erősítési lépések beiktatására van szükség, melyek közül a következőt alkalmazzák leggyakrabban: a például nyúlban termelt primer antitestet, illetve annak egy, az eredeti fehérje felismerésében nem résztvevő darabját egy

A kémia ebben az esetben is hasznos eszközöket ad a kutató orvosok, biológusok kezébe

másik faj, leggyakrabban kecske szervezetébe juttatják. Ennek hatására a kecskében olyan antitest képződik, ami hozzá tud kötődni a nyúl által termelt elsődleges antitesthez. Mivel a kecskében termelt antitestet másodszor alkalmazzuk, azt másodlagos antitestnek is nevezzük az immunfestés során. Erre a másodlagos antitestre kémiai reakcióval vagy fényben világító, fluo-



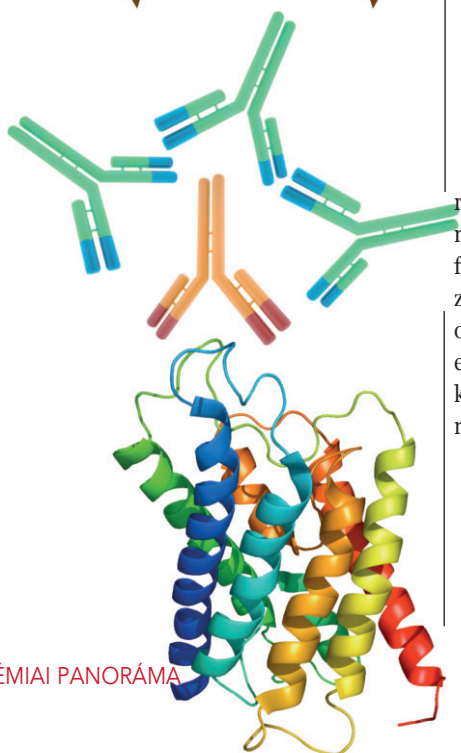
elsődleges antitest

másodlagos antitest

lát, amit utána a vérből tisztítással nyerünk ki.

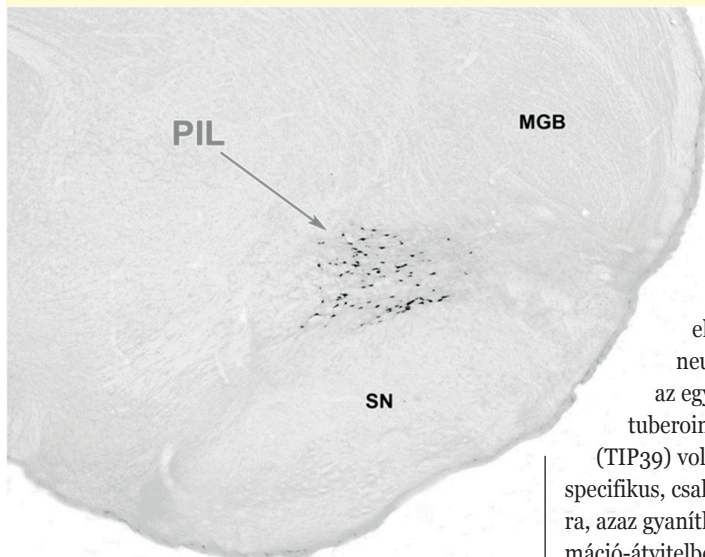
Ezek után már csak arra van szükség, hogy az antitestet láthatóvá tegyünk. Ez nem könnyű, hiszen általában nagyon kis mennyiségű fehérjét kell úgy kimutatnunk, hogy közben a szövet struktúrája ne változzon meg (az immunfestés egy rokon módszere az úgynevezett western blot technika, amivel kisebb mennyiségű fehérjét is ki lehet mutatni, viszont a szövet struktúrája elvész). A szövetből általában vékony, 10-50 µm vastag szeletet vágunk, és ehhez öntjük hozzá az antites-

reszcens kismolekulájú festéket, vagy enzimet kötnek. Az enzim kiválasztásakor a legfontosabb szempont az, hogy az általa katalizált reakcióban részt vevő vegyületek vízben oldódva színtelenek legyenek, azonban az enzim jelenlétében bekövetkező specifikus kémiai reakció révén vízben nem oldódó, színes vegyület képződjön. Így a reakciótermék



vizsgálható fehérje

Antitestek előállítása és felhasználása



TIP39 sejtek elhelyezkedése patkány anya agyában a talamusz ún. posterior intralamináris magjában (PIL). Környező agyi struktúrák: MGB (medial geniculate body), és SN (substantia nigra)

a vizes közegben kicsapódik, mégpedig olyan gyorsan, hogy nincs ideje szétfundálni. Ez a reakció a szöveten elszíneződést okoz éppen ott, ahol a vizsgált fehérjénk előfordul. A leggyakrabban alkalmazott enzim a tormánövényből származó peroxidáz enzim. Ez többféle reakciót is katalizálhat, de legáltalánosabban használt a 3,4,3',4'-tetraaminobifenil-hidroklorid, másnéven 3,3'-diaminobenzidin (DAB) konverziója, mely a mellékelt reakciónak megfelelően alakul át vízben és szerves oldószerekben egyaránt oldhatatlan barna színű polimerre.

A szoptatás neuroanatómiája

A következőben az immunfestés rengeteg biológiai felhasználása közül egy példa bemutatásával illusztrálom annak hasznosságát. Ismert, hogy a DNS-en kódolt 3-50 aminosavból álló neuropeptidok az agysejtek

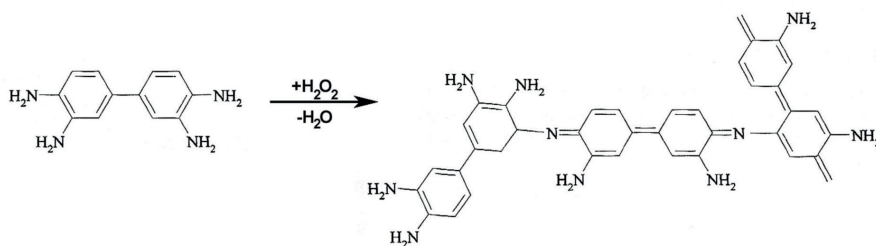
közötti kommunikációban vehetnek részt. A neuropeptidekre az jellemző, hogy nem minden sejtre hatnak, hanem csak meghatározott idegrendszeri funkciókban vesznek részt. Az elmúlt években több neuropeptidet is azonosítottak, az egyik az úgynevezett tuberoinfundibuláris peptid 39

(TIP39) volt. Ennek a fehérjének létezik specifikus, csak öt felismerni képes receptor, azaz gyanítható volt, hogy az agyi információ-átvitelben részt vesz, de a funkciója egyáltalán nem ismertük. Első lépésként tehát meg kellett vizsgálni immunfestés segítségével, hogy hol van TIP39 az agyban. Csak 3 db, egyenként kb. 5000 sejtet tartalmazó sejtcsoportban volt jelen a TIP39, azaz a TIP39-et kódoló gén csak ezekben a sejtekben aktiválódik a több 10 milliárd idegsejt közül. Az immunfestés ráadásul azt is megmutatta, hogy az egyik sejtcsoport hím állatokban nem tartalmazta a TIP39-et, ez csak nőstényekben, azon belül is csak anyaállatokban fordult elő.

Ebből következtetni lehetett rá, hogy ezek a sejtek olyan funkcióban vesznek részt, ami az anyákra jellemző. Ez a sejtcsoport az agy talamusz nevű részén helyezkedett el, ami az érzékszervekből származó ingerületeket továbbítja a magasabb területek felé. Szintén immunfestés segítségével sikerült kimutatni, hogy a TIP39 nemcsak a sejtestekben van jelen, hanem idegrostokban is. Idegrostokban neuropeptidok sosem szintetizálódnak, oda mindig a sejtestekből kerülnek transzportfolyamatok segítségével. Immunhisztokémiai eljárásokkal láthatóvá váltak TIP39 tartalmú idegrostok anyaállatok endokrin hipotalamikus agyterületén, ami a

talamusz alatt, az agy alapjánál helyezkedik el. Ennek a területnek az egyik funkciója, hogy irányítja a hipofízisben zajló prolaktin felszabadulását. A prolaktin nevű hormon a vérbe jutva a tejtermelés beindítását és fenntartását szolgálja. A TIP39 receptora ellen termelt antitestek segítségével azt is sikerült immunfestéssel kimutatni, hogy az endokrin hipotalamuszban levő sejtek tartalmazzák a TIP39 receptort, vagyis az ide a talamuszból érkező idegrostokból ingerület hatására felszabaduló TIP39 ezen receptorokon keresztül képes befolyásolni a prolaktin felszabadulását, így a tejtermelést. További immunhisztokémiai vizsgálatok arra is fényt derítettek, hogy a talamuszban levő TIP39 tartalmú idegsejtek a gerincvelőnek abból a részből kapnak beidegzést, melyek szoptatás hatására aktiválódnak. Létezik egy fehérje, a Fos fehérje, ami nyugalomban levő neuronokban nincsen jelen, de aktiváció hatására megjelenik, és jelenléte immunhisztokémiai módszerekkel kimutatható. Ezen fehérje immunhisztokémiai vizsgálata révén sikerült azt is bizonyítani, hogy a talamuszban levő TIP39-et tartalmazó sejtek Fos fehérjét kezdenek kifejezni, vagyis aktiválódnak anyaállatokban szoptatás hatására. További funkcionális vizsgálatok is megerősítették a TIP39 szerepét a szoptatás hatására meginduló tejléválasztás szabályozásában. Mindezeket a vizsgálatokat nem lehetett volna elvégezni az immunfestés által nyújtott információk nélkül, melyek mint láthatjuk, bizonyos fehérjék elhelyezkedésének meghatározása révén fontos információkat adnak nem csak az adott fehérje területi eloszlásáról, de funkciójáról is.

Az immunfestést általános jellege és az általa nyújtott információ hasznossága az egyik leggyakoribb kutatási technikává tette. A fent említett módszeren kívül számos variációja ismeretes, melyek tovább szélesítik az alkalmazások körét. Így bár alternatív technikák jelentek meg az utóbbi időben a fehérjék jelenlétének szövetben való kimutatására, az immunfestés továbbra is örzi jelentőségét a biológiai-biokémiai tudományokban, valamint az orvostudományban, a szövettani diagnosztikában.



Peroxidáz enzim jelenlétében a DAB polimerizálódik és vizes oldatból kicsapódik

Dobolyi Árpád
Semmelweis Egyetem,
Neuromorfológiai Laboratórium

Természetes antioxidánsal

A polimer előnyös fizikai tulajdonságai megőrizhetők és élettartama jelentősen növelhető antioxidánsok adagolásával

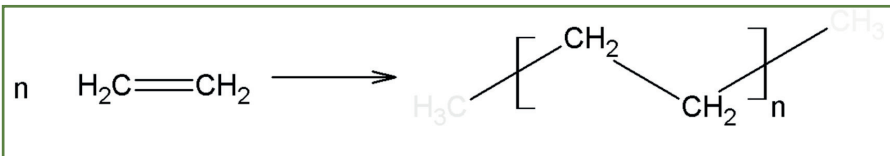
A műanyagok polimer molekulákból épülnek fel, amelyek sok, kisebb építőegységből – monomerekből állnak. A monomerekből polimerizációs reakcióval állítható elő a polimer, más néven makromolekula. Egyes műanyagok eredeti méretüknek akár több száz százaléka is megnyújthatók, majd utána reverzibilisen visszaalakulnak, amit mozgékony polimerláncoknak köszönhetnek. A műanyagoknak két alapvető típusa van: a hőre lágyuló polimerek (1. ábra: a-d), amelyek megolvaszthatók, majd újra alakíthatók, valamint a térhálós polimerek (1. ábra: e), amelyeknél már nincs lehetőségünk újrafeldolgozásra. A hőre lágyuló polimereket csak a láncok közötti áthurkolódások tartják össze, ezt hívják fizikai térhálóknak, míg a térhálós polimerekben a makromolekula láncai kémiai kötással kapcsolódnak egymáshoz. Érdekes belegondolni, hogy egy autó gumiabroncsa vagy egy ablakkeret szigetelése egyetlen, térhálós polimer molekulából áll. Léteznek egyéb, különleges szerkezetű polimerek is (1. ábra: f-i), ilyen a létra,

parketta szerkezetű polimer, illetve a csillag és a fésű alakú molekula.

POLIETILÉN

A sokféle polimer közül a legegyszerűbb kémiai szerkezetű polietilén (PE) etilén egységekből épül fel (2. ábra). Magyarországon a Tiszai Vegyi Kombinát (TVK) állít elő ilyen anyagot. A TVK honlapján egy kisfilm

lehet előállítani. Ez elsősorban annak köszönhető, hogy a molekulatömegettől, molekulatömeg-eloszlástól, a láncok elágazottságától (lásd 1. ábra: a-d) függően nagyon eltérő tulajdonságú végtermékeket kaphatunk. A polietilén egy kristályos polimer, ami azt jelenti, hogy a polimer molekulák lineáris részei hajtogatódással szabályos rendben helyezkednek el. A műanyagok



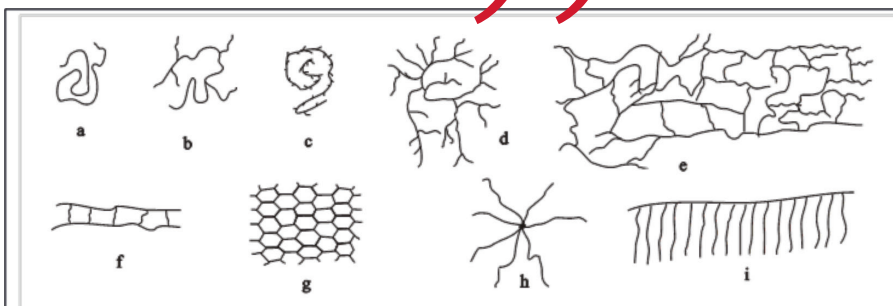
2. ábra A polietilén előállításának reakciósémája

segítségével erről bővebben is tájékozódhatunk (www.tvk.hu: Egy nap alatt a TVK körül).

A PE-ből egyszerű kémiai szerkezete ellenére igen sokféle terméket

A műanyagok feldolgozása során kémiai kötések szakadnak fel és szabad gyökök jönnek létre

sosem 100 %-ban kristályosak, mint a hagyományos kis molekulatömegű anyagok (jég, konyhasó), mert mindig tartalmaznak amorf részeket is, amelyekben a láncok elhelyezkedése szabálytalan. A PE-ben ilyen szabálytalan részek a polimer láncokon található elágazások, amelyeknek a hossza, illetve gyakorisága alapvetően meghatározza a kristályos hányadot és ezzel a termék mechanikai tulajdonságait is, valamint azt, hogy milyen használati tárgyat állíthatunk elő belőle. Nagy mennyiségben gyártanak PE-ből vízvezeték csöveket, ételtároló dobozokat, üreges testeket, például samponos vagy tusfürdős flakonokat. Fólia alapú termékek is előállíthatók belőle, például a mezőgazdaságban nagyon gyakran alkalmazott „üvegházak” burkolatát, agrofóliákat, vagy a bevásárló szatyrokat is ebből az anyagból gyártják. Ultranagy molekulatömegű polietilénből protéziseket (3. ábra) is készítenek, ami szövetbarát, tehát az emberi szervezet nem veti ki magából. A polietilén újrafeldolgozható, így a belőle keletkező hulladék csökkentése, a hasztalanná vált termékek újraolvasztása és újbóli terméké formálása csak rajtunk, embereken múlik. Ha az újrafeldolgozás nem megvalósítható, el is lehet égetni, égése során csak széndioxid és víz keletkezik, kellemetlen szaggal sem jár. Nagy molekulatömegű paraffinnak



1. ábra A polimermolekulák fajtái: a) lineáris fonalmolekula; b) elágazott fonalmolekula ritka, hosszú oldalláncokkal; c) elágazott fonalmolekula sűrű, rövid oldalláncokkal; d) globuláris szerkezetű polimer; e) térhálós molekula; f) hágcsó (létra) szerkezetű polimer; g) síkhálós (parketta) szerkezetű polimer; h) csillag alakú molekula; i) fésű alakú molekula



5. ábra A kurkuma gyökér (<http://en.wikipedia.org/wiki/Turmeric>)

EXTRUDÁLÁS

A műanyagfeldolgozás egyik alapvető eszköze az extruder (7. ábra). Ez a berendezés legkönnyebben egy nagy és fűthető hűsűrűsítőhöz hasonlítható. A garatnak nevezett nyíláson betöltik a műanyagot, amely a fűtött hengerben megömlik, képlékeny állagú lesz. Az ömledéket egy forgó csiga továbbítja előre a szerszám felé, ami a berendezés másik végén található, és a feladata, hogy megadja az extruderből távozó polimer alakját, amit aztán hűtéssel rögzítenek. Segítségével meghatározott keresztmetszetű, végtelenített termékeket lehet előállítani, amelyet utána darabolással megfelelő hosszúságúra vágnak. Ilyen termékek például a csövek, az ablakprofilok, a fóliák és a síklemezek. A polimergyártó cégek polimerizációval állítják elő a polimer port, majd extruderrel a feldolgozó cégek számára már kezelhető granulátumot. A granulátum apró bogyócskákra hasonlító szemcse, amelybe már az első extrúzió során bizonyos adalékokat, mint például stabilizátorokat vagy

antioxidánsokat bekevernek. Tehát a műanyagfeldolgozó cég, amely a készterméket állítja elő, már ilyen, használatra kész granulátumot kap.

SAJÁT KISÉRLETEK

Munkánk során a TVK-tól kapott por állagú PE-be először gyorskeverő segítségével bekevertük a kurkumint, valamint referenciaként elkészítettünk egy olyan porkeveréket, amelyhez Irganox 1010 elnevezésű, az iparban gyakran alkalmazott szintetikus antioxidánszt használtunk fel. Az adalékokból 0,1 %-ot alkalmaztunk. A gyorskeverő olyan, mint egy nagy turmixgép: forgó lapátok találhatók egy nagy, zárható térben, a lapátok forgásának sebessége szabályozható. Mi 500 fordulat/perc sebességgel kevertük a mintáinkat. Ezután hatszor egymás után extrudáltuk a porkeverékeket, valamint összehasonlításként adalékmentes polimert is átjártunk az extruderen, szintén hat egymást követő lépésben. Minden extrúzió

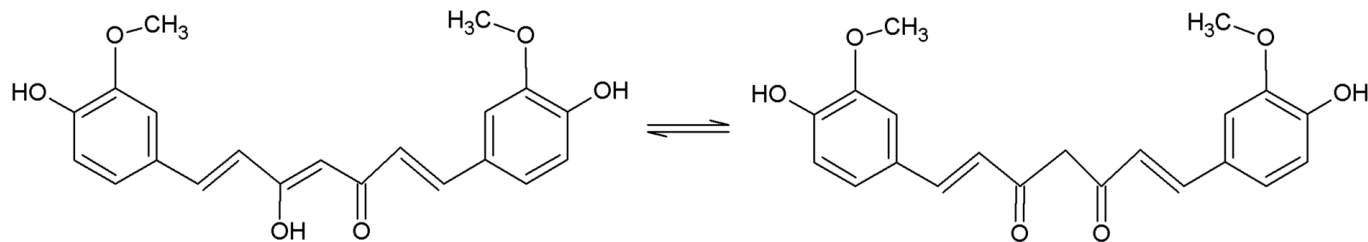
után mintát vettünk, a maradékot pedig újra betöltöttük a gépbe. Így hat, eltérő degradáltsági fokú mintát kaptunk, amelyeket különböző módszerekkel vizsgáltunk. Infravörös spektroszkópiával ellenőriztük a polimer kémiai változását, a metil (-CH₃), a vinil (-CH=CH₂) és a karbonil (-C=O) csoportok számát. Megmértük a polimer folyóképességét ömledék állapotban, a granulátum színét, a maradék termooxidatív stabilitását (mennyi ideig védené meg a polimert a még benne levő stabilizátor magas hőmérsékleten és oxigén atmoszférában), valamint mechanikai vizsgálatoknak vetettük alá az anyagokat.

HOGYAN MÉRJÜK A POLIMER FOLYÓKÉPESSÉGÉT?

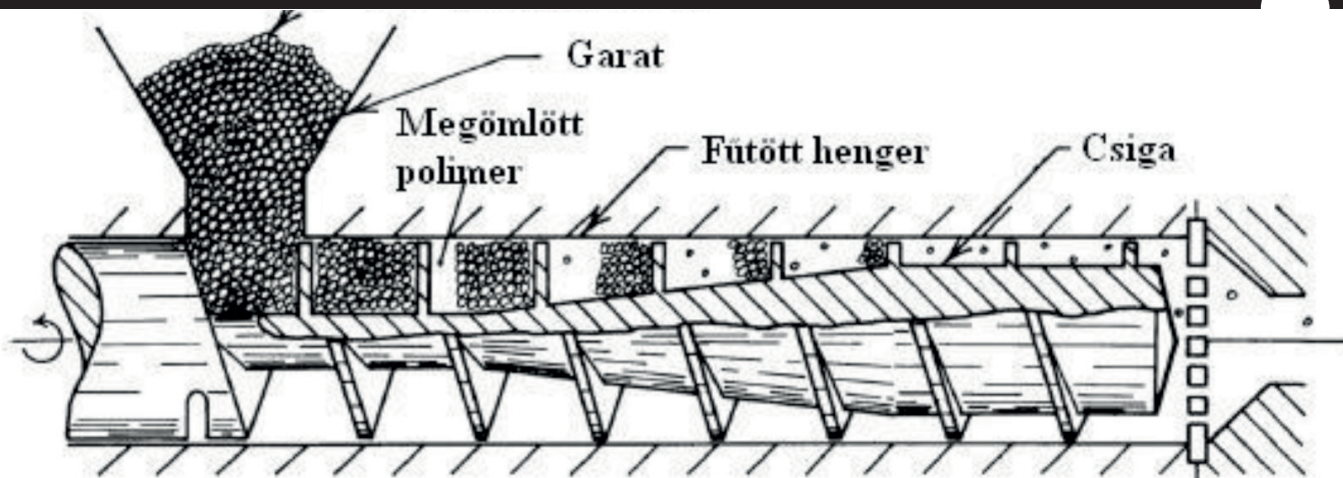
A meghatározott jellemzők közül az ömledék folyóképessége volt a leginformatívabb, ez mutatta ki legjobban a minták közötti különbségeket. A polimer folyóképességének szabványos vizsgálata, az MFI (Melt Flow Index = Ömledék Folyási Indexe) mérése a 8. ábrán látható készülékekkel történik. A vizsgálat lényege, hogy egy fűthető hengerbe betöltjük a műanyagot, és mérjük, hogy 190 °C-on, 2,16 kg terhelés mellett, 10 perc alatt hány gramm anyag távozik a hengerből az alján található szabványos méretű kapillárison keresztül.

EREDMÉNYEINK

Az általunk vizsgált polimer, mint már említettük, elsősorban lánclágazások kialakításával degradálódik, aminek következtében jelentősen csökken a folyóképessége. Vizsgálataink során azt tapasztaltuk, hogy

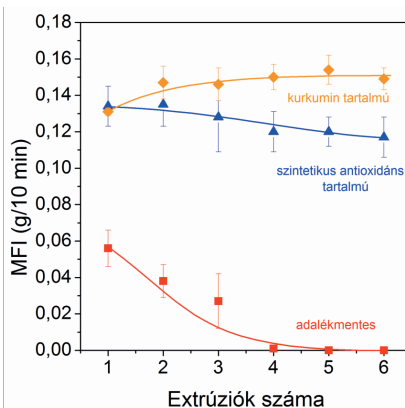


6. ábra A kurkumin enol (bal oldal) és keto (jobb oldal) formában



7. ábra Az extruder felépítése

az adalékmentes polimer folyóképessége gyorsan, már a negyedik extrúzió után nullára csökkent, vagyis az MFI mérés során nem jött ki anyag a készülékből: térhálós polimerhez hasonlító, nagymértékben degradálódott anyagot kaptunk. A szintetikus antioxidánsal csak kis mértékben csökkent az extrúziók során a folyóképesség, a stabilizátor kifejtette hatását. A kurkumin tartalmú minta azonban érdekes eredményt mutatott: a polimer folyóképessége nem



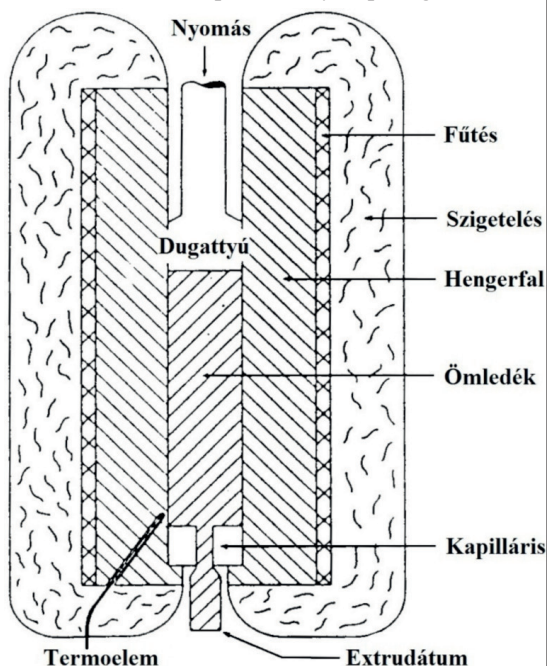
9. ábra A vizsgált minták folyóképessége az extrúziók számának függvényében

csökkent a többszöri extrúzió során, sőt kis mértékben még nőtt is (9. ábra). Ez egyrészt azt jelzi, hogy a kurkumin nagyon hatékony stabilizátor, másrészt, hogy hatásmechanizmusában jelentősen különbözik az ipari antioxidánstól. További feladatunk ennek a mechanizmusnak a pontos felderítése.

