



Válogatás

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya által kiválasztott, aktuális kiemelt a publikációk az omikron kötődési módjának analizésével és az aromás rendszerek közötti konjugációval foglalkoznak.

Az omikron kötődési mód: az ACE2 és omikron receptorkötő domén komplexének kontaktus- és dinamikai analizése

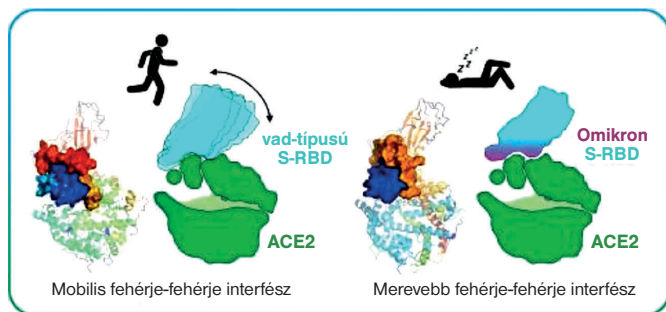
Journal of Chemical Information and Modelling, 2022, 62

Zsolt Fazekas¹, Dóra K. Menyhárd^{1,2}, András Perczel^{1,2}

¹Laboratory of Structural Chemistry and Biology, Institute of Chemistry, ELTE Eötvös Loránd University

²MTA-ELTE Protein Modeling Research Group, Eötvös Loránd Research Network (ELKH), ELTE Eötvös Loránd University

A publikációban az ACE2 fehérje és a SARS-CoV-2 egyik kulcsfehérjéjének komplexét vizsgálták számítógépes szimulációkkal. A vad típusú komplexhez képest jelentős eltéréseket találtak mind a két fehérje érintkezési felületén, mind a mozgásukban. Ez a tanulmány elősegítheti a vírus működésének pontosabb megértését, illetve antivirális szerek, például vírusellenes antitestek fejlesztését



Konjugáció 3D és 2D aromás rendszerek közt: valóban létezik? A karborán-kapcsolt heterociklusok esete

Chemical Science, 2022

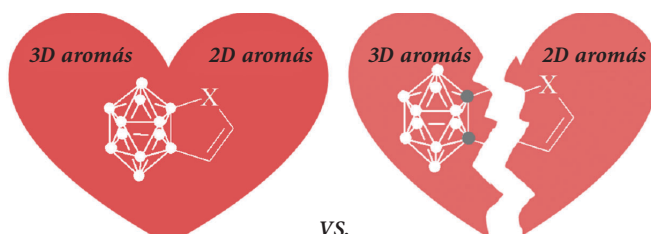
Dániel Buzsáki^{1,2}, Máté Barnabás Kovács², Evelyn Hümpfner², Zsófia Harcsa-Pintér², Zsolt Kelemen²

¹MTA-BME Computation Driven Chemistry Group, Műegyetem rkp 3., Budapest

²Department of Inorganic and Analytical Chemistry, Budapest University of Technology and Economics, Műegyetem rkp 3., Budapest

Az aromáság, amelyet az elektronok nagymértékű, kiterjedt delokalizációja okoz, meghatározó jelenség a kémiában. Számos

Perczel András osztályelnök, az MTA rendes tagja



Létezik konjugáció köztük?

közlemény jelent meg az ún. 2 és 3 dimenziós aromás rendszerek kölcsönhatásairól. Munkánk során megmutattuk, hogy valóban nem lép fel konjugáció a két rendszer közt, ami ugyanakkor lehetőséget teremt akár új katalizátorok (például hidrogéntárolás) tervezéséhez is.

TUDOMÁNY

Jubileumi vegyészmérnöki konferencia Veszprémben: 50. Műszaki Kémiai Napok

A Pannon Egyetem Mérnöki Kara 2022. április végén rendezte meg jubileumi tudományos konferenciáját a Pannon Egyetemen, Veszprémben. Az idén új helyszínen, a felújított E épületben talált otthonra a rendezvény, ahol közel 100 résztvevő több mint 80 prezentációban (előadások, poszterek) mutatta be tudományos eredményeit.

