

Kémiai PANORÁMA

2014. évfolyam 1. szám (11. szám)

FÉNYTERÁPIA

Egy meghökkentő felhasználás

ÁLLATI EREDETŰ MÉRGEK

Mérgező állatok

FLUORESZCENCIA SPEKTROSKÓPIA

Fénnyel gerjesztett molekulák

MIT TUDSZ AZ IZOTÓPOKRÓL?

Az izotópok története és felhasználása

GYÓGYÍTÓ MOLEKULÁK

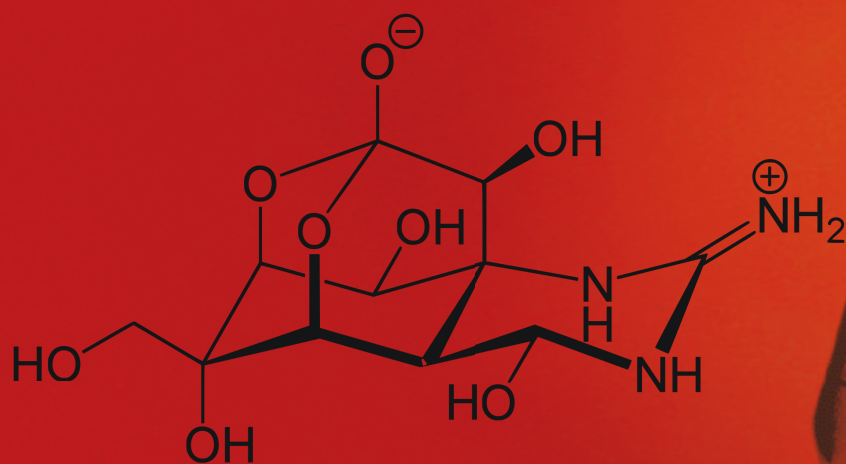
A teákról

AZ UNIVERZUM LABORATÓRIUMAI

Asztrokémia

HÍRES VEGYÉSZEK

G.A. Oláh, C.K. Ingold



Kedves Olvasónk!

A Kémiai Panoráma 11. száma igyekszik Olvasóink minden érzékszervére hatni. Hogy miként lehetséges ez egy elektronikus formában megjelenő folyóiratnál? Nos, természetesen, áttételesen, cikkeink témái révén.

Lapszámunkban kutató szerzőink tollából olvashatnak például a szemünkkel felfogható jelenségekről: a fény és a fájdalomérzet összefüggéséről vagy éppen a világító molekulák titkos-gyönyörű világáról. Aztán megtalálják az ízek kémiaiáját: a gyógynövények formájában, vagy éppen a kávékban, a mákban, a tonik italban a szekunder metabolitok formájában. Néhány cikkünk a kémiai tanároknak szól, az ő munkájukat szeretnénk segíteni velük. De megismerkedhetnek gyógyító, fájdalomcsökkentő, sőt, betegségeket előidéző molekulákkal is.

Akár csak minden eddigi számunkban: a kémiáról írunk, s közben valójában a bennünket körülvevő élő és élettelen természet egészéről folytatunk párbeszédet Önökkel, Olvasóinkkal!

A Szerkesztőség

A magazin 11. száma,
a Magyar Tudományos Akadémia és az MTA Kémiai Tudományok
Osztálya, továbbá az MTA Természettudományi Kutatóközpont
támogatásával valósult meg.



4-6 Fényterápia

A fájdalomérzet tanulmányozható
– Héja László

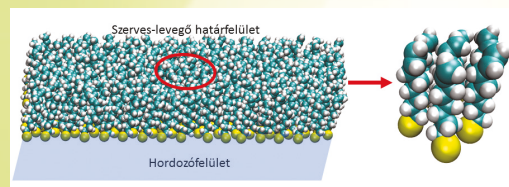


7-15 Állati eredetű mérgek

A gyógyszeripar felhasználja őket – Csákö Zsófia



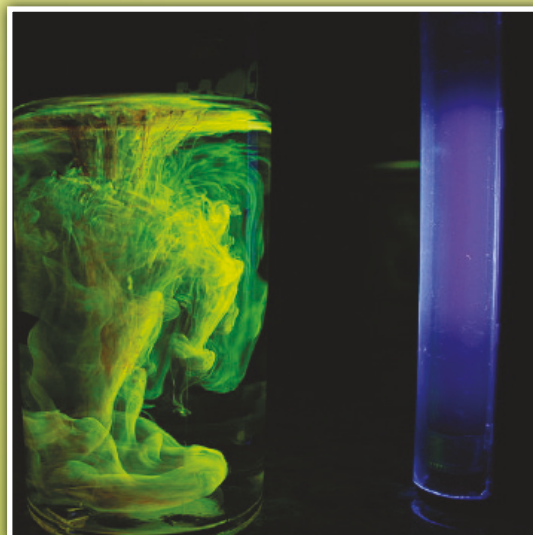
16-21 Modellszámítások kora



Kémiai szerveződés számítása – Szőri Milán,
Jórárt Balázs, Viskolcz Béla

22-25 Fluoreszcencia spektroszkópia

Elsőrendű kutatási módszerre vált – Nemes
László





26-33 Mit tudsz az izotópokról?

Egy felfedezés megértése sokszor nehézséget okozott a legnagyobb elméknek is – Simonyi Miklós

34-36 Egyszerű reakciók kinetikája

Ne bosszankodjunk, ha a diák nem azt feleli, amit elvártunk tőle – Simonyi Miklós, Mayer István

37-38 Gyógyító molekulák növényekben

Zöld, fehér, oolong és fekete tea – Kőszegi Lídia



39-40 Mikrobák az Antarktiszon

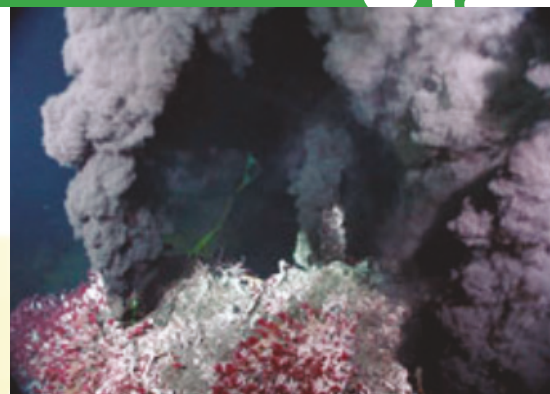
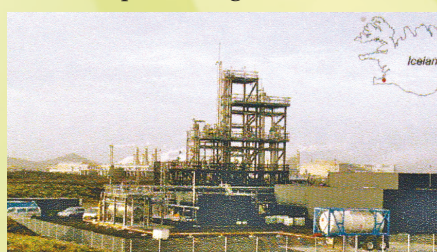
Hideg- és sótűrő ősbaktériumok – Simonyi Miklós

41 Malária

A régi nyomorúság – Simonyi Miklós

42-43 Híres vegyészek

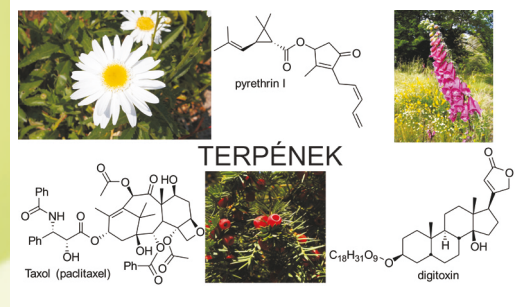
Oláh György és G.K. Surya Prakash
Sir Christopher K. Ingold



44-47 Az Univerzum Laboratóriumi

Valószínű, hogy sejtek csak óceánokkal és atmoszférával bíró bolygón alakulhatnak ki – Palinkás Gábor

48-52 Szekunder metabolitok



Segítségükkel sok új vegyületre bukkanhatunk – Varga Szilárd

53-56 Re-akció



A természettudomány népszerűsítése
Chemgeneration Roadshow – Paszternák András



Fényterápia

A fény energiáját biológiai hatássá alakító vegyületek lehetővé teszik a fájdalomérzet tanulmányozását.

A fényterápia valószínűleg sokak számára ismerős fogalom, hiszen az ókor óta szinte minden kultúrában kísérleteztek valamilyen formában a fénynek mint az élet forrásának gyógyászati célú alkalmazásával. A napfürdő mint gyógyító kúra bevett terápia volt az ókori Rómában és Görögországban, és a kínai orvosok is azt ajánlották bizonyos betegségekre, hogy a Nap felirattal ellátott zöld papírt kezükben fogva álljanak ki a férfi páciensek a kora reggeli napfénybe (a nőknek érdekes módon a holdfényben kellett ugyanezt tenniük).

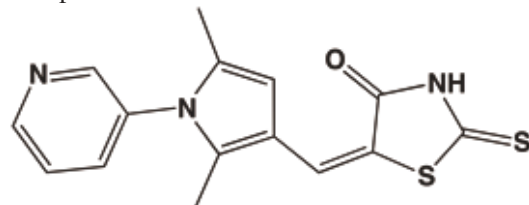
A tudományos ismeretek terjedésével ezek a praktikák természetesen feledésbe merültek, de a fény természetének megismerésével új utak is nyíltak az orvosi felhasználás előtt. A prizma felfedezése és a fény különböző hullámhosszú komponensekre való felbontása révén ugyanis felismerték, hogy a nagyobb energiájú, elsősorban az ultraibolya tartományba eső fénysugarak antibakteriális hatásúak, így gátolják a fertőzések terjedését. Az ilyen irányú orvosi alkalmazás úttörője volt a Nobel-díjas izlandi Niels Finsen, aki a XIX. század végén sikeres fényterápiás módszert dolgozott ki a bőrtuberkulózis kezelésére. Balszerencséjére azonban Izland éghajlata nem igazán kedvezett a fényterápiának, így kapóra jött, hogy épp abban az időben jelen-

tek meg a különböző mesterséges fényforrások, elsősorban pedig a higanygőz lámpa, ami lehetővé tette a megfelelő hullámhosszú fény helybeli előállítását.

Az azóta eltelt időben ugrásszerűen megnövekedett a fényforrások választéka. Különösen pedig megjelentek a lézerek, amik révén kiaknázható a fény szerepe, mint energiahordozó és fontos kutatási eszköz. A fénnel történő energiaközlés egyik rendkívül nagy előnye ugyanis, hogy térbelileg nagyon pontosan kontrollálható, így lehetőség van egyedi sejtek, sőt a sejtnél is jóval kisebb területek, vagy akár egyedi fehérjék célzott aktiválására. Ennek a lehetőségnek a kiaknázására született meg az optogenetika tudománya (ld. *Távírányított idegsejtek* című cikkünket a Kémiai Panoráma 8. számában). Az optogenetikai módszerek segítségével olyan ioncsatornákat juttatnak be genetikailag módosított állatokba, amelyek lézer fény hatására aktiválódnak, vagy éppen lecsendesítik az idegsejteket és ezáltal lehetővé teszik kiválasztott sejtek funkciójának vizsgálatát, megértését. Fontos korlátja azonban a módszernek a genetikai módosítás szükségessége. Ez ugyanis egyrészt időigényes és bonyolult eljárás, másrészt megakadályozza, hogy ezeket a módszereket idővel diagnosztikai vagy épp terápiás célból embereknek is alkalmazzák.

Genetika helyett kémia

Sokkal egyszerűbb lenne, ha idegen fehérjék bevitelével helyett az egyes élőlényekben meglévő fehérjék aktivitását tudnánk tetszés szerint szabályozni. Ehhez egy olyan vegyületre van szükségünk, ami fény hatására aktív állapotba alakul és így képes a szervezet különböző funkcióit specifikusan befolyásolni. Egy ilyen molekula családot, a bebörtönzött glutaminsavakat már korábban bemutattuk (ld. *Börtönbe zárt molekulák* című cikkünket a Kémiai Panoráma, 5. számában), most pedig egy újabb vegyületről, az eddig ismeretlen optovinről számolunk be.



Az optovin szerkezete, Nature Chemical Biology, 9: 257–263 (2013)

Amerikai és kínai kutatók nem bízták a véletlenre, hogy egy ilyen fontos vegyületet találjanak, egy biológiai tesztben 10 000 molekulát vizsgáltak végig, hogy végül felismerjék közöttük azt az eget, ami megvilágítás hatására



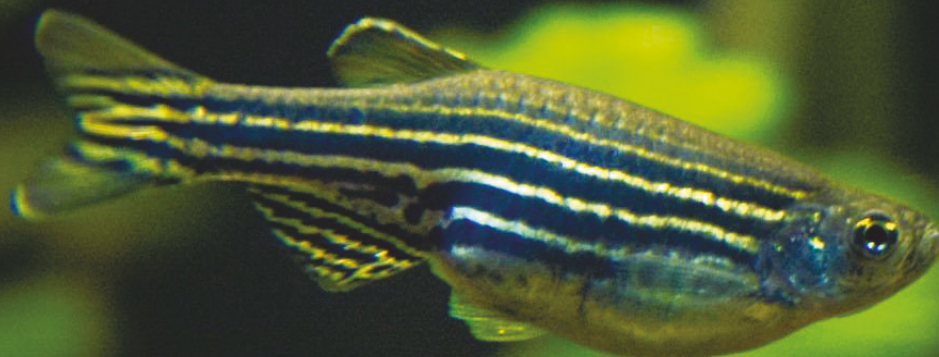
képes befolyásolni zebrahalak mozgását. A zebrahalak kiválóan alkalmasak arra, hogy a fényre történő aktiválódást határozzuk meg rajtuk, ugyanis emellett, hogy jól tenyésztethetők, életük első 3 napjában teljesen vakok, így a megvilágítás önmagában nem befolyásolja a viselkedésüket. A kísérletek során azonban megfigyelték, hogy az optovin nevű vegyület jelenlétében a fényfelvillanást követően a halak vadul úszkálni kezdtek, ami egyértelműen arra utalt, hogy a vegyület és a fény együttes hatására aktiválódtak az izomfunkcióik. Az olyan korai embriók, amelyek még nem láttak, reagáltak az optovin és a fény együttes jelenlétére, igazolva, hogy a megnövekedett aktivitás nem kizárólag a felvillanás hatására lépett fel.

Hogy végképp megbizonyosodjanak afelől, hogy az optovin a fény hatására közvetlenül aktiválta az izomösszehúzódást, a kutatók egy régi és meglehetősen szürreális módszerhez

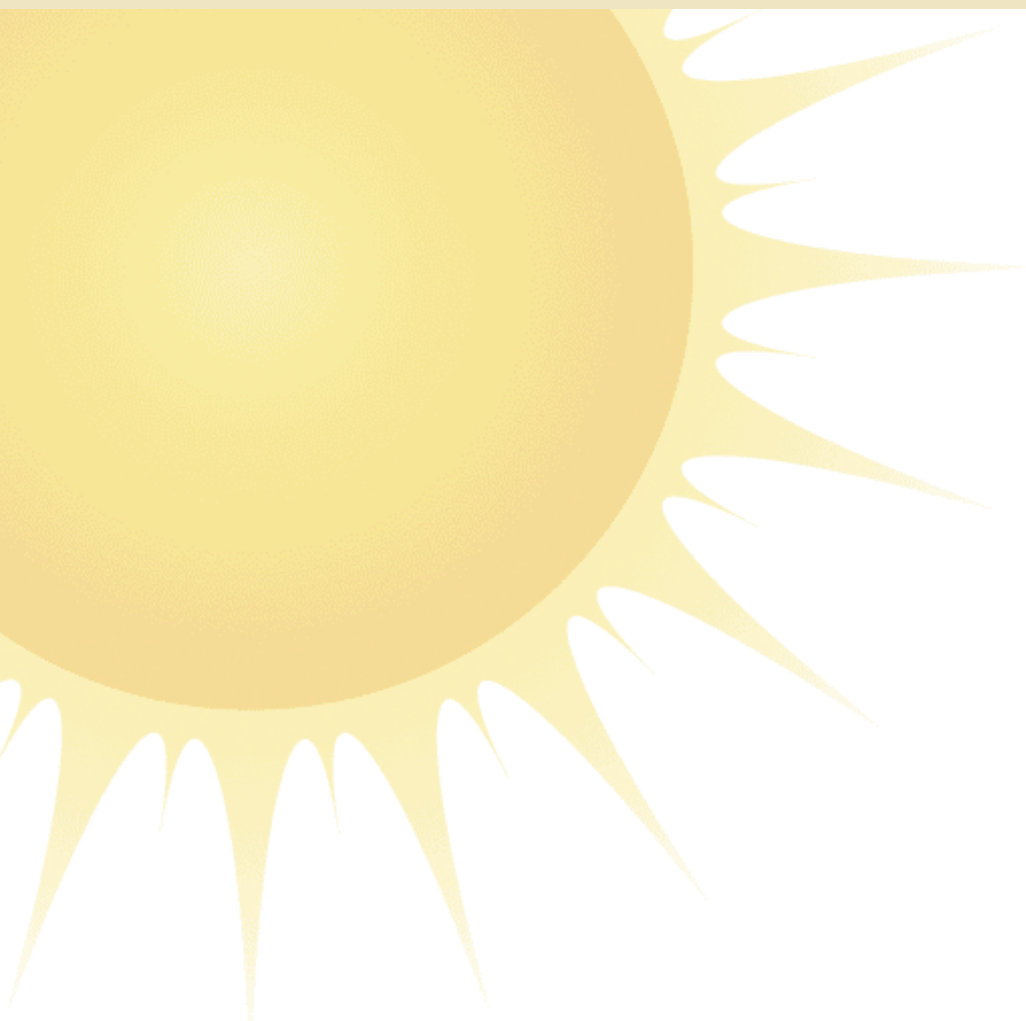
folyamodtak. A halak úszó mozgását nem az agy, hanem közvetlenül a gerincvelőben elhelyezkedő „központi ritmusgenerátor” vezérli, aminek

”
Egy kémiai
vegyületet és a
fény energiáját
felhasználva fontos
eszközt kaptunk a
kezünkbe.

