



## HÁLÓZATOS STRUKTÚRÁK A KÉMIÁBAN

SZALAY ROLAND, PhD  
ELTE TTK, Szervetlen Kémiai Tanszék  
E-mail: szalayr@chem.elte.hu

DOI 10.23716/TT0.24.2020.21

---

### Absztrakt

A kémia központi helyet foglal el a tudományágak hálózatában. Mint az anyag atomi-molekuláris (illetve szupramolekuláris) szerveződésével foglalkozó diszciplína, fogalmainak, módszereinek, ill. elméleteinek kialakításához jelentős mértékben épít az alapozó természettudományokra (fizika, matematika), ugyanakkor számtalan eredménye a legkülönfélébb tudományterületek (pl. a biológia, a földtudományok, az anyagtudomány) ismeretanyagát gazdagítja, illetve strukturálja.

A kémia egyben rendkívüli változatossággal is rendelkezik az érdeklődési körébe tartozó objektumok számossága terén: elég csak megemlíteni azt a kb. 200 millió leírt vegyületet, mely a világ legnagyobb ilyen profilú adatbázisában szerepel, továbbá az anyagok között lejátszódó (leírt, illetve lehetséges) miriádnyi kémiai reakciót, melyek legbonyolultabb hálózatával valószínűleg éppen az élő szervezetekben lejátszódó biokémiai folyamatok esetében találkozhatunk.

Az előadásban nemcsak a fentiekben idézett, hanem a kémiával a legszélesebb értelemben kapcsolatba hozható hálózatos struktúrák világába nyerünk bepillantást.

**Kulcsszavak:** kémiai háló, adatbázis, periódusos rendszer, elemi összetétel, atomi konnektivitás, izoméria, fizikai-kémiai tulajdonság, reakciómechanizmus, kutatói hálózat, kémiaoktatás

---

### Bevezetés

Az új évezredben nyilvánvalóvá vált, hogy mind a tudományos, mind pedig a hétköznapi életben az információtechnológia által szolgáltatott rendkívül nagy mennyiségű adat generálása, feldolgozása, csoportosítása, értelmezése, felhasználása új kihívások elé állítja a kutatókat. A kihívásokra adott válaszok közül első helyen lehet említeni a hálózatokban való gondolkodás (mások szerint: a hálózatelmélet megújulásának) robbanásszerű terjedését, különös

tekintettel a „big data” jellegű problémák kezelésére.<sup>1</sup> Fokozottan érvényes ez a megállapítás a természettudományokra, amelyekben a számítógépes módszerek nemcsak hogy egyenrangú partnerei a kísérletes vizsgálatoknak, hanem számos esetben nélkülözhetetlenek az elérendő célok kitűzésében, a gyakorlati munka megtervezésében, illetve a várható eredmények előrejelzésében.

Az alábbiakban a kémiai tudomány legszélesebb értelemben vett hálózatos struktúráira mutatok be példákat tíz jól körülhatárolható téma szerint csoportosítva.

## 1. A kémia helye a (természet)tudományok hálózatában

A különböző természettudományi ágak alkotta hierarchikus hálózaton belül a kémia központi helyet foglal el.<sup>2</sup> Mint az anyag atomi-molekuláris (illetve szupramolekuláris) szerveződésével foglalkozó diszciplína, fogalmainak, módszereinek, illetve elméleteinek kialakításához jelentős mértékben épít az alapozó természettudományokra (fizika, matematika), ugyanakkor számtalan eredménye a legkülönfélébb tudományterületek (pl. a biológia, a földtudományok, az anyagtudomány) ismeretanyagát gazdagítja, illetve strukturálja. A kémia centrális pozícióját az a körülmény is jól illusztrálja, hogy — példának okáért — a könyvtári katalogizálásban gyakran használt (habár napjainkban visszaszorulóban lévő) Egyetemes Tizedes Osztályozás (ETO) a természettudományi ágakat az alábbi jelzetszámokhoz rendeli.<sup>3</sup>

- 5 Természettudományok
- 51 Matematika
- 52 Csillagászat. Asztrofizika. Űrkutatás. Geodézia
- 53 Fizika
- 54 Kémia.** Kristálytan. Ásványtan
- 55 Földtudományok. Geológia
- 56 Óslénytan. Paleontológia
- 57 Biológia
- 58 Növénytan. Botanika
- 59 Állattan. Zoológia

<sup>1</sup> BARABÁSI 2017.