IPARI ALKALMAZÁSRA VÁRVA

A kurkuminnal stabilizált polimernek egyelőre nincs ipari alkalmazása, mi használtuk először ezt az anyagot stabilizálási célra. Annak ellenére, hogy némely esetekben színező hatása hátrányos, számos területen alkalmazható lenne, narancssárga színe még vonzó is lehet, például gyermekjátékok, írószerek előállításához. Csöveket is

készíthetnek belőle akár így, narancssárga színben, fekete színezék hozzákeverésével pedig fekete termékeket állíthatunk elő. Érdekes felhasználási mód lehet hatóanyag leadó rendszer előállítása ilyen kurkumin, vagy más természetes antioxidáns tartalmú polimerből. Antioxidánsokat alkalmaznak az élelmiszeriparban is az ételek romlandóságának csökkentésére, és az étel eltarthatósága akár növekedhet, ha a csomagoló-



8. ábra Az MFI mérőkészülék vázlatos rajza



10. ábra A kurkuminnal feldolgozott granulátum és példa a lehetséges felhasználásra

anyagból folyamatosan oldódik be antioxidáns az élelmiszerbe. Összefoglalva, természetes antioxidánsok felderítésével új irányt vehet a műanyagipar, felfedezésünknek, hogy a kurkumin alkalmas lehet műanyagok stabilizálására, ipari alkalmazása is lehetséges a közeljövőben.

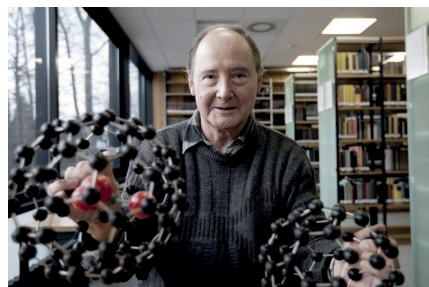
Tátraaljai Dóra
BME Műanyag- és Gumiipari
Laboratórium

NAGY szénmolekulák a világűrben

Korunk modern irányzata a nanoszerkezetek tudománya, ennek gyakorlati megvalósítása a nanotechnológia. Noha ma már számos kémiai elemet használnak fel a nano-tudományokban és technológiákban (pl. aranyat is), a nanoszerkezetek legismertebb típusai szénalapúak.

Negyed százada kezdődött az alapfullerének „diadalmenete”, a C_{60} és a C_{70} molekulák felfedezésével és szerkezeti vizsgálatával. Ezt a felfedezést

A fullerének felfedezésének 25. évfordulóján ezek a szénmolekulák bevonultak a csillagászat történetébe



Wolfgang Krätschmer

aztán követte 1990-ben a fullerének makroszkópikus mennyiségű előállítására szénplazmák segítségével. 1996-ban a kémiai Nobel-díjat három kutatónak ítéltek az 1985-ös felfedezésért: Harold W. Krotonak (University of Sussex, Anglia), Robert F. Curl Jr.-nek és Richard E. Smalley-nak (Rice University, Houston, Texas, USA).

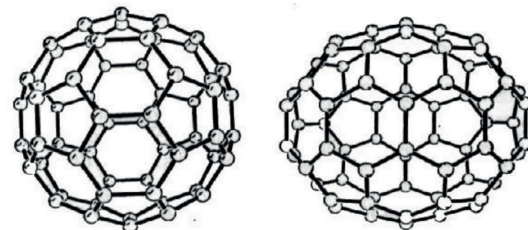
A szilárd fullerének kézzel fogható mennyiségének előállítása pedig Wolfgang Krätschmer (Max Planck Institute für Astrophysik, Heidelberg, Németország) és Donald R. Huffman (University of Arizona,



Donald R. Huffman

USA) nevéhez fűződik (1990).

Utóbbiak nem részesültek Nobel díjban, mivel legfeljebb három tudós kaphat egyszerre ilyen kitüntetést. Noha a fullerének irodalma magyar nyelven is igen bőséges (a nemzetközi irodalom a felfedezéseket követően exponenciális ütemben növekedett), talán nem árt az alábbi ábrán bemutatni az



C_{60}

C_{70}

alapfullerének geometriai szerkezetét.

A C_{60} szerkezete a hagyományos futball-labdához, a C_{70} szerkezete pedig az amerikai futball-labdához hasonlít.

Érdemes megemlíteni, hogy Sir Harold (Kroto) – akit Nobel-díját követően Angliában lovaggá ütöttek – eredeti célja az volt, hogy hosszúláncú szénmolekulákat állítson elő és ezért olyan kísérleteket végzett melyek során grafitról lézerrel felületi rétegeket távolított el (abláció) és ezeket tömegspektrométerrel vizsgálta. Hogy miért éppen ezekre volt kíváncsi? Kroto korábban mikrohullámu molekulaspektroszkópiával foglalkozott, és különösen érdeklődött a rádiócsillagászat szem-



A díjazottak érmeikkel a Nobel ünnepség után 1996-ban Stockholmban (source: http://i.telegraph.co.uk/telegraph/multimedia/archive/01708/k2_1708426c.jpg).



pontjából fontos hosszú szénláncú molekulák iránt (ilyen pl. a HC_7N molekula). Ettől függetlenül 1919 óta foglalkoztatta már az asztrofizikusokat, és csillagászokat az ún. diffúz csillagközi sávok (diffuse interstellar bands – DIBs) molekuláris azonosítási problémája. A DIB-ek a csillagok ultraibolya, látható és infravörös spektrumaiban található többé-kevésbé széles profilú abszorpciós sávok, amelyek a csillagközi térben elhelyezkedő anyagokkal függenek össze. Számuk ma már több mint 400-ra rúg. Ezek szimulációs ábrázolását mutatjuk be az alábbi ábrán.



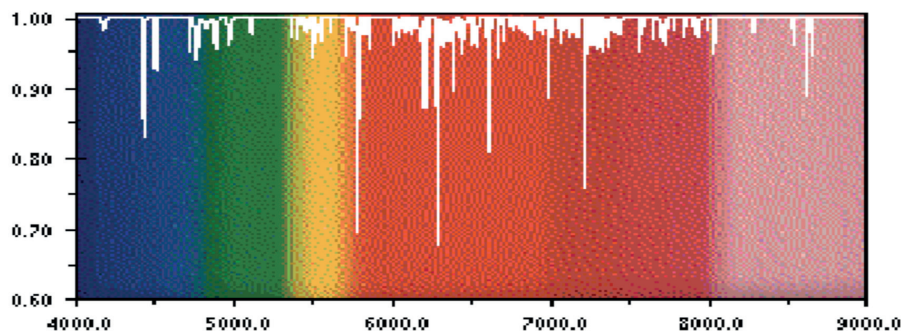
(forrás: http://www.astro.uwo.ca/~epeters/research_new.html)

cencia képet egy olyan csillagközi felhőről, ahol új csillagok születnek.

PAH molekulák képződésére vezethetnek a csillagközi porban levő amorf szénrészecské (grafitszemcsék) ütközései, amelyek eredményeképpen a szemcsékről grafénsíkok hasadnak le, majd szabad vegyértékeikkel hidrogénatomokat kötnek meg.

A PAH molekulák asztrofizikai kutatása már komolyultra tekinthet vissza. Így pl. tudjuk, hogy saját galaxisunk infravörös emissziójának döntő része PAH molekulától származik, és fontos forrásai lehetnek a diffúz csillagközi sávoknak is.

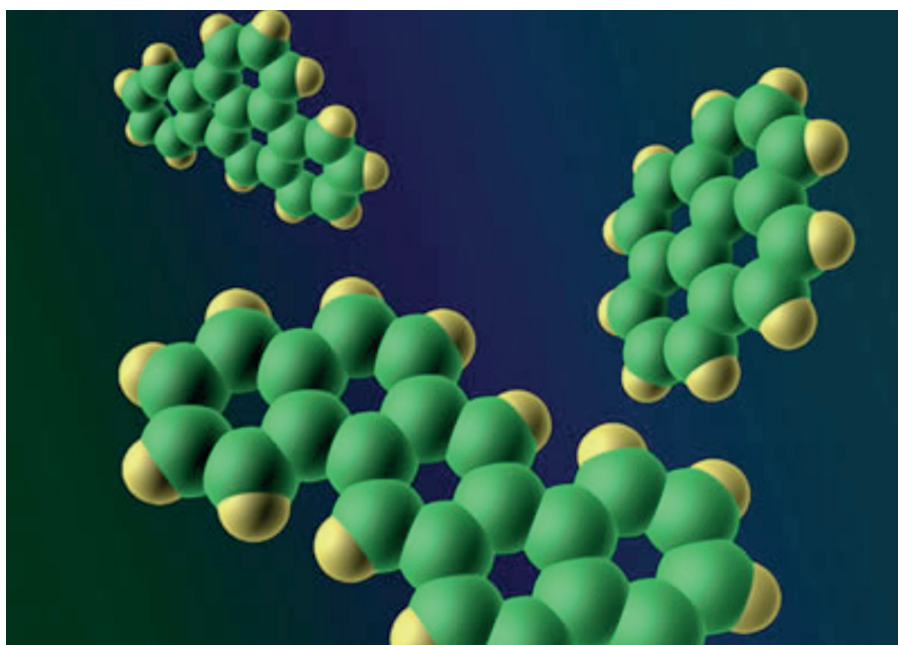
Már a fullerénkutatás kezdetekor felmerült az a lehetőség, hogy a fulleréneket megtalálják a csillagközi térben, illetőleg egyéb csillagászati objektumokban. Tekintettel a szén igen gyakori előfordulására és arra, hogy meteoritokban és közönséges földi körülmények között, pl. kormozó lángokban is találtak fulleréneket, ennek a valószínűsége elég nagy tünik. Azonban két lehetséges észlelési akadály is felléphet a világűr tulajdonságai miatt. Az egyik az, hogy az általánosan elterjedt vélemény szerint a világűr legfontosabb alkotójának, a hidrogénnek a jelenléte meggátolja a tiszta szénből álló fullerének létrejöttét. Elvégre mind az eredeti Kroto-Smalley-Curl, mind pedig a Krätschmer-Huffman kísérletekben fontos szerepe volt a nemesgáz környező atmoszférának a fullerének képződésében. A másik körülmény pedig a világűr legtöbb helyén uralkodó nagyenergiájú ultraibolya sugárzás, ill. az erősen ionizáló kozmikus sugárzás. Ezért úgy gondolták, kicsi annak a valószínűsége, hogy semleges fullerénmolekulák



A vízszintes tengelyen a csillagokról jövő fény teljes látható tartományának hullámhossza szerepel angström egységben. A függőleges tengely a fehér vonalakkal szimulált spektrális abszorpció intenzitását mutatja (forrás: <http://www.nat.vu.nl/en/research/physics-light/molecular-hydrogen/index.asp>).

Alexander Douglas kanadai asztrofizikus 1977-ban már feltételezte, hogy hosszúlán-cú szénmolekulák jelenléte okozza az elnyelési sávokat. A DIB-ek molekuláris azonosítása azonban igen nehéz problémának bizonyult, és mind a mai napig foglalkoztatja a molekulaspektroszkopusokat és asztrofizikusokat. Az mindenesetre bizonyossá vált, hogy a csillagközi térben jelentős mennyiségű nagy szénmolekula van, és pedig az ún. PAH molekulák. (PAH: polycyclic aromatic hydrocarbon, azaz többgyűrűs aromás szénhidrogén). Ezek kémiai igen sokfélék lehetnek, a mellékeltábra bemutat néhányat közülük:

Csillagászati becslések szerint a PAH molekulák a csillagközi tér szénmennyiségének 18%-át is kitehetik. A PAH-ok jelenléte infravörös emissziójuk formájában is jelentkezik. A fenti képen látjuk a Spitzer űrteleszkóp által készített vörös fluoresz-



Policiklusos aromás szénhidrogének (PAH) NASA20050627a_PAH_molecules.jpg



(forrás: <http://www.webbtelescope.org/2011/11/identifying-ecoplanets-by-infrared-rais/>)

ciális elhelyezkedésű obszervatóriumok is (pl. a Hawaii-i Mauna Kea kialudt vulkán obszervatóriumai) spektrálisan korlátozottak. Ezen kívül a földi objektumoknak is van hősugárzása, ami szintén korlátozza a csillagászati megfigyeléseket. Ezért egyre nagyobb a szerepe az űrben keringő infravörös obszervatóriumoknak, ill. csillagászati műholdaknak. 1995-ben lőtték fel az Infravörös Űrobzervatóriumot (ISO), amely 2.5 és 240 mikrométer hullámhossz tartományban működött, majd 2003-ban a Spitzer Űrteleszkópot, amely 3 és 180 mikrométer között tett (és tesz) lehetővé megfigyeléseket. A legújabb a 2009-ben pályára helyezett Herschel Űrobzervatórium, amely a távoli infravörös és a mm hullámhosszú tartományban működik. A lassan kiöregedő Hubble űrteleszkóp helyét 2014-ben elfoglalja a James Webb Űrteleszkóp, amely 0,6 és 28 mikrométer tartományban végez majd méréseket. Ezeken kívül pedig a SOFIA sztratoszférikus infravörös teleszkópot 2007 óta működtetik egy Boeing 747 repülőgépen elhelyezve, amely 12 km magasságban repülve a légköri nedvesség javarészen felülemelkedik. A SOFIA teleszkóp 1 és 655 mikrométer között képes infravörös csillagászati megfigyelésekre. A mellékelt képen láthatjuk a Spitzer teleszkóp művészi ábrázolását.

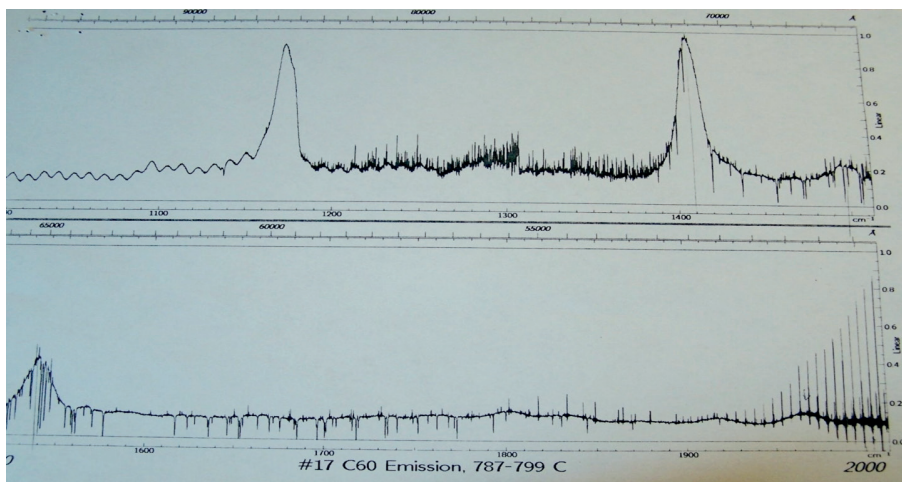
A Spitzer űrteleszkóp 2005-ben felvett infravörös spektrumfelvételein számos planetáris nebula infravörös emisszióját regisztrálták és a későbbi években analizál-

keletkezzenek, sokkal inkább ezek ionjai, pl. elsősorban az egyszeres töltésű fullerénkation: a C_{60}^+ jelenléte várható. A C_{60} első ionizációs potenciálja elég alacsony, 7.5 eV, második ionizációs potenciálja 11.5 eV.

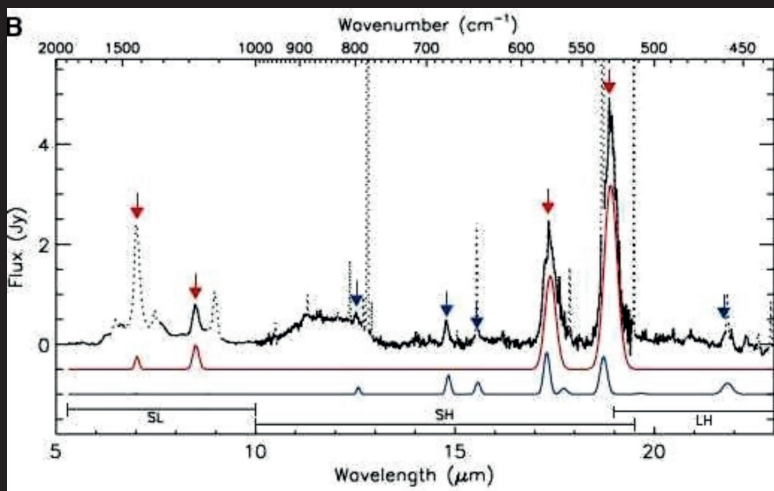
Sikerült olyan laboratóriumi mátrix izolációs alacsony hőmérsékletű közeli infravörös spektrumot nyerni a C_{60}^+ kationról, amely két jellegzetes abszorpciós sávot mutat olyan hullámhosszakon, ahol diffúz csillagközi sávokat észleltek (éspedig 9663 és 9724 angström hullámhosszon), továbbá vannak már gázfázisú infravörös és távoli infravörös laboratóriumi spektrumok is bizonyos PAH molekulákról és intenzív csillagászati megfigyelések folynak PAH molekulákkal kapcsolatban. Mindezek dacára a diffúz csillagközi sávok hozzárendelése ismert szerkezetű PAH molekulákhoz még mindig jórészt nyitott probléma. Így tehát még mindig elképzelhető, hogy ezeknek a sávoknak legalábbis egy részéért maguk a semleges fullerénmolekulák a felelősek. A csillagászati kutatásokban egyre fontosabb szerepet tölt be az infravörös spektrumtar-

tomány vizsgálata, mivel az infravörös rezgési spektrumok alapján a molekuláris azonosítás könnyebb, mint a látható és ultraibolya tartományban.

Az infravörös spektrumtartományban azonban nehéz földi körülmények között jó minőségű csillagászati észleléseket végezni. Ennek fő oka a légkör nedvességtartalma, a vízgőz infravörös elnyelése miatt még a spe-



Laboratóriumi C_{60} infravörös emissziós spektrumok egy tartományba 800 °C körül.



Az itt bemutatott spektrumban a piros nyilak mutatnak a C_{60} infravörös emissziós sávjaira, a 6 és 9 mikrométer közötti két sáv felismerhető az előző ábrán bemutatott laboratóriumi spektrumban (a 7.1 és 8.5 mikronos sávok hullámszáma a laboratóriumi spektrumban 1410 és 1180 cm^{-1} -nél.). A felfedező Jan Cami fotóját mutatja be a fenti kép. (forrás: Science, vol.329, pp.1180-82 (2010) (forrás: <http://www.astro.uwo.ca/news/news-archive-2007.html>)



ták. Mivel a csillagászok nem ismerték a C_{60} és C_{70} infravörös spektrumát, arra gondoltak, hogy a spektrumok hidrogénezett PAH molekulákra utalnak. Jeronimo Bernard-Salas spanyol csillagász a Cornell

Egyetemen (USA) azonban felismerte, hogy egyes Spitzer spektrumokban szokatlan infravörös sávok vannak. Kollegája Jan Cami belga csillagász Kanadában tovább tanulmányozta a kérdéses infravörös emissziós

spektrumokat és rádöbbsent arra, hogy nem PAH spektrumokról van szó. A sávok azonosítására laboratóriumi infravörös emissziós spektrumokat használt, amelyeket 1993-ban az arizoniai Kitt Peak obszervatórium napfizikai infravörös spektrométerével vettek fel széles hőmérséklettartományban a C_{60} és C_{70} fullerének magas hőmérsékletű gőzeiről.

Ezeknek a spektrumoknak az analizésében a jelen szerző is résztvett, és a cikket 1994-ben közzölték. (Nemes L, Ram R.S, Bernath P.F, Tinker F.A, Zumwalt M.C., Lamb L.D. Huffman D.R., Chem. Phys. Letters, 1994, 218, 295-303)

A Spitzer spektrumok egyértelműen bizonyították, hogy Jan Cami felfedezése a C_{60} és C_{70} fullerének jelenlétéről egy déli égbolti planetáris nebulában (a Tc1 nebulában) hitelt érdemlő, és így ez a fullerének kozmikus jelenlétét bizonyító első csillagászati munka. Cami és munkatársai cikke 2010 szeptemberében jelent meg teljes terjedelmében a Science folyóiratban. A cikkben közölt Spitzer spektrum fent látható.

Jan Cami felfedezését követően már több csoport találta meg a C_{60} fullerént csillagászati objektumokban. Így tehát a fullerének felfedezésének 25. évfordulóján ezek a szénmolekulák bevonultak a csillagászat történetébe és várható, hogy rövidesen számos új kozmikus forrásban is ki tudják majd mutatni őket. Ez a szén asztrokémiai szerepét illetően igen nagy fontosságú lesz.

Nemes László

MINILEXIKON

Szénplazma. A plazma a negyedik halmazállapot (ionizált atomi és molekuláris gázállapot), alkotóelemei atomi és molekuláris ionok, elektronok, semleges atomok és molekulák. Erős elektromágneses sugárzás forrása. A szénből keltett plazmák is ilyenek.

Infravörös spektrum. Általában a középső infravörös tartományra vonatkozik, ami durván a 2.5 mikrométer és 50 mikrométer hullámhosszak közé eső tartomány. A közeli infravörös spektrum csatlakozik a látható tartományú fény vörös határához (750 nm) és 2.5 mikrométer hullámhosszig terjed. A távoli infravörös spektrum kb. 50 mikrométer és 300 mikrométer hullámhossz közé esik.

Mikrohullámú spektroszkópia. A mikrohullámú sugárzás az infravörös és rádió hullámhosszú tartomány közötti elektromágneses spektrumtartományban, durván 0.3 mm és 30 cm hullámhosszak között található. Ebben a tartományban jelennek meg az elektromos dipólusmomentummal rendelkező molekulák forgási energia átmeneteit. A rádiócsillagászat ezt a tartományt hasznosítja molekulák azonosítására a világhírben. A mikrohullámú tartomány legnagyobb frekvenciájú, legrövidebb hullámhosszú része a mm és szub-mm tartomány, ami átfed a távoli infravörös spektroszkópiailis tartománnyal és tipikus frekvenciája a terahertz (10^{12} Hz) tartomány.

Abszorpciós sávok. Az elektromágneses spektrum azon részei, ahol az atomok és molekulák elnyelik a sugárzást.

Planetáris nebula. A planetáris nebula ill. köd gázból és plazmából álló világító burok, amely bizonyos típusú csillagok körül az életük vége felé ledobott gázfelhőből képződik. Elnevezése onnan ered, hogy a kisebb távcsövekben a planetáris ködök az óriásbolygókhoz hasonlítanak, de persze semmi közük azokhoz.

Fluoreszcencia. Az elektromágneses sugárzást (pl. ultraibolya sugárzást) elnyelő molekulák nagyobb hullámhosszakon (pl. infravörös hullámhosszakon) visszasugárzott energiája. A PAH molekulákat a planetáris nebulák központjában lévő csillagok ultraibolya sugárzása kelteti infravörös hullámhosszú fluoreszcenciára.

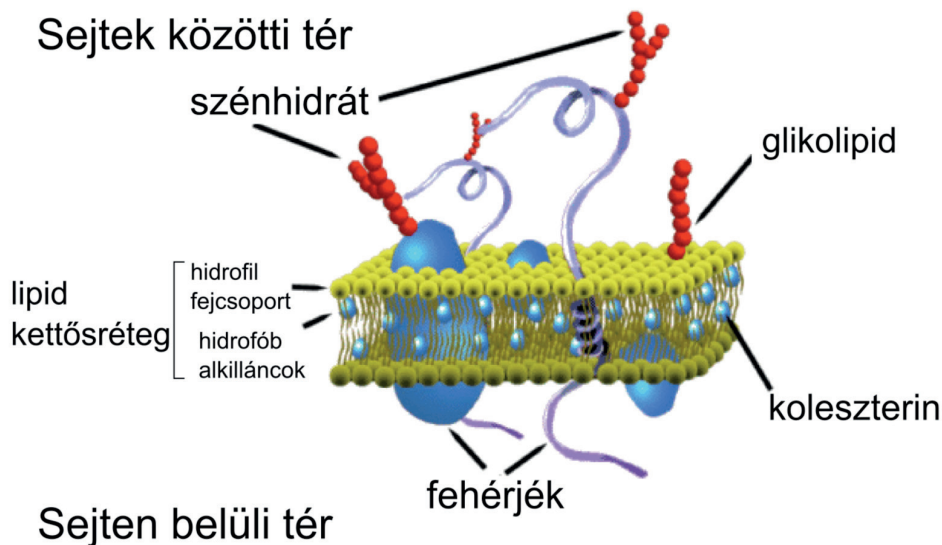
FTIR spektrométer. A Fourier transzformáció elvén alapuló infravörös (infrared) spektrométer, jellemzően igen nagy spektrális felbontású eszköz.