A konferencia nyitórendezvényét Németh Sándor, a Mérnöki Kar dékánja vezette le, s Gelencsér András akadémikus, a Pannon Egyetem rektora, majd Kovács Áron Zoltán önkormányzati képviselő köszöntötte a résztvevőket. A megnyitó végén a dékán virágcsokorral köszöntötte meg a szervezők (Bélafiné Bakó Katalin és Klein Mónika) munkáját.

Németh Sándor egyetemi docens a pulpitusnál

(forrás: Nagy Lajos/Napló)





OKTATÁS

Nemzetközi Kémiai Torna – hazai pályán

A hivatalos megnyitót követően Blaskó Gábor akadémikus tartotta az első plenáris előadást „Az originális és a generikus gyógyszerfejlesztések összehasonlítása szintetikus molekulák, ill. biotechnológiai termékek esetén” címmel, majd a másodikban Bakonyi Péter (Pannon Egyetem) mesélt kutatási eredményeiről („A hidrogéntől a bioelektrokémiai rendszerekig: lehetőségek és kihívások”).

A keddi nap délutánján szekcióülésekkel folytatódott a konferencia. A Bionanotechnológia szekcióban először Guttman András tartott egy keynote-előadást „The fundamental aspects of capillary sodium dodesyl sulfate electrophoresis” címmel, majd szekció-előadások következtek. Ezzel párhuzamosan került sor az MTA Műszaki Kémiai Tudományos Bizottság és a MTA Folyamatmérnöki Bizottság összevont ülésére, Gubicza László elnökletével. A keynote-előadást Bhavik R. Bakshi, a Chemical and Biomolecular Engineering, Sustainable Engineering Research Group professzora (Ohio State University) tartotta („Reinventing the Chemicals and Materials Industry for a Net-Zero, Nature-Positive World”). Az ülés után a Pannon Egyetem Folyamatmérnöki Intézeti Tanszékének 45 éves fennállására szervezett ünnepi értekezlete, illetve az MTA PE LENDÜLET Komplex rendszerek megfigyelése a negyedik ipari forradalomban kutatócsoport (2017–2022) szekciója következett.

Este a szokásos, kötetlen hangulatú fogadáson lehetett feleleveníteni a régi ismeretségeket és újakat kötni. A hosszú online időszak után üdítő volt újra személyesen megbeszélgetéseket folytatni, nemcsak szigorúan vett szakmai témákról...

Szerdán délelőtt először Bóna Áron (PE, Nagykanizsa), Visnyei Merve és Szakács Szabolcs (PE, Veszprém), valamint Jákói Zoltán (Szegei Tudományegyetem) előadását hallgattuk meg a Mémbrán szekcióban, Hodúr Cecília elnökletével, majd az MKE Mémbrántechnikai Szakosztály ülésének keretében Komáromy Péter (PE, Veszprém) PhD-házivédésén vehettünk részt. A délután során a Környezetmérnöki és Művelti szekció, valamint az Analitika szekció előadásaira került sor.

Az 50. jubileumhoz kötődően a VEAB pincéjében szervezett a PE Mérnöki Kar *Régi idők tanúi 50/100* címmel visszaemlékező ülést Szépvölgyi János vezetésével, amelynek az 50-es évfordulóhoz egy 100 éves születésnap megünneplése is kapcsolódott: Polinszky Károlyé, a veszprémi egyetem megalapítójáé. Erre az alkalomra fiai emlékkönyvet állítottak össze, amelyet szintén bemutatnak az ülésen. A rendezvényt szerény fogadás zárta, ahol a meghívottak fesztelen hangulatban folytathatták a nosztalgizást...

Csütörtökön délelőtt a napindító kávécsappék után a Biomérnöki műveletek szekcióval folytatódott a konferencia Németh Áron (BME) elnökletével, ahol a PE és a BME fiatal kutatói mutatkoztak be. Ezzel párhuzamosan a Környezetmérnöki és Művelti szekció második felvonásával folytatódott a rendezvény.

Csütörtökön az egyetem másik épületében (I épület, 7. emeleti tárgyaló) zajlott egy kísérőrendezvény is „Hulladékgazdálkodás a körforgásos gazdaságban” címmel, ahol az NKFIH 2019-1.3.1-KK-2019-00015 azonosító számú „Körforgásos gazdasági alapon nyugvó fenntarthatósági kompetencia-központ létrehozása a Pannon Egyetemen” elnevezésű pályázati projekthez kapcsolódóan hallhattak előadásokat az érdeklődők a meghívott vendég-előadóktól a megújuló energiák, hulladékgazdálkodás, víztechnológiák témakörében.