<sup>2</sup> BROWN 2018; BALABAN 2006;  
[https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/archive/7/75/20200131004742%21The\\_Scientific\\_Universe.png](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/archive/7/75/20200131004742%21The_Scientific_Universe.png)  
[2020.07.10.]

<sup>3</sup> ORSZÁGOS SZÉCHÉNYI KÖNYVTÁR KÖNYVTÁRI INTÉZET: *Egyetemes Tizedes Osztályozás: UDC Publ. No. P057.* Budapest 2005.; <https://mek.oszk.hu/19600/19690/19690.pdf> [2020.07.10.]

## 2. A kémiai diszciplínák hálózata

A kémia ugyanakkor igen „adatgazdag” tudományág, rendkívül nagy változatossággal bír az érdeklődési körébe tartozó objektumok számossága terén, amely világosan megmutatkozik a mára már alaposan differenciálódott, olykor nehezen áttekinthető, de egymáshoz mégis számos ponton kapcsolódó kutatási terület kibontakozásában. Hazánkban *Bóna Ervin* munkásságának köszönhetően jelent meg egy olyan mű, amely azt a nem csekély feladatot vállalta magára, hogy az akkori fejlettségi szinten (az 1960-as, 1970-es évek fordulóján) a kémia összes említésre méltó kutatási ágát és területét hierarchikus osztályozási rendszerbe foglalja.<sup>4</sup> A szerző szerint alapvetően négy fő diszciplínára lehet felosztani a kémiai tudományt: általános kémiára, analitikai kémiára, szervetlen, illetve szerves kémiára. Leegyszerűsítve és röviden fogalmazva, az általános kémia az anyag minden olyan tulajdonságával, változásával, átalakulásával foglalkozik, amely az anyagi minőségtől — azaz, hogy konkrétan milyen vegyületről vagy elemről, mint komponensről, van szó — elvonatkoztat. Az analitikai kémia központi kérdése viszont az, hogy miként lehet meghatározni egy adott anyagmintában jelen lévő komponensek milyenségét és mennyiségét. Ebből már nyilvánvaló, hogy az anyagi minőség figyelembe vétele elengedhetetlen feltétele annak, hogy adekvát választ lehessen kapni az analízis eredményéből. A konkrét vegyületek és elemek sajátos tulajdonságait, szerkezetét, reakcióit pedig a két ún. leíró kémiai ág, a szervetlen és a szerves kémia tárgyalja. (Köztudott, hogy 1828-ban, amikor is *Wöhler* a híres ammónium-cianát—karbamid izomerizációs kísérletével megdöntötte a *vis vitalis* elméletet, ledőlt a válaszfal a szerves és a szervetlen vegyületek között.)<sup>5</sup> A fenti négyen kívül már a felsőfokú kémiaoktatásban is természetesen jóval több tantárggyal találkozhatnak az egyetemi hallgatók, mint például: elméleti kémiával, fizikai kémiával, nukleáris kémiával, kolloid- és/vagy felületikémiával, biokémiával, környezeti kémiával, asztrokémiával — és még folytathatnánk a sort.

## 3. A kémiai elemek hálózata: a periódusos rendszer

A kémia — és különösen a szervetlen kémia — egyik legfontosabb (lényegében kétdimenziós) hálózatos struktúrájának tekinthető a kémiai elemek periódusos rendszere, amely, leginkább *Mengyelejev* munkásságának

<sup>4</sup> BÓNA 1971.