”



Zebrahal



köszönhetően az állat akkor is folytatni tudja az úszást, ha az agya és gerincvelője közötti kapcsolatot elvágják, ami egy embernél nyilvánvalóan teljes bénulást jelentene. Az ily módon „kezelt”, spinalizált, azaz gyakorlatilag lefejezett zebrahalaknál is ki lehetett váltani a törzs, a farok és az uszony mozgását, amennyiben optovin jelenlétében 405 nm-es lézer fénnel

világították meg a megfelelő területet, a kiváltott mozgás pedig nagyon hasonló volt ahhoz, mint amit normál úszás közben meg lehetett figyelni.

Távirányított receptor aktiválás

Annak kiderítésére, hogy miképpen

okozza megvilágítás hatására az optovin az izom aktivációt, a kutatók számos szoba jöhető fehérjét stimuláltak azok specifikus aktiváló vegyületeivel. Azt találták,

hogy az optovin azokat a sejteket serkenti, melyek a TRPA1 nevű receptor fehérjét is tartalmazzák, vagyis feltehetőleg ez az a fehérje, amit az optovin aktivál. De miért csak megvilágítás hatására teszi ezt és miért nem működik a vegyület sötétben?

Amikor egy molekula fényt nyel el, a fotonok a molekula elektornjait gerjesztve azokat az alapállapotból egy magasabb energiájú állapotba juttatják. Az így fotoaktivált vegyületek azután különböző módokon reagálhatnak a környezetükben jelen lévő más molekulákkal. A gerjesztés hatására bekövetkező egyik leggyakoribb jelenség az, hogy úgynevezett szingulett oxigén és egyéb reaktív oxigén gyökök jönnek létre, amelyek reakcióba lépnek a környező fehérjékkel és kis molekulákkal általában károsítva azokat. Esetünkben azonban nem a létrejövő reaktív oxigén gyökök voltak felelősek az izom aktivációért, ugyanis semlegesítésük esetén is létrejött a fénnel kiváltott mozgás. Ehelyett az optovinból felszabaduló molekularész az, ami felelős az élettani hatás kialakulásáért, mivel aktiválja a TRPA1 receptorokat, ami végül egy bonyolult kaszkádot elindítva kiváltja az izom összehúzódást – ráadásul nem csak halakban, de egerekben is.

A TRPA1 receptor ráadásul nemcsak az izom működésben vesz részt, hanem annál jóval általánosabb szereppel bír, gyakorlatilag minden érző idegsejten megtalálható és fő feladata, hogy közvetítse a sejt számára a külső ingereket. Különösen fontos, hogy ebben a szerepében részt vesz a fájdalom kialakulásában is, ami jelenleg az idegtudománynak egy nagyon kevésbé feltárt területe. Egy egyszerű kémiai vegyületet és a fény célzott energiáját felhasználva fontos eszközt kaptunk a kezünkbe, hogy ezáltal a fájdalomérzet megszületését jobban megérthessük, és idővel tanúi lehessünk egy új tudományág, az optofarmakológia születésének.

Héja László
MTA TTK

Forrás: <http://www.kurzwelai.net/images/optovin1-140x64.jpg>



Spinalizált zebrahal mozgása optovin jelenlétében fény felvillanás hatására



Állati eredetű mérgek

Félelmetes állatok a hollywoodi kaland- és horrorfilmek gyakori szereplői. Filmekben szállták már meg a Földet gyilkos méhek és hangyák is... de vajon jogos-e a félelmünk? A mérgező állat a prédaszerzésen túl csak akkor fordul az ember vagy más élőlény ellen, ha veszélyben érzi magát. Az állati mérgeket viszont a gyógyszeripar felhasználja. Az állatok szervezetében olyan anyagok termelődnek, amelyeket a vegyészek sok éves kutatómunkával képesek csak szintetizálni.

A toxikus szó Dioszkoridész görög katonaeorvos szerint a toxon (τόξον), azaz nyíl szóból ered, ami a mérgezett nyíllak alkalmazására utal. A mérgek használata igen régre nyúlik vissza. A sumér ékírásokon, az egyiptomi hieroglifákon számos, mérgekkel kapcsolatos gyógyászati leírást is találunk. Az i.e. 1550-ben keletkezett Ebersz papiruszok több, ma is ismert mérgeanyag leírását tartalmazza. A történelem során polihisztorok foglalkoztak a mérgek különleges világával. Kiemelkedő méregszakértő volt *Galenus* (i.u. 129 ~ 200), *Paracelsus* (1493 – 1541) és *Francis Bacon* (1561 – 1626). *Paracelsus* szerint: „a mennyiség teszi a mérget”, ami mai szóval a dózis fontosságára utal. A mérgek szerepe a történelemben igen változatos. Míg sokan gyógyhatású

készítménynek kifejlesztésén fáradoztak, addig mások mérge segítségével haragosaiktól, ellenségeiktől akartak megszabadulni. Már a görög mítoszokban is megjelent a mérgek használata: a haldokló Nessus (kentaur) vérével átitatott ing ölte meg Héraklész. A történelem sok olyan sze-

replőt tart számon, akik saját maguk ellen fordítottak állati mérgeket; a Kleopátra esetében sokat vitatott „kígyómarásos öngyilkosság” is ilyen.

Élővilágunk tele van olyan különleges állatfajokkal, amelyek szervezete mérget állít elő. Az állati mérgeket *zootoxinoknak* nevezzük. A csípéssel, vagy harapással a bőr alá jutatott mérge angol neve: *venom*. Az állatok mérgeanyagai általában összetett kémiai vegyületek, amelyek toxicitása fajoként eltérő. Egyes állati toxinok csak helyi elváltozást okoznak (apró kis pírt a bőrön), míg mások akár halálosak is lehetnek. A toxikus állatok mérgetermelésének több oka is van. Az egyik ok a *védekezés*. Sok állat egyfajta vegyi fegyvert fejleszt ki a rá vadászók ellen. Ilyen például a méhek, hangyák csípése. A másik ok a *táplálkozás*, a kígyók, pókok, csak így képesek zsákmányukat legyőzni és táplálékukat biztosítani.

védekezést vagy
zsákmányszerzést
szolgálnak



Kleopátra halála

Forrás: <http://www.kronika.ro/index.php?action=cpe&res=1894>

Ízeltlábúak

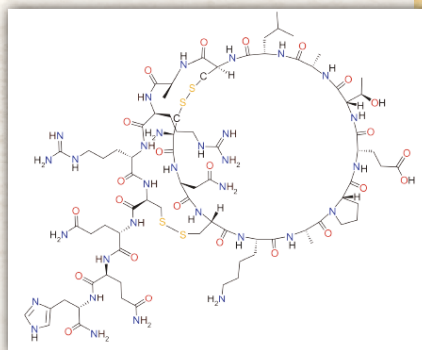
Egyes rovarok igen bonyolult mérgekészülékkel rendelkeznek, míg mások vérszíváskor juttatnak a szövetekbe irritáló, viszkető érzést előidéző anyagokat. Az utóbbiak kevésbé mérgesek (kullancsok, szúnyogok, poloskák), csípésük általában veszélytelen, de képesek súlyos fertőzéseket is terjeszteni (lyme-kór, vírusos agyhártyagyulladás, malária, álomkór, lásd Ígéretes molekulák című cikkünket a Kémiai Panoráma 3. számában).



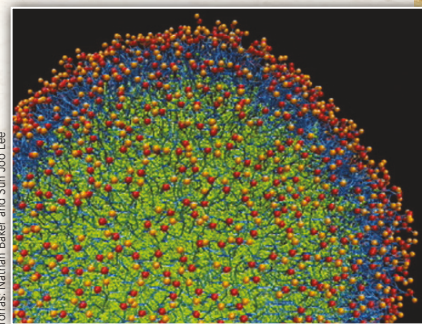
A nálunk leggyakoribb kullancs: Ixodes ricinus

A méhek és darazsak a hártás szárnyú repülő rovarok közé tartoznak. Mindkét rovarnak a potrohukon elhelyezkedő fullánkja van, amit a méhek védekezéskor, a darazsak főként területvédelmi okokból használnak. Összetett mérgekészülékükből fecskendezik az áldozatukba a mérgeanyagot a mérgecsatornán át. A mérge pontos összetétele a mai napig nem ismert, de tartalmaz peptid neurotoxint (apamin, melittin) és enzimeket (foszfolipáz, hialuronidáz). A melittin egy 26 aminosavból álló oligopeptid, ami gátol létfontosságú enzimeket és fokozza a

sejtmembránok áteresztőképességét, ugyanakkor elpusztít számos kórokozót (Borrelia burgdorferi, a lyme-kórt okozó baktérium, Candida albicans, gomba). Legújabban a melittint nanotechnológia segítségével alkalmazták tumor sejtek elpusztítására. Az egészséges sejtek védelmére a melittint kicsiny nanogömbökbe zárják (nanoméhek), amelyek a véráramban keringenek, amíg rákos sejttel nem találkoznak, ekkor felnyílnak és a sejtet elpusztítják.



Apamin, a méhmérge egyik komponense

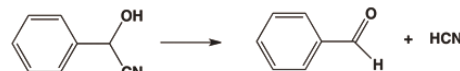


Nanoméhbe zárt melittin

Aki túl érzékeny a méhmérge, annak szervezetében már pár csípés nyomán allergiás reakció léphet fel, amit általában adrenalin terápiával szoktak kezelni. Nagy mennyiségű méhmérge komoly problémákat tud okozni, értágulathoz és súlyos sokkhoz vezethet. A méhmérge antimikrobiális tulajdonsága segít

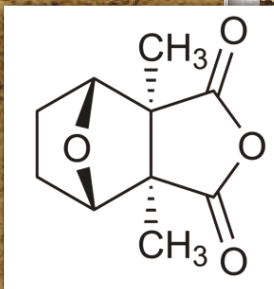
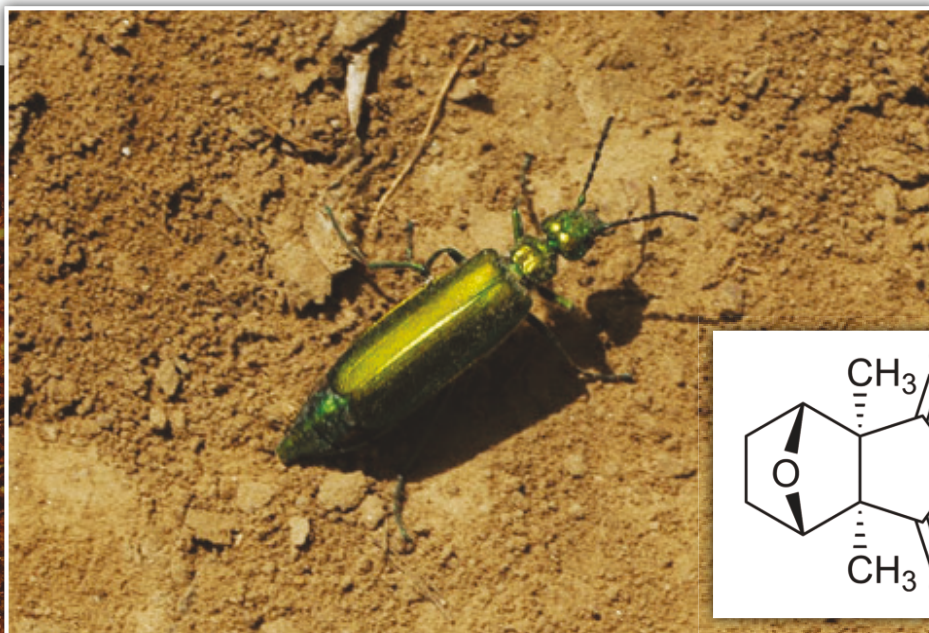
megőrizni a tárolt méz minőségét. Megfigyelték, hogy a méhészek körében ritka az ízületi betegség. A méhmérge gyulladásgátló hatása mellett ennek oka lehet a mellékvese kéreg kortizon-termelésének serkentése is.

A százlábúak valamennyi forró és mérsékelt égővi területen előfordulnak. Jellemző rájuk a szelvényezett test, a fejükön lévő mozgékony csáp és a lapított test. Ijesztő kinézetük ellenére hasznos állatok, megszabadítják a kerteket a kártevőktől. A százlábúak akár 30 centiméter hosszúra is megnőhetnek. Lábaik száma 15-101 pár, ha egyik végtagjukat elvesztik másik nő helyette. Legfontosabb fegyverük az első lábpárból módosult, hegyes, szúrós alakú mérge miriggyel rendelkező szerv. Ezzel ejtik el táplálékukat, a mérge az áldozat testébe jutva bénulást okoz. Rugalmas rekeszeik mandulasav-nitril emulziót tartalmaznak, amelyből enzimkatalizálta reakcióban hidrogén-cianid (sejtmérge) szabadul fel. A trópusi fajok csípése ödemás duzzanatot és helyi bénulást okozhat.



Mandulasav-nitril átalakulása benzaldehiddé és hidrogén cianiddá

A kőrisbogár 1,5 cm hosszú kellemtelen szagú, selyemzöld színű rovar. Orgonabokrokon kőrisfán májusi, júniusi hónapokban tömegesen megtalálható. Hólyaghúzó bogárnak is nevezik, mert a vérében lévő anyag, bőrre kerülve hólyagosodást okoz. Mérgeanyaga egy savanhidrid, a kantaridin. A kőrisbogár mérge vérbőséget okoz, felszívódhat a bőrön és a tápcsatornán keresztül is. Kenőcsök alkotószereként gyógyászati alkalmazást nyer reuma kezelésében. A



Kőrishogár

kantaridinnal fertőzött állatok húsának elfogyasztása is okozhat rosszullétet. Ezért az istállóba szórt takarmányt meg kell tisztítani a lucerna közé keveredett bogaraktól. A mérég heregyulladás és vérhast okozhat. Védekezés céljából kantaridint termel még a katicabogár, a nünüke és a hollóbogár.

A hangyák családjának (Formicidae) több ezer faja ismert, általában kistermetű, fekete rovarok, de a trópusokon találkozhatunk óriási, különböző színű alfajokkal is. A hangyák igen fejlett társadalmi életet élnek, úgynevezett bolyokat alkotnak. A hangyákat nem szokás a mérges rovarok közé sorolni, fullánkja is csak kevés fajnak van, de veszélyhelyzetben meg is marhatják az embert. Mérjük fő alkotórésze az erősen maró hatású hangyasav, ami könnyen okozhat a bőrön irritáló, piros sebet. A hangyák méreganyaga testük 12-18%-át is kiteheti. Egy-két amerikai hangyafaj mérge az emberre is veszélyes. Érdekesség, hogy veszély esetén az erdei vörshangyák százával rohannak elő a bolyuk felületére és négy lábon állva fecskende-

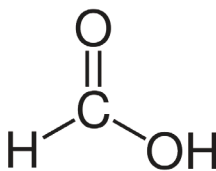
Kantaridin

zik ki a mérgeket a levegőbe, így egyfajta hangyasav felhőt hozva létre.