Spektrális felbontás. A különböző frekvenciájú spektrumvonalak különálló észlelése.

A Tris pufferrendszer hatása

A felsőbbrendű szervezetek sejtjeinek bonyolult és összehangolt működését a sejt szervecskék nagy száma biztosítja. Ezeket a sejt szervecskéket a funkcióiknak megfelelő összetételű membránok határolják, amelyek révén elkülönülnek, és egyben szervesen kapcsolódnak is környezetükhöz. Az első közelítésben rúd alakúnak tekinthető foszfolipidek jellegzetes módon kettősrétegekbe szerveződnek. A sejtmembránokhoz hasonló héjszerkezet mesterségesen kialakítható és a liposzómának nevezett gömbformává áll össze. Ezek a mikrométer alatti gömböcskék azon túl, hogy a sejtmembránok jó modell-rendszerei, gyógyászati célra előnyösen felhasználhatók: belsejükben gyógyszermolekulákat lehet juttatni a szervezetbe.

A foszfolipidek úgynevezett amfipatikus molekulák, egy hidrofíll, azaz vízkedvelő fejcsoportból, és egy hidrofób, azaz vízutasító szénhidrogén részből állnak. Ezek a molekulák vizes közegben kettősrétegekbe rendeződnek. Ebben a szerveződésben a hidrofíll „fejek” a vizes fázis felé, a zsírsav-lánc „lábak” pedig a kettősréteg belseje felé néznek. A foszfolipid mellett egyéb membránlipidek (pl. koleszterin), illetve fehérjék és szénhidrátok is részt vesznek a membrán felépítésében. A lipidek adják a biológiai membránok alapvető struktúráját és permeábilis tulajdonságait, az egyéb speciális tulajdonságokért az ún. membránfehérjék a felelősek (1. ábra).



1. ábra. Sejtmembránok felépítése (http://www.malebolge.net16.net/science10/fluid_mosaic.gif)

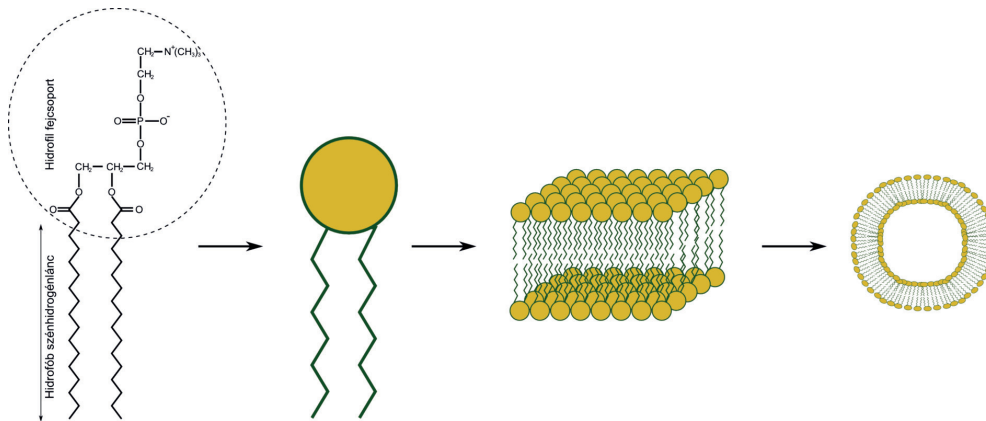
A biológiai membránok rendkívül összetett rendszerek, tanulmányozásukat megnehezíti, hogy bennük túl sok paraméter okozhat változást. Emiatt gyakran modellmembránokat tanulmányozunk, amiből a valós rendszerek tulajdonságaira lehet következtetni. Ebben a cikkben az emberi sejtmembránokban előforduló fő foszfolipid alkotóból készített rendszer vizsgálatát mutatjuk be. Ez a foszfolipid a dipalmitoil-foszfatidil-kolin, röviden DPPC. Szerkezeti

A lipid kettősréteg tulajdonságait a vizsgálatokhoz szükséges adalékanyagok befolyásolják

képe, valamint az abból felépülő alakzat, a liposzóma egyszerűsített ábrázolása a 2. ábrán látható. A telített zsírsavláncal rendelkező DPPC geometriai formáját tekintve egy henger. Alakjából következően kettősrétegekbe rendeződik, ezen rétegek sokasága pedig a

hagymák héjszerkezetéhez hasonlító alakzatokká, úgynevezett multilamelláris vezikulákká, vagy liposzómákká áll össze. A lipid kettősrétegek és a vízrétegek egymást váltogatva – akár több száz periódust alkotva – adják a többrétegű vezikulák gömb formáját.

Modell-membránok esetében a vázat a lipid kettősréteg képezi. A kialakuló szerkezet tulajdonságai leginkább az összetételtől függenek, vagyis fontos, hogy milyen lipidről van szó, és az milyen arányban vesz részt a modell-rendszer felépítésében. Minden, a lipid/víz alap-rendszerhez adott komponens megváltoztatja annak tulajdonságait. Az egyszerű lipid/víz alap-rendszer tanulmányozása már önmagában is hasznos információt jelent a valós biológiai membránok működésének megértéséhez. Az egyéb, kis méretű molekulák jelenléte a tulajdonságok megváltozását okozza, hasonlóan a valós biológiai membránokhoz. Különösen fontos például, hogy ezek a „vendégmolekulák” hogyan befolyásolják a kémhatást. Az élő szervezetben a funkciók ellátásához ugyanis alapvető a pH állandó értéken tartása. Emiatt a sejtekben pufferrendszerek működnek, amelyek stabilizálják a pH-t.



2. ábra. DPPC és sematikus ábrázolása, a kettősrétegbe rendeződés és bezáródás

A modell-rendszerek vizsgálatát is pufferekben végzik. A puffermolekula egy újabb komponens a lipid/víz alap-rendszerben, ennek ellenére a pufferek közvetlen hatásáról kevés információ található az irodalomban. A következőkben a Tris-puffer (2-amino-2-hidroxi-metil-1,3-propándiol, 3. ábra) vezikulákra kifejtett hatásának kísérleti módszerekkel történő jellemzését mutatjuk be.

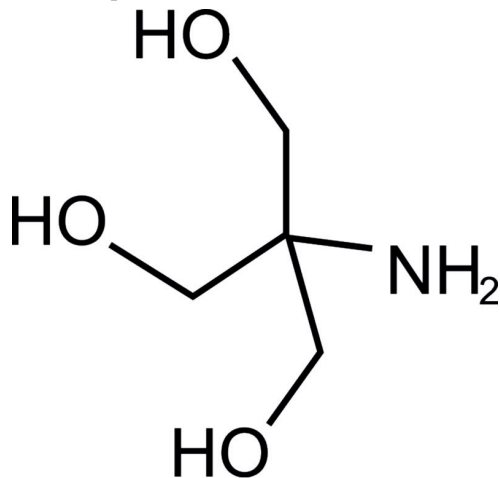
Az alkalmazott Tris-puffer széles körben elterjedt a biokémiai és molekuláris biológiai vizsgálatoknál. A Tris vízben történő feloldása után lúgos kémhatású, az oldat pH-ja ecetsav adagolásával állítható be. Disszociációs állandója $pK_a = 8,06$. Ez ideális az élőlények fiziológiás pH értékének beállításához. Ezt a széles körben alkalmazott puffert különböző koncentrációkban, és

NaCl hozzáadása mellett is alkalmaztuk, amivel a só-koncentrációnak a vezikulák szerkezetére kifejtett hatását is vizsgáltuk.

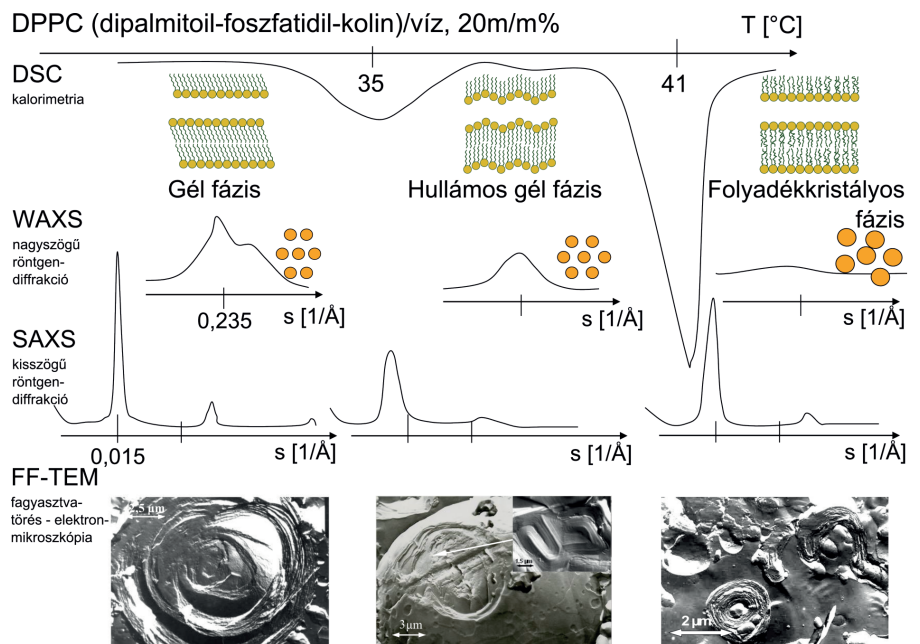
A DPPC alkotta vezikulák szerkezete hőmérsékletfüggést mutat. Kalorimetriás módszerrel (Differenciális pásztázó kalorimetria; Differential scanning calorimetry – DSC) a különböző mezomorf állapotok (fázisok) közötti átmeneti hőmérsékletek és így az egyes állapotokra jellemző hőmérséklet-tartományok vizsgálhatók. A módszer lényege, hogy egy kis méretű mintát tartalmazó,

valamint egy üres mintatartót együtt, meghatározott fűtési program szerint melegítünk, a környezettől termikusan elszigetelt térben. Ha a mintában olyan fázisátalakulás következik be, amit hőeffektus kísér, a két cella között hőáram indul. A hőmérséklet függvényében ábrázolt hőfluxus különbségből (DSC-görbe) meghatározható az állapotváltozásokot kísérő fázisátmeneti hőkezdeti hőmérséklete (T_{kezdt}), végső hőmérséklete ($T_{vég}$), a folyamat fajlagos átalakulási hője ($\Delta H/mol$ lipid), illetve a görbe minimum helye, ami egyben a fázisátmenet hőmérsékletének közelítő értéke (T_m).

A 4. ábra az alkalmazott vizsgálati módszerek jellegzetes mérési görbéit mutatja be a DPPC/víz alap-rendszerre vonatkozóan. Az ábra legfelső sorában a DSC görbe látható, amelynek két lefelé mutató csúcsa két fázisátmenetet mutat. A két fázisátmenet három fázist, a gél, a hullámos gél és folyadékkristályos fázisokat kapcsolja össze (a fázisokat jellemző rétegek sematikus képei is fel vannak tüntetve). 35°C -nál az ún. előátmenet detektálható. A fázisátmenet során a rendszer gél fázisból hullámos gél fázisba kerül. A hullámos gél fázis



3. ábra. A Tris molekula



4. ábra. Vizsgálati módszerek jellegzetességei az alap-rendszer tulajdonságain keresztül

onnan kapta a nevét, hogy a kettősrétegek sima gömbfelülete jellemzően meggyűrődik (mint ahogy egy sima vízfelületen hullámok alakulnak ki, a hullámok periódusa a kettősréteg 3 – 4 szerese, amplitúdója a kettősréteg vastagságánál kisebb). 41°C-nál a főátmenet jelentkezik, amelynek eredménye a folyadékkristályos fázis. A szerkezet meghatározására szolgáló röntgenméréseket ezektől a fázisátmeneti hőmérsékletektől néhány °C-szal távolabb (26, 38 és 46°C-on) végeztük, hogy biztosan stabil állapotokat vizsgáljunk.

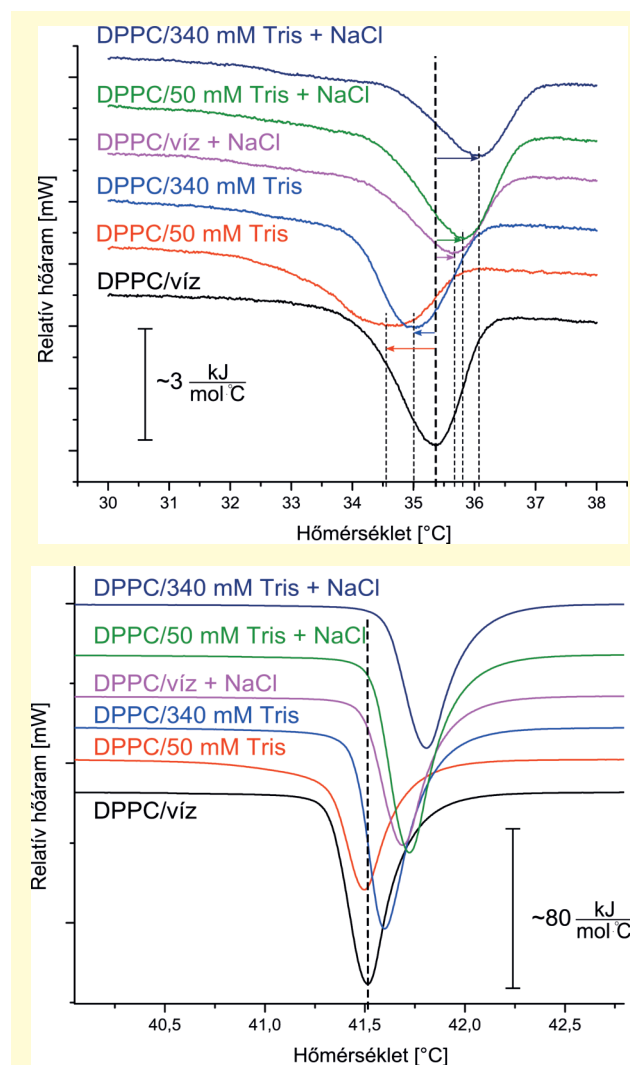
A szerkezet meghatározására szolgáló röntgendiffrakciós módszer elmélete a Bragg-diffrakción alapul. A monokromatikus röntgennyaláb rugalmasan szóródik a rácsponthoz illeszkedő molekulák elektronfelhőjéről. A szórt nyalábok bizonyos irányokban, a mintában jelenlévő nagy számú és tipikus távolságok következtében interferálnak egymással és kiugróan magas szórásintenzitást adnak, amelyek ún. diffrakciós csúcsok formájában detektálhatók. A belépő és a szórt röntgennyaláb irányai közötti szög, a szórás szög széles tartományban változtatható a röntgendiffrakciós módszernél. A diffrakciós csúcs szöge (a szórás változó nagysága) és a rétegvastagság között fordított arányosság van. A vezikulák esetében két méreetskálán beszélhetünk a diffrakcióról (a jellegzetes diffrakciós csúcsok alakját a 4. ábra második és harmadik sorában láthatjuk).

A kettősréteg és víz rétegek periodicitása az atomi méretnél lényegesen nagyobb méreetskálával (kb. 60-70 Ångström – 6-7 nanométer) jellemezhető, amely a kisszögű (néhány fok) szögtartományban ad Bragg-csúcsot. A röntgenszórás szempontjából a gömbszimmetrikus kettősrétegek síkokkal közelíthetők. A kettősrétegen belüli szerkezet a lipidmolekulák elhelyezkedésének következménye. A kettősréteg belső szerkezetének megértéséhez a közelítőleg rúd alakúnak elképzelt lipidek formáját részletesebben kell leírni, mégpedig úgy, hogy minden egyes szénhidrogén-láncot mint egy-egy pálcikát veszünk figyelembe (lásd 2. ábra). A lipidmolekulák láncainak kettősrétegen belüli szoros, közel párhuzamos elhelyezkedése, más szóval pakolódása tipikus, az

egy-egy gél állapotokra jellemző módon valószínűleg meg (a szorosan pakolt fahasábokhoz hasonlatosan), a szénhidrogén-„pálcikák” távolsága kb. 5 Ångström. Ez a rács távolság 18–24° közötti szórás szögtartományban vezet diffrakciós csúcsokhoz. A nagyszögű diffrakciós (nagyszögű röntgenszórás; Wide angle x-ray scattering – WAXS) görbékben lévő csúcs kiszélesedett alakja a gél és a hullámos gél állapotban egy többé-kevésbé szabályos rendeződésre utal. A 4. ábrán megfigyelhető narancssárga körök (láncrégiókban a „pálcikák” keresztmetszete) szemléltetik a szénláncok pakolódását, a kettősrétegek belső felületét. Folyadékkristályos állapotban a láncrégiók mozgása szabálytalan lesz, a rendeződés megszűnik, aminek következtében eltűnik a nagyszögű csúcs. A kisszögű görbék (kisszögű röntgenszórás; Small angle x-ray scattering – SAXS) a multilamelláris rétegszerkezetet jellemzik. Gél fázisban a felületek síkkal közelíthetők, a rétegvastagság egyenletes, 63,4 Å. Hullámos gél fázisban a lipidek kissé eltávolodnak egymástól, a rétegvastagság ennek megfelelően kb. 71 Å-re nő, a csúcsok kiszélesedése pedig kevésbé rendezett rétegek sokaságára utal. A folyadékkristályos állapotban újra sík lesz a felület, 65 Å körüli rétegvastagsággal.

A kalorimetriás és a röntgenszórásos módszerek által nyújtott adatok mellett nagyon fontos, közvetlen képi információkat nyerhetünk a fagyasztatással kom-

binált elektronmikroszkópia (freeze-fracture with transmission electron microscopy, FF-TEM) alkalmazásával. A hirtelen lehűtött (kb. 10000 °C/sec hűtési sebesség), kis mennyiségű mintának a felületét vákuumban egy speciális késsel elmettszve láthatóvá válnak a metszés által a felületre került részletek. A friss felületre ferdén párologtatott platinaréteg biztosítja a „domborzat” megjelenítését, míg az egyenletesen felhordott szénréteg a „maszk” rögzítésére szolgál. Az így nyert lenyomatot, az ún. replikát az eredeti minta lemosása után elektronmikroszkópba helyezve vizsgálhatjuk. Vezikulák ese-



5. ábra. A DSC módszerrel mérhető fázisátalakulásokra vonatkozó csúcsok: előátmenet (fent), főátmenet (lent)



tében a metszőkés a héjakkal párhuzamos és a hibahelyek következtében arra merőleges töréseket okoz. Ennek következtében láthatóvá válnak a réteges elhelyezkedés sajátosságai, a rétegek szabályos vagy éppen szabálytalan pakolódása, a vezikulák egészének szabályos, a gömb alakot megközelítő, vagy attól eltérő formái. A 4. ábra alsó során a három fázisállapotnak megfelelő vezikulák képe látható. Gél és hullámos gél állapotok kísérői a nagyméretű, szabályos gömb alakú vezikulák. Utóbbi esetben a héjak felületén kialakult hullámos redőket is megfigyelhetünk. A folyadékristályos szerkezet hőmérséklet-tartományában a vezikulák alakja erősen deformált és méretük nagy mértékben különbözik. A 4. ábra illusztrálja, hogy a fázisátmenetek során a rétegek, a vezikulák egésze átrendeződik; a rendszer dinamikus sajátágú.

Tris-pufferrendszer alkalmazása során a kalorimetriás vizsgálatok (5. ábra) az előátmenetre jellemző hőmérsékletnél mutatnak jelentős változást. Hogy ezt a jelenséget értelmezni tudjuk, figyelembe kell vennünk, hogy az előátmenet során a lipid molekulák hossztengeleyük mentén kimozdulnak a kettősrétegekből. Ennek az az oka, hogy a fejsoportok közötti tasztító kölcsönhatás a lipid molekulákat nagyobb távolságra kényszeríti, ugyanakkor a szénláncok továbbra is párhuzamosak – a nagyszögű csúcs tanúsága szerint. Ez a kimozdulás periodikus a héj mentén, és ez okozza az előzőekben ismertetett felületi hullámot. Minden vendégmolekula, vagy ion, ami a fejsoport közelébe kerül, megváltoztathatja a lipidek fejsoportjainak kölcsönhatását. Jelen esetben a változások azt jelzik, hogy a Tris-pufferrendszer ionjai a fejsoport közelében helyezkednek el és módosítják a lipidek közötti kölcsönhatást.

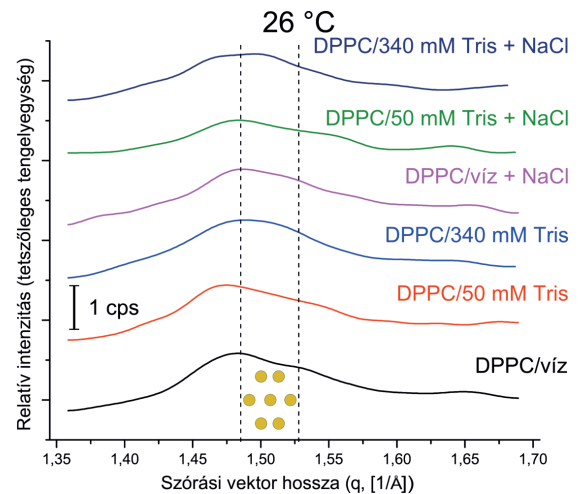
A Tris-molekula 3. ábrán bemutatott szerkezete indokolja, hogy a Tris-puffer a lipidek ionos jellegű kölcsönhatásait befolyásolja. A biokémiai rendszerek esetében alkalmazott pufferek szokásos koncentrációja 50 mM. Ez a koncentráció a vizsgált 20 tömeg%-os lipid/víz rendszer esetében azt jelenti, hogy 1 lipid molekulára átlagosan 0,147 Tris molekula esik. Ennél az aránynál a fázis-átmeneti hőmérséklet kb. 1°C-szal alacsonyabb, mint

vizes rendszer esetében (lásd 5a ábra). A főátmenet hőmérséklete nem változik, jelezve, hogy a poláris Tris-molekula nem érinti a szénhidrogén láncokat, így az azok közötti kölcsönhatást sem (5. lenti ábra). A Tris koncentrációját növelve 340 mM-ra (egy lipidre egy Tris molekula jut) az előátmenet hőmérséklete emelkedik. 0,5 M koncentrációjú NaCl oldat esetében és minden további Tris és NaCl hozzáadása után a tendencia folytatódik. A főátmenet esetében is ez a változás a jellemző, a fázisátmenet hőmérséklete emelkedik, azaz a gél és hullámos gél állapotok stabilitása növekedik. Az

előátmenettel járó hőváltozások (a DSC görbék csúcsainak területe) csak a legnagyobb só koncentrációk (Tris és NaCl is) esetében csökkennek lényegesen (7-9%-ot meghaladó mértékben) a DPPC/víz alaprendszer jellemző értékével összehasonlítva. A főátmenetnél (5. lenti ábra görbéi) a relatív változások értéke 1-2%, azaz a Tris molekulának a láncrégióra kifejtett hatása csekély.

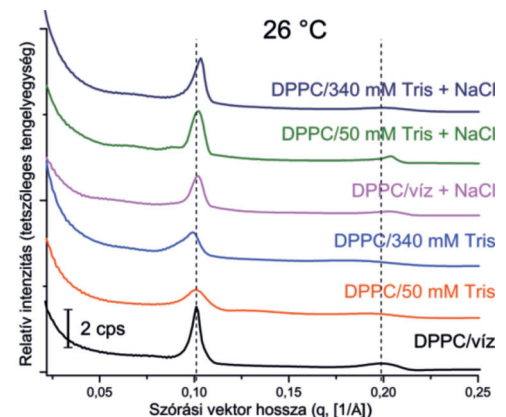
A 6. ábra a gél állapot szénhidrogén láncának nagyszögű röntgen diffrakciós görbéit mutatja be. Az alaprendszer összetett csúcsalakjának legnagyobb mértékű változását ugyanaz az 50 mM-os Tris koncentráció jelzi, mint amelyik az előátmenet során is a legszélsőségesebb esetet eredményezte. A csúcs maximuma a kisebb szórási változó (azaz a kisebb szögek) irányába tolódott, azaz a lipidmolekulák rácsa „kitágult”. Érdekes a két módszer összevetése: a fejsoport régiójához köthető (kalorimetriásan mérhető) effektus hatása a szénhidrogén lánc régiójában tovább terjed és szerkezeti változást okozva röntgendiffrakciós módszerrel nyomon követhető.