<sup>5</sup> [https://hu.wikipedia.org/wiki/Friedrich\\_W%C3%B6hler](https://hu.wikipedia.org/wiki/Friedrich_W%C3%B6hler) [2020.07.10.]

köszönhetően, éppen 2019-ben ünnepelte 150 éves születésnapját.<sup>6</sup> A sorokból (periódusokból) és oszlopokból (csoportokból, illetve régebben: fő- és mellékcsoportokból) álló táblázat „prediktív erejét” jól fémjelzi az a kémiai történeti szempontból is figyelemre méltó eredmény, amely szerint *Mengyelejev* bámulatossággal jósolta meg a még abban az időben nem ismert „eka-szilícium” (azaz germánium) számos tulajdonságát, mindössze a táblázatban betöltött helye, illetve a már felfedezett szomszédos elemek hasonló sajátosságai alapján.<sup>7</sup>

	eka-Si	Ge
rel. atomtömeg	72	72,630
olvadáspont / °C	magas	938
sűrűség / g cm <sup>-3</sup>	5,5	5,323
klorid forráspontja / °C	< 100	86,5
klorid sűrűsége / g cm <sup>-3</sup>	1,9	1,879
oxid sűrűsége / g cm <sup>-3</sup>	4,7	4,228

#### 4. Az atomi konnektivitások hálózata: molekula- és kristályszerkezet

Az elemek atomjai különféle kémiai kötésekkel kapcsolódnak egymáshoz, így létrehozva az atomi konnektivitások bonyolult hálózatát: diszkrét számú atom esetében a molekulákat, (elvileg) végtelen számú esetében pedig a polimereket, illetve a kristályokat. (Megjegyzendő, példának okáért, hogy magyar nyelven a kötéstípus szerint jellemzően atomrácsnak nevezett kristályszerkezetet angolul „covalent network solid/crystal”-nak, azaz kovalens hálózatú szilárd/kristályos anyagnak nevezik.) Ha az egyik legegyszerűbb összetételű, mindössze kétféle atomból felépülő vegyületcsaládot, a szénből és hidrogénből álló szénhidrogéneket tekintjük, és

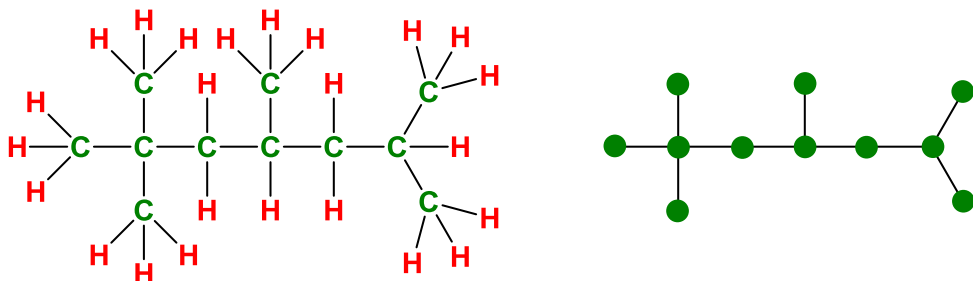
<sup>6</sup> Менделеев, Д.: Соотношение свойств с атомным весом элементов. *Журнал Русского Химического Общества* 1. (1869) 60–77.;

[https://hu.wikipedia.org/wiki/K%C3%A9miai\\_elemek\\_peri%C3%B3dusos\\_rendszere](https://hu.wikipedia.org/wiki/K%C3%A9miai_elemek_peri%C3%B3dusos_rendszere)  
<https://iyp2019.org> [2020.07.10.]

[2020.07.10.];

<sup>7</sup> [https://en.wikipedia.org/wiki/Mendeleev%27s\\_predicted\\_elements](https://en.wikipedia.org/wiki/Mendeleev%27s_predicted_elements) [2020.07.10.]

ezekben belül is az ún. alkánok (régébbi nevükön: paraffinok, összegképletük  $C_nH_{2n+2}$ , ahol  $n = 1, 2, \dots, \infty$ ) homológ sorozatát vesszük alapul, akkor  $n$  nem is túl nagy értékénél már hihetetlenül sokféle módon kapcsolódhatnak egymáshoz a C- és H-atomok azonos elemi összetételű (azaz azonos  $n$ -értékű), de különböző szerkezetű (izomer) molekulákat eredményezve: például  $n = 10$  esetében 75-öt,  $n = 20$ -nál 366319-et, illetve  $n = 30$ -nál pedig 4111846763-at(!).<sup>8</sup> A különféle izomerekben az atomok eltérő kapcsolódási hálózatát szemléletesen lehet bemutatni az ún. „molekulagráfokkal”, melyekben a csomópontok a C-atomokat, míg az élek a C-C kötésekét reprezentálják. Az 1. ábra a  $C_{11}H_{24}$  egyik izomerének (konstitúciós) képletét, illetve az annak megfelelő gráfot mutatja.