Hangyák

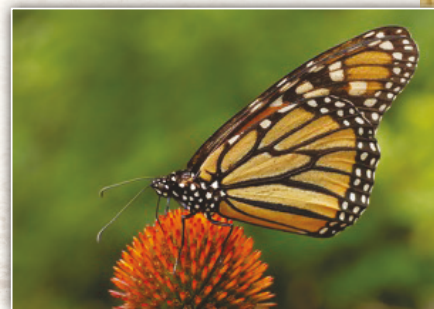
Hangyasav (formic acid)



A rovarok egyik legváltozatosabb és legszínesebb táborába tartoznak a lepkék. Mintegy 150 000 alfajt jegyeztek eddig le, ebből 3500 él a Kárpát-medencében. Szárnyaik fesztávolsága

néhány millimétertől 30 cm-ig terjed és fantasztikus, tarka színekben pompáznak. Ennek a szín kavalkádnak több szerepe is van (védekezés, udvarlás, rejtőzködés. A látványos külső ellenére, vannak köztük igen mérgező egyedek is.

A pompás királylepké (nagy búzalepke, *Danaus plexippus*) a tarkalepkék egyik legismertebb és legkülönlegesebb életmódú faja. Nyáron az amerikai Nagy-tavak környékén él az USA-ban és Kanadában, de a telet Mexikóban tölti. Bár a lepkék életciklusa csak néhány hónap, minden ősszel és tavasszal mintegy kétszázmillió lepke indul 3500–5000 km-es útjára a fajfenntartás érdekében. Gyönyörű narancsos-fekete szárnyai figyelmeztetik a rá vadászókat, hogy a királylepké mérgező. Méreganyagai szívre ható glikozidok (pl. oleandrin), melyek védetté teszik őket a rájuk leselkedő ragadozók ellen. A petékből

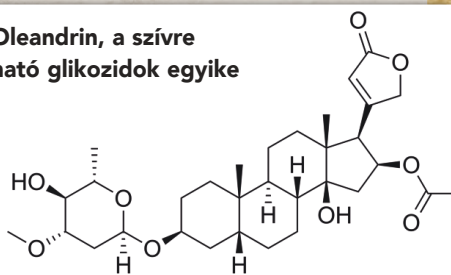


A pompás királylepké és hernyója



A selyemkóró virága

Oleandrin, a szívre ható glikozidok egyike



kikelt lárvák egy különleges növény-nyel, a selyemkóró (*Asclepias incarnata*) leveleivel táplálkoznak, innen nyerik ki a méreganyagot, ami védekezést ad a kifejlett lepke számára.

A mérges pókokat az ízeltlábúak osztályába soroljuk, de nem rovarok, aminek oka négy pár lábuk. Kevés kivétellel ragadozók. Prédájukat általában tökéletesen megkomponált fogóhálójukkal ejtik rabul. A pókháló rugalmas és erősebb az acélnál, anyaga fehérje, a potrohon lévő szövőszemölcsök váladéka. A pókok a testükön található méregmirigyekkel bénítják meg zsákmányaikat. Az emberre nézve nem veszélyesek, a ház körül kifejezetten hasznosak, elpusztítják a legyeket, szúnyogokat. Méregváladékukat veszélyhelyzetben képesek védekezésre használni, így akár az embert is megtámadhatják. A legtöbb pók csípése – egy-két kivétellel – nem okoz komoly károkat az emberi szervezetben. Az egyik hír-

hedt pókfajta a világ melegebb éghajlatú területein előforduló fekete özvegy (*Latrodectus*). Nevét onnan kapta, hogy a párzás után felfalja a kisebb testalkatú hímét. Külsője is félelemre ad okot, a fekete alapon vörös pöttyös pók joggal ilyen ijesztő. A fekete özvegy mérge az emberre is igen veszélyes. A 15 csörgőkígyó harapásánál is erősebben mérgező α -latrotoxin egy fehérje molekula tetramerje, ami gerincekre szelektív idegméreg, erős görcsöket idéz elő, hányingert, izomfájdalmat és rekeszizom-bénulást okoz. Harapás esetén azonnal orvoshoz kell fordulni, ugyanis kezeletlen esetek fulladásos halállal is végződhetnek. A fekete özvegy csak akkor támad, ha megijeszti, vagy valamilyen okból veszélyben érzi magát, harapásának amúgy csak a bogarak vannak kitéve, illetve párja: a hím fekete özvegy.



Fekete özvegy

Brazíliai párdücpók



A brazíliai párdücpók mérge erősebb a fekete özvegyénél. Váratlan hatása a megmart férfiaknál tapasztalt merevedés, amiből egy – az USA Georgia Orvostudományi Egyetemén működő – kutatócsoport gyógyszert remél kifejleszteni. A pókméregből



Ázsiai erdei skorpió

A skorpió faroktövisé



Forrás: <http://en.wikipedia.org/wiki/Scorpion>

izoláltak egy 48 aminosavból álló Tx2-6 nevű peptidet, aminek nitrogén-oxidot termelő, erekciót okozó hatását patkányokban igazolták.

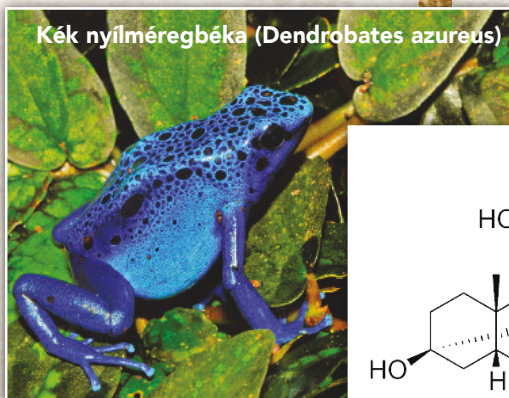
A skorpiók faroktövisseikkel fecskendezik be áldozataikba a mérget. Méretük 6 – 20 cm. A pici skorpió aránylag apró faroktövissel rendelkezik, így kisebb mennyiségű mérget képes áldozataiba belefecskendezni. A kis méretet azonban mérgeének erőssége ellensúlyozza. A mérge hatóanyaga molekulák keveréke, enzimekből (hialuronidáz, foszfolipáz) és mérgező fehérjéből (toxalbumin) áll, amelyek az idegsejteken lévő nátrium (Na) csatorna működését gátolják. A skorpió az első támadásban kiadja mérge nagy részét, amit csak idővel képes újratermelni. Hűvös helyen a mérge nem annyira hatásos, mint a trópusi, száraz égővön. Hidegvérű állatokban a mérge csak kisebb pusztítást végez. A skorpió méregtövisét általában táplálékszerzésre használja, de veszélyhelyzetben megtámadhatja az embert is. A skorpió csípése hányingert és légzési görcsöket okozhat. Az Észak-Afrikában élő vastagfarkú skorpió mindössze 10 centiméter, de igen veszedelmes ragadozó. Nevét zömök, széles farkáról kapta, aminek végén méregmirigyhez kötődő erős tüske kapcsolódik. Rovarokkal,



pókokkal táplálkozik, amelyeket erőteljes ollóival ragad meg, majd mérget befecskendezi áldozatába. A mérge azonnal megöli az állatot. A vastagfarkú skorpió az emberre is igen veszélyes főleg a nőkre és a gyerekekre, évente több haláleset is okoz.

Kétéltűek

A mérgező kétéltűek többsége a ráleselkedő ragadozók ellen védekezik mérgével, erre figyelmeztet a színes, feltűnő külső. A békák (mintegy 3500 faj) közös jellemzője, a lapított test dülledt szemek, széles, nagy száj és a hosszú ugrólábbá fejlődött hátsó végtagok. Szemük érzékenyen ismeri fel a színeket, mozgó tárgyakat. Rovarokkal, csigákkal, pókokkal és férgekkel táplálkoznak. Zsákmányukat hosszú, gyors nyelvükkel kapják el, majd a szájüregben lévő mirigyek váladékával puhítják fel. A Dél-Amerikában honos *Dendrobates azureus* (kék nyílméregbeka) gyönyörű színe mellett igen erős mérgével tűnik ki. Mérget indián törzsek használták, amit fűvócsóveikből kilőtt nyilaik végére kentek. Mivel a mérge hőre bomlik, a nyíllal elejtett, majd megsütött állat már nem mérgező. Egy átlagos felnőtt egyed 2200 ember elpusztításához elegendő mérget tartalmaz.



Kék nyílméregbeka (*Dendrobates azureus*)

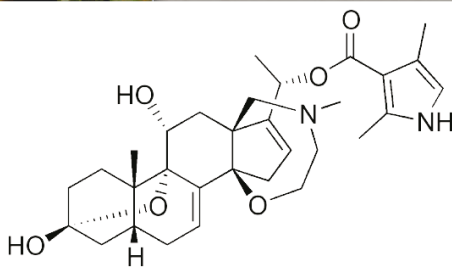
mel. A váladék aktív összetevői szteroid típusú alkaloidok, Batrachotoxin és Homobatrachotoxin.

A nyílméregbeka mérge meggátolja, hogy az idegsejtek ingerületet adjanak át egymásnak így az izmok lebénulnak, a halált rendszerint szívreleállás okozza. Hatása szinte azonnali, ellenszere nincs. A béka bőrében raktározott mérgeanyagok nagyon nehezen bomlanak le, egyes beszámolók szerint csirkék és kutyák is elhullottak, miután olyan papírlaphoz értek hozzá, amin előzőleg egy nyílméregbeka sétált át. A békák nem maguktól szintetizálják mérgeiket, hanem táplálékukból viszik be hangyákból, atkákból, ezerlábúakból. A mérget koncentrálik, majd elraktározzák mirigyeikben. A terráriumban tartott nyílméreg békák viszont elveszítik mérgező képességüket, ami valószínűleg a táplálkozásra vezethető vissza. A méregből izolált egyes alkaloidokat az asztma és az epilepszia gyógyítására hasznosítják.

A nem éppen higiénikus körülmények között élő békák sérülés esetén nem pusztulnak el, aminek okai a békák által termelt antimikrobás hatású peptidok, a caerin és maculatin. Ezeket a gyógyszerkutatók megkísérlik a HIV- vírussal szemben alkalmazni.

A morfinnál 200-szor erősebb fáj-

és egyik mérgeanyaga:
Batrachotoxin

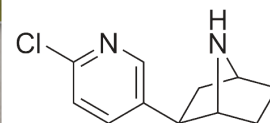


dalomcsillapító hatású epibatidint tartalmazó equadori *Epidobates tricolor* nevű béka az 1970-es években a kihalás szélére került és ezért mérgeének kutatása a béka nemzetközi védelme miatt nehézségekkel járt. Az ezredforduló végére az analitikai módszerek fejlődése lehetővé tette kicsiny mennyiségű minták analitikai vizsgálataát, az epibatidin szerkezetének felderítését és kémiai szintézisét. Kiderült, hogy az epibatidin nem opiát szerkezetű vegyület és nem okoz függőséget. Hátránya viszont, hogy a terápiás és toxikus dózis nagyon közel esik egymáshoz, ezért az epibatidinból sosem lesz gyógyszer.

Az equadori béka, *Epidobates tricolor*

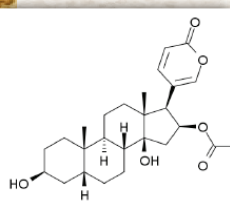


Epibatidin

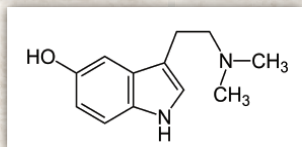
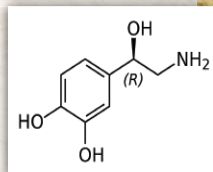
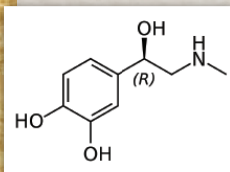
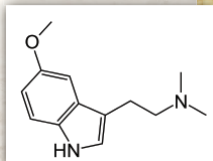
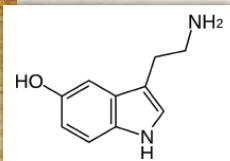
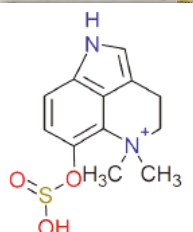


A varangyok (*Bufo*) fültőmirigyének váladéka nagyon összetett, mérgeük hatóanyaga fajonként változik. Általában hallucinogén és érszűkítő hatású vegyületek. Gyűjtőnevük a bufotoxin, ami szívre toxikus szteoidot (bufotalin), triptamin (T) származékokat (szerotonin = 5-OH-T, bufotenin = 5-OH-NMe₂-T, O-Me-bufotenin), bufotionint és ideg ingerületátvivő anyagokat (adrenalin, noradrenalin) tartalmaz.

Barnavarangy és mérgeanyagai: bufotalin, bufotionin, szerotonin, bufotenin, O-Me-bufotenin, noradrenalin, adrenalin.



forrás: http://hu.wikipedia.org/wiki/Barna_varangy



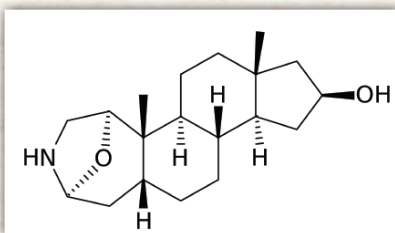
A varangy kézre vagy kötőhártyára jutott váladéka alapos lemosás után már nem veszélyes.

A foltos szalamandra Közép- és Dél-Európában elterjedt farkas kételtű. Hosszúsága 13-28 cm, feje zömök, rövid végtagjai vaskosak. Legfőbb ismertetőjele a színe. Fényes fekete bőrén, szabálytalanul elhelyezkedő sárga foltjairól könnyen felismerhető. Bőrének felülete mirigyes. Bőrváladékában több alkaloid, köztük a samandarin is megtalálható. A mirigyek által kiválasztott csipős bőrvála-



forrás: <https://www.google.hu/search?q=foltos+szalamandra>

Foltos szalamandra



Samandarin

dék sok ellenség ellen megvédi, azokra nézve akár halálos is lehet.

A foltos szalamandra nedve a nyálkahártyákon heves égést, gyulladást okoz, amiben apró madarak, hüllők és kételtűek is elpusztulnak. A samandarin hatóanyag a központi idegrendszerre hat és a reflexingerlékenységet fokozza, de izgatja a külső nyálkahártyát és vérnyomásnövelő hatása is van. A mérgezési tünetek csak akkor lépnek fel, ha az állat megérintése után az irritáló nedvet nem mossunk le bő vízzel. Szembe kerülve gyulladást okozhat.

A kételtűekhez tartoznak a kígyók is. Megközelítőleg 3000 kígyófajta létezik, aminek csupán 10%-a termel mérget ennek ellenére a legismertebb hüllőkként tartjuk számon őket. A kígyók mérge a nyál módosult formája. Ezek mind különböző anyagkeverékek – fehérjék és enzimek – amelyek a kígyók páros mérlegmirigyében termelődnek. Mérjüknek leginkább a

védekezéskor és zsákmányszerzéskor van fontos szerepe. A kígyóknál alapvetően két mérgefajtáról beszélhetünk, a neurotoxinokról és a haemotoxinokról. Az elsőként említett mérge az idegrendszert támadja meg, bénulást, légzésszavart és a szív működés leállítását okozhatja. A haemotoxin egy lassabb hatású, ugyanakkor sokkal nagyobb károkozásra képes vérmérge. Minden fajtánál megtalálható mindkét mérgeanyag, csak eltérő arányban. Az idegmérge leginkább a mérges siklókra, míg a vérmérge a viperákra jellemző.



Fekete mamba

A mérgessiklók egyik legismertebb és legmérgesebb faja a fekete mamba. Leginkább az afrikai kontinens délkeleti részein terjedt el. Testük elérheti a 4 méteres hosszúságot és a csukló vastagságot. A világ leggyorsabb kígyójaként tartják számon, mivel képes elérni a 25 km/órás sebességet. A neve megtévesztő, ugyanis az állat nem fekete. A fekete jelzőt a szája belső részéről kapta, ami úgy néz ki, mint a tinta. A fiatalabb mambák színe világos, de ahogy öregsznek, ez a szín sötétebb lesz. Táplálékukat leginkább melegvérű állatok biztosítják, főként rágcsálók, mókusok és kisebb emlősök. Miután zsákmányát megsebezte elengedi és megvárja, amíg a mérge végez vele. A



fekete mamba mérgéből izolálható dendrotoxin elsősorban az izomidegi kapcsolódásokat gátló neurotoxin. Az áldozat a légzőizmok bénulásába, fulladásba hal bele. A méreg hatását nagyban befolyásolja a marás helye, ami a fekete mamba méretéből és támadási módszereiből adódóan leggyakrabban a felkar, mellkas, nyak és az arc. A Dél-Afriai Orvosi Kutatóintézet gyárt egy többkomponensű ellenszert kígyómérgek ellen. Az időben beadott ellenszerrerrel és megfelelő orvosi ellátással az áldozatok 99%-a túlélheti a végzetesnek tűnő harapást.