A kisszögű röntgendiffrakciós görbék (7, 8, 9. ábrák) markáns változásokat mutatnak Tris-puffer hatására mind a három fázisállapotban. Gél állapotban a diffrakciós csúcsok kiszélesednek, ami a vezikulák rétegek nem periodikus elhelyezkedésé-

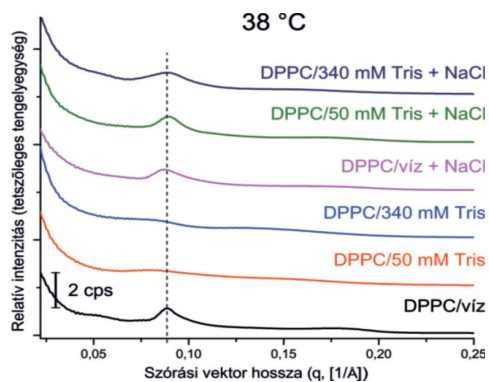


6. ábra. A lipidek kettősrétegen belüli pakolódására jellemző nagyszögű diffrakciós görbék részletei (a felvétel 26°C hőmérsékleten készült)

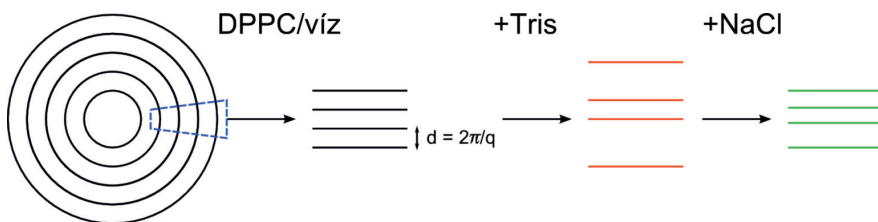
nek következménye (7. ábra). A rétegek egy része a DPPC/víz rendszer ismétlődési távolságánál nagyobb értékeket vesz fel, ezáltal a rétegek szabályos, periodikus elrendeződését megszünteti. NaCl jelenlétében a puffer-tartalmú rendszer szerkezete rendeződik és az alaprendszer csúcsalakját szolgáltatja. Hullámos gél fázisban (ahol a felületi gyűrődések miatt eleve kisebb mértékű a rendezettség és ennek megfelelően szélesebb a diffrakciós csúcs alakja) Tris hatására teljesen megszűnik a rétegek közötti korreláció (8. ábra). A kisszögű görbe – diffrakciós csúcs híján – a rétegek közötti korreláció teljes elvesztését, az ún. „szétcsa-



7. ábra. Kisszögű röntgendiffrakciós görbék (26°C)



8. ábra. Kiszögű röntgendiffrakciós és röntgenszórási görbék (38°C)



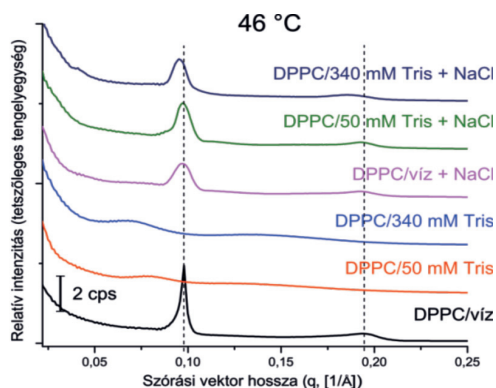
10. ábra A Tris és a kísérő ionok által a rétegszerkezetben okozott szétcsatolódás és só-hatás szemléltetése

alakú vezikulák helyett deformált alakzatok jelennek meg a TEM felvételeken. A 11. ábrán az 50 mM-os Tris-puffert tartalmazó minta felületi morfológiája látható. Hosszú, elnyúlt, de minden esetben réteges szerkezetek (kettősrétegű lipidek) láthatók, amelyek pakolódása nem szabályos, nagyszámban láthatók elvált (szétcsatolt) rétegek. Utóbbi jellegzetesség közvetlen magyarázattal szolgál a kiszögű görbék kiszélesedett diffrakciós csúcsaira.

Eddig a molekulák együttesét vizsgáltuk. A lipid kettősrétegekben az inter- és intramolekuláris kölcsönhatások megismerésére jól alkalmazható módszer a Fourier

általunk alkalmazott csillapított teljes reflexiós infravörös spektroszkópiai módszer (Attenuated Total Reflection – ATR) előnye, hogy vizes szuszpenziók is egyszerűen mérhetők.

A 12. ábra az egyes jellemző rezgési sávokat szemlélteti a DPPC/víz alap-rendszer spektrumán a víz intenzív sávjainak levonása után. A DPPC különböző funkciós csoportjaihoz tartozó rezgési sávok egymástól jól elkülönülten jelentkeznek, megkönnyítve az értékelést. Ezek közül figyelemre méltó a 2850 cm⁻¹-nél jelentkező szimmetrikus CH₂ vegyértékrezgés. A hőmérséklet változtatása mellett ez a

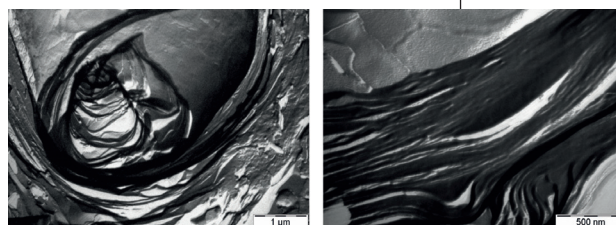


9. ábra. Kiszögű röntgendiffrakciós és röntgenszórási görbék (46°C)

toltt” állapotot bizonyítja. NaCl hozzáadása után az alap-rendszer állapota ismét helyreáll. Hasonló eseteket figyelhetünk meg 46°C-on a folyadékkristályos állapotban: a puffer jelenléte megszünteti a szabályos rétegszerkezetet, a rendszer egvedi kettősrétegek rendezetlen halmazává válik (9. ábra). NaCl bevitele leárnyékolja a Tris molekulák hatását, és az alap-rendszerhez hasonló, rendezett szerkezetre utaló görbék mérhetők. A szétcsatolt rétegek újrarendeződnek, a megjelenő diffrakciós csúcsok ezt tanúsítják.

A Tris hatására bekövetkező szétcsatolódást, valamint a NaCl jelenlétében megfigyelhető újrarendeződést szemlélteti a 10. ábra. A röntgenszórás szempontjából a gömbhéjak síkokkal közelíthetők a vezikulák nagy mérete miatt.

A DPPC/víz alap-rendszerrel a 4. ábrán bemutatott, fagyasztva töréses eljárással rögzített kép Tris puffer jelenlétében nagy mértékben módosul. A szabályos gömb

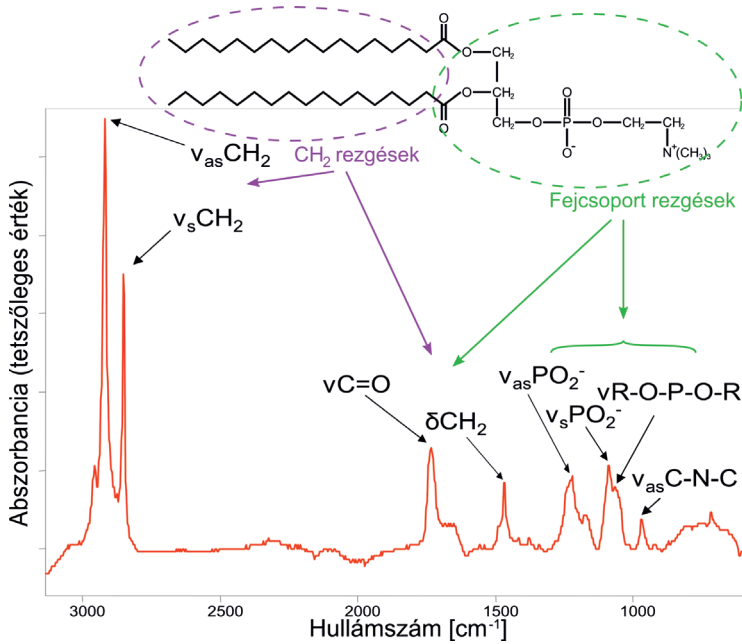


11. ábra. FF-TEM felvétel DPPC/50 mM Tris rendszerről, szobahőmérsékleten

transzformációs infravörös spektroszkópia (FTIR), amivel mind a vendégmolekulák (jelen esetben a TRIS acetát sójának ionjai) által okozott molekularendezetségi változása, mind a lokalizált kölcsönhatások (H-kötések, kialakuló új kötések) vizsgálhatók. Az infravörös spektroszkópia azt a jelenséget használja ki, hogy elektromágneses gerjesztés hatására a molekulákban az atomok egymáshoz képest elmozdulnak, miközben megváltozik a dipólusmomentumuk. A detektált infravörös spektrumban a vizsgált anyagban lévő kémiai kötések, atomcsoportok anyagi minőségétől függően, különböző hullámszámértékeknél infravörös elnyelési sávok jelennek meg. Az

sáv a vezikula fázisátalakulásáról ad információt. Gél fázisban a szénláncok nagy többsége transz konformációs állapotban van, azaz egymással párhuzamos. Amikor a lipid kettősréteg folyadékkris-

tályos állapotba megy át, a gauche-konformerek száma ugrásszerűen megnő (törések lesznek a láncokban) és kevésbé merev szerkezet alakul ki. Ezért a főátmenetet láncolvadásnak is nevezik. (Ezt az átmenetet detektálhatjuk 41°-nál a DSC módszerrel.) A gauche-konformerek számának növekedésével a CH₂ vegyértékrezgések magasabb hullámszámok felé tolnának el (13. ábra), a hőmérséklet függvényében ábrázolt hullámszámokból a fázisátalakulás hőmérséklete is meghatározható. Az aszimmetrikus rezgés intenzívebb a szimmetrikusnál, viszont átfedhet más sávokkal: a láncvégi, illetve a kolincsoport CH₃ rezgéseivel, valamint a CH₂-csoport ollózó rezgésének első felhangjával. Emiatt a szimmetrikus CH₂-rezgés alkalmasabb a konformáció-változások leírására, mivel zavaró hatásoktól



12. ábra DPPC/víz rendszer infravörös spektruma, és a DPPC jellegzetes rezgési sávjai

mentesebb.

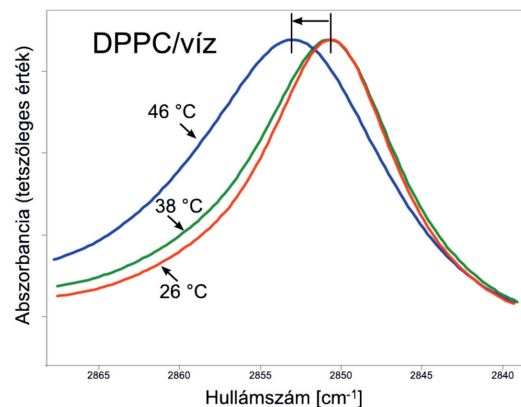
Ezen mérések eredményei láthatók a 14. ábrán. Az 50 mM-os Tris-puffer esetén alacsonyabb hőmérsékleten kezdődik ez az átmenet, és a fázisátalakulás során bekövetkező transz-gauche arány csökkenésére a hőmérsékleten felül a sóösszetétel is hatással van. Tris és NaCl együttes jelenlétében magasabb hőmérsékleteken megnő a gauche-konformerek száma, nagyobb a rendezetlenség. A Tris molekulák és a

molekula hidratációját, és így a kettősrétegek szétcsatlódásához vezet. A hatás NaCl adagolásával csökkenthető.

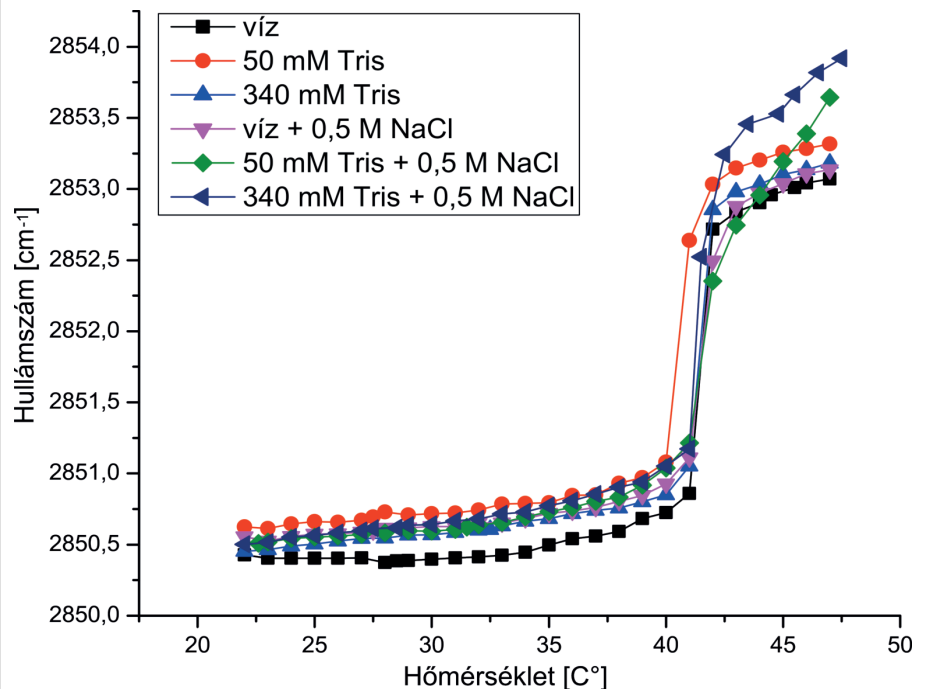
A különböző fizikai-kémiai vizsgálati

módszerek azt igazolják, hogy a DPPC-víz rendszer termikus és szerkezeti változással járó folyamatai összetettek és azokat a rendszerhez adott további molekulák, ionok befolyásolni képesek. A kapott eredmények fényében további – a membránvizsgálatoknál alkalmazott – puffer rendszerek (PBS/foszfát, HEPES, karbonát) részletes vizsgálatára van szükség a különböző finom és speciális kölcsönhatások feltárása céljából. A puffer rendszerek és általában az elektrolitok által a lipidek fejcsoportjára gyakorolt hatás ismerete a vezikulák másik fontos felhasználási területét érinti. Az unilamellás (egyszeres kettősrétegű) liposzómák ugyanis gyógyszermolekulák biokompatibilis hordozójaként nyertek fontos alkalmazást a biomedicinában. Ebben az esetben a mérési eredmények a liposzómák stabilitásának fokozásához, azaz a liposzómák egymás közötti, és a biológiai mátrixszal történő aggregációjának megakadályozását szolgáló ismeretekhez járulnak hozzá.

**Karácsony Zsuzsanna, Mihály Judith,
Bóta Attila
MTA Természettudományi
Kutatóközpont**



13. ábra. Eltolódás a lipid szénlánc régiójának CH₂ vegyértékrezgésében folyadékkristályos állapotban



14. ábra. A szimmetrikus CH₂ vegyértékrezgés hőmérsékletfüggő változása

Vegytanészet

A kémiával való szerelemben és első lépése általában az, amikor az ifjú vegyész felfedezi bizonyos molekulák szépségét a szerves kémia folyton változó, kimeríthetetlen tárházában. Tapasztalt szintetikus vegyészek, akik hosszú hónapokat, éveket, esetleg egy fél életet áldoztak egy-egy molekula előállítására ennél többet értenek kémiai szépségen. Számtalan sikertelen kísérlettel vagy éppen az utolsó fázisban elbukott gyógyszerjelölt vegyülettel a hátuk mögött, a molekulák szépsége már nem csak a bonyolult szerkezetet vagy a tetszetős térbeli formát jelenti számukra, hanem jó esélyt is az adott molekula előállíthatóságára és a kívánt célra történő felhasználhatóságára.

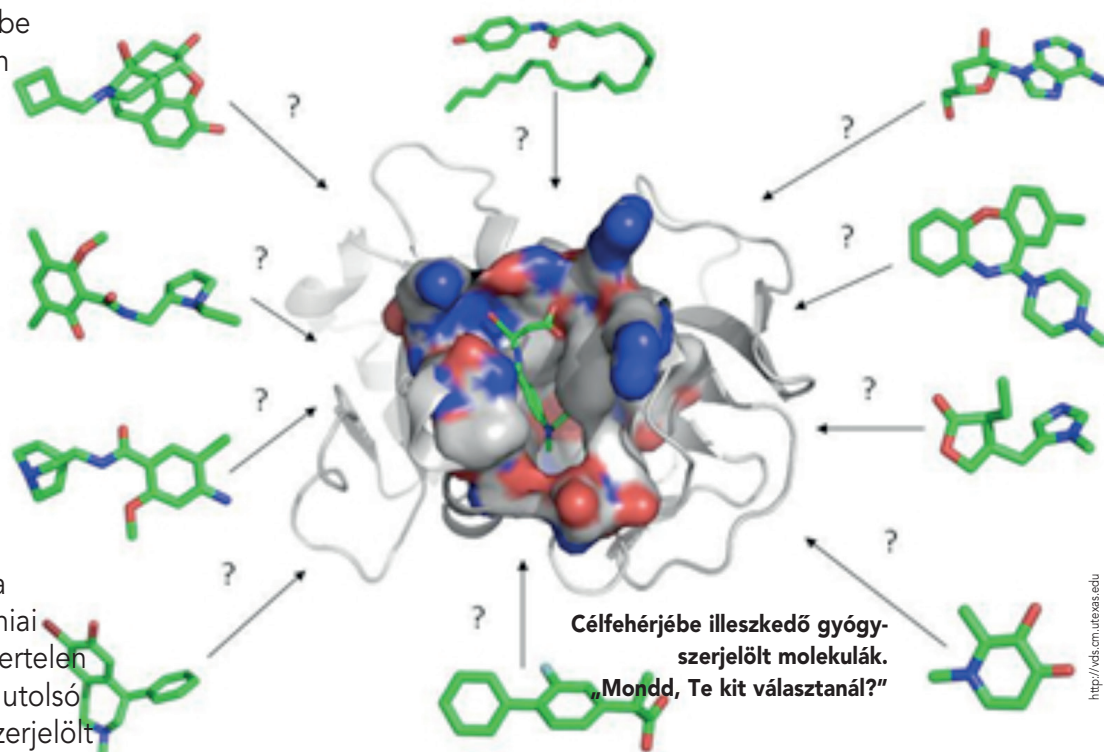
A molekulák esztétikája akár hasznos mérőszáma is lehetne annak, hogy egy papíron megtervezett vegyület milyen eséllyel válhat gyógyszerre a jövőben. Ez egy olyan információ, ami nem csak elméleti, de gyakorlati téren is hatalmas jelentőséggel bír. A gyógyszerfejlesztés ugyanis nagyon drága. Egy átlagos gyógyszermolekula a felfedezéstől a piacra vitelig mintegy 2 mil-

liárd dollárba kerül. Ez hozzávetőleg annyi, mint amennyit az állam az összes magyarországi kórház fenntartására fordít egy év alatt. Ennek oka az, hogy egy sikeres gyógyszermolekula mögött sok ezer olyan van, amelyek a fejlesztési és tesztelési folyamat valamelyik fázisában kihullik a rostán. A kiindulási vegyületek 98 %-a már a kezdeti teszteken elbukik, mert nem tudnak megfelelő kölcsönhatásba lépni a megcélzott fehérjével, vagy toxikusnak bizonyulnak. A továbbjutó vegyületek újabb 96 %-a vérzik el az állatkísérletes vizsgálatokon. **Végül a rendkívül drága klinikai fázisba jutó molekulák újabb 80-90 %-ról derül ki a humán kísérletekben, hogy túlzott mértékű mellékhatást produkálnak vagy éppen nem eléggé hatásosak.** Végeredményben a kiindulási vegyületek kb. 0,01 %-a válik valódi gyógyszerre. Nyilvánvaló tehát, hogy minden olyan mód-

szert ami ezt az arányt növelni tudná, olcsóbbá tenné a fejlesztést és több új gyógyszer megjelenését segítené elő (lásd: „Molekulák fogyókúrán” című írásunkat a Kémiai Panoráma 6. számában).

Szépség és intelligencia

A rosszabb eséllyel gyógyszerre váló molekulákat érdemes lenne tehát kiszűrni a vegyészek fejében meglévő absztrakt esztétikai ítélet alapján. A szépséget azonban nehéz mérni. Egy skót kutatócsoport mégis erre tett kísérletet. Azzal természetesen ők is tisztában voltak, hogy különböző emberek szubjektív ítéletét lehetetlen lenne matematikailag leírni, ezért az ellenkező irányból közelítették meg a kérdést. Azt vizsgálták, hogy a már bevált gyógyszermolekulákat milyen ismeretek alapján sorolják a kutatók az esélyes vegyületek közé. A módszer hasonlít ahhoz,





és esztétika

ahogy az intelligencia legelterjedtebb mérőszámát, az IQ-t meghatározták. Nem véletlenül. Az intelligencia ugyanis ugyanúgy szubjektív tulajdonság, mint a szépség. Általában nem tudjuk megmondani, mi alapján minősítünk valakit intelligensnek vagy szépnek, illetve ha meg is tudjuk mondani, biztos, hogy egy másik ember más szempontok alapján rangsorol. Az IQ teszt fejlesztésénél kihasználták azt a nem éppen nyilvánvaló tényt, hogy – különböző okokra hivatkozva ugyan – az emberek mégis egy-egy csoportból általában ugyanazokat jelölték meg intelligensnek vagy kevésbé intelligensnek. Ennek ismeretében már csak ki kellett dolgozni azokat a tesztek, amikben az intelligensként megjelölt emberek szignifikánsan jobban teljesítenek és kinevezni az így kapott, meglehetősen elvonatkoztatott tesztrendszer IQ-tesztnek. Annak ellenére, hogy a tesztek feladatainak látszólag nem sok közük van az intelligenciához, mégis jól tudják mérni azt, mert bebizonyosodott, hogy az intelligensnek tartott emberek sikerebben oldják meg őket.

Ennek analógiájaként a skót kutatók is azokat a tulajdonságokat igyekeztek összegyűjteni, amik közösek a sikeres gyógyszervegyületekben. Nekik ráadásul két nagy előnyük is volt az IQ-tesztek kidolgozóival szemben. Egyrészt, a vizsgált molekuláris jellemzők sokkal egyértelműbb kapcsolatban állnak a gyógyszer alkalmazhatóságával, mint az IQ-tesztek feladatai az intelligenciával. Másrészt, **nem előzmények nélkül kellett ezeket a tulajdonságokat kiválogatni.** A gyógyszergyárak és a szerves kémikusok ugyanis régóta alkalmaznak már különböző rendszereket annak jellemzésére, hogy egy adott molekula mennyire esélyes gyógyszerként való hasznosításra. A legáltalánosabban használt rendszert Lipinski alkotta meg a kilencvenes évek végén. Ő abból indult ki, hogy a szájon át bevett gyógyszerek csak abban az esetben lehetnek hatásosak, ha a szervezet

könnyen fel tudja venni azokat, **vagyis átjutnak különböző határfelületeken (membránokon).** A Lipinski-féle „Rule of Five” szerint ezt akkor tudják megtenni, ha (1) **molekulatömegük** kisebb, mint 500; (2) az oktanol/víz megoszlási hányadosuk (logP) nem nagyobb 5-nél, **azaz jól oldódnak szerves oldószerekben;** (3) nem több mint 5 hidrogén kötésben

Minden olyan módszer, ami olcsóbbá tenné a fejlesztést, több új gyógyszer megjelenését segítené elő

donorként viselkedő OH- és NH-csoportot tartalmaznak és (4) kevesebb mint 10 hidrogén kötésben akceptorként viselkedő **N és O atomot** tartalmaznak. A szabály neve onnan származik, hogy mind a négy megkötésben a korlátot jelentő számok értéke 5, vagy annak többszöröse. Egyszerűsége és hatékonysága miatt a Lipinski-féle szabályrendszer ma is általánosan alkalmazzák gyógyszerjelölt molekulák szűrésére.

Mérhető szépség

A Lipinski-féle szabályoknak – sikerességük ellenére – megvannak a korlátai is. Az egyik épp a rendszer egyszerűségéből fakad. Mivel csak igen-nem alapon válogat a vegyületek között, nem képes megmondani, hogy egy adott molekula mennyire gyógyszer-szerű. A rostán éppen csak fenn maradt vegyületek ugyanolyan elbírálás alá esnek, mint a tökéleteshez közel állók. Hasonlóan, ha egy vegyület kicsúszik valamelyik tulajdonságra előírt értékből, az akkor is kiszűrődik, ha a többi tulajdonság tekintetében optimálisnak lenne mondható. Jobban használható lenne egy olyan rendszer, ami ezeket a tulajdonsá-

gokat egy skála mentén pontozza és az egyes tulajdonságokra kapott pontok birtokában döntene arról, érdemes-e az adott vegyületet gyógyszerjelöltként kezelni. Az itt leírt rendszer épp ezt tette meg. Első lépésben tovább bővítette a figyelt tulajdonságok körét. A Lipinski-féle rendszerben szereplő négy tulajdonság mellé felvett **további négyet: a forgatható kötések számát, az aromás gyűrűk számát, a poláris felület méretét, valamint a jól ismert, problémát jelentő szerkezeti egységek (pl. anilin) számát.** Szerencsére mindezen tulajdonságok számíthatók a molekula szerkezetének ismeretében, így akár több száz-ezer molekulát tartalmazó virtuális vegyületkönyvtárakra is meghatározhatók az értékek. A nyolc tulajdonságot jelző szám birtokában a skót kutatók által alkalmazott, úgynevezett kívánatossági függvények révén minden vegyülethez hozzárendelhető egy szám, ami megadja annak esélyét, hogy az adott molekula sikeres gyógyszerjelölt legyen. Fontos hangsúlyozni, hogy a Lipinski-féle szabályokkal szemben a vegyületek ebben a rendszerben egy folytonos skálán helyezkednek el és így egymással közvetlenül összehasonlíthatóak, könnyebbé téve a különböző származékok közötti szelektálást már a molekulatervezés kezdeti fázisában.