1. ábra: Az undekán egyik izomerének konstitúciós képlete és gráfja

A molekulákkal szemben a kristályokban az atomok hosszútávú, periódikusan rendezett hálózatot alkotnak, melyeket ugyanakkor különféle szimmetriaműveletek kapcsolnak egymáshoz, ennek eredményeképpen viszont az akár végtelen számú atom lényegesen egyszerűbb hálózati modellel (kristályrács) írható le.

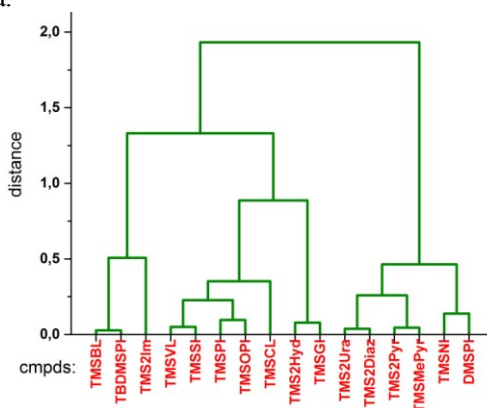
## 5. Az anyagok fizikai-kémiai állandóinak, tulajdonságainak hálózata

Az újonnan szintetizált, illetve karakterizált kémiai vegyületek száma az idővel exponenciálisan növekszik, mint ahogy arról meglehetősen pontos és naprakész információk találhatók a világ legnagyobb kémiai tárgyú adatbázisainak kezelője, az ún. Chemical Abstract Service (CAS) által

<sup>8</sup> TRINAJSTIC 2019.

üzemeltetett honlapon.<sup>9</sup> Ezen sorok írásakor, példának okáért, a regisztrált szervezetlen és szerves vegyületek száma eléri a 160 milliót, továbbá a néhány egyszerű alapvegyületből, mint monomerből (pl. aminosavakból, nukleotidokból), felépülő nagymolekulák, polimerek (pl. fehérjék, nukleinsavak) — melyek külön nyilvántartásban szerepelnek — száma pedig a 70 millióhoz közelít. Ha mindehhez hozzávesszük az egyes vegyületekre jellemző fizikai-kémiai állandók, illetve tulajdonságok számszerűsíthető értékeit, csillagászati mennyiségű adat generálására van szükség, mely probléma csak a hálózatos struktúrák keretein belül kezelhető.

Az alábbiakban egy viszonylag egyszerű, saját kutatási példán keresztül mutatom be, hogy egy vegyületcsalád (jelen esetben: szililezett gyűrűs karbonsavamid-származékok) tagjai közötti hasonlóság az adott reakciópartnerrel (*n*-oktanollal) szemben megnyilvánuló reakciókészségük (pontosabban: reakciósebességi állandójuk nagysága) alapján miként szemléltethető fa-struktúrájú diagramba, azaz dendrogramba rendezve (2. ábra).<sup>10</sup> Az adatok kiértékelése az ún. hierarchikus klaszteranalízis módszerével történt, ennek eredményeképpen kapjuk meg azt a grafikont, amelynek a vízszintes tengelyén a konkrét vegyületek (mint „falevelek”) jelennek meg, míg a függőleges tengelyen az „ágak” hosszúsága, illetve az elágazási pontok hivatottak a hasonlóság mértékét érzékeltetni.<sup>11</sup> Ennek értelmében két, tetszőlegesen kiválasztott vegyület annál inkább hasonló reaktivitású, minél közelebb van a vízszintes tengelyhez azok közös elágazási pontja.



2. ábra: Szilil-amidok csoportosítása reakciókészségük szerint

<sup>9</sup> <https://www.cas.org/about/cas-content> [2020.07.10.]

<sup>10</sup> SZALAY, R. – HARMAT, V. – EÖRI, J. – PONGOR, G.: Strong influence of intramolecular Si...O proximity on reactivity: Systematic molecular structure, solvolysis, and mechanistic study of cyclic N-trimethylsilyl carboxamide derivatives. *Tetrahedron Letters* 58. (2017):23. 2186-2192.; <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2017.04.057> [2020.07.10.]