Királykobra

A királykobra Malaysiában és Fülöp szigeteken őshonos. A legrettegettebb kígyóként tartják számon. A királykobra egyedülállósága a mozgásában rejlik. Képes testhossza harmadára felágaskodni és a farkára támaszkod-

va lavírozni, teljes hossza elérheti az 5 métert. Kígyókon kívül még gyíkokkal, madarakkal és rácsálókkal táplálkozik. Ellentétben más kígyókkal a királykobra a marása után nem hagyja el áldozatát. Mérgé rendkívül erős és hatékony idegméreg, ami egy átlagos súlyú férfit körülbelül 15-20 percen belül ölhet meg. Hatalmas méregmirigyéből egyetlen harapással képes akár 600 mg mérget juttatni áldozatába, ami 20 felnőtt ember halálos dózisát jelentheti. Az áldozatnál légzésbénulás következtében beáll a halál. A királykobra mérget a kutatók több mint 50 éve tanulmányozzák. A kutatások kimutatták, hogy a méreg összetételét (neuro- és cardiotoxinok) nagyban befolyásolhatja a kígyó környezete, étrendje, de akár az adott évszak is.

A kispikkelyű tajpán a legerősebb mérgű szárazföldi kígyó Ausztrália belső, száraz területein őshonos. Ellentétben sok más kígyóval természete igen félnék és rejtőzködő. Kerüli a bajt és csak akkor támad, ha fenyegetve érzi magát. Átlagban 180 cm-re nő meg, de elérheti a 2 méteres hosszúságot is. Pikkelye színe igazodik az évszakokhoz így az általában sötétbarna színe akár világos olajzöld is lehet. A kivárási technikát alkalmazza, amikor táplálék után vadászik. Prédáját megmarja, majd biztos távolságból megvárja, míg áldozata elpusztul, azután biztonságban elfo-



Kispikkelyű tajpán

gyasztja azt. Leginkább rácsálókkal, patkányokkal, olykor madarakkal táplálkozik.

Az idegrendszert megtámadó mérgé 50-szer erősebb, mint a kobráé. Egy marással képes 40-110 mg között toxint bejuttatni áldozatának a szervezetébe, ami 45 perc alatt végezhet egy felnőtt emberrel. Egereken elvégzett tesztek alapján mérgének erőssége LD₅₀ = 0,03 mg/kg (LD₅₀ az a dózis, ami az egerek 50%-át elpusztítja).

Egyes kígyómérgeket (pl. a templomi vipéráét) rántalanító arckrémek hatóanyagaként használják.

Vízben élő állatok

Nemcsak a szárazföldön leselkednek ránk halálos mérgekkel rendelkező élőlények, hanem a tenger felszíne alatt is. A kúpcsigák és egyes halak védekezésére, némelyik zsákmányejtésre használja mérgező tövisseit.

A kúpcsigák (Conidae) meleg tengerekben élnek, főleg az Indiai- és a Csendes-óceánban, az Ausztráliát és Új-Zélandot körülölelő meleg vizek partmenti területein, továbbá a Földközi-tengerben és Kalifornia déli vizeiben. Általában férgesekkel és más csigákkal táplálkoznak, de előfordul, hogy halak is áldozatul esnek támadásaiknak. Támadásra és védekezésre egyaránt hosszú, hegyes végű, ormányszerű reszelőnyelvüket (radula) használják; ezzel testük, illetve házuk bármely pontját képesek elérni. A radulán mintegy húsz, eltérő mértékben érett méregtüske található. A kifejlett méregtüske közel egy centiméteres. A kúpcsigák nem jó úszók, ebből adódóan nem közlekednek jól a víz alatt. Áldozatait a kúpcsigák méregtüskéivel ejti el. Ezek a kis szigonyyszerű tüskék konotoxint tartalmaznak, ami egy olyan erős ideg-

Kúpcsga



méreg, hogy egy halat másodpercek alatt bénít meg, de egy felnőtt ember halálát is okozhatja.

A konotoxinok 10-30 aminosavegységet tartalmazó neuropeptidek amelyek inhibíciós hatása igen változatos: az alfa-konotoxin az acetilkolin receptorokat, a delta-konotoxin a feszültségfüggő Na-csatornákat, a kappa-konotoxin a K-csatornákat, a mü-konotoxin az izmok Na-csatornáit, az omega-konotoxin a feszültségfüggő Ca-csatornákat bénítja. Ez utóbbi 100-szor hatékonyabb a morfinnál, ezért egy fájdalomcsillapító gyógyszer (Ziconotide) fejlesztésében nyert alkalmazást.

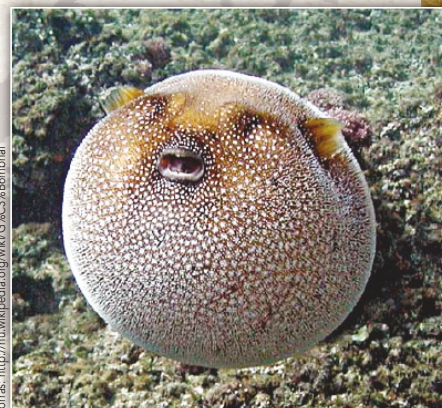
A halak közül mérgező hatás szempontjából a kőhal (Synanceia verrucosa) talán a legveszélyesebb fajta. A kőhalak életük nagy részét sziklákon, korallzátványokon töltik. Nem túl jó úszók így ritkán és keveset mozognak. Legfeljebb félméteresre nőhetnek meg, átlagos méretük 30 cm. Álcázó képességüket használják ki zsákmányszerzésre. Az apró halak, rákok szinte észre sem veszik a rájuk leselkedő veszélyt. Amikor elég közel kerülnek a kőhal-

hoz, az pillanatok alatt tátja hatalmas száját és szippantja be áldozatait. Mérgeiket szinte soha nem használják támadásra. A testüket borító, mérget tartalmazó tüskék a védekezésre szolgálnak. Mérgeük a stonustoxin (SNTX) – két alegységből álló 150 kDa méretű fehérje – a legkisebb nyomásra is kifeccskendeződik a 13 tüske valamelyikéből. Ez az óvatlan bűvárnak vagy fürdőzőnek az életébe is kerülhet. A méreg akár hetekig tartó egészségkárosodást okozhat, vagy végtag amputációhoz vezethet. A méreg hatására az izmok elhálnak, bénulás és sokk léphet fel.

Azonnali elsősegélyként azt javasolják, hogy a sérült részt tegyük



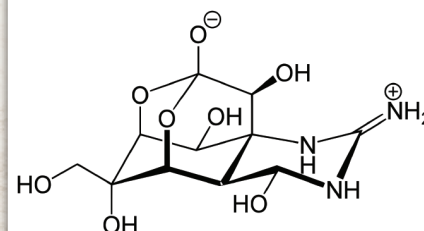
Kőhal



Gömbhal

forró víz alá, és ahogy tudjuk, szorítjuk el a keringést.

A gömbhal (Tetraodon fluviatilis) a sugarasúszójú halak osztályába tartozik. Élőhelye Délkelet-Ázsia folyói. A gömbhal átlagos mérete 14-17 centiméter. Ragadozó, kisebb halakkal, rákokkal táplálkozik. A gömbhal neve az egyik védekezési mechanizmusára utal, ugyanis veszély esetén vízzel telíti el testét ez által tűnve nagyobb-



Tetrodotoxin

nak és kevésbé könnyen elejthető áldozatnak. A gömbhalra vadászóknak nem csak a nagyobb mérettel kell megküzdeniük, hanem az állat testéből kiálló éles tüskékkel és a belső szerveiben található igen erős méreggel is. Japánul a hal neve fugu. A hal májában és veséjében erős méreg, tetrodotoxin (TTX) található. A TTX gátolja az idegrendszer működését,



Tűzhalak



blokkolja a Na-csatornák működését, érszűkítő hatása van és ellenálló a főzésre. A számunkra halálos mérge a gömbhal számára létszükség. Táplálkozásuk során, mérgező állatok elfogyasztásával kerül szervezetükbe a mérge, amire immunisak. A tetrodotoxinnak nemcsak a védekezésben van szerepe, hanem a párválasztásban is.

A tűzhal (*Pterois antennata*) trópusi korallzátonyok sekély vizeiben élő, színpompás hal. Mozgásában tollszerű, remegő, foltos úszói segítik. A díszes külsőn segíti őt a táplálkozásában, mivel így képes beleolvadni a korallzátonyok rengetegébe. Ragadozó, kisebb halakkal táplálkozik. A dekoratív úszóinak sugaraiban nagyon erős méreggel telített méregmirigyekkel rendelkező töviseket rejtget. Ennek a rendkívül

erős fegyvernek csak védelmi funkciója van, vadászatra nem használja őket. A méregmirigyekben lévő erős, bénító hatású toxinra figyelmeztet az állat impozáns külseje is.

A tengerek még sok száz különleges, „mérgező” állatot rejtenek. Például a csalánozók végtagjaiban csalánsejtek találhatók, amelyek érintésre kinyílnak. Ilyen állatok közé soroljuk a medúzákat, polipokat. Mérgük összetétele igen változatos, fehérjék, polipeptidek, aminosavak, enzimek, szterolok, szaponinok keverékéből áll. A tüskésbőrűek osztályába tartoznak a csillagok, sünök. Nevük utal védekezési szokásaikra, hisz vázukhoz erős tüskék tartoznak, melyek méreganyagokat is tartalmazhatnak.

Csáky Zsófia

ELTE-TTK Kémiai Intézet



További olvasnivalók:

Horst Altmann: *Mérgező növények, mérgező állatok, LÍCIUM-Art Könyvkiadó Kft., Debrecen, 1993.*

Manfred Niekisch: *Mi micsoda- Hüllők és kételtűek, Tessloff és Babilon Kiadó, 2001.*

Sabine Steghaus-Kovac: *Mi micsoda-Rovarok, Tessloff és Babilon Kiadó, 2004.*

Modellszámítások kora

Összetett rendszerek megismerésére két alapvető szemlélet alakult ki. A redukcionista elmélet a rendszerek egy jellemző, vagy különleges részének vizsgálatára törekszik, míg a holisztikus szemlélet a teljes rendszer egységes kezelését tűzi ki célul. A mérési módszerek elérhető és szükséges pontossága befolyásolja a megközelítési mód kiválasztását. A számítógépes kémiai vizsgálatok esetén, a véges számítási kapacitások miatt a rendszer mérete szabja meg a rendszerről szereshető információk körét, a számítások pontosságát és az adott rendszer vizsgálatához rendelkezésre álló eljárásokat is.

A legkisebb önálló szerveződésen alapuló kémiai rendszernek az egyedi molekulákat tekinthetjük, amelyek az atomok megfelelő kombinációjából alakulnak ki. Ezen kis rendszerek tulajdonságait nagymértékben befolyásolhatja a környezet hatása, ennek figyelembevételével a kísérleti tapasztalatokat jobban megérthetjük, és jobb előrejelzéseket tehetünk. A molekulák egyedi tulajdonságait az atommagok körüli elektroneloszlás fogja meghatározni, ennek megismerésére az időfüggetlen Schrödinger-egyenlet közelítő megoldásával nyílik lehetőség (kvantumkémiai számítások). Az egyes molekulák kémiai környezetének leírása jelenti a következő lehetséges szerveződési szintet, ahol a molekulák kölcsönhatása új tulajdonságok megjelenésével jár. A vizsgált rendszer méretének növekedése miatt a megfigyelőknek más elméleti nézőpontot célszerű választani. Ennek fő oka technikai: a számolások időigénye módszertől függően a rendszer méretével növekszik,

A szerveződés minden szintjén új fizikai, kémiai (és biológiai) tulajdonságok jelennek meg

sok esetben a részecskeszám valamelyik magasabb hatványa szerint, így a lehetséges vizsgálatoknak gátat szab a rendelkezésünkre álló számítógépes kapacitás. Hogy nagyobb rendszerek esetén is célt érhesünk, a kémiai rendszer elektroneloszlással történő leírását feladva, a molekulákat térbeli tömegpontok különböző erősségű rugókkal összekötött hálózatával írjuk le. A tömegpontok töltéssel rendelkező részecskék, távolságukat és térbeli kiterjedésüket korábbi elméleti számítások alapján erőterrel írjuk le.

Az egyik alapvető kérdés az, hogyan jönnek létre a szervezett rendszerek. Vajon a kialakuló új tulajdonságok leírását, előrejelzését megadhatjuk-e a számítógépes kémia eszközeivel? Manapság a processzorok számítási kapacitásának évenkénti duplázódása folyamatosan újabb vizsgálati lehetőségeket nyit meg. Ezáltal a megismerés technikai korlátai egyre messzebb kerülnek. Egy hasonlattal élve, a kulcslyukon történő rövid lekelődés helyett hamarosan a szélesre tárt ajtón keresztül akár hosszasan is szemlélődhetünk. Ezt szeretnénk szemléltetni három különböző rendszer egy-egy vizsgálati szempontjának bemutatásával.

Az első sejtek az élet megjelenése előtt már létező (prebiotikus) molekulák önszerveződésével jöttek létre, aminek az építőegységként szolgáló biomolekula-alapegységek (pl. aminosavak,

cukrok, zsírsavak) képződése, illetve feldúsulása volt szükséges. Ezek az alapegységek számos szerkezeti izomerrel rendelkeznek, viszont közülük csak néhány vált a biomolekulák építőelmévé. Mivel a molekuláris szintű evolúciós szabályok alig-alig ismertek, feltételezésünk az, hogy alapvetően termodinamikai tényezők szabják meg egyensúlyi rendszerek molekuláris evolúcióját. Egy adott biomolekula-alapegység összes szerkezeti izomerjének meghatározásával, illetve ezen szerkezetek energetikai jellemzőinek ismeretében ezt mutatjuk meg.

A kémiai evolúcióban is alapvető szerepet játszanak két fázis határán (pl. víz-levegő, levegő-szerves anyag, víz-szerves anyag) kialakuló, különleges tulajdonságokkal rendelkező határrétegek. Ezen határrétegekben megjelenő új tulajdonságok és lejátszódó reakciók leírása csak megfelelő számú felületalkotó molekula együttes vizsgálatával végezhető el.

Biológiai környezetben előforduló legfontosabb határrétegeknek, a kettős lipidrétegeknek alapvető szerepe, hogy elhatárolják egymástól a különböző minőségű közegeket (pl. folyadékokat, különböző koncentrációjú oldatokat, sejtek belső tereit), és a két közeg közti anyagáramlásokat szabályozzák. Ezen funkciójuk mellett, szelektivitásuk következtében a hidrofób karakterrel rendelkező molekulák számára átjárhatóak (permeabilisak), míg a töltéssel rendelkező részecskék (ionok) áthaladását gátolják. Az ilyen lipidrétegek kialakulása nemcsak sejtek belső folyamatai által, hanem önszerveződéssel is képes lejátszódni.

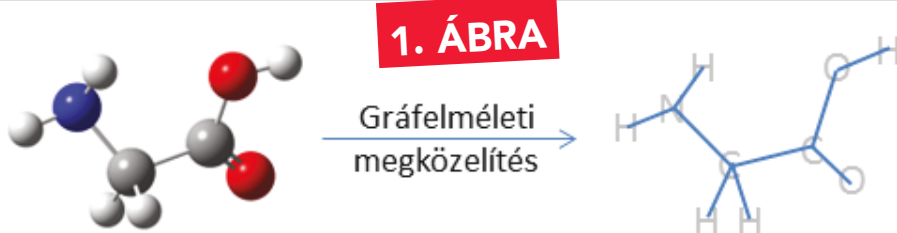
Biomolekulák építőköveinek kialakulása

A szisztematikusan végzett kvantumkémiai számításokkal egy adott biomolekula-építőegység összes izo-



merjének energiáját, illetve kémiai potenciálját (munkavégző képességét) meghatározhatjuk, és ennek alapján sorba rendezhetjük őket. Az egyensúlyi termodinamika szerint a kisebb kémiai potenciálú izomer a rendszer legvalószínűbb állapota. Minél nagyobb a kémiai potenciál, annál kisebb az adott izomer mennyisége (populációja) az azonos szerkezetek közül. A sorrend kialakításának feltétele az összes lehetséges szerkezeti izomer előállítása. Ehhez a leggyorsabb a molekulákat olyan egybefüggő „hálózatnak” (gráfnak) elképzelni, amiben a többszörös összekötések és esetleg hurkok megengedettek (zárt multigráf), és amelynek csúcsai az atomok, élei a kötések (1. ábra).