Ahhoz, hogy az eredményeket a kémikusok szubjektív ítéletével összevessék, az AstraZeneca nemzetközi gyógyszerkutató cég egy korábbi vizsgálatát használták fel. Ebben a vizsgálatban 79, a gyógyszerfejlesztésben nagy tapasztalatot szerzett szerves kémikust kértek fel, hogy több mint 17000 különböző vegyületet értékeljenek pusztán a szerkeztükre pillantva aszerint, hogy esélyes gyógyszerjelöltnek tartják-e őket. Az ebben a vizsgálatban kapott pontértékek nagyfokú hasonlóságot mutattak a nyolc molekula paraméter alapján számolt hányadossal, ami igazolja a kémikusok fejében kialakult **szubjektív molekula-szépség mérhetőségét.** **Héja László**

MTA Természettudományi Kutatóközpont

A természet illatanyagai

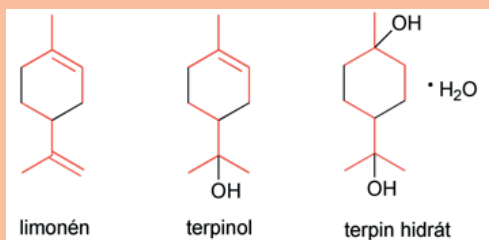
Eau de parfum: az illat készítmény 15-30%-a az illóolaj, a többi része vizes etanol.

Eau de toilette: jóval kevesebb esszenciát tartalmaz (4-8%).

Eau de cologne: kevesebb, mint 5% illatanyagot tartalmaz. Ezt hívják magyarul kölni víznek.

Az ókori mediterránum területét borító gazdag fenyvesek nemcsak faanyag kimeríthetetlen forrását, hanem a fák kérgének és gyantájának felhasználását is kínálták. Idővel a gyantákból desztillációval két illatanyagokban gazdag főtermék készült: az illékony terpentin és a maradék gyanta, amit ma hegedűgyantaként ismerünk. Az illatos anyag-keverékek összetétele nagyban függött a fenyő fajtájától és attól, hogy hol éltek a forrásul használt egyedek.

A terpeninolaj egy átható illatú és keserű ízű folyadék, amelyet számos szerves vegyület alkot. Az alkotók jelentős részét az illékony terpének teszik ki. A terpének a természetben előforduló jelentős vegyületcsalád, amely mind az állat- mind a növényvilágban képviselteti magát. A terpének családját a legkülönbözőbb szerkezetű és hatású molekulák alkotják, azonban e vegyületek közös építőeleme az izoprén váz, egy öt szénatomot tartalmazó szénhidrogén. Az ún. monoterpének két izoprén egységből épülnek fel, így tíz szénatom alkotja őket. Ezeket a vegyületeket az emberiség régóta alkalmazza, mint festék összetevőt, fertőtlenítőszer, gyógyszer és illatszert.



2 izoprén egységből álló monoterpének

Az illatszerek több ezer év óta luxuscikknek, a fényűzés kellékeinek számítanak. A parfüm készítés művészete az ókori Mezopotámiából és Egyiptomból származik. Ezekről a területekről került később a görögökhöz, majd közvetítésükkel a rómaiakhoz eme tudás. A középkorban az arab világban élt tovább és fejlődött az illatanyagok keverésének művészete. Ezt a fejlődést segítették az alkímiában alkalmazott műveletek, mint amilyen a desztilláció technikája is. Európában e tudományok először a reneszánsz Itáliát hódították meg újra. Az illatszerek előállításához természetes aromákat vontak ki növényekből és állati szervekből, majd ezen kivonatok elegyítésével alkottak új illatokat. A parfüm készítés ezen útja egészen a XX. századig megmaradt. A mesterséges illat molekulák előállításához először a

A drága parfümök áthatották az egész ókori kereskedelmet és a felsőbb társadalmi rétegek életét

szerves szintetikus kémiának kellett fejlődnie. E tudományterület kialakulása és fejlődése a XIX. század második felére tehető. Ezzel együtt a fejlődő német vegyipar lett az illatszert gyártás meghatározó központja, míg az illatkeverés hazája Franciaország volt. Napjainkban a parfümök készítésének fellegrárai Franciaország, Svájc, Németország, a tengerentúl az Egyesült Államok, míg a távolkeleten Japán.

Az emberiség illatszerek iránti rajongását látványosan mutatják az ókori tároló edények, amelyekben tulajdonosaik e luxuscikkeket őrizték. Ezek a drága parfümök áthatották az egész ókori kereskedelmet és a felsőbb társadalmi rétegek életét. Az egyik ilyen drága és közkedvelt

aromát a libanoni cédrusból vonták ki és árulták a mezopotámiaiak. Az ebből készült illatszert Kleopátra és Marcus Antonius is használta, és ez az aroma mind a mai napig az illatszerek egyik alkotó anyaga.

Hogyan készültek a parfümök? Az etanol desztillációs tisztítása előtt szagtalan zsírok és növényi olajok segítségével virágszirmokból készítették el a kivonatokat és ebben a formában alkalmazták kozmetikumként, illetve gyógy-balzsamként. A modern illatszerek készítésekor az illóolajokat és a mesterséges illatanyagokat etanollal és vízzel hígítják. A parfümök készítése a zene-szerzéshez hasonló művészet, amelynek célja a változatos szerkezetű, származású és illatú vegyületek olyan arányú „hazásítása”, ami egy teljesen új illathatást ad.

A modern parfümkészítés a XIX. századi kémia fejlődésével vette kezdetét. Ennek eredményeként számos új oldószer lehetett tisztán előállítani, amelyek segítségével újabb és újabb illóanyagok szelektív kioldása, kivonása vált lehetővé. Ezenkívül a XIX. század második felében a vegyészek figyelmé nemcsak a természetes anyagok vizsgálatára és hatóanyaguk meghatározására, hanem a természetes molekulák mesterséges előállítására is irányult. E kutatások keretében állította elő egy brit vegyész, az idősebb William Henry Perkin 1868-ban a kumarint, amelynek széna és szagos müge illata van. Ezt követte még számos természetes illatanyag szintézise, mint például a vanilliné, amely a vanília illatát adja. Az aro-más szénvegyületek szintézise után, már a jóval nagyobb kihívást tartogató terpénszármazékok szintézisét is megvalósították. Elsők között az illékony kámforét, illetve a terpinolét. A XX. század elején született meg két olyan parfüm, amely a nagy mennyiségben gyártott és forgalmazott igényes illatszert első képviselői voltak. 1921-ben jelent meg a Chanel N° 5, amelynek komponense a narancsra emlékeztető illatú mesterséges lauril-aldehid (egy 12 szénatomból álló aldehid). Tíz évvel később, 1931-ben a Joy nevű parfüm a jázmin virág kivonatából készült.



<http://www.pianach.hu>

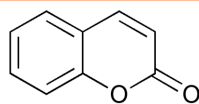
Libanoni cédrus

Napjainkban az illatszerek mindennapi életünk szoros részét képezi, gondoljunk csak a különböző parfümökre, dezodorokra vagy akár az illatosított mosóporokra. Az illatanyagok megalkotása nagyrészt mesterséges úton történik a szintetikus szerves vegyészek nagyfokú tudását ötvözve az illatok megalkotásának művészi komponálásával.

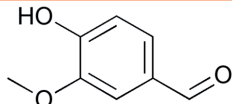
Az illatmolekulák tervezésének inspirálói általában a természetben fellelhető illatok aroma anyagai. Ezek közül az egyik leggyakoribbak a monoterpének, amelyek számtalan virág, gyümölcs és fenyő illatát adják. A monoterpének egyik legjelentősebb képviselője a terpinol, melyet először az ifjabb William Henry Perkin (1860–1929) állított elő mesterségesen. Az ifjabb Perkin egy vérbeli szintetikus kémikus volt, mondhatjuk, már az anyatejjel szívta



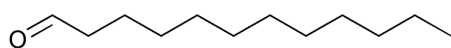
<http://pin.perfume.net>



kumarin



vanillin



lauril-aldehid

magába ezt a tudományt. A terpinolt egyszerű kiindulási anyagokból hozta létre, olyan modern eszközöket alkalmazva, mint amelyet a vele egy időben dolgozó Victor Grignard használt magnézium-szén kötést tartalmazó reagensehez. Ezenkívül leírta, hogy a terpinolból vízelvonással egy másik illóanyag, a citrusfélék jellegzetes illatát adó limonén állítható elő. Terpinolból víz addíciójával pedig a kristályos terpin hidrához jutott. Ez a vegyület akkoriban azért bírt nagy jelentőséggel, mert az olajokkal ellentétben határozott olvadáspontja volt, amely egyértelmű azonosítást tett lehetővé. A terpinol szintézisében a végső bizonyíték a természetből kivont aromával való „illat egyezőség volt”. Az orgonából származó természetes terpinol és a Perkin által előállított terpinol illata megegyezett. Ezzel a szintézissel Perkin megnyitotta az utat a természet-azonos aromák gyártása előtt.

A terpének családja természetesen nemcsak ezen illóanyagokat foglalja magába. Olyan vegyületek is ide tartoznak, mint a karotinoidok, pl. a sárgarépa és a paradicsom színanyaga a beta-karotin és a likopin (lásd: „Mitől piros a paprika?” című írásunkat a Kémiai Panoráma 1. számában, a http://www.kemiaipanorama.hu/1_evfolyam/panorama1.html oldalon). A természetes gumi alapját adó kaucsuk is izoprén egységekből felépülő politerpén.

A szteroidok is a terpének bioszintézise során keletkeznek. Érdekes, hogy a napjainkban alkalmazott egyik leghatékonyabb rákellenes szer a bonyolult szerkezetű Taxol is terpin származék, és jelentős mennyiségben fordul elő a tiszafában (lásd: „Ternyő és taxol” című írásunkat a Kémiai Panoráma 6. számában). Láthattuk, hogy az illatanyagok nemcsak a történelem során voltak fontos luxuscikkek, hanem a modern szintetikus kémia kialakulása során egy olyan fontos

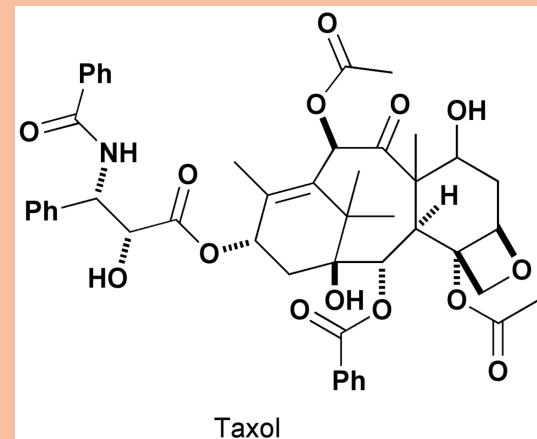
Gumifa és kaucsuk



<http://www.belaeserogantipatitress.com>

vegyületcsalád megismeréséhez segítették hozzá a kutatókat, mint a terpének.

Varga Szilárd
MTA Természettudományi
Kutatóközpont



* Felhasznált irodalom:

K. C. Nicolaou, T. Montagnon: *Molecules that Changed the World*, Wiley-VCH, 2008, Weinheim
<http://wikipedia.org>

Földönkívüli fénycsóvák



A lángjelenség korán felkeltette a természettudósok érdeklődését. Faraday az angol Királyi Kémiai Társaságban tartott 1860. évi karácsonyi előadását így kezdte: „A gyertya természetrajzát már régebben ismertettem, és ha tőlem függne, az előadásaimat évről évre ezzel a témával fejezném be: ugyanis annyira érdekes tárgy ez és megannyi módot nyújt a természet tanulmányozásához vezető út megismerésére.”

Az amerikai Nemzeti Légügyi és Ūrhajózási Hivatal (NASA) kutatási témái közül az Ūrhajósok egyik kedvence a lángok vizsgálata volt.

Az MSL-1 jelű 1997. évi Ūrexpedíció során az Ūrhajósok a tervezettnél kétszer több kísérletet végeztek lángokkal, és ez a „tűz az Ūrben” elnevezésű kutatási

Lángégés főbb technikai jellemzői

Stacionér láng: állandósult állapotú, pl. Bunsen-égő lángja

Robbanás: időben nem állandósult láng

Homogén láng: a fűtőanyag gáznemű

Heterogén láng: a fűtőanyag folyékony vagy szilárd halmazállapotú

Előkevert láng: fűtőanyag és oxigén/levegő elegye jut a lángtérbe, pl. Bunsen-égő

Diffúziós láng: az oxigén/levegő a környezetből jut a lángtérbe, pl. gyertyaláng

Égési sebesség: az a sebesség, amellyel egy lángfront a felületére merőlegesen a környezetében lévő még nem elégett gázban terjed. Pl. 20°C-on légköri nyomáson:

metán-levegő elegy ~ 37 cm/s, metán-oxigén elegy ~ 330 cm/s,

hidrogén-levegő elegy ~ 270 cm/s, hidrogén-oxigén elegy ~ 890 cm/s

Alsó-felső éghetőségi határ: az a legkisebb illetve legnagyobb fűtőanyag koncentráció, ami önfenntartó lángégést biztosít. Pl. 20°C-on légköri nyomáson:

metán levegőben 5-15 tf%, metán oxigénben 5-60 tf%,

hidrogén levegőben 4.1-75 tf%, hidrogén oxigénben 4.5-95 tf%

Öngyulladás hőmérséklet: az a hőmérséklet, amelynél az égési reakció már önmagától megindul. Pl. értéke metánra levegőben 580°C, hidrogénre levegőben 500°C

Gyújtás: helyi energiaközlés, pl. elektromos szikrával, lánggal

Gyújtási energia: az a minimális energiaérték, amely adott feltételek mellett még gyújtást hoz létre

tevékenység kapta a legnagyobb média nyilvánosságot is.

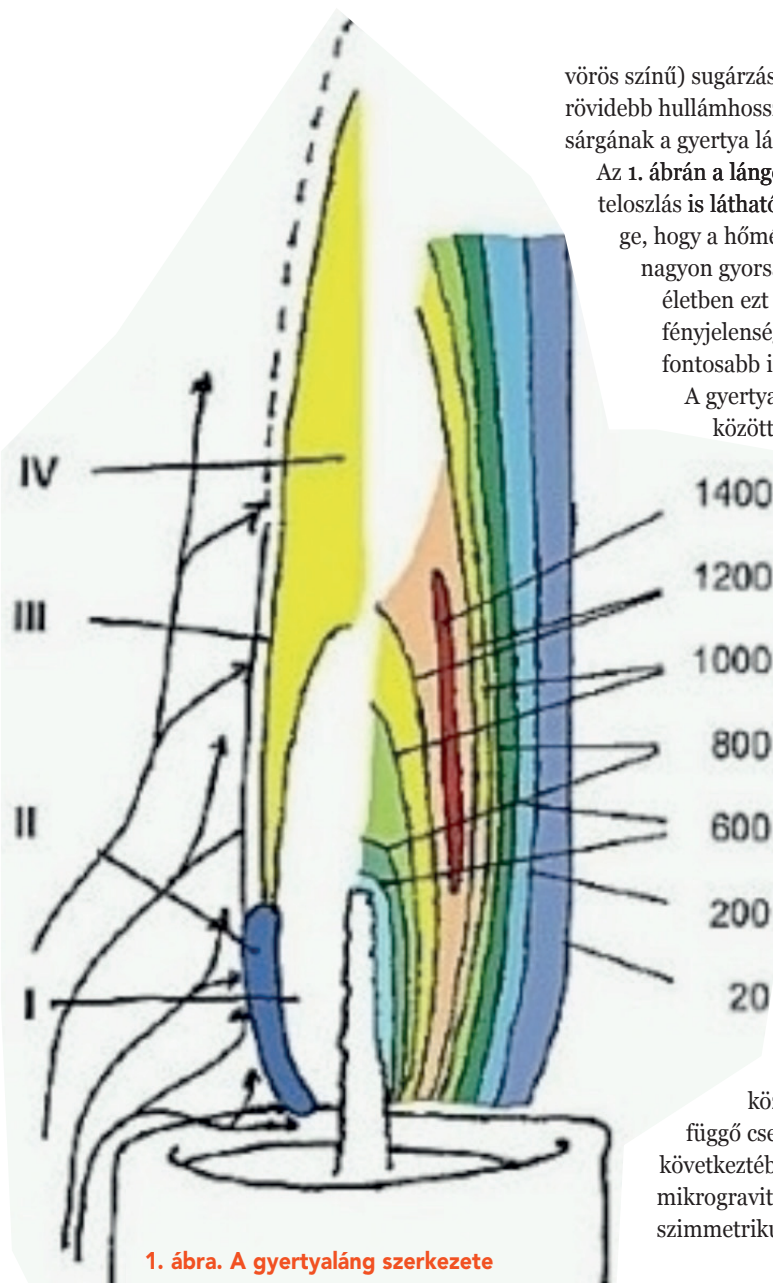
A láng a Földön mindannyiunk számára ismerős jelenség. Alakját, hőmérsékletét, égési sebességét, a koromképződést, és hogy ég-e vagy kialszik, több tényező határozza meg: a nehézségi erő, a folyamatban résztvevő gázok áramlása, a fűtőanyag és oxidáló komponens típusa és ezek aránya. A lángégés példaszzerű bemutatására mi is a gyertyát választottuk, mert látszólagos egyszerűsége ellenére jól szemlélteti a folyamat bonyolultságát.

A gyertyaláng állandósult állapotú (stacionér) diffúziós égés (lásd: a lángégés főbb technikai jellemzőit keretben). Az égési hő egy része megolvasztja a viaszt, amely kapilláris erők révén jut el a kanóchoz, ennek felületéről párolog a lángba. A hideg levegő viszont hűti a gyertya külső részét, úgyhogy annak felső pereme nem olvad meg. Az olvadó és égő

Mikrogravitációs térben a gyertya lángja kékes színű és félgömb alakú

viasz között egyensúlyi állapot alakul ki, és a láng a meleg levegő felhajtó hatására veszi fel egy felfelé megnyúló csepphez hasonló alakját.

A gyertyalángban négy jellegzetes zónát különböztethetünk meg. A sötét I. zónában a paraffin elgőzölgése és hőbomlása megy végbe, ezek endoterm (hőigénylő) folyama-



1. ábra. A gyertyaláng szerkezete

vörös színű) sugárzás intenzívebb, mint a rövidebb hullámhosszú (kék), ezért látjuk sárgának a gyertya lángját.

Az 1. ábrán a lángon belüli hőmérsékleteloszlás is látható. Ennek jellegzetessége, hogy a hőmérséklet a lángon belül nagyon gyorsan nő, a hétköznapi életben ezt és a hozzákapcsolódó fényjelenséget szokás a láng legfontosabb ismérvének tartani.

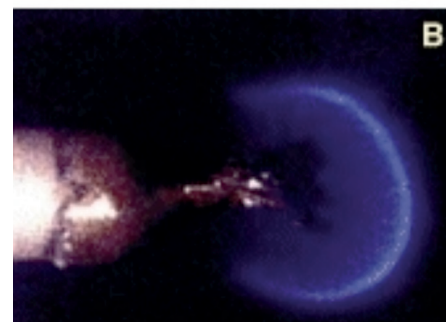
A gyertya földi körülmények között jól ismert lángja

azonban az űrhajókon végzett kísérletekben ettől egészen eltérő képet mutat. A mikrogravitációs térben, ahol a gázkonvekció is csekély, a gyertyaláng kékes színű és félgömb alakú, amint ezt a 2. ábrán egy vízszintes állású gyertya fényképe szemlélteti.

A csepp-égés is más földi körülmények és az űrhajóban tapasztalt

között. Amíg a szálon függő csepp alakja a gravitáció következtében megnyúlik, mikrogravitációs térben közel szimmetrikus gömb lesz (3. ábra).

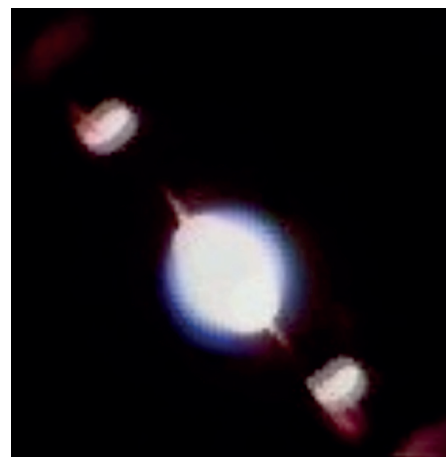
A mikrogravitációs térben megvalósított cseppégés további újdonságokkal is szolgált. Olyan kísérleti körülményeket sikerült megvalósítani, amelyek lehetővé tették annak kimutatását, hogy a metilalkohol és az etilalkohol cseppek égése lényegesen különbözhet. Míg az etilalkohol csepp teljesen elégett, a metilalkohol csepp kialudt, mielőtt még a metilalkohol elfogyott volna. Ez azzal magyarázható, hogy etilalkohol esetén az égéshő elegendő arra, hogy az alkoholorok égéstermékékként létrejövő vízgőz a csepp felületéről teljesen elforrjon. Metilalkohol



2. ábra. Vízszintes állású gyertyaláng földi gravitációs (A) és mikrogravitációs térben (B)

azonban az égéstermékéből több vízgőzt abszorbeál mint az etilalkohol, ennek elforralása már annyi hőt von el, hogy a láng idő előtt kialszik. Ez a felismerés segítheti hatékonyabb alkohollal hajtott belső égésű motorok kifejlesztését.

Az égést befolyásoló egyik tényező az ú.n. Lewis-szám, a hő- és anyagdiffúzió aránya



3. ábra. Szálon függő cseppfolyós tüzelőanyag lángja mikrogravitációs térben

tok. A kékes-zölden világító II. és az alig világító III. zónában játszódnak le az exoterm (hőtermelő) oxidációs reakciók. Megjegyezzük, hogy a III. zónát csak azért látjuk szinte telennek, mert a mellette lévő IV. zóna erősen világító sárga fénye az eredeti kékes-zöld színt jórészt kioltja. A láng jellegzetes ragyogó fényét, a IV. zóna, az agglomerizálódás és dehidrogéneződés révén több millió szénatomot tartalmazó koromszemcsék izzása adja. A kibocsátott fényben a hosszabb hullámhosszú (sárga és



4. ábra. Mikrogravitációs térben elektromos szikrával meggyújtott hidrogén-oxigén elegy lángjának széttöredezése lángpontokká

adott fűtőanyag összetétel esetén: kis Lewis-szám azt jelenti, hogy a hő lassabban diffundál, mint a molekulák. Égéseméleti megfontolások alapján már 1940-ben feltételezték, hogy meghatározott kísérleti körülmények



5. ábra. Koromképződés zónája etilén-propilén diffúziós lángjában földi gravitációs (A) és mikrogravitációs (B) térben.

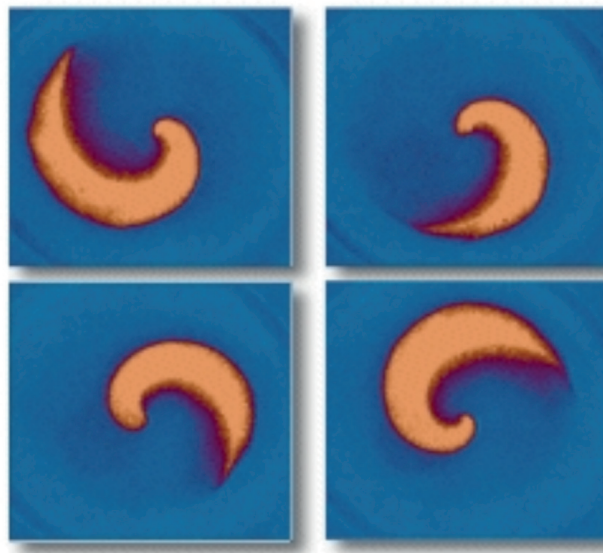
esetén zárt térben helyileg meggyújtott éghető gázelegy lángja nem tölti ki robbanásszerűen az egész égésteret, hanem apró lángokká töredezik szét. Ez a sejtés most kísérleti igazolást nyert. Gömb alakú kamrában hidrogén és oxigén gáz elegyét elektromos szikrával gyújtottak meg kis Lewis-számok feltétele esetén. A kísérletben a fényképezőgép valóban gombostűfej nagyságú fénylő pontokként rögzítette a láng szétesését (4. ábra).

A mikrogravitációs tér új lehetőségeket nyitott a koromképződés vizsgálatára is. Ha a lángot világításra használjuk (pl. petróleumlámpa), akkor a korom jelenléte nélkülözhetetlen, mert az izzó koromrészecskék világítanak. Ha a fűtőanyagot energiatermelésre használjuk (pl. dízel motor, sugárhajtású repülőgép motor), akkor a koromképződés káros, mert energiát von el, és környezetszennyező is. A 5. ábra a koromképződési zóna alakját szemlélteti földi gravitációs (A) és mikrogravitációs (B) térben (megjegyezzük, hogy a bal és jobboldal nem azonos méretarányú kép).

A mikrogravitációs térben megfigyelt jellegzetes alakváltozás következménye, hogy míg földi gravitációs térben egy korom szemcse élettartama a másodperc ezredrésze, utóbbiban akár 1 másodpercre is nőhet.