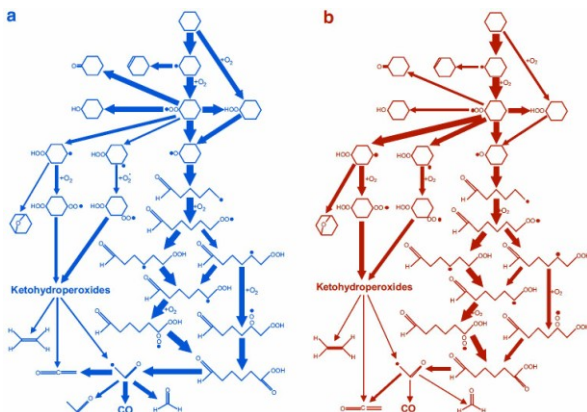
<sup>11</sup> <http://84.89.132.1/~michael/stanford/maeb7.pdf> [2020.07.10.]

## 6. A kémiai reakciók (illetve reakciómechanizmusok) hálózata

A címben szereplő hálózattípusra ékes példát szolgáltat a már fent említett CAS által kialakított és rohamtempóval bővített ún. reakció-adatbázis, mely lényegét tekintve a hálózat csomópontjaiként az egyedi anyagokat (akár mint reaktánsokat/reagenseket, akár mint köztermékeket vagy végtermékeket) veszi számba, a közöttük fennálló kapcsolatokat („éleket”) pedig a köztük lejátszódó kémiai folyamatok, reakciók reprezentálják.<sup>12</sup> Megjegyzendő, hogy az adatbázis tételeinek közel egy évtizede tartó jelentős mértékű növekedési ütemét nem feltétlenül az újonnan felfedezett reakciók egyre bővülő száma indokolja, hanem annak a számítógépes adatfeldolgozásnak az igénye, amely az 1907 óta a kémiai szakirodalomban leírt összes reakció minél teljesebb és gyorsabb regisztrálását valósítja meg visszamenőleg.

Nem lehet eléggé hangsúlyozni, hogy igen bonyolult és szövevényes hálózatot alkotnak az élő szervezetekben lejátszódó biokémiai folyamatok (metabolikus reakcióutak), melyek felderítése elengedhetetlen volt a biológiai rendszerek működésének megértése szempontjából.<sup>13</sup>

Az összetett reakciók időbeli lefolyásának (azaz a reakciómechanizmusnak) szemléltetésére tovább finomítható a hálózati gráf ábrázolási módszere: a kémiai szpecíeszeket, mint csomópontokat összekötő „reakcióéleket” vastagításával az adott folyamat relatív sebességét is kifejezésre juttathatjuk. Jó példát szolgáltat erre a 3. ábra, melyen a ciklohexán-levegő 1:2 arányú reaktív elegyére vonatkozó „szénfluxus” követhető nyomon különböző hőmérsékleten és nyomáson: (a) 200 °C, 1 bar, ill. (b) 260 °C, 0,74 bar.<sup>14</sup>



3. ábra: Égési mechanizmus két különböző hőmérsékleten és nyomáson (kép forrása: TURÁNYI 2014)

<sup>12</sup> <https://www.cas.org/support/documentation/reactions> [2020.07.10.]

<sup>13</sup> <http://www.metabolic-pathway.com/fullMap.html> [2020.07.10.]

<sup>14</sup> TURÁNYI 2014. 56.