Ismert kémiai összegképlet esetén



A molekulák felfoghatóak csúcsokból és élekből álló „hálózatként”.

(pl.: $C_2H_5NO_2$) az atomokhoz tartozó lehetséges kovalens kötések számával (kovalencia) megadható a gráfelméleti-

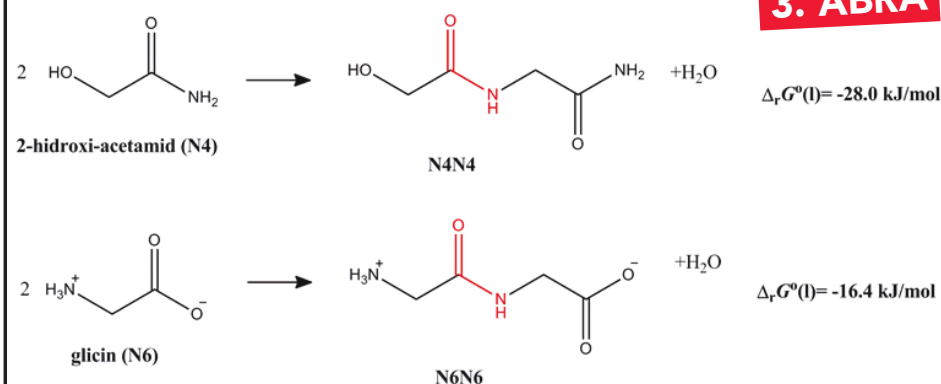
energiája minimális (legalábbis lokális). Ehhez az atomok egymáshoz képesti távolságait változtató kvantumkémiai számításokra (geometriai optimalítás) van szükség, melynek során számos korábban szerkezeti izomernek gondolt szerkezetről kiderül, hogy nem létezik. A létező izomerek száma kevesebb, mint a gráfel-

2. ÁBRA

A hat legkisebb kémiai potenciálú $C_2H_5NO_2$ izomer szerkezete. A kémiai potenciál (munkavégző képesség) számításánál a vizes közeget egyszerű oldószer modellel vettük figyelembe, az (I) ezt jelöli.

	Szerkezet	Név	$\Delta\mu^\circ(I)$ kJ/mol
N1		metilamin szén-dioxid komplexe	0
N2		N-metilkarbaminsav	5.2
N3		metil-karbamát	22.7
N4		2-hidroxi-acetamid	34.5
N5		glicin	40.2
N6		glicin (ikerionos forma)	44.3

3. ÁBRA



leg lehetséges összes hálózati összekötés, azaz szerkezeti izomer. Az így előkészített háromdimenziós szerkezetek csak közelítőleg felelnek meg a valódi szerkezeteknek. Az energiaminimum elve szerint az a szerkezet létezik, amelynek

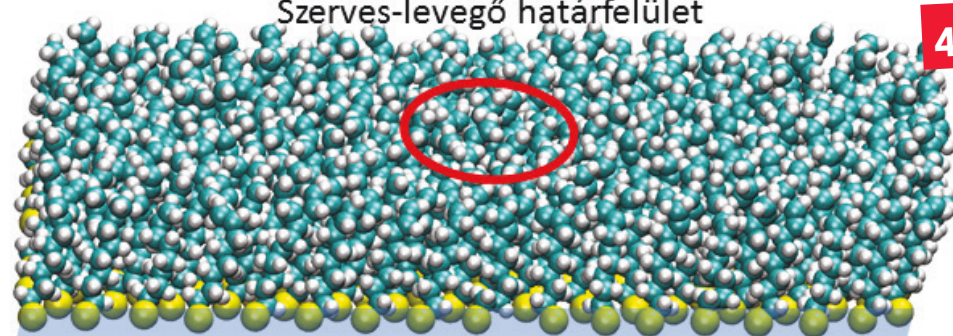
A polikondenzációs reakciók első lépései és a hozzá tartozó reakciószabadentalpiák ($\Delta_r G^\circ(I)$). Pirossal jelöltük a molekulák peptidkötését.

méleti megfontolások alapján várható lenne. A geometriai optimalizációkkal kapott izomerek legfőbb molekuláris és termodinamikai tulajdonságai megadhatók (pl. képződéshő, relatív stabilitás, kémiai potenciál, hőtartalom, fajhő).

A legegyszerűbb fehérjealkotó építőkö, a glicin kialakulásának termodinamikai feltételeit vizsgáltuk meg úgy, hogy a $C_2H_5NO_2$ összegképlethez tartozó lehetséges izomereket vizsgáltuk, gráfelméleti alapon. A lehetséges 404 szerkezeti izomer közül a glicin különböző protonáltsági állapotai (N5 és N6) nem a legkisebb kémiai potenciálú (μ) szerkezetek, hanem „csak” a rangsor 5. és 6. eleme (2. ábra). Számításaink olyan izomer létezését is „megjósolja”, amely – legjobb tudásunk szerint – ez idáig nem volt ismert ($NH_2CH_2OCHO \sim$ aminometil formiátot, amely a rangsor 9. eleme, N9). Az alacsonyabb kémiai potenciálú molekulák (N1–N3) reaktivitását megvizsgálva megmutatható, hogy ezek vízzel reagálva gyorsan átalakulnak vagy elbomlanak. Így a biomolekulagyűlések (kémiai szintű) evolúciójában nemcsak a termodinamikai stabilitás, hanem a reaktivitás is fontos szerepet játszik. Ez egyben a víz kémiai reakciópartner szerepét is hangsúlyozza.¹

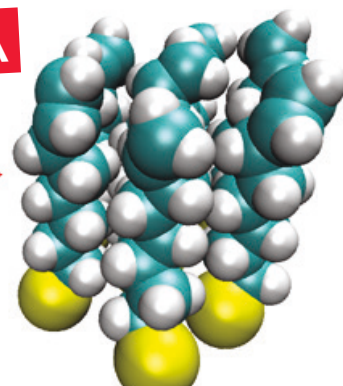
A peptidkötés kialakulása 2-hidroxi-

Szerves-levegő határfelület



Hordozófelület

4. ÁBRA



Az önszerveződő szerves felület.

acetamidból (N4) termodinamikailag kedvezőbb ($DG = -28.0$ kJ/mol), mint glicinből ($DG = -16.4$ kJ/mol). A kialakuló polipeptidben a különbség „csak” az C- és N-terminális végeken jelentkezik, de ez a különbség a polimerizáció fok növekedésével egyre kisebbé válik. Így egy termodinamikailag kedvezőbb reakcióutat mutatunk meg a poliglicin kialakulásra (3. ábra).¹

Megállapíthatjuk, hogy a molekuláris rendszerek evolúciójában a termodinamikai stabilitás és az adott környezeti feltételek szabta reaktivitás a meghatározó jelenség.

Kémia a „határon”

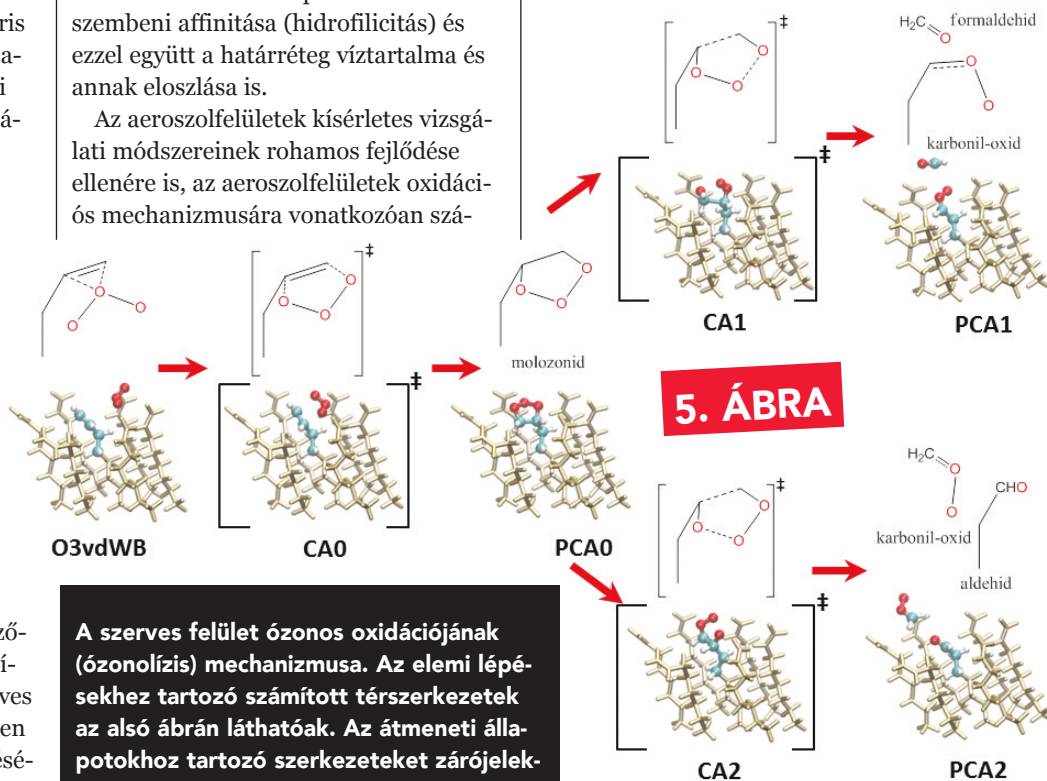
Két anyag határán lejátszódó ún. határfelületi jelenségek számos esetben segítik az egymással egyébként nem, vagy csak nagyon lassan reagáló anyagok reakcióját. Ez szolgál az élő szervezetek enzimatis reakciói mellett több vegyipari eljárás alapjául. Hasonlóképpen, az atmoszféra parányi szálló részecskéinek felületén zajlik le a légköri folyamatok jelentős része, pl. e részecskék segítik elő a csapadékképződést, így jelentősen befolyásolják a klímát. Az aeroszoloikat elsősorban szerves vegyületek borítják. A határfelületeiken lejátszódó fizikai folyamatok megértéséhez elengedhetetlen a felületi határreteg alkotó komponensek minőségének

és mennyiségének ismerete (pl. a különböző komponensek egymáshoz viszonyított aránya és a komponensek eloszlása). Az oxidatív atmoszférának kitett aeroszolfelület összetétele, különösen a gyors, gyakran párosítatlan elektront is tartalmazó részecskék (szabadgyökök) hatására nagymértékben átalakul.

Ennek következtében jelentősen változik a felületet alkotó komponensek vízzel szembeni affinitása (hidrofilicitás) és ezzel együtt a határreteg víztartalma és annak eloszlása is.

Az aeroszolfelületek kísérletes vizsgálati módszereinek rohamos fejlődése ellenére is, az aeroszolfelületek oxidációs mechanizmusára vonatkozóan szá-

mos kérdés még megválaszolásra vár. A körülményektől függően számos mechanizmust javasolnak a képződő termékek és a kísérletileg meghatározott felületösszetételek magyarázatára,^{2,3} azonban ezek elméleti háttere nem igazolt. A felületi oxidációt az egymással kölcsönható szénláncok jelentősen befolyásolják, és a gázfázisú reakcióhoz képest



5. ÁBRA

A szerves felület ózonos oxidációjának (ózonolízis) mechanizmusa. Az elemi lépésekhez tartozó számított térszerkezetek az alsó ábrán láthatóak. Az átmeneti állapotokhoz tartozó szerkezeteket zárójellel és $\ddagger$ szimbólummal jelöltük.

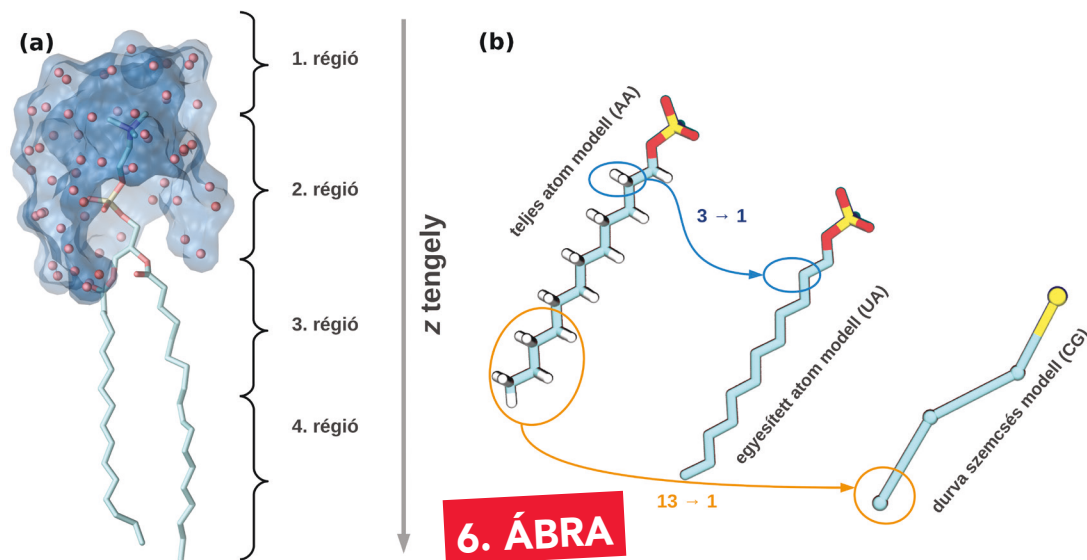


megváltoztatják az energetikai viszonyokat és a képződő termékek arányát is. Ezeket a hatásokat kvantumkémiai számításokkal lehetséges meghatározni úgy, hogy oxidálószerként viselkedő reaktív oxigéntartalmú részecskék (pl.: hidroxilgyök $[\cdot\text{OH}]$, hidroperoxil gyök $[\cdot\text{OOH}]$, ózon $[\text{O}_3]$) felületen végbe menő molekuláris folyamatát és az elemi kémiai reakciók lépéseit derítjük fel. Ehhez az aeroszolatot borító szerves molekulák sokaságát modellezendő

1-oktén-tiolátokból $[\text{S}-(\text{CH}_2)_6-\text{CH}=\text{CH}_2]$ képzett önszerveződő monomolekulás réteg használható. A tiol-csoport egy úgynevezett hordozó felülethez elsőrendű kémiai kötással kapcsolódik, rögzítve ezzel a molekula egyik végét. Az ilyen módon rögzített végpontok egymáshoz közeli elhelyezkedése végzi el a molekulák nagyfokú rendezettségét (önszerveződését) és ezzel a szerves-levegő határfelület kialakítását (4. ábra). A modellalkotás során így kiválasztott szerves határfelület a valóságban kísérletileg is előállítható, így módunk nyílik a számítási eredmények közvetlen ellenőrzésére. Nagy előnye e duális technikának, hogy a kísérletek és a számítások így idealizált felületen történnek, a feltételek és a körülmények szisztematikus változtatásával kapjuk a kívánt információkat. A felületen végbe menő folyamatokat befolyásoló tényezőket pontosan azonosíthatjuk, és a reális komplex rendszerek pontos leírására is tudjuk alkalmazni (pl. az aeroszolatoknál).

A szerves felületek oxidációs folyamatai közül az ózonnal (O_3) történő reakciót, az ózonolízist (5. ábra) mutatjuk be részletesebben.

A reakció első elemi lépése a két molekula közeledésével létrejövő molekulakomplex (O_3vdW), amit másodrendű kémiai kötőerők tartanak egyben. Az egyik legfontosabb kémiai



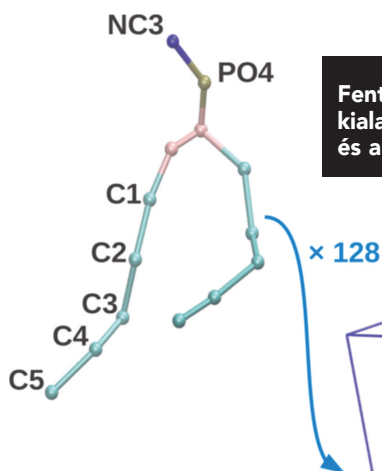
6. ÁBRA

reakció az ózonmolekula két „szélső” oxigénjének a kettős kötést kialakító szénatomokkal történő 1,3-cikloaddíciója. A reakció legmagasabb energiájú térszerkezetén, átmeneti állapotán keresztül (CAO, 5. ábra) kialakuló három oxigénatomos öttagú gyűrűs szerkezet lesz (PCAO) a reakció terméke (molozonid). A teljes folyamat szempontjából a molozonid csak egy közbuló termék (intermedier), mivel gyors reakciókban (CA1 és CA2) alakul tovább stabil termékekké (PCA1 és PCA2). Az egyik csatornán a formaldehid mellett kialakult termék a karbonil-oxid (PCA1) könnyen karboxil-csoporttá képes átrendeződni, míg a másik csatornán hangyasav és aldehyd zárja a reakciót. A mechanizmus egyes lépéseire tartozó számított háromdimenziós szerkezeteket az 5. ábra mutatja. Így az ózonolízis során mindkét úton rövidült a szénlánc, és a felületen megjelenő karbonil- és karboxil-csoportok jelentősen megváltoztatják az addig hidrofób felületet, és ezzel együtt a víz felületi megkötődését, adszorpcióját is. A következő bekezdésben ilyen adszorpciós jelenségek számítását fogjuk röviden bemutatni.