A spirálok a természettudósok kedvenc mintázatai. Gondoljunk csak a DNS kettős spiráljára, vagy a hurrikánok örvénylésére! Mikrogravitációs térben forgó kör alakú műanyag lemez égése is érdekes lángspirál alakzatot mutatott (6. ábra).

A lemezt a középpontjában gyújtólánggal meggyújtották, az égéshez szükséges oxigént a környezet levegője szolgáltatta. Égés közben a lemezt az óramutató forgásával megegyező irányban másodpercenként 2-20 közötti fordulatszámmal forgatták. A kísérletben az óramutató járásával ellentétesen forgó lapos spirálok jöttek létre. Ráadásul, ahogy az égés előrehaladtával a spirálok csúcsa csökkent, a spirálok ide-oda tekeregtek. A kutatók ezt ahhoz a jelenséghez hasonlítják, amikor egy vízzel töltött medence közepébe követ dobunk. Mint a



6. ábra. Lángspirálok forgó kör alakú műanyag lemez égésekor mikrogravitációs térben

hullámok, a láng is a gyújtást követően körökben a korong széle felé terjed. De mikrogravitációs térben adott forgási sebesség esetén és közvetlenül a láng kialakítása előtt megtörik a szimmetriája, belsejében spirálok alakulnak ki, és a láng nem körhullámokban, hanem spirálokban éri el a korong szélét. A kutatók azt várják, hogy a lángjelenség e sajátos formája is leírható lesz majd a fizika alapelveivel, ami elősegítheti a mikrogravitációs térben végmenő lángégés jobb megértését.

Németh András és Baranyai Péter
MTA Természettudományi
Kutatóközpont



Olvasnivalók:

- Flame On - and on, and on, Combustion Science on MSL-1 NASA Science News, July 17, 1997
- Klaus Roth: Chemistry of the Christmas Candle – Part 3, Chemie in unserer Zeit, 24 Dezember 2011
- Michael Faraday: A gyertya természetrajza, Athenaeum, Budapest, 1921; ford. Bálint András
- Turányi Tamás: Miről beszél a gyertya lángja? Az égés kémiája 150 évvel Faraday után. Középszintű Kémiai Lapok, 2008/1, 9-22 oldal
- Németh András: Égésen alapuló vegyipari eljárások. Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1962



2011 a kémia nagy kampányéve volt. Ebbe a kampányba bekapcsolódott a Kecskeméti Református

Gimnázium biológia-kémia munkaközössége is.

Általános iskolás alsó tagozatosoknak, felső tagozatosoknak, majd gimnazistáinknak tartottunk rendhagyó kémiaórákat látványos kísérletekkel. Igyekeztünk minden látott kísérletet a diákok korának megfelelően megmagyarázni: a „Rácsodálkozások”-tól az atomszerkezetig.

Az egyik emléklapunk így nézett ki:



És akkor...

...megszületett a KÉMIA

Reméljük, a kampányévvvel megszületett a kémia szeretete is. Ám, minden kampány végül annyit ér, amennyi a hétköznapokra marad belőle. Ezért összeültünk 2011 szeptemberében a Magyar Kémikusok Egyesülete Bács-Kiskun Megyei területi csoportjával és megpróbáltuk kitalálni, milyen formában lehetne fenntarthatóvá tenni, továbbvinni a Kémia Nemzetközi Évének kezdeményezését. Ennek eredménye lett a 2011. december 20-án elkezdett programsorozatunk.

Atomünnep

Mivel újat kezdtünk, így a forma, a minőség és a mélység alakulófélben van. Terveink szerint kéthetente tartunk egy-egy előadást a Kecskeméti Református Gimnázium kémia előadójában, melyeken tematikus rendben mutatjuk be az általános iskolai és gimnáziumi kémia tananyaghoz kapcsolódó kísérleteket. Az első témához, *Halmazállapotok, halmazállapot-változások* kb. 50 kísérletet készítettünk elő, s ezek közül 33-at sikerült

RefiKém

is bemutatunk a téli szünet előtti 105 perces előadáson. A show és az ismeretterjesztés határán mozogva fenntartható az érdeklődés ilyen hosszú ideig a kísérletekkel. Ezt a nagyon „pörgős” tempót úgy tudtuk/tudjuk tartani, hogy két tanár felváltva végzi a kísérleteket és magyarázza azokat, míg a harmadik társuk közben mindent a kezük alá készíti. A kísérletek összeállításánál az sem zavar nagyon bennünket, ha a kémiának a biológiával vagy fizikával határos területére érkezzünk.

Azért, hogy a résztvevő diákok tényleg csak a kísérletekre és a magyarázatokra tudjanak figyelni, s ne kelljen jegyzetelniük, az előadások után a kísérletek rövid leírását, tapasztalatait és magyarázatait iskolánk honlapján közzéteesszük. (Ezzel a legnehezebb utolérni magunkat, pedig a program hasznossága szempontjából az egyik legfontosabb elem.)

Mindenki jöhet, akit atomok építenek fel

Tudva azt, hogy nem minden iskolának olyanok az adottságai, mint a miénknek (vegyesekkel teli szekrények, folyamatosan bővülő laboreszköz-állomány, pozitív fenntartói hozzáállás), ezért minden ilyen előadást nyilvánossá tettünk. Plakátjainkat, meghívóinkat eljuttattuk Kecskemét szinte minden általános és középiskolájába, a helyi sajtó nagy segítségünkre volt a rendezvény beharangozásában és a legnagyobb közösségi oldalon keresztül fiatalos, játékos üzenetekkel próbálunk állandóan jelen lenni a virtuális térben.

A zenekar hangol: lámpalázas izgalomban rezegnek az atomok.

(NO, EZ A HŐMOZGÁS.)

„s míg kis szíve nagyon szorongva dobban,

tán ő se tudja, mit is kíván jobban,

a mesét-e, vagy azt, hogy ott legyél”

– Jössz? - kérdi a hidrogén.

Célunk az, hogy ha egy diák eljár a RefiKém előadásaira, akkor olyan rendszerezett kísérletgyűjteményre tegyen szert, amely hozzásegíti egy sikeres érettségéhez.



Bemutató

Sok jó atom kis helyen is elfér

A Kecskeméti Református Gimnázium kémia előadójában 36 diákok tudunk leültetni egy kémiaórán. December 20-án hetvenen zsúfolódtak össze a teremben, s akik nem fértek be (kb. 30 fő), a fizika előadó digitális tábláján nézték az „élő közvetítést”. Sajnos volt egy általános iskola, ahonnan 30 kémia iránt érdeklődő 7. és 8. osztályos diákok nem tudunk fogadni. Őket egy későbbi előadással kárpótoljuk.

Forrásteremtés, ami a legnehezebb

Programunkat jelen pillanatban csak az iskola és egy támogatási program keretében Kecskemét városa finanszírozza. Bízunk abban, hogy 4-5 sikeres előadás után külső támogatókat (gyógyszertárakat, vegyipari cégeket, magánszemélyeket) is sikerül bevonnunk támogatóink körébe. Ez a legnagyobb kockázata előadássorozatunk fenntarthatóságának.

A RefiKém molekula

A kísérletek előkészítésében, az előadások lebonyolításában és a segédanyagok összeállításában iskolánk minden kémia szakos tanára (Juhász Katalin, Vargáné Lengyel Adrien, Kecskés Ágnes, Tóth Imre, Sándor Zoltán, Labancz István) részt vesz. Nagyon jó hozadéka a programnak, hogy általa sokkal intenzívebb lett a szakmai együttműködés a munkaközösségen belül, sok trükköt, fogást, jó gyakorlatot lesünk el egymástól. Nagyon megtisztelő, hogy a városból több kolléga is elfogadta meghívásunkat és részt vett eddigi előadásainkon. Velük is nagyszerű beszélgetések alakultak, szakmai együttműködések alakul(hat)nak ki e program kapcsán.

Labancz István

NYERTES kémiai diákkörösök

Idén tavasszal került sor a jubileumi, XXX. Országos Tudományos Diákköri Konferenciára. A Kémiai és Vegyipari Szekciónak április 27-e és 29-e között a Pécsi Tudományegyetem adott otthont. Három tagozat első helyezettjeivel beszélgettünk. Közülük Takács Ágostonnak a legértékesebb tudományos eredményért járó Pro Scientia Aranyérmesek Társaságának Díját is odaítélték.

Takács Ágoston

2011 januárjában szerzett kütüntetéses vegyész-mérnöki MSc oklevelet a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyész-mérnöki és Biomérnöki Karán. 2009-ben kiemelt első helyezést ért el az egyetemi TDK Elméleti és fizikai kémia szekciójában és a legmagasabb elismerésben, a Rektori Különdíjban is részesült.

Ezek után nem meglepő, hogy idén tavasszal a XXX. Jubileumi OTDK Kémiai és Vegyipari Szekciójában az Analitikai kémia I. tagozatban is első helyezett lett. Jelenleg a MOL Nyrt-nél technológiafejlesztő mérnökként dolgozik.

– Az OTDK-n nagyon sok jó helyezést zsebeltek be a BME diákjai, mi lehet erre a magyarázat?

A BME-n presztízskérdésként kezelik az OTDK-t, ezért mindenki a jó helyezésre törekszik. A felvételi ponthatár a kémiás szakokra több éve a BME-n a legmagasabb, és a legjobb képességű diákok alkalmasak kiemelkedő tudományos eredmények elérésére.

– Analitikai kémiából írta a díjnyertes dolgozatot, ez az egyik legbonyolultabb terület. Miért épp erre esett a választása?

Már az egyetem kezdetén felkeltette érdek-



lődésemet az analitikai kémia, így kerültem a Kémiai és Bioszenzorok csoportjába. Eleinte az volt a feladat, hogy lehetőségek minták iontartalmának a meghatározására fejlesszek ki egy analitikai módszert. Ebben az jelentette a legnagyobb kihívást, hogy nagyon kicsi, néhány csepp térfogatú mintákban kellett meghatározni az ionkoncentrációkat. Ez különféle tüdőbetegségek kimutatására lehet alkal-

mas módszer. E kutatás volt az előzménye a TDK-s munkámnak. A TDK kutatásom keretében egy olyan újfajta detektálási elven működő ionszenzor kifejlesztésével foglalkoztam, amely a jelenleginél robosztusabb elemzést tesz lehetővé.

– A robosztusabb mit jelent?

Az ionszenzorok „lelke” szokványos esetben egy PVC membrán, amelyben gyenge, másodlagos kölcsönhatással rögzítik a szelektív ionfelismerést biztosító molekulákat. A membránkomponensek kioldódása behatárolja a membrán élettartamát. A mi célunk egyrészt egy újfajta felismerési módszer fejlesztése, másrészt a komponensek erős rögzítése és a kioldódás megelőzése volt. Igen, mi azt találtuk ki, hogy PVC helyett egy aranyozott nanopórusos membránt alkalmazunk. A szemmel nem látható, 5-15 nanométer átmérőjű pórusokba rögzítjük a szelektív ionfelismerést biztosító molekulákat. Ez azért jobb, mint a korábbi módszerek, mert

sokkal erősebb kölcsönhatás, elsődleges kötés tartja a molekulát a membrán pórusaiban. Másrészt a PVC membránnal szemben az in vivo (élő szervezetekben) alkalmazások is előtérbe kerülhetnek. A módszert idén januárban publikáltuk egy nagyon neves folyóiratban, az Angewandte Chemie nemzetközi kiadásában. A mi szenzorunk ezüst-ion felismerésére alkalmas, a továbbiakban a csoportban a módszert gyakorlati szempontból jelentősebb ionokra is tervezik kiterjeszteni.

Ábrányi-Balogh Péter a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Vegyész- és Biomérnöki Karán gyógyszervegyész-mérnök MSc. szakos hallgató. A Kar Szerves Kémia és Technológia Tanszékén illetve az Egis Gyógyszergyárban TDK-zik. Idén áprilisig a BME Szent-Györgyi Albert Szakkollégium alelnöki tisztségét töltötte be, ahol konferenciákat, előadásokat szervez. A XXX. OTDK Szerves Kémia tagozatán lett első helyezett. Személyes gyufásdobozgyűjtő és elhivatott cserkész.

– A Szerves kémia tagozaton a karbolinvázas vegyületek előállításával lett első díjas. Milyen kutatás áll ennek a háttérében?

Azok közül az anyagok közül, amiket megpróbáltunk előállítani, soknak van valamilyen biológiai vagy gyógyszerjellegű tulajdonsága, amiket így rákellenes, HIV ellenes gyógyszereknél, vagy egyszerűen alvászavarok kezelésére alkalmazhatnak. Kerestünk ilyen vegyületeket, és megpróbáltunk velük analóg anyagokat előállítani,





amik felépítésre és talán hatásra is hasonlóak lehetnek hozzájuk. Valójában tehát az eredetihez hasonló, de új vegyületeket állítottunk elő. Ez azért lehet érdekes és hasznos, hogy hátha jobb lesz az új vegyület. Az ilyen kutatásokkal mindig az a cél, hogy talán találunk az előzőnél is jobb anyagot, mint amivel az adott gyógyszert előállítják. A mi anyagainkról nem tudjuk, hogy van-e valamilyen biológiai hatása, mert még nem történt meg a tesztelés, de bízunk benne, hogy hamarosan erre is sor kerül.

– Voltak áttörések a kísérletek során?

Talán azt lehet áttörésnek nevezni, amikor észrevettük, hogy van egy érdekes mellékreakció és melléktermék, amit ki tudtunk nyerni. Izoláltuk, megtisztítottuk, megvizsgáltuk, ettől lett érdekes az egész munka. Megfigyeltünk egy érdekes bomlási reakciót, amire szintén nem számítottunk. Végeredményben egy újszerű reakciómechanizmust sikerült lemodellezniünk.

A Letters in Organic Chemistry folyóiratban megjelent egy cikkünk, egy másikat pedig már elfogadtak a Current Organic Chemistry-ben, most nyáron fog megjelenni.

– A személyes honlapjáról kiderül, hogy szenvedélyes gyufásdobozgyűjtő. Hány darabnál tart?

7000 fölött. A 40-es és a 70-es évek közötti magyar dobozok magukon viselik annak a korszaknak minden jellegzetességét. Kicsit hasonlít ez a bélyeggyűjtéshez, csak sokkal kézzel foghatóbb. Tavaly egyébként németül beadtam egy TDK dolgozatot, ami a gyufásdobozok kialakulásáról és a gyűjteményemről szólt, harmadik lettem vele. Egyszer majd szeretnék egy kiállítást is létrehozni gyufásdobozokról, a dobozgyűjtésről, a címkegyűjtésről.

Antal Péter a Szegedi Tudományegyetem Élettani Tanszékén neurobiológusként idén fog végezni az Msc képzésen, egy éve a szegedi Biotechnológiai Intézetben TDK-zik. Az OTDK-n a Környezeti Kémia és Környezettechnológia tagozat első helyezettje lett.

– Miképpen került biológusként a Kémiai Szekcióba?

Én egy ilyen kentaur fajta vagyok, a barátaim aggattak is rám egy becenevet az interdiszciplináris érdeklődésem miatt, úgy hívnak, hogy nitrátmentesítő neurobiológus. Valójában annyi a magyarázat, hogy neurobiológus akartam lenni, de az állatkísérletek során kialakult egy állatallergiám és ezért új szakdolgozat témát kellett keresnem. Mivel a biotechnológia mindig is érdekelt, így kötöttem ki a Szegedi Biotechnológiai Intézetben. Így papíron neurobiológusként fogok végezni, de a szakdolgozatomat is már biotechnológiából írom és a biotechnológiai Tanszék óráira járok be.

Kutatásomban lényegében arról van szó, hogy az emberi és az ipari tevékenység során keletkező szennyező anyagok lebontásának elősegítésére dolgozunk ki egy a jelenleg elérhető módszereknél hatékonyabb, úgynevezett bioremediációs eljárást. A kutatócsoportom speciálisan a klórozott szénvegyületek lebontását tűzte ki célul, amik elsősorban olajipari melléktermékként és növényi peszticidekből keletkeznek. Attól veszélyesek, hogy a klórozottság miatt ellenállnak a lebontó vegyületeknek, ugyanakkor mivel erős ipari lobbí áll az olyan technológiák használata mögött, amelyek mentén keletkeznek, sok olyan kutatási eredményt is lehet olvasni, hogy nem veszélyesek.

Manapság egyre divatosabbak a vasport



Antal Péter

felhasználó ZVI (zero valent iron) bioremediációs eljárások, mert a vas elektront ad le, ezért a klóratom lehasad, így az idő vasfoga és a baktériumok már könnyebben lebontják ezeket a szénvegyületeket. A vas ráadásul olcsó és nagy mennyiségben elérhető. A jelenlegi eljárásokban általában úgy alkalmazzák, hogy leásnak a földbe, ahova vasszemcséket juttatnak le, akár olyan nanoszemcséket, amik lebegnek a vizen. A baj az, hogy ezek mérgezőek. Mi nagyobb felületű rendszereket akartunk létrehozni és olyat, ami nem mérgező. Vasgégeket készítettünk, zárójelben jegyzem meg, hogy ez csak egy fantázianév, és azt találtuk, hogy ezek hatékonyabbak a lebontásban és a bakteriológiai tesztelés során az is kiderült, hogy nem toxikusak.

Barta Judit

11. GRAND PRIX CHIMIQUE (GPCH) VEGYÉSZTECHNIKUSI DIÁKOLIMPIA

Az eddigi 10 versenyen magyar diák 8 esetben került az 1-3. helyezettek közé.

2011. szeptember 25-30. között az ausztriai Dornbirnben lezajlott a 11. GPCh diákolimpia 10 ország 20 vegyésztechnikus diákja részvételével. A magyar csapat tagjai Nagy Sándor és Zsemberi Máté, a

Petrik Szakközépiskola most végzett diákjai voltak. A versenyen preparatív kémiai, klasszikus és műszeres analitikai feladatok szerepeltek a két versenynapon 9-9 órás munkaidővel. A magyar versenyzők sikeresen szerepeltek: Nagy Sándor két német diák mögött csak 2 ponttal lema-

radva harmadik helyezett lett a 240 pontos skálán, míg Zsemberi Máté a 7-8. helyezéssel osztozott. A diákok felkészítésében részt vettek az Petrik Szakközépiskola tanárai, Fogarasi József mentor, továbbá Szabó Dénes és Riedel Miklós az ELTE oktatói.

Terápiás gyógyszer szint monitorozás

A terápiás gyógyszer szint monitorozás (therapeutic drug monitoring, TDM) a klinikai kémia ill. a farmakológia témaköréhez tartozik. Azt jelenti, hogy a gyógyszerrel kezelt beteg esetén meghatározzák egy adott gyógyszer (ill. hatóanyag) koncentrációját a vérplazmában annak érdekében, hogy a megfelelő plazmaszintet pontosan be lehessen állítani.

A „megfelelő” plazmakoncentráció elég magas kell legyen ahhoz, hogy a gyógyszer a megfelelő hatást kiváltsa, ugyanakkor nem érheti el azt a szintet, amely súlyos mellékhatást okozna. A címben szereplő „terápiás” jelző azt jelenti, hogy a vizsgálatokat a beteg sikeres gyógyítása érdekében, a kórházi kezelése során végzik. A témakör fontosságát és aktualitását jól jelzi, hogy a témával egy neves tudományos folyóirat foglalkozik (Journal of Therapeutic Drug Monitoring).

A terápiás gyógyszer szint monitorozást szűk terápiás ablakkal (kis különbség a gyógyító és káros dózisok között) rendelkező hatóanyagok esetében szükséges elvégezni, mivel ebben az esetben a terápiás hatóanyag szint kismértékű túllépése is súlyos mellékhatásokat okozhat. A monitorozás elsődleges célja annak ismerete, hogy a beteg vérében a beadott gyógyszer milyen koncentrációt ér el és időben hogyan változik.

Fontos tudni, hogy egy hatóanyag koncentrációja a vérplazmában nem csak a beadott gyógyszer mennyiségétől, hanem sok más tényezőtől is függ. Talán a legfontosabb, hogy genetikai adottságok nagymértékben megváltoztathatják a gyógyszerek farmakokinetikáját – vagyis egy adott gyógyszer mennyiség bevétele az egyik emberben túl kis, a másikban túl nagy

plazmakoncentrációt hozhat létre. A gyógyszer szintet a genetikai adottságokon és a testsúlyon kívül az életkor, az elfogyasztott ételek az egyidejűleg szedett gyógyszerek és több más tényező is befolyásolhatja. A gyakran alkalmazott gyógyszerek közül nemzetközi adatok alapján az alábbiak esetén feltétlen indokolt a TDM alkalmazása:

- Procainamid és digoxin szívgyógyszerek esetén
- Fenitoin és nátrium-valproát antiepileptikumok esetén
- Gentamicin és amikacin antibiotikumok esetén

A terápiás gyógyszer szint monitorozás ezeken kívül számos más esetben is javasolt, ezekről részletes lista az interneten megtekinthető:

<http://www.nlm.nih.gov/medlineplus/ency/article/003430.htm>

A szűk terápiás ablak mellett jelentős farmakokinetikai variabilitással is rendelkező hatóanyagok esetében elengedhetetlenül fontos a pontos analitikai módszerrel történő hatóanyag szint meghatározás. Gyógyszerek plazmakoncentrációját számos módon lehet mérni ill. ellenőrizni, a pontos analitikai meghatározás talán legkorszerűbb eszköze a tömegspektrometria (<http://hu.wikipedia.org/wiki/Tömegspektrometria>). Ez lehetőséget

nyújt a plazmában igen kis koncentrációban előforduló hatóanyagok érzékeny, szelektív és kvantitatív meghatározására. Tömegspektrometria segítségével néhány mikro- vagy milliliter vérmintában nanovagy pikogramm mennyiségben előforduló hatóanyag analízise is kivitelezhető. Az analízist leggyakrabban folyadékkromatográfiával (esetenként gázkromatográfiával) kapcsolt tömegspektrometriával végzik (HPLC-MS, GC-MS). A nemzetközi szakirodalomban a gyógyszer szint monitorozás területén egyre érzékenyebb és pontosabb, egyre kevesebb mintamennyiséget felhasználó kutatások és hatóanyagok analitikáját kidolgozó módszerek nyernek nyilvánosságot. Ezeket a módszereket gyakran automatizálják ill. robotizálják, mely nagyszámú beteg vizsgálatát teszi lehetővé (lásd „A terrorizmus ellen tömegspektrometriával” című cikkünket a Kémiai Panoráma 6. számában).

Egyes antibiotikumok esetében a hatás és mellékhatás is a koncentrációtól függ. Az aminoglikozid antibiotikumok gramnegatív baktériumok okozta infekciók kezelésében bizonyulhatnak hatásosnak. Az aminoglikozidok kedvezőtlen tulajdonsága azonban a vesét és hallást érintő károsodás, azaz a nefro- és ototoxicitás, ami a magas plazmaszintek következtében alakul ki. Az aminoglikozidok által kiváltott nefrotoxicitást is befolyásolja a koncentráció mellett számos egyéb farmakokinetikai paraméter, az életkor, a vesefunkció, egyéb vesekárosító gyógyszerek egyidejű szedése és korábbi aminoglikozid terápia. A hatékony és egyidejűleg nem káros gyógyszer szintek megállapítása, azaz a gyógyszer plazmában mért koncentrációjának monitorozása ezért aminoglikozid terápia alatt kiemelten fontos. Az antibiotikum plazmaszintje akkor ideális, ha nem lépi túl a koncentrá-



ciótól függő mellékhatások előidézéséhez szükséges küszöbértéket, ugyanakkor a megfelelő hatás eléréséhez meghaladja a minimális inhibitor koncentrációt, azaz MIC értéket.

A kialakuló gyógyszer szintet számos farmakokinetikai tényező befolyásolja. Az abszorpció, disztribúció, metabolizmus és elimináció folyamataiban is különbségek adódhatnak, amelyek lehetnek kortól, nemtől, betegségtől, genetikai tényezőktől és individuális tényezőktől függő eltérések. A farmakokinetikai paraméterek mellett az ételfogyasztás is befolyásolhatja egyes gyógyszerek hatását. A warfarin tartalmú tablettákat a vérrögképződés megakadályozására, illetve a tromboembólia és szövődményeinek kezelésére alkalmazzák. A nagy mennyiségű sóska, brokkoli, kelbimbó, káposzta, endívia, kelkáposzta, kivi, salátalevél, petrezselyem fogyasztása magas K-vitamin tartalma miatt hatással van a warfarin vérárvadást gátló hatására, ezért nem ajánlott a K-vitamin tartalmú ételek mennyiségének hirtelen változtatása az étrendben, mindig csak azonos mennyiségű fogyasztása.

Az egyidejűleg szedett gyógyszerek szintén hozzájárulnak egyes hatóanyagok megváltozott farmakokinetikájához. A digitoxin hatóanyagot tartalmazó tabletták a szívelégtelenség kezelésében lehetnek hatásosak. A digitoxin terápia alatt azonban más gyógyszerek, valamint az elektrolit-háztartás zavara megváltoztatja a gyógyszer hatásának mértékét. A kálium- és magnéziumvesztés a digitoxin hatás fokozását idézi elő és ezzel a mellékhatások súlyosbodását is kiváltja. Leggyakrabban a szívét érintik a digitoxin terápia mellékhatásai és szívritmuszavarokként jelentkeznek.