Összességében – a résztvevők nagy részének visszajelzései alapján – sikeresnek ítéltető a konferencia, mind létszámban, mind szakmaiságban megőrizte a korábbi rendezvények színvonalát.

Bélafiné Bakó Katalin

2022. augusztus 16. és 21. között ötödik alkalommal került sor a Nemzetközi Kémiai Tornára (International Chemistry Tournament, IChTo). Ez a vitaverseny minden évben különleges alkalom és élmény, ám az idei verseny több szempontból is kiemelkedő volt. Először is, három év után újra személyesen találkozhattak a csapatok (a világitárvány miatt 2020-ban elmaradt, 2021-ben pedig online formában folyt a verseny). Másodsor, a verseny idén először jutott el európai uniós országba. Harmadsor, ez épp Magyarország volt.

Hosszú hónapok kemény munkája készítette elő azt, hogy ezúttal Budapest adhatott otthont ennek a világitársenynek. A szervezés hivatalos részét a Magyar Kémikusok Egyesülete fogta össze, az esemény főszervezője Forman Ferenc volt. A verseny alapító főszervezőivel már évekkorábban megkezdődött az előkészítést, és igyekeztünk minél több új országot megszólítani a korábbi résztvevők megtartása mellett. A feladatsor összeállítását és a szabályzat pontosítását nagyrészt korábbi versenyzőinkből álló szakmai munkacsoport végezte.

Mindeközben lezajlott a hazai válogatóverseny, ami meghatározta, hogy ki lesz a 12 magyar versenyző. A felkészülés legintenzívebb szakasza természetesen a tábor volt. A tavalyi pozitív tapasztalatok után visszavágytunk Tiszafüredre, ahol Kati néni végtelen vendégszeretete mellett kovácsolódott össze a két csapat. Bár a válogatón is tapasztaltuk, hogy jelentősen emelkedett a színvonal, megdöbbentő volt látni, hogy már július elején milyen részletesen kidolgozott megoldásokkal álltak elő a leggyorsabb diákok. Persze ebben a műfajban nincs kész megoldás, mindig van mit csiszolgatni egy prezentáción, és azért az opponálás és a review elsajátítása is sok gyakorlást igényel. Erre volt is lehetőségünk, az elmúlt évekhez hasonlóan idén is az ELKH Természettudományi Kutatóközpontjában töltöttük a nyári hétvégéket. Ezúton is köszönjük a felkészítői munkát Bogner Marcellnek, Buzafalvi Dénesnek, Csoma Baláznak, Debreczeni Dorinának, Répási Gergelynek, Szappanos Attilának, valamint a felkészítést és a szakmai munkát vezető Botlik Bence főszervezőnek.

A verseny napjai mindhárom főszervezőnek a szokásosnál is intenzívebben teltek, hiszen egyszerre kellett helytállnunk szervezőként és résztvevőként is. Ahogy mindig, idén is voltak nehéz pillanatok, amelyeken át kellett lendülnünk, hogy aztán élvezhessük a felemelőbbeket. Utóbbira példa: amikor kiderült, hogy a történelemben először sikerült mindkét magyar csapatnak döntőbe jutnia. Az aranyéremről ugyan pár ponttal lecsúsztunk, de el kell ismerni, hogy a győztes szingapúri csapat megérdemelten nyerte az idei tornát. Így végül mindkét magyar csapat ezüstérmes nyert (*fényképüket lásd a címlapon*).

Az abszolút 2. helyen végzett, ezüstérmes **Hungarian Team Red** tagjai:

Saracco Lucio csapatkapitány, ELTE Apáczai Csere János Gyakorló Gimnázium és Kollégium, Budapest

Ágoston Barbara, Batthyány Lajos Gimnázium, Nagykanizsa

Cserneczky Balázs, Eötvös József Gimnázium, Budapest

Járay-Vojcek Hanna, Ciszterci Rend Nagy Lajos Gimnáziuma, Pécs

Sótonyi Adrienn, BME által alapított Két Tanítási Nyelvű Gimnázium, Budapest

Szabó Márton, Péter András Gimnázium és Kollégium, Szeghalom

Csapatvezetőjük: *Buzafalvi Dénes*, University of Cambridge



Az abszolút 3. helyen végzett, ezüstérmes **Hungarian Team Green** tagjai:

Temesvári-Nagy Levente csapatkapitány, Toldy Ferenc Gimnázium, Budapest

Hegedűs Márton, Kecskeméti Református Gimnázium

Lawson Richard Hanh, Budapesti Fazekas Mihály Gyakorló Általános Iskola és Gyakorló Gimnázium

Ódé Bence Levente, BMSZC Petrik Lajos Két Tanítási Nyelvű Technikum, Budapest

Skenderovic Szonja, Eötvös József Gimnázium, Budapest

Zsoldos Tamás, Kazinczy Ferenc Gimnázium és Kollégium, Győr

Csapatvezetőjük: *Formanné Kiss Andrea*, Szent István Gimnázium, Budapest

Bár a Nemzetközi Kémiai Torna csapatverseny, a versenyzők egyéni teljesítményükért is értékelhetők. Az egyéni pontverseny egyetlen aranyérmét *Saracco Lucio* nyerte, ezüstérmes lett *Temesvári-Nagy Levente* és *Zsoldos Tamás*, egyéni bronzérmes nyert *Csernecky Balázs*, *Ódé Bence* és *Ágoston Barbara*. A legjobb opponens különdíját is *Saracco Lucio* kapta meg, a legjobb reviewer pedig *Csernecky Balázs* volt a versenyen. Idén először kaphattak különdíjat az egyes feladatokat legjobban megoldó versenyzők: *Zsoldos Tamásé* a legmegkapóbb 1. feladat (Feels and Logs), *Ágoston Barbara* a 4. feladat lovagja (Molecular Chainmail), a 10. feladatban *Csernecky Balázs* adott mattot (Chemist's Gambit), *Skenderovic Szonjának* pedig azt dobta a kocka, hogy a döntőben adhatta elő kiváló 6. feladatát (Roll the Dice).

A sok szép eredmény és az izgalmas verseny nem jöhetett volna létre szponzoraink nélkül. Köszönetünket fejezzük ki a verseny helyszínénél szolgáló Eötvös Loránd Tudományegyetemnek, a segítőkész kapcsolattartásért pedig Szalai Istvánnak, a Kémiai Intézet igazgatójának. Köszönet az élő közvetítésekért, az interjúkért és tudósításért a Tudományos Olimpikonok Facebook-oldalának és főszerkesztőjének, Békés Gáspárnak (Fenntartható Demokráciáért Egyesület). Köszönjük az anyagi támogatást a Chemaxon Kft.-nek, az Egis Gyógyszergyár Zrt.-nek, az Iconomix Kft.-nek, a Pannonpharma Kft.-nek, a Richter Gedeon Nyrt.-nek, a Servier Hungária Kft.-nek és a Szerencsejáték Zrt.-nek. Köszönjük a szervezésben nyújtott fáradhatatlan segítséget a Magyar Kémikusok Egyesületének, elsősorban Schenker Beatrixnak és Androsits Beátának.

Ahogy a cikk elején írtam, az IChTo különleges élmény. A varázslat a részt vevő emberekben van. Hatalmas köszönet illeti mindezt a közel harmincfős szervezői csapat minden tagját!

Idén is 12 csodálatos versenyzőnk volt, akik éppúgy a varázslat részei és alkotói, mint a szervezők. Ne feledkezzünk el sem róluk, sem a mögöttük álló támogatókról. Köszönet a szülőknek, rokonoknak, barátoknak, és végül, de a legkevésbé sem utolsósorban, köszönet annak a több tucat pedagógusnak, akik elindították ezeket a fiatalokat a tudomány rögzös útján!

Formanné Kiss Andrea
főszerző

KIEMELT TÁMOGATÓK:



RICHTER GEDEON



SZERENCSEJÁTÉK ZRT.

TÁMOGATÓK:



ELKH
Eötvös Loránd
Kutatói Hálózat



Magyar Gyógyszeripártó



Tudományos
Olimpikonok



Cambridge-i tehetséggondozó programban a debreceni hallgatók

Kilenc héten át fejleszthette képességeit a Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Karának három hallgatója a Cambridge-i Egyetem képzésén. A debreceniek az elsők, akik Magyarországról bekapcsolódhattak a világ harmadik legrégebbi, folyamatosan működő felsőoktatási intézményének tehetséggondozó programjába.