## 7. A kémiai szintézisutak hálózata

A fent említett reakció-adatbázis létrehozásának a legfőbb célja éppen az volt, hogy a kutatók számára rendelkezésre álljon olyan eszköz, amelynek segítségével a kívánt célmolekula előállítására irányuló — várhatóan nemcsak papíron, hanem ténylegesen is járható — szintézisutak nagyobb találati pontossággal, sokkal gyorsabban és költséghatékonyabban legyenek megvalósíthatók. A kémiai szintézisek kidolgozása lényegében „hálózat a hálózatban” típusú megközelítést feltételez, melynek során a molekula egyre bonyolultabb atomi hálózatát egy vagy több reakciósorozat által képviselt reakcióhálózatba ágyazva, annak „állomásaiként” építjük fel — a „végállomás” természetesen maga lesz a célmolekula.<sup>15</sup> A számítógépes szintézistervezés logikája (retroszintetikus analízis) éppen a fordított irányú folyamatot követi, azaz a végtermék molekuláját kezdik lépésenként „szétszededegetni” egyre kisebb olyan alkotórészekre, melyek aztán lehetőleg olcsó és könnyen hozzáférhető kiindulási anyagok formájában már a kereskedelemben is beszerezhetőek (vagy legalább is egyszerűen előállíthatók).<sup>16</sup>

Érdeemes hangsúlyozni, hogy azokban az időkben, amikor még nem álltak rendelkezésre a molekulák szerkezetének pontos vizsgálatára, meghatározására alkalmas (műszeres, főleg spektroszkópiai, ill. diffrakciós) módszerek, kiemelkedő jelentőséggel bírtak az ún. szerkezetbizonyító szintézisek, melyek nem elsősorban a kívánt molekula minél hatékonyabb, nagy hozamot nyújtó előállítását célozták meg, hanem azt, hogy az egyes jól dokumentált reakciólépések folyamányaként kapott termék a rá jellemző fizikai-kémiai állandó értéke (pl. olvadáspontja stb.) alapján egyértelműen azonosítható legyen a célmolekulával.<sup>17</sup>

## 8. A kémia szerepe egyéb tudományágak hálózatos struktúráiban

A biológiai tudományon belül több diszciplína hálózatos felépítés keretében tárgyalja, rendszerezi ismeretanyagát, jellemzően ilyen pl. a növény-, ill. az állatrendszertan. Az egyes fajok törzsfjlődési rokonságát ábrázoló dendrogramok manapság már a középfokú oktatás szintjén is elengedhetetlen szemléltető eszközeivé váltak, példának okáért, az evolúciós elmélet tanításának. A többféle különböző megközelítési módnak köszönhetően ezek a leszármazási diagramok az elágazások, csomópontok helye, száma stb.

<sup>15</sup> Lásd pl. NICOLAOU 2000.

<sup>16</sup> COREY 1995.

<sup>17</sup> Lásd pl. BRUCKNER 1952-1981.



tekintetében némileg egymástól eltérő képet mutatnak, az egyik leggyakrabban hivatkozott struktúra az ún. citokróm C fehérjét felépítő aminosavak sorrendjét kódoló gén nukleotid-eltéréseinek vizsgálatán alapul.<sup>18</sup> Szemléletesen fogalmazva, az aminosavak, mint monomerek, egymáshoz kapcsolódása által létrejött (egydimenziós) molekuláris szintű hálózat egy magasabb hierarchiaszintű, evolúciobiológiai hálózatot definiál. Ennek értelmében tehát annál szorosabb a rokonság két kiválasztott faj között (másképp fogalmazva: a dendrogramon annál közelebb van hozzájuk a közös elágazási pont), minél kisebb számú eltérés található a nukleotid-, ill. az annak megfelelő aminosav-sorrendjükben.

## 9. A kémikusok kutatói hálózata

A fentiekben ecsetelt hálózatos struktúrákhoz képest merőben más jellegűekre térünk ki az esszé hátralevő részében. Mint minden tudomány hivatásos művelőinek, a kutatóegyéseknek is kialakult a saját szakmai hálózata, mely mind térben, mind időben dinamikusan változik. A letűnt korok hasonló közösségi hálózatai különösképpen a kémia történet iránt érdeklődők számára szolgálhat fontos tanulságokkal, azok vizsgálata ugyanis számos érdekes adalékot nyújthat egy-egy nagy horderejű felfedezés megszületésének körülményeihez.