A plazmakoncentráció pontos analitikai meghatározására a tömegspektrometria (MS) kínál lehetőséget.

Tömegspektrumok segítségével lehetőség van az analízált mintát alkotó komponensek molekulatömegének meghatározására. Az MS-mérés előnye, hogy rendkívül kis anyagmennyiség meghatározására

kínál lehetőséget, akár pikomolnyi mennyiségű minta analízise is kivitelezhető. Biológiai minták analízise során a kis anyagmennyiség meghatározása kiemelkedően fontos, hiszen kis mennyiségű vérplazmából is kimutatható a nanogramnyi mennyiségű hatóanyag. A folyadékkromatográfiával kapcsolt tömegspektrometria (HPLC-MS) lehetőséget nyújt a mintát alkotó vegyületek elválasztására, a hatékony és pontos analízisre, kvantitatív meghatározásra. Az alábbiakban néhány példát mutatunk be.

A helyi érzéstelenítők túladagolása és a szisztémás keringésbe történő bejutásuk központi idegrendszeri tüneteket produkálhat, ami remegésben, agitációban, konvulzív állapotban nyilvánulhat meg. A ropivakain helyi érzéstelenítő központi idegrendszeri mellékhatásai szoros összefüggést mutatnak a hatóanyag szisztémás koncentrációjával. A központi idegrendszeri mellékhatásokat légzési elégtelenség követheti és halálhoz is vezethet. Ezek a súlyos mellékhatások előrevetítik, hogy a helyi érzéstelenítők esetében is szükséges a biztonságos terápiás dózis betartása, ami ropivakain esetében 10 µg/ml alatti vérszintet jelent. Egy japán

A gyógyszer és mérge közötti leggyakoribb különbség a dózis

”

kutatócsoport pontos, analitikai módszert

mutatott be a ropivakain vérszint monitorozásához HPLC-MS készülékkel. A kis mennyiségű injektált mintatérfigatból (5 µl) 75 ng/ml-es ropivakain koncentrációt határoztak meg jelentős intenzitással. A bemutatott módszer is alátámasztja, hogy a HPLC-MS technika alkalmazása megfelelően érzékeny és szelektív analitikai módszer kis mennyiségű hatóanyagok koncentrációjának monitorozásában.

A fluoxetin hatóanyag az antidepresszánsok körébe tartozik. A hatóanyag jelentős metabolizáción esik át a májban,

aktív metabolitja, a norfluoxetin (lásd „A kémiai védelmi rendszer” című cikkünket a Kémiai Panoráma 4. számában). LC-MS módszerrel egy amerikai kutatócsoportnak sikerült a fluoxetin és norfluoxetin egyidejű azonosítása. Humán plazmából 0,05 ng/ml-es hatóanyag-mennyiséget is detektálni tudtak rendkívül kis mennyiségű, csupán 0,1 ml-nyi mintamennyiséget felhasználva.

Egy német kutatócsoport folyadékkromatográfiával kapcsolt tandem tömegspektrometriás (HPLC-MS/MS) módszert fejlesztett ki antifungális, azaz gombaellenes szerek elválasztására. A vérplazmából hat antifungális hatóanyag szimultán analízisét mutatják be. A kromatográfiás analízis mindössze 8 perc és az injektált mintatérfigat is rendkívül kis mennyiségű (20 µl).

A folyadékkromatográfiával kapcsolt tömegspektrometria érzékenységét és szelektivitását tükrözi, hogy egyes immunosuppresszáns hatóanyagok meghatározását nemcsak vérplazmából teszi lehetővé, hanem beszáradt vércsepp foltjából is. Takrolimusz és ciklosporin immunosuppresszáns hatóanyagok meghatározására HPLC-MS/MS módszert írtak le. Azonban még további kutatások szükségesek ahhoz, hogy a beszáradt vércsepp foltjából történő hatóanyag szint monitorozás a vénás vérmintából meghatározott monitorozás alternatívájaként legyen elfogadható.

A bemutatott példák jól szemléltetik, hogy a HPLC-MS, illetve HPLC-MS/MS technika nagyfokú érzékenységgel és szelektivitásával kiemelkedő szerepet tölt be kis mennyiségű hatóanyagok vérplazmakoncentrációjának meghatározásában. A terápiás gyógyszer szint monitorozás a gyakorlatban gyorsan terjed, ma már Magyarországon is számos esetben alkalmazható.

Budai Livia
Semmelweis Egyetem,
Gyógyszerészeti Intézet
Vékey Károly
MTA Természettudományi
Kutatóközpont

Molekuláris csapda

trombózis ellen

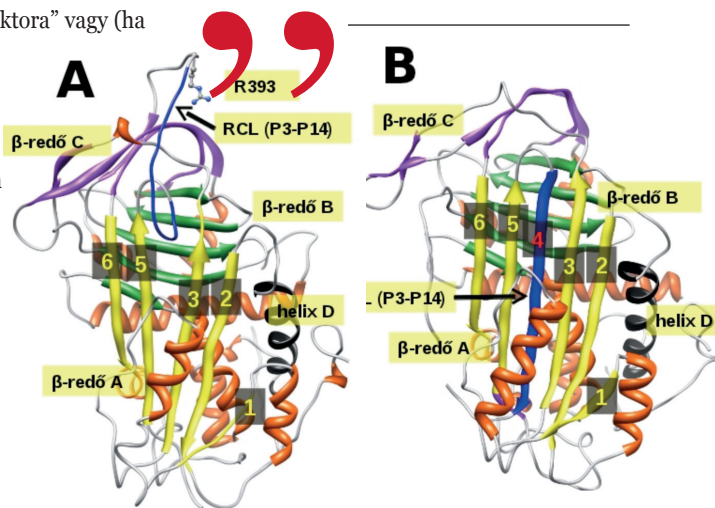
Az oxigén, tápanyagok és hormonok szállításának élettani szerepét betöltő vér folyékony halmazállapotú, ami azzal a veszéllyel jár, hogy a vért szállító erek bármilyen kicsi sérülése elvérzéshez vezethet. Ennek elhárításáról egy bonyolult, sok ponton szabályozott rendszer gondoskodik, amely normális körülmények között „csendben” várakozik, de a véredények sérülésekor robbanásszerűen aktiválódik és gondoskodik a sérült érfal eltömítéséről, a vérzés elállításáról. A véralvadásban alapvetően fontos szerepük van a lépcsőzetesen (kaskádszerűen) egymás után aktiválódó szerin proteáz enzimeknek, amelyek pozitív visszacsatolása robbanásszerű aktiválódást okoz.

VÉRALVADÁSI FAKTOROK

Sok zimogén szerin proteázt (a véralvadási kutatások korábbi szakaszából eredően) „számozott” véralvadási faktorként tartunk nyilván és római számokkal különböztetjük meg. Pl. a „véralvadás X-es faktora” vagy (ha nem vezet félreértéshez) X-es faktor, egyszerűbben FX, egy bizonyos szerin proteáz zimogén formája. A faktorok aktív formáját (az aktív szerin proteázt) kis „a” betű hozzáadásával jelöljük (pl. FXa). Megjegyzendő, hogy nem minden véralvadási faktor zimogén szerin proteáz és a számozás nincs direkt kapcsolatban a véralvadási kaskádban elfoglalt hellyel.

Bármilyen zavar ebben a bonyolult, sokkomponensű rendszerben vagy vérzékenységet (ha a véralvadási folyamatok nem működnek megfelelően) vagy trombózt

Bármilyen zavar a bonyolult rendszerben vérzékenységet vagy trombózt okozhat



1. ábra. SZERPINEK szerkezeti elemei az antitrombin natív (inhibitor, A) és látens (B) formáin szemléltetve

okozhat (ha a véralvadás nem csupán a sérült érfal befoltozására korlátozódik). A trombózis megelőzésének egyik jól bevált módja a véralvadási kaskád szerin proteáz enzimeinek gátlása. A szervezetünk zömében úgynevezett szerpineket használ ilyen célra.

SZERPINEK

Ez az egyetlen szerin proteáz **inhibitorcsalád**, amely az élővilágban mindenütt (a vírusoktól az emberig) előfordul. Napjainkig több mint 1500 szerpin szekvenciát azonosítottak, és talán túlzás nélkül állítható, hogy szerpinek bárhol megtalálhatók. Fő fehérje komponense pl. a tyúktojásnak de a vér harmadik legnagyobb mennyiségben előforduló proteincsaládjá is. Elterjedtségét mi sem jelzi

NÉHÁNY SZAKKIFEJEZÉS:

A proteázok olyan enzimek, amelyek megfelelő enzim-szubsztrát illeszkedés esetén oligopeptidek, fehérjék (proteinek) lebontásában (proteolízis) vesznek részt úgy, hogy a peptidkötéseket hasítják. A szerin proteáz katalitikus helyén található szerin oldalláncának oxigénje kémiai reakcióba lép a bontandó peptidkötés karbonil szenével.

Az adott enzim „zimogén” formája egy inaktív fehérje, amelyből valamilyen módon (pl. proteolitikus hasítással) az aktív enzimet kapjuk.

Trombózisról beszélünk ha a sérülés „befoltozására” keletkező vérrög (trombus) elsza- badul, vagy ilyen vérrög valamilyen okból a véráramban keletkezik és ereket zár el. Ez igen súlyos következménnyel is járhat, ha létfontosságú szervek vérellátása sérül.

A szerpin a **SZERin Proteáz INhibitor** szavakból származtatott mozaikszó (az angol szakirodalomban: serpin), de a szerpin elnevezés valójában egy jól meghatározott fehérjecsaládra utal. A szerpin család nem minden tagja inhibitor tulajdonságú, pl. az ovalbumin (az első 3D szerpin szerkezet) nem szerin proteáz inhibitor.

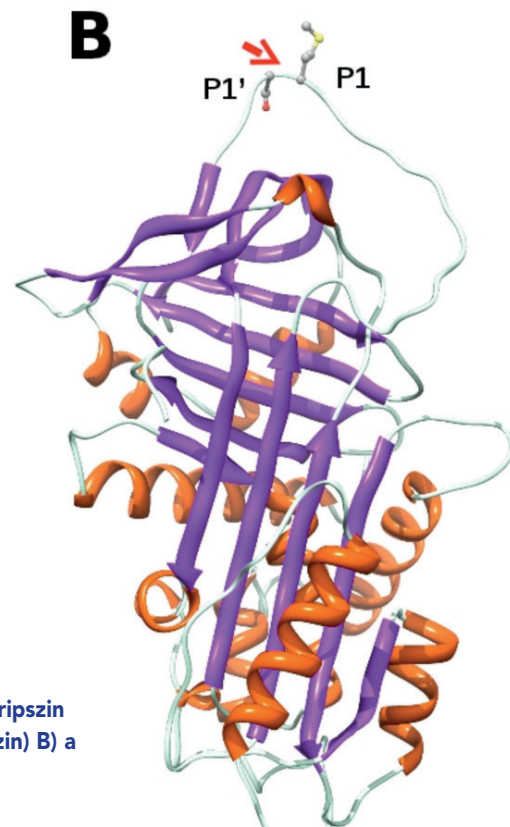
A heparin és a heparán szulfátok az ún. glikozaminoglikán csoportba tartozó (változó hosszúságú) szulfatált poliszacharidok, melyek fontos alkotóeleme az N-Acetilglikozamin.



jobban, mint hogy a sör legjelentősebb proteín alkotórésze az árpa szerpin. Ezidáig 36 emberi szerpin fehérjét azonosítottak. Bár számos egyéb szerin proteáz inhibitorcsalád létezik, magasabbrendű élőlényekben (különösen az embernél) ezek a legfontosabb szervezeten belüli (ún. endogén) szerin proteáz inhibitorok. A szerpinek szerkezetükénél fogva különösen alkalmasak arra, hogy finoman szabályozzák a szerin proteázok működését.

A szerpin család tagjai kb. 400 aminosavat tartalmazó fehérjék, melyek egy fehérjeláncból állnak. Annak ellenére, hogy a fehérjeláncot alkotó aminosavak sorrendjét összehasonlítva gyakran csak kevés hasonlóság fedezhető fel közöttük, az eddigi adatok alapján nagyon hasonló háromdimenziós szerkezettel rendelkeznek. A szerkezet jellegzetesége, hogy a csavarvonalú (helikális) szerkezeti elemek zömében a fehérjelánc kezdeti (ún. N-terminális) felén míg a β -redős szerkezeti elemek főleg a fehérjelánc második (ún. C-terminális) felén található (1A ábra). Működésük szempontjából legfontosabb egy 20-24 aminosavból álló hurok és a fehérje központi részén található öt százból álló A-val jelzett lemezes szerkezet (ún. β -lemezes vagy β -redős szerkezet, 1A ábra). Az előbbit (mivel ez lép kölcsönhatásba a megfelelő szerin proteázzal) „reaktív hurok”-nak, vagy angol elnevezéséből (Reactive Center Loop) képzett mozaikszó alapján egyszerűen csak RCL-nek hívják a szerpinekkel foglalkozó szakirodalomban. A β -lemez-A-t alkotó szálak számozása az 1. ábrán látható.

A szerin proteáz inhibitor szerpinek egyik legmeglepőbb és hatásmódjukat tekintve leglényegesebb jellemzője az, hogy nem a termodinamikailag legstabilabb állapotba bomlolyodnak (tekerednek fel). A termodinamikailag legstabilabb állapotban ugyanis a RCL mint 4. szál, beépül a β -lemez A-ba. (1B ábra). A szerin proteáz gátló képességgel bíró, kevésbé stabil szerkezetet „natív”- míg a termodinamikailag stabilat „latens” szerkezetnek hívjuk. Az átalakulás a natív és latens szerkezetek között általában viszonylag lassú, de az RCL elhasításakor az RCL hosszabbik fele villámgyorsan beépül az β -redős A szerkezetbe. A beépülés hajtóereje a natív és a látens formák közötti jelentős stabilitásbeli különbség.



2. ábra. Kanonikus (szarvasmarha pankréasz tripszin inhibitor, A) és szerpin inhibitor (α 1-antitripszin) B) a nyílak a szerin proteázok hasítási helyei

HOGYAN MŰKÖDNEK A SZERPINEK?

A rendelkezésre álló röntgendiffrakciós szerkezeteknek köszönhetően, a szerpinek különös, a „kanonikus” szerin proteáz inhibitorokétól eltérő gátlási mechanizmusának sok részletét sikerült megérteni. Néhány frissebb összefoglaló közleményt a szerpinek szerkezetéről és működéséről a cikk végén sorolunk fel.

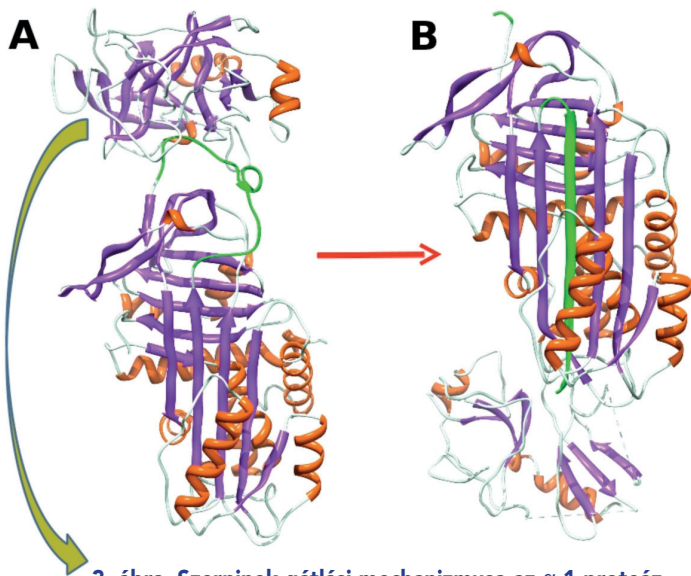
Az ún. kanonikus szerin proteáz inhibitorok általában rövid és az enzim aktív helyéhez jól illeszkedő, merev hurokkal rendelkeznek (2A ábra). Ebben az esetben a peptidkötés hasítása esetén létrejövő fragmentek sem távolodnak el egymástól, a hasított peptidkötésben érintett aminosavak így továbbra is jól illeszkednek a szerin proteázok aktív helyéhez. Így az inhibitor bár erősen, ugyanakkor reverzibilisen kötődik az enzimhez.

A szerpinek ezzel szemben egy viszonylag hosszú és flexibilis RCL-t tartalmaznak. Ez a hurok hasonló az adott szerin proteáz által „kedvelt” flexibilis peptidszakaszokhoz (2B ábra). A szerin proteáz az RCL-re, mint „csalira” „ráharap” és elhasítja, így kialakul a szerin proteáz reakció stabil, kovalens közti-

terméke, az ún. acil-enzim köztitermék (acil-enzim komplexként is szokták említeni). De ezzel már csapdába is esett, mivel a hasítással megnyitotta az utat az RCL számára, hogy elfoglalja helyét a β -szálak között. Ehhez a szerpinnek „csupán” a csapdába ejtett enzimet kell az egyik oldaláról a másikra „átlendíteni”, vagy más megközelítésben, a szerpinnek rá kell záródnia a szerin proteázra, mielőtt még a proteolitikus reakció teljesen végbemegy, azaz elbomlik az acil-enzim köztitermékét összetartó kötés (3. ábra). A szerin proteáz elmozdulása ebben az esetben a szerpinhez képest több mint 70 Å! A β -szál beépülésének hajtóereje olyan nagy, hogy a folyamat gyakorlatilag irreverzibilis, ráadásul a szerin proteáz katalitikus helyét is deformálja oly mértékben, hogy az acil-enzim köztitermék bomlására ekkor már nincs is lehetőség. Az elmondottakból következik, hogy a szerpinek egyszer használatos („eldobható”, vagy szebben fogalmazva „önmagukat feláldozó”) csapdaként szolgálnak.

AZ ANTITROMBIN

A véralvadási proteázok gátlásában kitüntetett szerepe van egy, a vérben nagy koncentrációban jelen levő szerpinnek, az



3. ábra. Szerpinek gátlási mechanizmusa az α -1 proteáz inhibitor és tripszin kölcsönhatásával szemléltetve. A zöld szín az RCL szakaszt jelöli.

antitrombinnak. Az antitrombin fő fiziológiai funkciója a trombin (FIIa) és az aktív X-es véralvadási faktor gátlása, de gátolja a IXa, XIa és XIIa véralvadási faktorokat is. Az antitrombin az egyik hatékony segítőnk akkor is, ha nemkívánt trombózt szeretnénk megelőzni, pl. műtétek után, vagy hosszabb kényszerű mozdulatlanlás esetén. Az antitrombin ezekre a feladatokra néhány, a szerpinek között is érdekes tulajdonsága miatt alkalmas.

Az egyik ilyen tulajdonság, hogy az antitrombin maga csak gyenge inhibitora a FXa-nak, trombinnak vagy a koagulációs kaszkád többi proteázának. Ez magyarázza azt, hogy az antitrombin nagy koncentrációja ellenére sem okoz vérzékenységet. Egy másik érdekes tulajdonsága, hogy eltérő stratégiát választ legfontosabb „áldozatait”, az FXa és a trombin léprecsalásához. Mivel az FXa a két úton induló véralvadási kaszkád közös pontja és egy FXa molekula mintegy 1000 protrombin molekulát (FII) alakít át aktív szerin proteázá (trombinná), ezért a véralvadási folyamat gátlása különösen hatásos, ha az FXa szerin proteázt gátoljuk. Miután egyszerűbbnek tűnik olyan trombózt megelőző gyógyszerjelölt molekulát előállítani, amely az antitrombint FXa ellen (és nem trombin ellen) „élesíti” ezért a következőkben csak ezzel az „élesztéssel” foglalkozunk.

Ahhoz, hogy az antitrombin hatásosan

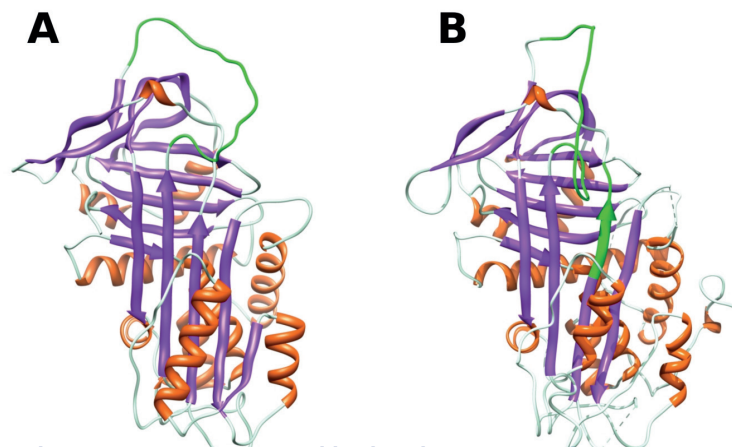
gátolja az aktív X-es faktort, szükség van egy lineáris, öt monoszacharidból álló, több szulfátcsoportot tartalmazó egységre, azaz egy megfelelően szulfált pentaszacharidra. Ilyen egységek szervezetünkben a heparán szulfátokban vagy pl. a heparinban található, melyek az antitrombin FXa gátló képességét akár 1000-szeresre is növelhetik. A heparán szulfátok elsősorban a természetes gátló hatás növelésért felelősek, míg a heparint főleg gyógyászati vagy diagnosztikai célú véralvadás gátlására alkalmazzák.

Az antitrombin szerkezetét összehasonlítva egy másik szerpin fehérje, pl. az α 1-antitripszin szerkezetével (4A-4B ábra), a szembetűnő hasonlóságok mellett egy lényeges különbséget is felfedezhetünk. Az antitrombin esetében ugyanis a RCL egy bizonyos szakasza, részlegesen beékelődik a β -lemez-A-ba, a 3. és 5. β -szál közé. Ez magyarázhatja is a csökkent gátló hatást, hiszen a RCL számára egy szorosabb, az antitrombin felszínéhez közelebbi elrendezést ír elő.

A FXa az antitrombint az RCL-nél, a fehérjelánc 393. és 394. aminosav egységei (Arg393-Ser394) közötti peptidkötésnél hasítja. Ehhez (többek között) az szükséges, hogy az antitrombin Arg393 oldallánca és a FXa között erős elektrosztatikus kölcsönhatás alakuljon ki. A natív antitrombinban az RCL konformációi olyanok, hogy az Arg393 aminosav oldallánca túlnyomóan az antitrombin belseje felé mutat (5A-5B ábra). Az előző analógiát használva: a csapda ugyan már megfeszített (azaz termodinamikailag nem a legstabilabb) állapotban van, de a csali még nem-

vagy csak alig látható (nincs „kicsomagolva”). Gyökeresen megváltozik a helyzet, ha egy megfelelő erősen negatív töltésű pentaszacharid az antitrombin nagy pozitív töltéssűrűségű felületéhez kapcsolódik és egy többlépéses konformációváltást indít el. Ennek következtében a laza asszociációt egy szorosabb indukált illeszkedés („induced fit”) követi. Az antitrombin pentaszacharid kötő régiójában és azok környékén olyan szerkezeti változás megy végbe, ami erősebb antitrombin-pentaszacharid kölcsönhatást hoz létre.