A Cambridge-i Egyetem ReachSci Global címmel olyan nemzetközi képzést tart fenn, melynek célja világszerte a természet- és technológiai tudományok iránt érdeklődő egyetemisták kutatási, szakmai és személyes ismereteinek, készségeinek fejlesztése.

Az ingyenes programhoz idén a világ 20 országának egyeteméről lehetett csatlakozni. A Debreceni Egyetem Természettudományi és Technológiai Kara (DE TTK) is élt a lehetőséggel, ahonnan *Barna Döme*, *Barnáné Szabó Zsuzsanna* és *Sipos Bianka* hallgatók vettek részt a kilenc héten át tartó online képzésen. Őket a Cambridge-i Egyetem munkatársai tanulmányi átlaguk, illetve a beküldött motivációs levelek alapján választották ki.

A résztvevők kísérlettervezéssel, laboratóriumi munkával, adatelemzéssel, tudományos kommunikációval és prezentációkészítéssel foglalkoztak, valamint pályázatírással kapcsolatos előadásokon, műhelymunkákon gyarapították elméleti és gyakorlati tudásukat. Végül önálló projektet kellett megvalósítaniuk. Azt vizsgálták, hogyan befolyásolják egyes gyógyszerhatóanyagok és vitaminok a vércukorszintmérőkön mutatott értékeket. Az eredményekről később konferencián is beszámolhatnak.

Vegyipari mozaik

Kutató pedagógusokat köszöntöttek az MTA Székházban.

Idén 12 pedagógus vehette át az MTA Pedagógus Kutatói Pályadíját a pedagógia, a neveléstudomány, a társadalomföldrajz, a társadalomtörténet, a fizika- és a kémiaoktatás területén elért kutatási eredményeiért. A matematikai és természettudományok területén Pedagógus Kutatói Pályadíjban részesült: **Csernovszky Zoltán**, a Berzsényi Dániel Gimnázium tanára *Organikus naplemek a fizikatanításban (Organic solar cells and physics edu-*



ation) című pályamunkájáért; **Szokmány Csaba**, az ELTE Trefort Ágoston Gyakorló Gimnázium vezetőtanára *Tantárgyközi kapcsolatok a fizika és kémia középiskolai tanításában* című pályamunkájáért.



Szegedi kutatók a szennyvíziszap hasznosításának lehetőségeit vizsgálták. Jelenleg évente közel 200 ezer tonna szennyvíziszap keletkezik több mint nyolcszáz szennyvíztelepen. Egy uniós projekt keretében a Szegedi Tudományegyetem (SZTE) kutatói a debreceni TÁRS-95 Kft.-vel együttműködve a szennyvíziszap és a biogázüzemekben keletkező fermentációs maradék hasznosításának lehetőségeit vizsgálták, olyan reaktor prototípusát készítettek el, amelyben ilyen alapanyagokból energiahordozók állíthatók elő.

A projekt során Szegeden épült meg egy tízliteres termokémiai reaktor, mely normál nyomáson, 500 °C-on vagy 30 bar nyomáson 300 °C-on alkalmas szennyvíziszap vagy más biomassza kezelésére. Ezt követően hasonló elven működő, de nagyobb reaktort építettek a szakemberek Debrecenben.



A MET Csoporthoz tartozó Dunamenti Erőmű százhalombattai telephelyén felavatták az ország első Tesla Mega-Pack akkumulátoros villamosenergia-tároló berendezéseit.

Az avatáson Palkovics László technológiai és ipari miniszter kiemelte, hogy a villamosenergia-rendszer egyensúlyának fenntartásához és a csúcsidőszaki fogyasztás kiszolgálásához elengedhetetlen az energiatárolási kapacitás fejlesztése. A Dunamenti Erőmű vezérigazgatója, Horváth Péter véleménye, hogy a következő évtizedben az energiatárolás tényerése várható a villamosenergia-szektorban, így a mostani projektjük után a következő években további villamosenergia-tároló kapacitások telepítését tervezik.