A prezentáció során az előadó szűkebb szakterületéhez (a szilíciumkémiahoz) kapcsolódó kutatói „családfa” került bemutatásra, melyet a kutatási téma egyik kiváló angol művelője, *A. Bassindale* állított össze és mutatott be az 1993-ban Poznan-ban (Lengyelország) rendezett Nemzetközi Szilíciumorganikus Kémiai Szimpózium egyik kísérő brosrájában.<sup>19</sup> A fa „levelei” főként az akkoriban is aktív, nemzetközileg elismert szilíciumorganikus kémiai szakemberek voltak, míg a legfontosabbként kiemelt „csomópont” mellett *F. S. Kipping* neve szerepelt. Róla azért kell külön megemlékezni, mert gazdag munkássága révén joggal érdemelte ki a „szilíciumorganikus kémia atyja” megnevezést, holott iskolateremtőnek nem igazán tekinthető, mivel leginkább egyedül dolgozott. Sőt, szakmai tevékenységének utolsó egy-két évtizedében kifejezett csalódásának adott hangot azzal, hogy az általa szintetizált és leírt hatalmas számú szerves szilíciumvegyületet haszontalannak, az alkalmazások szempontjából

<sup>18</sup> [https://en.wikipedia.org/wiki/Cytochrome\\_c](https://en.wikipedia.org/wiki/Cytochrome_c) [2020.07.10.]; [2020.07.10.]; KULKARNI 2016.

<https://www.britannica.com/science/cytochrome-c>

<sup>19</sup> BASSINDALE 1993.

értéktelennek tartotta!<sup>20</sup> A kémiatörténet fíntoraként, ezzel szemben, pár évvel halála előtt, a szilikonok rendkívül előnyös tulajdonságainak felfedezésével, illetve azok ipari méretű előállításának szabadalmaztatásával indult el hódító útjára a Si-organikus kémia, amely napjainkban is töretlen fejlődésnek örvend.<sup>21</sup> Mellesleg visszatérve a terebélyes kutatói családfához, annak „gyökerénél” nem kevésbé ismert személyiségnek, mint a modern kori kémia megalapítójának, *A. Lavoisier*-nak a neve is felbukkan...

## 10. A kémiaoktatáshoz, ill. -tanuláshoz kapcsolódó hálózatok

Mint általában a többi természettudományi tantárgy esetében is, a kémiai ismeretek elsajátítása, alkalmazása, illetve átadása — különösképpen a mai, a digitális korszakban felnőtt és szocializálódott generációk számára — meglehetősen nagy kihívás elé állítja az egyetemi oktatás rendszerét. Sokszor hangzik el, hogy a hagyományos oktatási-tanulási formák háttérbe szorulásával az új módszerek, megközelítési módok, ill. számonkérési keretek bevezetése egyre elkerülhetetlenebbé válik, melynek aktualitása a közelmúlt járványügyi helyzetének köszönhetően még élesebben vetődött fel, mint bármikor annak előtte. Mind ezektől függetlenül, a kémiai fogalmak és összefüggések megértése, bevésése, előhívása olyan tanulótechnikai (mnemotechnikai) stratégiák kifejlesztését követeli meg az egyéntől, amelynek során az agya a befogadandó ismeretek hálózattá szervezését (tkp. a kognitív hálózatépítést) automatikusan elvégzi a tanulási folyamat részeként.

Jelen sorok írója néhány évvel ezelőtt a kari hallgatói lapban egy könnyed hangvételű, ám komoly tartalmat érintő írást tett közzé annak érdekében, hogy a hallgatók számára egy lehetséges stratégiát kínáljon a vizsgaidőszakban abszolválandó számonkéréseik minél eredményesebb teljesítéséhez.<sup>22</sup> A tanulmány a számítógépes hálózatépítés analógiája alapján nyújt vezérfonalat ahhoz, hogy a tanulási folyamat három, egymástól időben jól elkülöníthető szakaszában a vonatkozó ismeretek hatékony és tartós „összehuzalozását” miképp lehet megvalósítani. Habár a kurzusokon megkövetelt lexikális tudásanyag általában csökken, bizonyos tantárgyak, így például a szerves kémia elsajátításánál kulcskérdés, hogy a számos képlet, szerkezet, reakció, felhasználás stb. hálózati szemlélettel átítatott

<sup>20</sup> KIPPING, F. S.: The Bakerian Lecture. Organic Derivatives of Silicon. *Proc Roy Soc London* 159. (1937):896. 139-148.; <https://www.jstor.org/stable/pdf/96928.pdf> [2020.07.10.]