A felületi szorpciós jelenségek modellezéséhez sokatomos rendszer összeállítása szükséges (nagyságrendileg 10000 atom, kb. 70000 elektron!). A rendszer mérete miatt szükségszerű a molekulá-

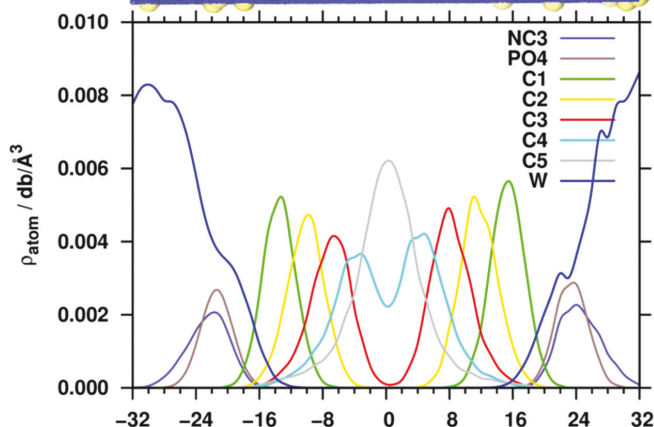
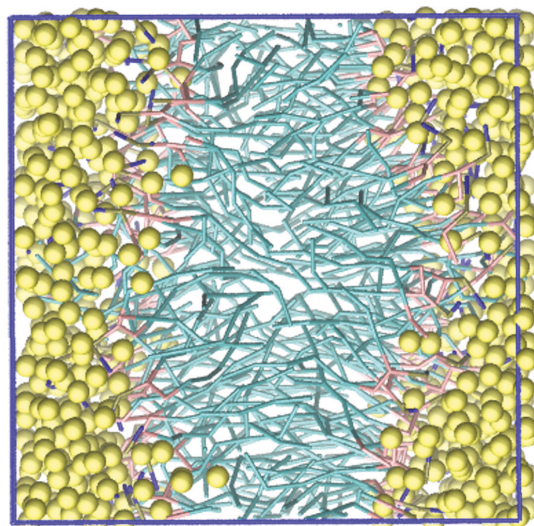
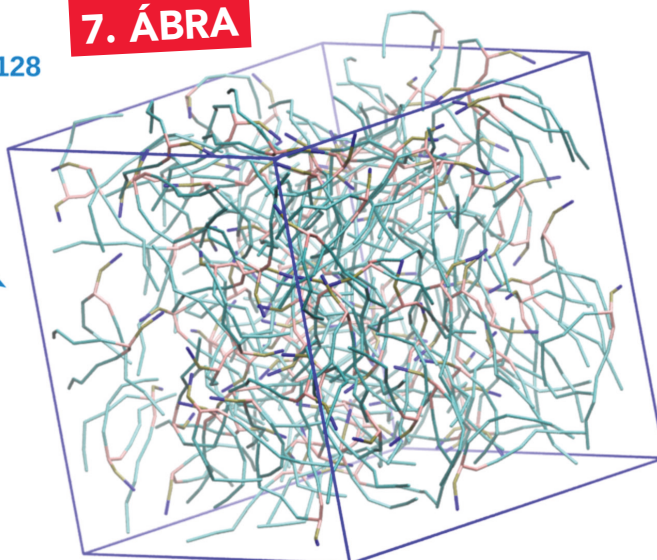
A membránok 4 régiós modellje az 5,5 Å távolságon belül lévő vízmolekulákkal (a), és a számítási modellek egyszerűsítési lépései (b).

kat alkotó atomok különböző erősségű rugókkal összekötött, tömeg- és töltésközéppontokkal ellátott hálózatának egyszerűsített leírása. Ezen molekulák preferált orientációit és pozícióit oly módon vizsgáljuk, hogy az atomokat a hőmérsékletnek megfelelő mozgási energiával látjuk el, és a rendszerre bizonyos időközökkel megoldjuk a newtoni egyenleteket (molekuladinamika). A rendszerek heterogenitása miatt az egyensúly kialakulásáig nagyon sok lépést kell számítani, ami gyakran korlátokba ütközik. Ez esetben az atomi szintű modell helyett, a kevesebb paramétert tartalmazó molekulacsoport-szintű ún. durva szemcsés modell alkalmazása lehet egy célszerű alternatíva. Így a számítás felgyorsul. Egy másik megoldás szerint Monte Carlo technikával végezzük el modellszámításainkat. Ez utóbbi esetben a cél „véletlenszerű” molekulakonfigurációk Boltzmann-eloszlás szerinti súlyozott mintavételezése, összegyűjtése. Ekkor egyedül az egyensúlyi állapotra szerzünk fontos információkat, mint például atomi szinten a kötési energiák eloszlása, vízmole-



Fentről lefelé: a DSPC molekula durva szemcsés (CG) reprezentációja, a belőle véletlenszerű elrendezéssel kialakított 128 db DSPC-t tartalmazó kiindulási sokaság, a molekuladinamikai trajektória utolsó szerkezete és a különböző kölcsönhatási pontok sűrűségprofilja a z tengely mentén (W – a víz jelölése).

7. ÁBRA



kulák felszínközeli orientációi vagy makroszkopikus paraméterek közül az adszorpciós izotermák.

Membránok – a felület és fázis önszerveződése

A sejtmembránok kettősrétegeit elsősorban foszfolipid molekulák építik fel, melyek „foszfo” fejcsoportjukat tekintve hidrophilek, míg a zsírsavész (lipid) hidrophób karakterű. A kialakuló kettősrétegben a fejcsoport a vizes fázis felé orientálódik, és erősen hidratált. A hidrophób szénlánc a kettősrétegben a fejcsoportok miatt a vizes fázistól elzártan helyezkedik el, úgy hogy az 1-1 rétegben lévő szénláncok egymás felé orientálódnak. Marrink és Berendsen elméleti munkája alapján alakult ki a membránok 4 rétegű modellje (6. ábra).

Ha a membránt úgy képzeljük el, hogy a z tengely mentén haladva tartunk a vizes fázistól a membrán belseje felé, akkor a tengely mentén bekövetkező hidratáció és sűrűségváltozás adja meg a membránok 4 régióját.⁴ Az első régióban kialakul a kölcsönhatás a lipidek fejcsoportja és a vízmolekulák között. A második régióban a legnagyobb a membrán sűrűsége és hidratációja. A harmadik régió a szénláncokból álló külső rész, ahol a hidrophób rész sűrűsége a legnagyobb. A 4. régióra a nagyon kicsi hidratáció, alacsony sűrűség jellemző, a határfelület hatása itt már teljesen elhanyagolható.

A membránok szerkezete nem állandó, alkotói helyzetüket egymáshoz képest állandóan változtatják, ezért csak olyan elméleti kémiai módszerekkel tudjuk őket jellemezni, amelyek dinamikus mozgásukat írják le, és kellően gyorsak. Erre a molekuláris rendszer erőtszintű modelljének alkalmazása mellett, a molekuláris dinamikai szimulációk adnak lehetőséget.

Az erőterek több típusát is megkülön-



böztetjük attól függően, hogy a szimuláció során használt tömegpontok (kölcsonhatási pontok) hány atomnak felelnek meg. Ha egy kölcsonhatási pont egy atomot reprezentál, akkor teljes atom modellekről beszélünk („all-atom models”, AA, 6.b ábra). Ha kisebb atomcsoportokhoz rendeljük ezeket a kölcsonhatási pontokat, akkor kapjuk az egyesített modelleket („united atom”, UA). Ha még több atomot vagy molekulát is egy kölcsonhatási ponttal helyettesítünk, „durva szemcsés” („coarse-grained”, CG) modellekről beszélünk. Az egyszerűsítések következtében csökken az egy adott atomi elrendeződéshez szükséges számolási idő. Az egyszerűsítések lépcsőfokait és a különböző erőteretű típusokat a dodecil-szulfát-molekula példáján a 6. ábra mutatja be. A kölcsonhatási pontok száma egy nagyságrenddel csökken az AA, UA és CG sorrendben: 43, 17 és 4. Ennek megfelelően a számítási igény is jelentősen csökken.

Az egyszerűsítési lépésekkel az adott rendszer vizsgálatához szükséges számítási időt jelentősen le tudjuk csökkenteni, ám természetesen ez mit sem érne, ha az így kapott modellre az eredmények nem tükröznék a valóságot, vagy nem tudnák megadni a valóság minőségi leírását. A CG modellek segítségével fényt deríthetünk micellák képződésére, összetett membránrendszerek tulajdonságaira, illetve membránproteinek asszociációjára.

A továbbiakban szolvatált, 128 darab disztearát-foszfátidil-kolin molekulából álló membrán önszerveződését mutatjuk be (DSPC, 7. ábra) a kezdeti lépésektől a membrán kettősréteg kialakulásáig. A 128 darab DSPC molekulát véletlenszerűen rendezzük el egy $75 \times 75 \times 75 \text{ Å}^3$ ($1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$) térfogatú dobozban, majd a rendszert szolvatáljuk „CG-víz molekulákkal”. Az így összeállított rendszeren végezzük el a molekuladinamikai szimulációt. Így a modellrendszer összesen 27392 db atomnak felel meg, amit 2560 db kölcsonhatási pont reprezentál.

A szimulációt a rendszer potenciális energiájának változásával követhetjük.

Az egyensúlyi rendszer akkor alakul ki, amikor a potenciális energia értéke állandósul. Az egyensúly kialakulása és stabilizálódása nagymértékű szerkezeti változással, önrendeződéssel jár, ami a 7. ábrán középen jól látható. A szimuláció során az is megfigyelhető, hogy a kezdeti, véletlenszerű elhelyezkedés után (7. ábra felső panel) hogyan rendeződnek a DSPC molekulák két rétegbe (középső panel). Ennek során a hidrofób karakterű kölcsonhatási pontok (C1, C2, C3, C4 és C5, ld. 7. ábra) egymással alakítanak ki kölcsonhatásokat, miközben a hidrofílf fejcsoportok (N3C és PO4) elzárják a membrán kettősréteg belsejét a vízmolekuláktól.

A membránszimulációk egyik legfontosabb eredménye, a különböző membránalkotók s azok csoportjainak térbeli eloszlása, amit az ún. sűrűségprofíllal jellemezhetünk. A membránrétegre merőlegesen választott tengely mentén, a szimulációs dobozt rétegekre osztjuk, és meghatározzuk, hogy hány darab atom, molekularészlet található az adott rétegben. Ha ezt az eljárást nemcsak egy szerkezetre, hanem a molekuladinamikai szimuláció számos lépésénél elvégezzük, és átlagot számolunk, akkor kapjuk a 7. ábra alján látható sűrűségprofíllt. Jól látható, hogy a DSPC C3, C4 és C5 részei milyen kevésbé hidratáltak (a hozzájuk tartozó sűrűségcsúcsok nem fednek át a vízsűrűségprofíllal), hiszen ezekben a térrészekben a víz sűrűsége gyakorlatilag nulla, hasonlóan a kísérleti tapasztalatokhoz. Ezzel szemben a fejcsoportok nagy hidratációs fokkal rendelkeznek.

Az elméleti vizsgálatokkal három különböző modellrendszerrel kaptunk a különböző mérési eredményekkel összevethető információkat.⁵ Nem tértünk ki rá, de a bemutatott modellek jó egyezést mutatnak a kísérleti eredményekkel. A számítások segítségével olyan tulajdonságokat is meg tudunk határozni, amelyek mérése nem, vagy csak nagyon költséges technikákkal lenne lehetséges. Fontos kiemelni, hogy a kémiai kutatásoknál is elérkezett az a pont, amikor egy-egy reakció, kémiai kísérlet vagy

akár kémiai szintézis előtt elengedhetetlen lesz modellszámításokat végezni, hasonlóképpen, mint ahogy az történt a fizikai kutatásokban.

**Szőri Milán, Jójárt Balázs,
Viskolcz Béla**

**Szegedi Tudományegyetem, Kémiai
Informatika Tanszék**



TOVÁBBI OLVASNIVALÓK:

1. Milán Szőri, Balázs Jójárt, Róbert Izsák, Kornél Szőri, Imre G. Csizmadia, Béla Viscolcz: “Chemical Evolution of Biomolecule Building Blocks. Can Thermodynamics Explain The Accumulation of Glycine in Prebiotic Ocean?” *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2011, 13, 7449-7458.
2. Karagulian, F.; Dilbeck, C. W.; Finlayson-Pitts; B. J.: „Unusual oxidation of organics at interfaces from the bottom up and atmospheric implications” *J. Am. Chem. Soc.* 2008, 130, 11272.
3. McIntire, T.M.; Lea, A.S.; Gaspar, D.J.; Jaitly, N.; Dubowski, Y.; Li, Q.Q.; Finlayson-Pitts, B.J.: „Unusual aggregates from the oxidation of alkene self-assembled monolayers: a previously unrecognized mechanism for SAM ozonolysis?” *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2005, 20, 3605.
4. Tieleman DP, Marrink SJ, Berendsen HJ. A computer perspective of membranes: molecular dynamics studies of lipid bilayer systems. *Biochim Biophys Acta.* 1997 Nov 21;1331(3):235-70.
5. A bemutatott számításokat a TÁMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0010 „Szuperszámítógép a nemzeti virtuális laboratórium” és a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0047 „Új, funkcionális anyagok által kiváltott biológiai és környezeti válaszok” projektek támogatták.

A HAJDANI KURIÓZUM MÁRA ELSŐRENDŰ KUTATÁSI MÓDSZERRÉ VÁLT

A fluoreszcencia spektroszkópia

A fluoreszcencia jelenségének megfigyelése több, mint 400 évre nyúlik vissza. Ez a kémiai kaland a vese fájának megfigyelésétől a Nobel-díjakon át a modern genetikai alkalmazásokig terjed.

Nicolas Monardes spanyol orvos és botanikus híres könyvében (*Historia medicinal de las cosas que se traen de nuestras Indias Occidentales*) 1565-ben leírta, hogy egy bizonyos, Mexikóban található fafajtából vízzel egy olyan gyógyító hatású anyag oldható ki, ami az oldatnak furcsa kékes színt kölcsönöz.

Nagyjából ugyanebben az időszakban Bernardino de Sahagun ferences misszionárius (1499-1590) is említette ezt a fajtát, aminek azték neve 'coatli' volt.



Nicolas Monardes

Monardes munkájának egy 1574-es latin fordításában Charles de L'Ecluse, latinos nevén Carolus Clusius híres flamand botanikus a szóbanforgó fát *Lignum Nephriticum*-nak, azaz vese fának nevezte el, és hozzásegítette Európát a fa furcsa optikai tulajdonságának megismeréséhez. A XVI - XVII századokban ez a fajta népszerű



Bernardino de Sahagun

lett Európában különböző vesebetegségek gyógyítására. Monardes leírását 1577-ben John Frampton angol szerző a következőképpen fordította: "Fehér fácska azoknak, akik nem vizelnek könnyűszerrel, és gyógyír a kövek okozta kínokra..."

Athanasius Kircher német jezsuita tudós 1646-ban írt könyvében (*Ars Magna Lucis et Umbrae*) megemlíti a

Lignum nephriticum kivonatának tulajdonságait. Ennek a

fának vizes kivonata áteső fényben sárga színű, míg az oldatból visszavert fény kékes.



Charles de L'Ecluse



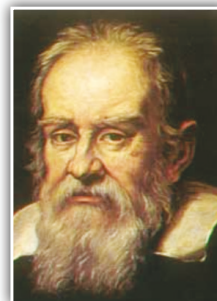
Athanasius Kircher

A későbbi századokban ezt a fát már nem használták és botanikailag elkeveredett más fajták között. Safford azonban 1915-ben tisztázta ezt a problémát és azt a fajtát, amihez a mexikói *Lignum nephriticum* tartozik *Eynsemhardtia Polystachia* néven írta le. Később ebből a fajtából sikerült több, erősen fluoreszkáló *glucosyl-hidroxichalcone*-t elkülöníteni.