A Dunamenti Erőmű telephelyén telepített három Tesla Mega-Pack alapú, lítiumion-akkumulátort tartalmazó konténer 7,68 megawattóra energia tárolását teszi lehetővé kétórás tárolási ciklusidővel. (<https://www.tisztajovo.hu/technika/2022/09/12/felavattak-az-orszag-első-tesla-megapack-akkumulátoros-villamosenergia-tarolojat>) **Dobó Dorina összeállítása**

MKE-HÍREK

Rendezvénytár (2022)

november 17.	Borsodi Vegyipari Nap	Miskolc
november 24.	Kozmetikai Szimpózium	Budapest
november 29–30.	HungaroCoat 2022	Budapest

MKE egyéni tagdíj (2023)

Kérjük tisztelt tagtársainkat, hogy szíveskedjenek gondoskodni a **2023. évi tagdíj** befizetéséről A tagdíj összege az egyes tagdíjkategóriák szerint az alábbi:

- alaptagdíj: 10 000 Ft/fő/év
- nyugdíjas (50%): 5000 Ft/fő/év
- közoktatásban dolgozó kémiatanár (50%): 5000 Ft/fő/év
- ifjúsági tag (25%): 2500 Ft/fő/év
- gyeseen lévő (25%): 2500 Ft/fő/év

Tagdíjbefizetési lehetőségek:

- banki átutalással (az MKE CIB banki számlájára: 10700024-24764207-51100005)
- sárga csekk az MKE Titkárságtól kérhető
- személyesen (MKE-pénztár, 1015 Budapest, Hattyú u 16. II/8.)

Banki átutalásos és csekkes tagdíjbefizetés esetén a **név, lakcím, összeg rendeltetése** adatokat kérjük jól olvashatóan feltüntetni.

Ahol a munkahely levonja a munkabérből a tagdíjat és listás átutalás formájában továbbítja az MKE-nek, ez a lista szolgálja a tagdíjbefizetés nyilvántartását.

Tájékoztatjuk, hogy a **Magyar Kémikusok Lapja** nyomtatott változatát csak azok a tagjaink kapják meg, akik 7000 Ft-tal hozzájárulnak a lap megjelenéséhez és postázásához. Kérjük, ha az online hozzáférés mellett a nyomtatott példányt is szeretné megkapni, küldje el nevét és címét az Egyesület Titkárságának (1015 Budapest Hattyú u. 16. 2/8., e-mail: mkl@mke.org.hu)

Előfizetés a Magyar Kémiai Folyóirat 2023. évi számaira

A Magyar Kémiai Folyóirat 2023. évi díja fizető egyesületi tagjaink számára 1400 Ft. Kérjük, hogy az előfizetési díjat a tagdíjjal együtt szíveskedjenek befizetni. Lehetőség van átutalással rendezni az előfizetést a Titkárság által küldött számla ellenében. Kérjük, jelezzék az erre vonatkozó igényüket!

Köszönetet mondunk mindenkinek, aki 2022-ben kettős előfizetéssel hozzájárult a határon túli magyar kémikusoknak küldött folyóirat terjesztési költségeihez. Kérjük, aki teheti, 2023-ban is csatlakozzon a kettős előfizetési akcióhoz.

HUNGARIAN CHEMICAL JOURNAL

LXXVII. No. 11. November

CONTENTS

<i>Eugene Wigner's exceptional year in Oak Ridge</i>	322
BALÁZS HARGITTAI and ISTVÁN HARGITTAI <i>The second „Momentum” —from enzymes to nanozymes.</i>	
<i>An interview with István Szilágyi</i>	326
PÉTER SZALAY <i>Continuous flow reactors and continuous pharmaceutical processing. Part III. Industrial examples. Part II</i>	328
PÉTER DEÁK, ATTILA VÖRÖS, and PÉTER MIZSEY <i>Action and effect of proton pumps.</i>	
<i>Functional electro-biochemistry of mitochondrion. Part III</i>	334
ANDRÁS RÓKA <i>On allergy and textiles</i>	338
CSABA KUTASI <i>Dear Ms Fülöp, the test-tube is neighing!</i>	342
LIZA SZÓFIA NÉMETH <i>Chembits</i>	346
GÁBOR LENTE <i>Obituary</i>	
<i>Tibor Braun has passed away</i>	348
<i>In memoriam Ibolya Molnár-Perl</i>	349
<i>Publication of the month</i>	350
<i>News of the Month</i>	350