A pentaszacharid kötő régióban (amit heparin kötő régióknak is neveznek) bekövetkező viszonylag kisebb konformációs változások továbbterjednek távolabbi régiókra is. A RCL ugyan kissé elmozdul, de részleges beékelődése a β -lemez-A 3. és 5. β -szálai közé továbbra is megmarad (5C ábra). Ez az RCL viszonylagos merevségét alig oldja. Kimutatták, hogy ez a lépés „csupán” az antitrombin-pentaszacharid kölcsönhatási energia ~40%-át szolgáltatja. Az antitrombin-pentaszacharid rendszer további szerkezeti átalakuláson megy keresztül, amelyben már a heparin kötő régióktól távolabbi változások dominálnak. Ekkor az RCL kiszabadul a 3. és 5. β -szálak közül és kellően flexibilissé válik (5D ábra). Ez megteremti a lehetőséget, hogy jól illeszkedjen a Xa véralvadási faktor aktív helyéhez. Analógiánknál maradván, a FXa számára kívánatos „falatot” nem rejti többé a csomagolás. A pentaszacharid



4. ábra. Az α 1-antitripszin további aktiválást nem igénylő natív szerpin konformáció, A) és az antitrombin szerkezete (α -lemez-A 3. és 5. szálai közé részlegesen beékelődő RCL, B)

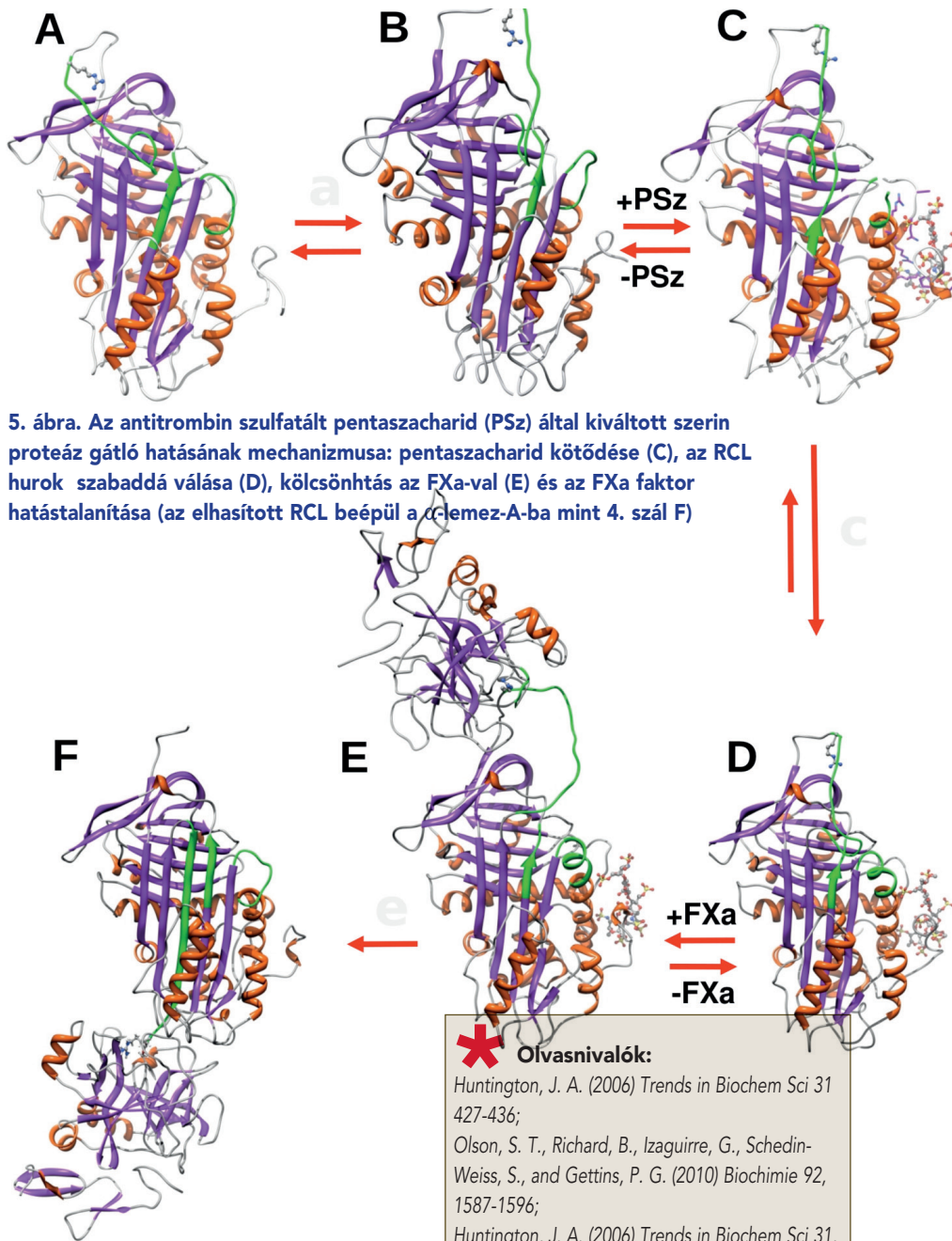
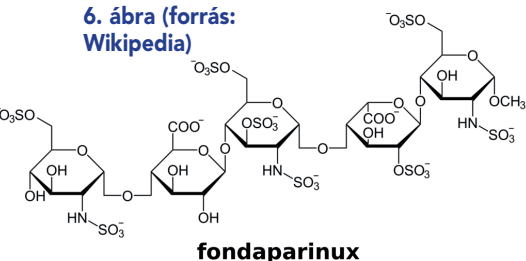


kötődés által okozott konformációs változások („kicsomagolás”) eredményeként az antitrombin gátlási képessége mintegy 1000 szorosra nő. A FXa véralvadási faktor, miután megtalálta és hasította a flexibilis RCL-t (5E ábra), ugyanúgy csapdában találja magát, mint sorstársai, amelyek szerepének hasításával próbálkoztak. Az RCL ugyanis villámgyorsan (mielőtt még a hasítási reakció teljesen lezajlana) beépül a 3. és 5. β -szálak közé. Ez együtt jár a csapdába ejtett szerin proteáz katalitikus helyének torzulásával és így a proteolízis helyek az acil-enzim köztitermék állapotban (5F ábra).

Nem lebecsülve a még megértésre váró folyamatok jelentőségét, az eddigi szerkezeti információk alapján annyi mindenképpen kijelenthető, hogy az antitrombin jó célfehérjeje a nemkívánatos véralvadást megakadályozó molekulák tervezésének. Hatás-szerkezet összefüggések tanulmányozásával sikerült egy hatékony, ma már a gyógyászatban is sikerrel alkalmazott pentaszacharid (fondaparinux Na⁺ sója) származékot előállítani, amely Arixtra néven kerül forgalomba (6. ábra). Hála a szintetikus szénhidrátkémia fejlődésének, pentaszacharidok előállítása napjainkban már könnyebben megvalósítható, még ha rutinszerű szintézisekről nem is beszélhetünk. Elviekben így lehetőség van újabb, a szervezetet kevésbé megterhelő ugyanakkor hatékony antitrombint aktiváló (azaz az antitrombin FXa gátló hatását fokozó) vegyületek szintézisére. Ilyen újabb ígéretes vegyületnek indult pl. az idraparinux névre keresztelt pentaszacharid. A klinikai kipróbálás szakaszában azonban a további vizsgálatokat le kellett állítani, mert egyes esetekben túlzott vérzékenységet okozott.

Érdekesképpen megemlítendő, hogy az antitrombin különböző mutációi jelen-

6. ábra (forrás: Wikipedia)



*** Olvasnivalók:**

Huntington, J. A. (2006) *Trends in Biochem Sci* 31 427-436;
 Olson, S. T., Richard, B., Izaguirre, G., Schedin-Weiss, S., and Gettins, P. G. (2010) *Biochimie* 92, 1587-1596;
 Huntington, J. A. (2006) *Trends in Biochem Sci* 31, 427-435;
 Rau, J. C., Beaulieu, L. M., Huntington, J. A., and Church, F. C. (2007) *J Thromb Haemost* 5, 102-115;
 Huntington, J. A. (2011) *J Thromb Haemost* 9 Suppl 1, 26-34;
 Whisstock, J. C. and Bottomley, S. P. *Current Opinion in Struct Biol* (2006) 16 761-768;
 Sas, G., Blaskó, Gy., Bánhegyi, J., Jákó, J., Pálos, Á. L. (1974): *Thrombosis et Diathesis Haemorrhagica*, 32, 105-115;
 Olds, R. J., Lane, D. A., Boisclair, M., Sas, G., Bock, S. C., Thein, S. L. *FEBS Lett.* (1992) 300, 241-6.

tősen befolyásolhatják annak szerin proteáz (pl. FXa) gátló hatását. Az egyik ilyen mutáció az antitrombin Budapest III mutációja, amelyet magyar kutatók azonosítottak (a mutációkat igen gyakran arról a városról nevezik el, ahol azt kimutatták). Ez a mutáció a szulfatált pentaszacharid egység kötődését gyengíti, ezért meglehetősen fokozott trombózisra való hajlamot jelez.

Komáromi István
Orvos- és Egészségtudományi Centrum, Debreceni Egyetem

A KÉMIAI PANORÁMA

VITAEST A NANOTECHNOLÓGIÁRÓL – TUDOMÁNYNÉPSZERŰSÍTÉS ÁZSIÁBAN



Nanoskála a poszterkiállításon

Az MTA Természettudományi Kutatóközpont és a Tudástársadalom Alapítvány által szervezett Lángész programok során szerzett tapasztalatok birtokában nagy érdeklődéssel vártam, hogyan népszerűsítik a fiatalok körében a tudományokat a világ más pontjain.

2012 januárjában meghívott szakértőként részt vettem az Európai Unió FP7-es keretprogramja által támogatott NanoChannels (www.nanochannels.eu) projekt első két iskolai vitaestjén. Az országokon átívelő kezdeményezés koordinátora az izraeli ORT Iskolahálózat (190 oktatási intézmény 100 ezer diákkal) Moshinsky Kutatási és Fejlesztési Központja. A partnerek között kiemelkedő feladat jut az angol The Guardian-nek, a spanyol El Mundo-nak és a belgiumi székhelyű European School Net-nek. A többnyelvű (angol, francia, német, spanyol, olasz, héber és román) összefogás célkitűzése, hogy információt juttasson el az

európai és a társult országok lakóihoz a nanotechnológiával kapcsolatban, illetve vitákat generálva párbeszédet indítson el a társadalom különböző rétegei között. Első körben a virtuális információ-áramlásé volt a főszerep: a nagy múltú, százezres olvasottságú napilapok és rádióállomások bevonásával az olvasók és a hallgatók széles köréhez jutattak el információkat a tudományág legújabb vívmányairól és az esetleges kockázati tényezőkről.

Második körben 24 iskolában rendeznek nyilvános vitákat diákok, szülők jelenlétében. Az első két nyitó rendezvényre a Bat Yam és Ramat Gan városok ORT iskoláiban került sor. A Ramat Yosef tanintézményben a hetedikesek, míg másnap az Ebin iskolában a tizedikesek mutatták be, mi mindent tanultak a nanotudományokról.

A vitaest mellett a témához kapcsolódó dolgozatokkal és makett-kiállítással is készültek a tanulók. Az első rendezvény túlnőtt egy egyszerű kerekasztal beszélgetésen, s valóságos iskolai ünnepéllé emelkedett. A tánc és ének csoportok vidám hangulatot teremtő bemutatója után Pnina Glass igazgató köszöntötte az este hét órakor (!) megjelent 90 érdeklődőt, szülőket és diákokat. Eloise Gerard (European school net - EUN) a most induló párbeszéd fontosságát hangsúlyozta. A megnyitó után a színpadon két diák-csapat vitája kezdődött. A támogatók és ellenzők csoportja a nanotechnológia orvosi alkalmazásával kapcsolatban fejtette ki véleményét pro és kontra.

Egyetemi hallgatókat messze leköröző lelkesedéssel és komolysággal érveltek a hetedikesek. Számos kérdés hangzott el a nézőtér soraiból, s itt jutott szerep a brüsszeli és a budapesti témában tevékenykedő szakembernek. A feladatunk az volt, hogy megválaszoljuk a diákok kérdéseit, közelebb hozzuk a mindennapi kutatói dilemmákat a gyerekekhez. Többek között szóba került a célzott gyógyszerbevitel és az állatkísérletek is. Összegzésként Dr. Nira Shimoni, a program

szakmai tanácsadója tartott átfogó előadást a nanovilágról, majd szavazásra került a sor. Minden résztvevő kinyilváníthatta, fontosnak és hasznosnak érzi-e a nanotechnológiával kapcsolatos laboratóriumi fejlesztéseket, a hétköznapi életben megjelenő vívmányokat. A résztvevő diákok az est végén oklevelet kaptak munkájuk elismeréseként.

Másnap több mint 100-an jöttek el a tizedikesek vitaestjére. Ilana Mayo, igazgatónő az etikai kérdések fontosságát hangsúlyozó bevezetőjét követően a rehovoti Weizmann Kutatóközpont Tudomány-oktatási részlegének munkatársa Dr. Ron Blonder arról beszélt, hogyan befolyásolja majd a jövőnket a nanotechnológia. Dana Golan, a diákokat a nyilvános beszédre és vitastratégiákra felkészítő pedagógus rövid magyarázatát követően három-három diák próbálta meggyőzni a teremben ülőket a „nano” hasznosságáról illetve veszélyességéről. Az alap témát a tech-



A diákok érvelnek, pro és kontra

nológia emberi aggyal kapcsolatos alkalmazásai szolgáltatották. A támogatók szerint a hallás és látássérültek életének megváltoztatását hozhatja el a jövő, az ellenzők az emberi gondolkodás befolyásolhatóságát emelte ki veszélyforrásként. Az est résztvevői érdeklődéssel hallgatták a laborból érkezett kutatót, kíváncsian faggatták az atomok világról és a nanoanyagokkal történő munka során alkalmazott biztonsági intézkedésekről. A végszavazáson a nanotechnológiai kutatásokat támogatók alkották a többséget. Az eseményt élőben követhették az iskolahálózat és a projekt weboldalán a távolban lévő érdeklődők.

közösségi oldala



Ron Blonder a grafénről magyaráz



Mekkora is a „nano”?

A lelkes diákok és tanárok által szervezett közel kétórás programok feladták a leckét a következő 22 európai rendezvény szervezőinek. Sajnos, hazai résztvevője nincs a projektnek, de reméljük, a Kémiai Panoráma hasábjain beszámolhatunk majd nálunk zajló iskolai tudományos vitaestekről.

KEMIKLIKK – A HÓNAP FÉNYKÉPE
 „Célkereszt” – Si felületen kialakult Co mintázat pásztázó elektronmikroszkópiai (SEM) felvétele (Paszternák András, Bar-Ilan Egyetem)

KETTŐS KÖTÉS

Kérdéseiket a következő e-mail címre: panorama@chemres.hu vagy hagyományos levélben a Kémiai Panoráma, MTA Természettudományi Kutatóközpont, Pusztaszeri út 59-67., 1025 Budapest címre várjuk (a borítékra írják rá: „Kettős kötés”)

RÁTZ TANÁR ÚR ÉLETMŰDÍJ 2011. ÉVI DÍJAZOTTJAI

November végén átadták a Rátz tanár úr életműdíjat 2-2 kémia, fizika, matematika és biológia szakos tanárnak. A kémia szakos díjazottak:

Dr. Pfeiffer Ádám az érdi gimnázium biológia-kémia tagozatának alapítója, Pest megyei szakfelügyelő, szaktanácsadó, az ELTE Apáczai Csere János Gyakorlógimnáziumában vezetőtanár, munkaközösség-vezető, majd az intézmény igazgatója. Több tanítványa ért el jó helyezéseket az Irinyi János Országos Kémiaversenyen és a kémia OKTV-n. Az egyetemi kollégákkal közösen végzett szakmódszertani kutatásaiból sokat publikált, majd doktorált is. Tanszékfejlesztésért „TANÉRT 1.” - díjat kapott. Tankönyveket írt, az ELTE tanári államvizsga-bizottságnak jelenleg is külső tagja. Gyerekközpontú és közösségteremtő tanárszemélyiség.

Dr. Bohdaneczky Lászlóné egyetemi

tanulmányai befejezése után (1976) a debreceni Fazekas Mihály Gimnáziumban kezdte el tanári pályafutását, kémia-fizika szakos tanárként. Jelenleg a Debreceni Egyetem Kossuth Lajos Gyakorló Gimnáziumában vezető kémia tanár. Tanári ösztöndíjasként a Debreceni Egyetemen és az MTA Atommag Kutató Intézetében végzett kutatómunkát, eredményeiből több publikáció született, majd „summa cum laude” minősítéssel doktori fokozatot szerzett. Középkorú diákokat vont be a környezetvédelemmel kapcsolatos kutatásaiba, kutatómunkákkal pályázó diákok mentora, számos növendéke ért el nagyon jó eredményeket különböző versenyeken. Saját maga is több verseny szervezésében vesz részt. Sok szakmódszertani cikk szerzője, szaktanácsadó és vezetőtanár. Továbbképzések, tanfolyamok vezetője, a Magyar Géniusz programban tehetőség gondozó segédanyag készítője.

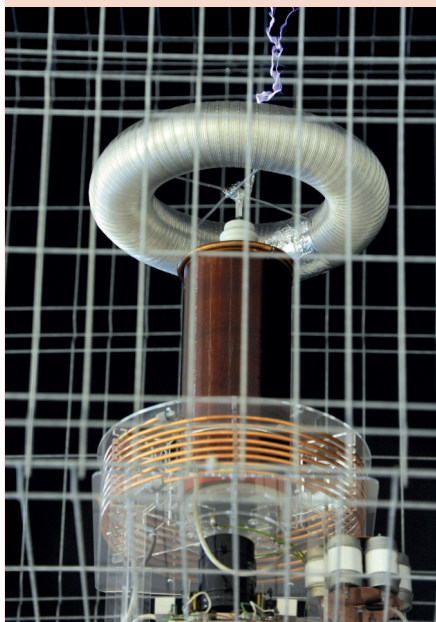


12/11/2011 HV WD mag spot det mode
 6:04:47 PM 10.00 kV 3.5 mm 10 000 x 3.0 ETD SE

A KÉMIAI PANORÁMA közösségi oldala

MEGNYÍLT A „CSODÁK PALOTÁJA” A PÉCSI ZSOLNAY KULTURÁLIS NEGYEDBEN

Természettudományi kiállítással, valamint interaktív technikai játszótérrel várja az érdeklődőket a csodák palotájának is nevezett Látogatóközpont - Labor a pécsi Zsolnay Kulturális Negyedben.



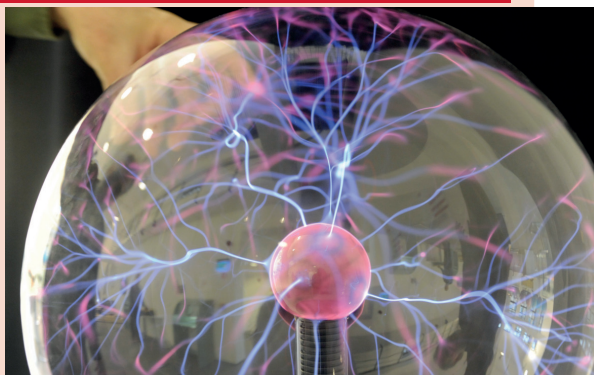
Tesla transzformátor, Látogatóközpont, Pécs
MTI Fotó: Kálmándy Ferenc

Az intézmény vendégei harminc kísérleti eszközt és játékokat vehetnek szemügyre. Az installációk között van mágnesezhető folyadék és Tesla-transzformátor. Akik kíváncsiak rá, megtudhatják, miért tűnnek el hajók a Bermuda háromszögben és kipróbálhatják a légörvényágyút is.

A kiállítás célja az, hogy felkeltsék és játékos formában kielégítsék a gyermekeknek és felnőtteknek a természettudományi jelenségek megismerése és megértése iránti kíváncsiságát.

A Zsolnay manufaktúra nagyfeszültségű porcelán szigetelőit tesztelő egykori laboratóriumában berendezett látogatóközpont eszközeit a Pécsi Tudományegyetem (PTE) Fizikai Intézetének munkatársai és pécsi iskolák fizikatanárai állították össze. A tudósok, oktatók, tanárok régi vágya volt, hogy Budapest és több hazai nagyváros után a baranyai megyeszékhelyen is legyen interaktív tudományos játszótér.

A megvalósításhoz 2007-ben megalakult a Csodák Pécsi Palotája Alapítvány Janszky József akadémikus és Sebestyén Zoltán fizikatanár adományainak köszönhetően. A



Plazmagömb, Látogatóközpont, Pécs
MTI Fotó: Kálmándy Ferenc

szervezet kurátorai a PTE, az Eötvös Lóránd Fizikai Társulat, a Pécsi Akadémiai Bizottság, a pécsi önkormányzat kulturális bizottsága és a Paksi Atomerőmű meghatározó személyiségei, akik biztosítják a széleskörű szakmai háttérrel. (Az MTI szabadon felhasználható tartalma alapján.)

A HÓNAP IDÉZETE

„Az a gondolat, hogy a tudomány csak a tudósokra tartozik, olyan tudományellenes, mint amilyen költészetellenes azt állítani, hogy a költészet csak a költőkre tartozik.”

Gabriel Garcia Márquez

LAPOZGATÓ – KÖNYVAJÁNLÓ KÉT KÍSÉRLET KÖZÉ

A „Multidiszciplináris, modulrendszerű, digitális tananyagfejlesztés a vegyészmérnöki, biomérnöki és vegyész alapképzésben” című Támop projekt keretében számos kémiával foglalkozó, ingyenes egyetemi tananyag vált elérhetővé a világhálón. Az egyetemi hallgatók által mindennap forgatott szakkönyvekbe bizonyára jó néhány érdeklődő középiskolás is

belepillantana. A teljesség igénye nélkül néhány témakör az új kiadványok közül:

Kémiai alapok (Benkő Zoltán – Kőmívesné Tamás Ibolya – Stankovics Éva)

Műanyagok (Pukánszky Béla – Móczó János)

A nanotechnológia kolloidkémiai alapjai (Hórvölgyi Zoltán)

Analitikai kémia (Pokol György – Simon András – Bezúr László – Horvai György – Horváth Viola – Dudás Katalin Mária – Gyurcsányi E. Róbert)

Atomenergetika és nukleáris technológia (Pátzay György)

A könyvek az alábbi weboldalról díjmentesen tölthetők le: http://www.interkonyv.hu/index.php?page=konyvek&series_id=42



Zárórendezvény Csömörön

Kémiadélután tartottak a Budapesttel határos település általános iskolásainak.

A Kémia Nemzetközi Éve zárórendezvényeként 2011. december 13-án a csömöri Mátyás Király Általános Iskolában a felsős diákoknak egy emlékezetes délutánt szerveztek iskolánk kémiatanárai - Bánné Énekes Anita, Merényi Márta tanárnők és Bátovszky János, az iskola igazgatója. Előzőleg a **7-8. osztályos diákok azt a feladatot kapták, hogy készítsenek a megszokottól eltérő periódusos rendszereket, amelyeket a rendezvényen bemutatnak és a közönség értékeli azokat.** Nagyon ötletes, képekkel illusztrált, térbeli, műanyag kupakokból, sőt süteményből és szaloncukorból készült periódusos rendszerek születtek.

A foglalkozás fénypontja azonban a kísérleti bemutató volt, melyen a tanulók is segítettek.



Periódusos rendszer PET kupakokból



Periódusos rendszer csokoládéból

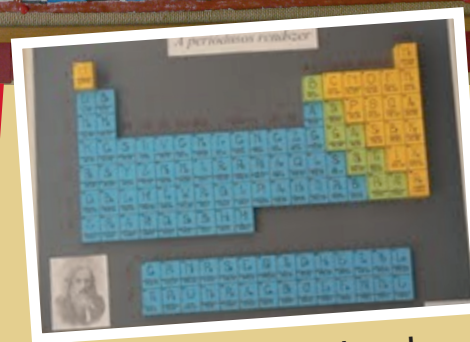


Periódusos rendszer süteményből

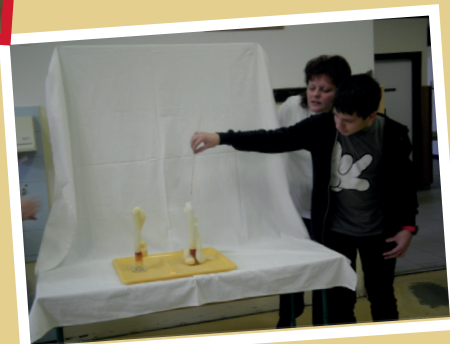
Nagy sikere volt a durranógáz nagyerejű robbanásának, a fekete kígyónak, az elefánt fogkrémnek, az éghetetlen zsebkendőnek, a vizen úszó nátriumdarabkát tartalmazó papírhajó felgyulladásának, elsüllyedésének, az ammónia szökőkútjának, a fehérfoszfor öngyulladásának, a kén-dioxid színtelenítő hatásának, az alumínium és jód reakciójában keletkező lila füstnek, valamint a virág cseppfolyós nitrogénben való viselkedésének.

Reméljük, hogy ez az emlékezetes délután még jobban felkeltette diákjainkban a természettudományok, különösen a kémia iránti érdeklődést.

Merényi Márta
kémia és fizika szakos tanár



Térhatású periódusos rendszerek



Tanulói kísérletezés



Lila füst

KÖVETKEZŐ SZÁMAINK TERVEZETT TARTALMÁBÓL:

Fűszerek és társadalom

Antibiotikum rezisztencia az őskorban

A koffein és a rák

A fullerén palack

A tanulás nem verseny

Illóolajok fertőtlenítő hatása

Munkatársaink

Rovatvezetők

Héja László (kémia a biológiában)
Lopata Antal (kémiai informatika)
Paszternák András (Re-Akción)
Tárkányi Gábor (kémia az iparban)
Varga Szilárd (szervező: kémia)
Wayand Judit (kémia az oktatásban)

E szám szerzői

Baranyai Péter
Barta Judit
Bombicz Petra
Bóta Attila
Budai Livia
Dobolyi Árpád
Gal Joseph
Héja László
Horváth Dániel Vajk
Karácsony Zsuzsanna
Komáromi István
Közegi Livia
Labancz István
Merényi Mária
Mihály Judit
Nemes László
Németh András
Paszternák András
Tátraaljai Dóra
Varga Szilárd
Vékey Károly
Villányi Attila
Wayand Judit

Kémiai Panoráma

Felelős kiadó / főszerkesztő:

Pálinkás Gábor
Kiadja az MTA Kémiai Kutatóközpont
Kapcsolat: 1025 Budapest,
Pusztaszeri út 59-67.

e-mail: panorama@chemres.hu

Tördelés-képszerkesztés: Horák Ferenc

Szalmai tanácsadó: Gózon Ákos

Terjesztő: az ELTE Eötvös Kiadó Kft.

1053 Budapest, Királyi Pál u. 18.

www.eotvoskiado.hu

Nyomdai Munka: Cerberus Ofset
és Digitális Nyomda

Honlap: www.kemiaipanorama.hu



Pálinkás Gábor
főszerkesztő



Nemes László
szerkesztő



Simonyi Miklós
szerkesztő