1603-ban Vincenzo Casciarolo bolognai cipész, alkémikus, talált a környéken egy olyan követ, ami felhevítés után liláskék fényt sugárzott. Ez valószínűleg bárium-

Különböző fluoreszkáló festékeket alkalmazva úgy festhető meg a sejt, hogy annak egyes alkotórészei más-más színben láthatók.

Barit kristályok



Galileo Galilei

szulfát (lapis solaris, barit) volt. A felfedezés élénk vitára indította a korabeli tudósokat. A mellékelt fotó egy perui barit kristály halmazt mutat be.

Galileo Galilei is foglalkozott a bolognai kő foszforeszcenciájával 1612-ben, mint írta: "Meg kell magyarázni, hogyan esik foglyul a fény a kőben, hogy aztán később, mint a gyermek szülésnél, kiszabaduljon abból."

Ugyancsak Monardes megfigyelései inspirálták Robert Boyle-t (1627-1691) a kérdés alaposabb vizsgálatára. Ezek során úgy találta, hogy többszöri kilúgozás hatására a fa egyre kevésbé színezte meg a vizet, és hogy valamilyen 'fontos só' felelős az effektusért. Arra is Boyle jött rá, hogy a savak kioltják a



rövid története



Robert Boyle



David Brewster

színt, míg lúgok hatására az oldat visszaszíneződik.

David Brewster írta le, hogy ha növényi levelek alkoholos oldatán fehér fényt bocsát át, oldalirányból vörös fény jelenik meg (ez a klorofil fluoreszcenciája). Brewster még úgy gondolta, hogy ez 'diszperziós jelenség'.

Az első igazán modern fluoreszcencia megfigyelés John Frederick William Herscheltől (1792-1871) származik. 1845-ben írta le, hogy a kininszulfát oldata napfényben kék fénnel világít. Ő azonban a jelenséget még 'epipolikus diszperzió' nevezte. Ahhoz, hogy ez megfigyelhető legyen, a kis oldékonyságú kininszulfátot borkósavval keverve oldotta fel vízben.

További fejlemény volt, hogy Edmond

Becquerel (1820-1891) leírta a kalcium szulfát fénykibocsátását ultraibolya fénnel történő megvilágításkor.

Megállapította, hogy a kibocsátott fény hullámhossza nagyobb, mint a gerjesztő fényé. Sőt 1858-ban megépítette az első foszforoszkópot a foszforeszcencia sugárzási élettartamának mérésére.

Ezután George Gabriel Stokes (1819-1903) végzett nagy jelentőségű munkát a fluoreszcencia terén. 1852-ben közölt egy százoldalas cikket a következő címmel: *On the refrangibility of light*. Eredetileg a kininszulfát esetében a 'diszperzív reflexió' kifejezést használta, de azt később megváltoztatta:

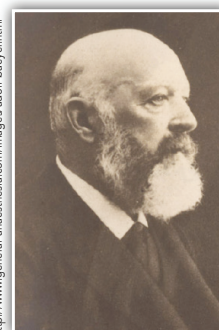
„Be kell valljam, nem szeretem ezt a kifejezést. Hajlamos lennék egy új elnevezést alkotni: *fluoreszcencia*. Ez a fluor spar [kalcium fluorid] nevéből származik, hasonló módon, mint ahogyan az *opaleszcencia* elnevezés is egy ásvány nevéből.” – javasolta.

Stokes prizmat használt a nap színképének felbontására és a kininszulfát oldat besugárzására. Azt találta, hogy az effektus (fluoreszcencia) csak akkor figyelhető meg, ha az oldatot a kiterített színkép ultraibolya részébe helyezi. Meglepte az a

furcsa látvány, hogy az oldat abban a pillanatban kezd el világítani, amikor a színkép nem látható részébe kerül. Szavaival élve: szó szerint az történik, hogy a *sötétség láthatóvá lesz*. Az egész jelenséget *földöntúli jellegűnek* találta. Ezek a megfigyelések indították Stokes-t arra, hogy kijelentse, a fluoreszcencia hullámhossza nagyobb, mint a gerjesztő fény hullámhossza. Ennek elismerése alapján ma ezt az eltolódást a **Stokes-féle eltolódásnak**

nevezzük. Stokes javasolta 1894-ben elsőként, hogy a fluoreszcenciát analitikai eszközként használják. Ez az alábbi előadásában hangzott el: *Optikai tulajdonságok alkalmazása szerves anyagok észlelésére és megkülönböztetésére*.

Az egyik legismertebb fluoreszkáló szerves anyag (fluorofór) a Baeyer (1835-1917) által szintetizált *fluorescein* [2-(3-hidroxi-6-oxoxanthen-9-yl)benzoesav]. A fluorescein nevet valószínűleg a 'fluo' és 'rezorcin' tagokból állította elő, ugyanis a szintézis során a rezorcin reagáltatta

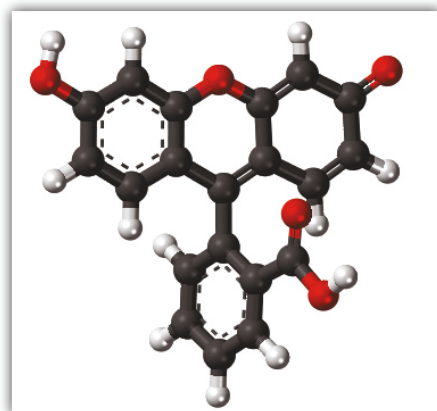


Adolf von Baeyer

ftálsav-anhidriddel.

Baeyer 1905-ben kémiai Nobel-díjat kapott a szerves kémia és a kémiai ipar terén kifejtett tevékenységéért, különösképpen a szerves festékek és aliciklikus

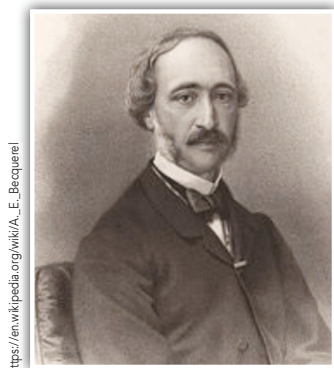
vegyületek terén



A fluorescein térszerkezete

(lásd *Festékanyagok kémiája* című cikkünket a Kémiai Panoráma 6. számában).

A fluorescein színező képességére és általában a fluoreszcencia észlelésének



Alexandre-Edmond Becquerel



George Gabriel Stokes

HOGYAN VILÁGÍTANAK A MOLEKULÁK?



A fluoreszcein fluoreszcenciája

érzékenységére jellemző, hogy 1877-ben fluoreszceint használtak a Duna és Rajna földalatti vízfolyásokon keresztüli kapcsolatának kimutatására. Kb. 60 órával azután, hogy a Dunába fluoreszceint jutattak, egy a Rajnába ömlő kis folyóban megjelent a jellegzetes zöld színű fluoreszcencia. Ezt a festékanyagot használják manapság is a tengerben hánykolódó emberek felkeresésében, pl. az Atlanti óceánba zuhanó úrkabinok felkutatásában.

Paul Erlich (1854-1915) elsőként alkalmazta a fluoreszcein nátrium sóját (*uranin*) *in vivo* a szem üvegteste kiválasztási folyamatainak vizsgálatára (lásd „Kémiai kommunikáció” című cikkünket a Kémiai Panoráma 7. számában).

Visszatérve a vesefából megfigyelt fluoreszcenciára, még modern időkben is fog-**Paul Erlich** lalkozott ezzel Ulises

Acuna, és megállapította, hogy az a kékes fényemisszió, amit már az aztékok is megfigyeltek a *coatli* fában, az abban levő Coatline B nevű flavonoid gyengén lúgos közegben lejátszódó spontán oxidációjának tulajdonítható, amelynek során a fluoreszceinhez hasonlóan erős kék-emittáló anyag keletkezik.

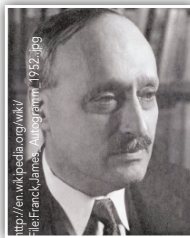
James Franck fizikus 1926-ban a fény hatására lezajló kémiai folyamatokat vizsgálva rámutatott, hogy a foton abszorpció folytán létrejövő elektrongerjesztés pillanatszerű, ez alatt az idő alatt a magok



Ulises Acuna

elmozdulása elhanyagolható. Ha a gerjesztett elektronállapotban a molekula magjainak az alapállapottól eltérő egyensúlyi geometriája van, az elektrongerjesztés rezgési gerjesztésre vezet. Ez pedig befolyásolja az elnyelési és a fluoreszcencia spektrumok rezgési intenzitását. Ezt a magyarázatot még ugyanebben az évben továbbfejlesztette Edward Condon, megadva annak kvantummechanikai leírását. Erre azóta már *Franck-Condon elvként* hivatkoznak. Első alkalmazása Raymond Birge nevéhez fűződik, aki a kétatomos CO molekula elektronszínképének intenzitásvizonyait analizálta ugyancsak 1926-ban.

Megemlíttük, hogy 1968-ban Condon volt a fő szerzője a '*Condon jelentésnek*', amelyet az USA Légierője finanszírozott és amelyben kétségbe vonták az ún. UFO-k létezését, ill. fantasztikus magyarázatait.



James Franck

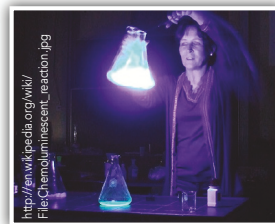


Edward Condon

Noha nem fluoreszcenciás jelenségek, megjegyezzük, hogy vannak melegítésre létrejövő fénykibocsátási folyamatok is, pl. a *termikus lumineszcencia* (lásd a barit kristály esetét). Sőt egyes anyagok dörzsölésre is fénylenek (*tribolumineszcencia*), és kémiai reakciók is kiválthatnak fénykibocsátást (*kemilumineszcencia*). Ez utóbbit alkalmazzák a gyermekek körében igen közkedvelt világító pálcák, és ezt láthatjuk az alábbi laboratóriumi kísérlet fotóján is.

Az óceánokban élő szervezetek is bocsáthatnak ki kemilumineszcenciás

fényt. Néhány esetben nem maguk a szervezetek, hanem a bennük élő baktériumok lumineszkálnak. Az alábbi felvételen a Karib tenger nagy mélységeiben élő szervezeteket látunk saját fényükben

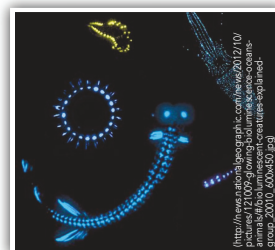


Kemilumineszcencia kísérlet

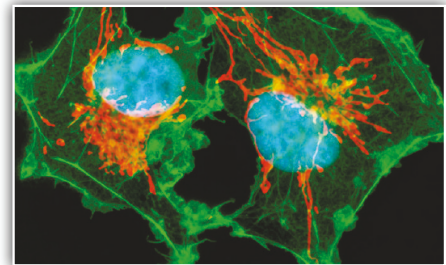
Végezetül röviden utalunk arra a hatalmas fejlődésre, amit a fluoreszcenciás módszerek hoztak a biokémiában és biofizikában, kiemelten pedig a *genetikai kutatásban*. Mindezek kísérletes alapja a modern fluoreszcencia mikroszkópia eszközeinek kifejlődése. Egy ilyen optikai vázlat látható a túloldali képen.

Ezzel a módszerrel különböző fluoreszkáló festékeket alkalmazva úgy festhető meg a sejt, hogy annak egyes alkotórészei (pl. sejtmag, mitokondriumok) más-más színben láthatók. Ilyenkor a fluoreszkáló ágensek fehérjékhez kötődnek. A mellékelt felvételeken majom vese sejteket láthatunk fluoreszcenciás mikroszkópban.

Igen fontos felismerés volt, hogy bizonyos fehérjék természetes állapotukban is fluoreszkálnak kék ill. ultraibolya fénnel való megvilágításra. Ennek nyilvánvaló



Lumineszkáló élőlények

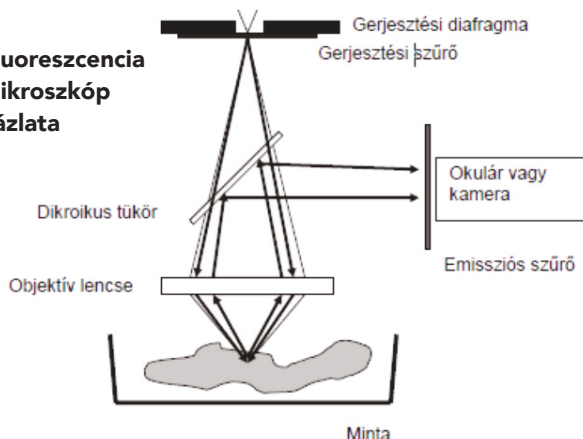


Majom vesesejt fluoreszcenciája

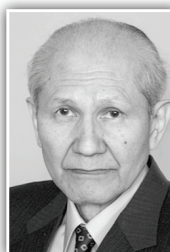
előnye, hogy nem kerül sejtidegen anyag a vizsgált objektumba. Az első ilyen fehérjét, amely 238 aminosavból áll, a kristály medúzából (*Aequorea victoria*) különítették el az 1960-as ill. 70-es években. Ennek a medúzának olyan génjei is vannak, ame-



Fluoreszcencia mikroszkóp vázlata



A GFP kémiai Nobel-díjai 2008-ban



http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2008/

A genetikai kísérletek alanyai hosszú időn át a gyümölcs muslica, a fehér egér, a tengeri malac, majmok és patkányok voltak.

RNA-t. Ezt hívják RNA interferenciának (RNAi) amely növényekben és állatokban egyaránt bekövetkezik. Ezekben a vizsgálatokban is igen jelentős szerepet játszott a fluoreszcencia mikroszkópia.

A fluoreszcencia különböző módszerei a rendkívül gyorsan fejlődő genetikai kutatások alapmódszereivé váltak. Csak név szerint említjük például a fluoreszcenciás megjelölés (*fluorescent tagging*), a fluoreszcencia in-situ hibridizáció (FISH) és a fluoreszkáló nukleotidokat felhasználó mikrochip technológia (*DNA microarray technology*) módszereit. Ezek akár csak felületes ismertetése itt nem oldható meg, óriási anyagról lévén szó, ami nap, mint nap egyre gyorsabban gyarapodik.

Nemes László

lyek ilyen fehérjék képződésére vezetnek. Az eredeti medúzafehérje élénk zölden fluoreszkál ezért GFP-nek (Green Fluorescent Protein) nevezik.

A GFP felfedezése mintegy 50 éve a mikroszkópos vizsgálatokban drámai fejlődést hozott. Az

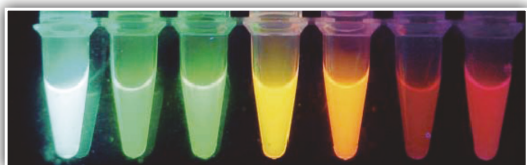
<http://en.wikipedia.org/wiki/File:Aequorea.jpg>



Kristálymedúza fluoreszcenciája

a képesség, hogy genetikusan kódolt fluoreszkáló ágens lehet ráilleszteni majdnem minden fehérje típusra, lehetővé tette a sejteken belüli kémiai kommunikáció mechanizmusainak feltérképezését és a sejt belső mozgásainak megismerését. A GFP és hasonló fehérjék genetikai markerekként való felhasználásáért kapta 2008-ban Martin Chalfie, Osamu Shimomura és Roger Tsien a kémiai Nobel-díjat (lásd „Molekuláris fáklyák” című cikkünket a Kémiai Panoráma 5. számában).

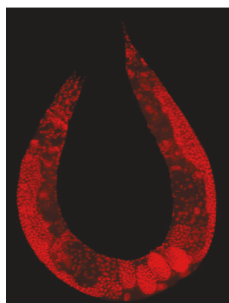
Ha a megfelelő géneket mutációnak vetik alá, a keletkező fehérje fluoreszcenciájának színe széles skálán változtatható, ahogy ezt a következő ábrán látjuk.