<sup>21</sup> KALCHAUER, W. – PACHALY, B.: Müller–Rochow Synthesis: The Direct Process to Methylchlorosilanes. In: Eds. ERTL, G. – KNÖZINGER, H. – SCHÜTH, F. – WEITKAMP, J.: *Handbook of Heterogeneous Catalysis*. Wiley-VCH, 2008. 2635-2647.

<sup>22</sup> SZALAY 2013.; [http://www.eltereader.hu/media/2013/11/nyuz4612\\_webj\\_READER.pdf](http://www.eltereader.hu/media/2013/11/nyuz4612_webj_READER.pdf) [2020.07.10.]

koherens rendszerré álljon össze a befogadó számára — jelen példánál maradva, éppen a már fentebb említett periódusos rendszer nyújt ehhez nélkülözhetetlen eszközt.

## Network Structures in Chemistry

Chemistry plays central role in the network of branches of science. As a discipline concerning to the organization of matter at the atomic-molecular (and supramolecular) level it strongly builds upon the fundamental sciences (physics, mathematics) when creating its concepts, methods, and theories, however, its countless results heavily contribute to the rich and structured knowledge of various scientific fields (e.g. biology, earth sciences, materials science).

In its own right chemistry also shows incredible diversity in its entities interested: it is enough to mention, just for example, the 200 million compounds recorded by the world-largest database of such a profile, and, moreover, the myriads of (known and potential) chemical reactions that occur between different materials; the most complex reaction network is certainly maintained by the biochemical pathways in living systems.

In the paper we gain insight into the fascinating world of networks related to chemistry in the broadest sense.

**Keywords:** chemical network, database, periodic table, elemental composition, atomic connectivity, isomerism, physicochemical property, reaction mechanism, research network, chemical education

## Irodalom

BALABAN, A. T. – KLEIN, D. J.: Is chemistry ‘The Central Science’? How are different sciences related? Co-citations, reductionism, emergence, and posets. *Scientometrics* 69. (2006):3. 615–637.

BARABÁSI ALBERT-LÁSZLÓ: *A hálózatok tudománya*. Libri Könyvkiadó, Budapest 2017.

BASSINDALE, A. R.: An abbreviated but approximately accurate scientific family tree for F. S. Kipping and some contemporary silicon chemists. *X. Nemzetközi Szilíciumorganikus Kémiai Szimpózium*, Poznan (Lengyelország), 1993.08.15–20.

BÓNA ERVIN: *A kémiai tudományok és kutatási ágak rendszerezési kérdései*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971.

BROWN, T. E. – LEMAY, H. E. – BURSTEN, B. E. – MURPHY, C. – WOODWARD, P. – STOLTZFUS, M. E.: *Chemistry: The Central Science, 14th edition*. Pearson, 2018.

BRUCKNER GYÖZÖ: *Szerves kémia I-III*. (Kucsman Árpáddal, Kajtár Mártonnal és Császár Jánossal) Tankönyvkiadó, Budapest, 1952–1981.

COREY, E. J. – CHENG, X. M.: *The Logic of Chemical Synthesis*. Wiley-Interscience, 1995.

KULKARNI, K. – SUNDARRAJAN, P.: A Study of Phylogenetic Relationships and Homology of Cytochrome C using Bioinformatics. *Int. Res. Journal of Science & Engineering* 4. (2016):3-4. 65-75.

NICOLAOU, K. C. – VOURLOUMIS, D. – WINSSINGER, N. – BARAN, P. S.: The Art and Science of Total Synthesis at the Dawn of the Twenty-First Century. *Angew. Chem. Int. Ed.* 39. (2000):1. 44–122.

SZALAY ROLAND: Hogyan készüljünk vizsgáinkra? Egy lehetséges stratégia. *Tétékás Nyúz (az ELTE TTK HÖK hetilapja)* 46. félévfolyam (2013):12. 9.

TRINAJSTIC, N.: *Chemical Graph Theory*. CRC Press, Boca Raton 2019.

TURÁNYI, T. – TOMLIN, A. S.: *Analysis of Kinetic Reaction Mechanisms*. Springer, 2014.