Fluoreszkáló fehérjék

Érdekes módon egy újabb, apró lény csatlakozott az utóbbi időkben ezek közé, egy mikroszkopikus fonálféreg, a *Caenorhabditis elegans*. 1963-ban vezette be a kutatásba Sydney Brenner. 2002-ben H. Robert Horvitzcal és John E. Sulston-nal együtt orvosi Nobel díjat kapott a programozott sejthalál és a szervek fejlődésének genetikai vizsgálataiért, amelyeket ezen a kis férgen végeztek. Ugyanezek a gének működnek az emberi szervezetben is. Ez a fonálféreg alig több, mint ezer sejtből áll csupán, minden egyes sejtjét és genetikai felépítését teljesen ismerik. Több mint 19000 proteinkódoló génje van. A talajban él, coli baktériumokkal táplálkozik, könnyen és olcsón tenyészthető. Az alábbi kép mutatja be fluoreszcencia mikroszkópos képét.

Ez a kis férgecske még egy orvosi Nobel-díjat hozott 2006-ban. Andrew Z. Fire és Craig C. Mello ekkor kapták elismerésüket a genetikai szabályozás alapvető mechanizmusának a felfedezéséért. Kimutatták a *Caenorhabditis elegans* felhasználásával, hogy a kettős spirálú RNA a működésből kikapcsolhat egy gént (*gene silencing by double-stranded RNA*) azzal, hogy eltávolítja az ennek a gének megfelelő hírvívó (messenger)



TOVÁBBI OLVASNIVALÓK:

Beniamino Barbieri: A short history of fluorescence, The Fluorescence Foundation (<http://www.fluorescence-foundation.org/lectures/madrid2010/lecture1.pdf>)

Fluorescence Microscopy, Introduction to Fluorescence, <http://micro.magnet.fsu.edu/primer/techniques/fluorescence/fluorointrohome.html>

Fluorescent labeling (http://en.wikipedia.org/wiki/Fluorescent_labelling)

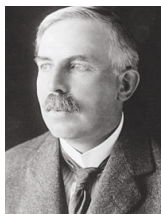
Joseph R. Lakowicz: Principles of Fluorescence Spectroscopy, 3rd edition, Springer, 2006

Mit tudsz az izotópokról?

Lead: Egy kémiai elem atomjai nem kötelezően azonos tömegűek. Mai szóval, a periódusos rendszerben elfoglalt hely a rendszámától, vagyis az atom magjában lévő protonok számától függ, amelyhez különböző számú neutron csatlakozhat. Ez a felismerés nagy jelentőségű volt abban az időben, amikor még azt hitték, a természetben előforduló elemek tömege a hidrogén tömegének egészszámú többszöröse (Prout 1815).

Az izotópok felfedezése és alkalmazása

A történet a radioaktivitás kutatásával kezdődik: Ernest Rutherford (1876-1937), akit a tudomány a nukleáris fizika atyjaként tart számon, 1908-ban kapott kémiai Nobel-díjat a kanadai

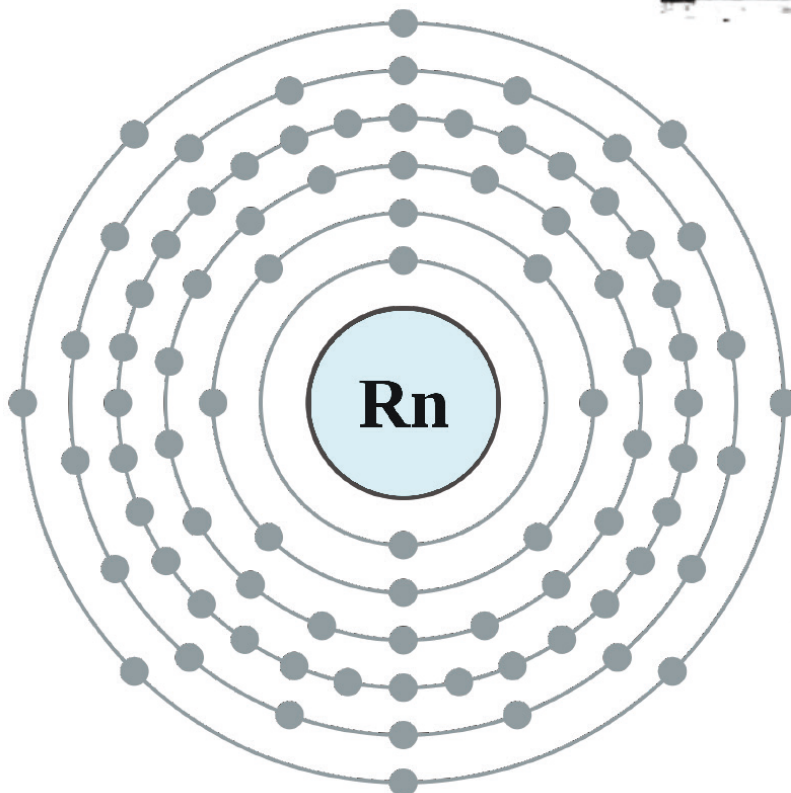


Ernest Rutherford

McGill Egyetemen végzett kutatásaiért, amelyek során igazolta, hogy a radioaktív bomlások alkalmával egyik kémiai elem átalakul egy másikba, megkülönböztette és elnevezte az α - és β - radioaktív sugárzásokat és felfedezte a 86-os rendszámú radioaktív nemes gázt, a radont.

Frederick Soddy (1877-1956) angol kémikus 1900-tól 1903-ig Rutherford munkatársaként radioaktív elemek bomlását tanulmányozta és bevezette a bomlási félidő fogalmát. Később javasolta a bomlási félidő alkalmazását régészeti leletek korának meghatározására, ami széles körben elterjedt (lásd: „Adalékok a titokzatos torinói lepelről” és „Platinafémekek” című cikkeinket a Kémiai

Egy újdonság, egy felfedezés elfogadása és megértése sokszor nehézséget okozott a legnagyobb elméknek is



86: Radon

2,8,18,32,18,8 os

A McGill Egyetemen felfedezett radon elektronhéja

1903-ban egy éves ösztöndíja alatt (University College London) megállapította, hogy a rádium bomlásakor képződő α -részecskék pozitív töltésű hélium atommagok. 1904-től kezdve a Glasgow-i Egyetemen igazolta, hogy uránium bomlásakor rádium képződik. 1912-ben úgy találta, hogy az elemek különböző formában létezhetnek. Az atomok eltérő változatait izotópoknak nevezte el – a görög

„hely”) szavak összevonásával – arra utalva, hogy ezek kémiaiilag azonosak, így a periódusos rendszer azonos helyén kell szerepelniük.

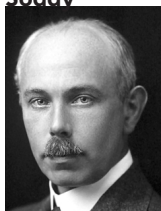
Soddy elméletét a tudományos körök kétkedéssel fogadták, ami nem csoda, hiszen senki nem tudta annak magyarázatát. Az idegenkedésre jellemző, hogy Soddy-t 1921-ben felfedezéseiért kémiai Nobel-díjra javasolták, de a Nobel-



bizottság úgy találta, hogy nem felelt meg Alfred Nobel végrendeletében foglalt kritériumoknak, s ezért az 1921. évi kémiai díjat nem adták ki. A történet azonban szerencsés véget ért, mert 1922-ben két kémiai Nobel-díjat adtak ki: az 1922. évit Francis William Aston kapta, aki elsőként konstruált tömegspektrográfiával igazolta izotópok előfordulását számos nem-radioaktív elem esetében, míg az 1921. évit egy év késedelemmel megkapta Soddy.



Frederick Soddy



Francis William Aston

Aston eredményeire jellemző, hogy a természetben előforduló 287 izotóp atommag közül 217-et ő fedezett fel. Nevéhez fűződik az egészszám szabály módosítása is: minden izotóp tömege egész szám, az oxigén tömege 16-od részének többszöröse (az oxigén 17-es és 18-as tömegszámú izotópja akkor még ismeretlen volt).

Az izotópok alkalmazása területén Hevesy György (1885-1969) nagyon jelentős eredményeket ért el. 1911-ben Rutherford-tól Manchesterben azt a feladatot kapta, hogy radioaktív ólomot válasszon el közönséges ólomtól.

Miután ez lehetetlennek bizonyult, felismerte, hogy a radioaktív ólom felhasználható a közönséges ólom indikátoraként.



Hevesy György



A Niels Bohr Intézet Koppenhágában

Az I. Világháborúban Hevesy magyar katonaként a Monarchia hadseregében teljesített szolgálatot. Háború után a Műegyetem Fizikai Kémiai Tanszékét vezette. Amikor 1920-ban megvonták tőle az előadói jogot, Niels Bohr (1885-1962, a róla elnevezett atommodell megalkotója) meghívására Koppenhágába utazott. 1923-ban itt fedezte fel a periódusos rendszerből akkor még hiányzó 72-es rendszámú elemet, amit Koppenhága latin neve (Hafnia) után Hafnium-nak nevezett el. Ugyanebben az évben meghívták a Feiburgi Egyetemre, ahol korábbi elkötelezettségét meg is valósította: radioaktív ^{212}Pb izotóppal követte nyomon egy babfajta (Vicia faba) gyökerében, szárában és leveleiben az ólom felszívódását és lerakódását. Ezzel megalapozta a radioaktív nyomjelzés módszerét, amit azóta már nem csak kutatásra, de diagnosztikai célra is elterjedten használnak.

Hevesy a II. Világháború alatt Koppenhágában dolgozott, ahová két német tudós, Max von Laue és James Franck a Nobel aranyérmét elküldte. 1943-ban, amikor a német hadsereg megszállta Dániát, Hevesy Svédországba emigrált, de előbb az aranyérmeket királyvízben feloldotta, nehogy felfedezzék, hogy az érmekek illegális úton kijutottak Németországból, s ezzel bajba juttassa tudós kollégáit. A Stockholm University College-ban dolgozott 1961-ig. Még 1943-ban neki ítéltek a kémiai Nobel díjat „az izotópok, mint nyomjelzők felhasználásáért kémiai folyamatokban”, amit azonban csak egy évvel később, 1944-ben kapott meg.

Hevesy a háború után visszatért Koppenhágába, ahol az aranyérmek oldatát a Niels Bohr Intézet laboratóriumának polcán háborítatlanul megtalálta. Az oldatból az aranyat kicsapta és elküldte a Nobel Society-nak, akik az aranyérmeket az eredeti aranyból újraöntötték.

Hevesy 1959-ben nemzetközi díjat kapott a radioaktív izotópok békés felhasználásáért. 1966-ban Freiburgban halt meg. Családja kívánságára 2001. április 19-én szülővárosában, Buda-pesten ünne-

pélyes keretek között helyezték hamvait örök nyugalomra. Ő máig az egyetlen Nobel-díjas tudós, akinek hazánkban van a sírja.



Hevesy György sírja a Kerepesi úti temetőben

A Deutérium felfedezése

Az izotópok történetének következő, talán legnagyobb meglepetése a nehéz hidrogén (deutérium) felfedezése volt. Harold Clayton Urey (1893-1981), amerikai vegyész tanulmányai során egy évet töltött elméleti fizikai tanulmányokkal a Niels Bohr Intézetben, majd kinevezést kapott a Columbia Egyetemre (New York), ahol 1931-ben cseppfolyós hidrogén desztillációjával, majd víz elektrolízisével deutériumot állított elő. Az eredmény azonnal világméretű érdeklődést váltott ki, elismerést és kétkedést is okozott.

Az első vita az elnevezés körül alakult ki. Korábban egyetlen elem izotópja sem kapott önálló nevet, hanem azt csak a tömegszámával jellemezték. Urey-nak a név megválasztása is sok gondot okozott, de neki a számos javaslattevő közül korábbi kaliforniai témavezetője, N. G. Lewis volt a legkellemetlenebb, aki dygén, majd deuton mellett tört lán-



Harold Clayton Urey a deutérium felfedezője



Urey vitája Lewis-szal,
Seo (Sarah) Roh rajza

dzsát. Urey ragaszkodott a deutériumhoz, amit végül is elfogadtak.

A deutérium felfedezésének méltó elismeréseként 1933-ban Londonban a Royal Society rendezett konferenciát kiváló kutatók részvételével a Nehéz Hidrogén megvitatására. A konferenciát Rutherford nyitotta meg.

„A tudomány történetében köz-hely, hogy egy új felfedezés, ami először pusztán tudományos érdeklődést vált ki, évek múltán gyakorlati alkalmazást nyer. Jól jellemzi ezt a légkör nemes gázainak (neon és argon) felfedezése, amelyeket ma már nagy mennyiségben használnak ipari célokra. Az oxigén ^{17}O és ^{18}O izotópjainak felfedezése rámutatott egy apró különbségre a hidrogén és oxigén relatív tömegei között. Raymond T. Birge úgy vélte, hogy az eltérést a hidrogénben egy 2-es tömegszámú izotóp jelenléte okozhatja. Ez vezette Urey-t arra, hogy megvizsgálja a hidrogén spektrumát. Valóban talált egy spektrumvonalat, ami 1.79 Å egységgel nagyobb mint a hidrogén a-vonala. Ezután nagyobb koncentrációban találta a ^2H izotópot elektrolízis cellában és rájött, hogy elektrolízis útján a ^2H izotóp dúsítható. Arra következtetett, hogy minden 6500 közönséges H atomra egy ^2H izotóp atom jut.”

A deuterium különleges kémiai reakcióképességét, azaz a hidrogén és deutérium kémiai különbözőségét Polányi Mihály hangsúlyozta.

„Általános az a nézet, – amiért részint magam is felelős vagyok – hogy a deutérium lassabban reagál, mint a hidrogén. Ennek főként két oka van: (1) a zéruspont energia létezése, és (2) a kvantummechanikai áthatolás az energiagáton.”

Ez az érvelés évtizedekkel meghaladta korát és idővel az izotóp-effektusok értelmezésének alapja lett.

Polányi Mihály (1891-1976) – talán az utolsó polihisztor – hazánk szülötte. 1913-ban orvosi diplomát szerzett, majd kémiai ösztöndíjat kapott a Műszaki Egyetemen. Az I. Világ-háborúban az Osztrák–Magyar Monarchia hadseregében szolgált orvosként. Megsebesült, kórházba került, és lábadozása idején, 1917-ben írta fizikai kémiaiából doktori disszertációját. 1918-ban a Károlyi kormány egészségügyi államtitkára, de 1919-ben nem lépett be a Vörös Hadseregbe. Még ebben az évben a Műegyetemen kémiai doktorátust szerzett. 1920-ban Németországba emigrált és a berlini Kaiser Wilhelm Institutban nemzetközi hírértékelési iskolát hozott létre. 1929-ben János nevű fia született. A család a nemzeti-szocialista hatalomátvétel után Angliába emigrált, ahol Polányi 1934-től a Manchesteri Egyetem fizikai kémia professzora lett. Két tanítványa, Wigner Jenő és Melvin C. Calvin később Nobel-díjas lett. A II. Világháború után érdeklődése egyre inkább a társadalomtudományok (közgazdaságtan, filozófia) felé fordult, és a Manchesteri Egyetem 1948-ban Social Science nevű Tanszéket hozott létre számára.

Fia a Manchesteri Egyetemen tanult kémiát, majd a Toronto-i Egyetemen lett professzor és 1986-ban, mint John C. Polanyi kapta meg a Kémiai Nobel-díjat elemi kémiai folyamatok dinamikájának tanulmányozásáért.



Polányi Mihály



John C.
Polanyi

A Nehéz Hidrogén konferencián rendezett vita alkalmával a deutériumot – mint a hidrogén izotópját – éppen az izotópok felfedezője, Soddy részéről érte erős támadás:

„Kérdéses, hogy a már jól megértett izotóp fogalmat kiterjeszthetjük-e a nehéz hidrogénre pusztán az észlelt spektrum-sávok alapján. . . . Az 1907 és 1910 között felállított szabály szerint, amely végső formáját 1913-ban nyerte el az én laboratóriumomban, Glasgowban, az izotópok egy elem elválaszthatatlan formái. . . . A felfedezett jelentős kémiai különbség a hidrogén és nehéz hidrogén között teljességgel ellentmond az izotóp fogalomnak. . . . A legkevésbé sem kívánom csökkenteni a felfedezés jelentőségét, az amerikai kollégáknak gratulálnunk kell. De óvatosnak kell lennünk a nehéz elemekre érvényes megállapítások alkalmazásakor az első periódus elemeire, különösen a hidrogénre. Sohasem jelöltem ki helyet a nehéz hidrogén részére a periódusos rendszerben és ezért a hidrogén izotóp kifejezést kétszeresen is hibásnak tartom.”

A hidrogén izotópjáról folytatott vitát Rutherford olyan zársszóval értékelte, ami a tudományos érvelés iskolapéldája:



„Mint mindannyian tudjuk, Professzor Soddy – az izotópok felfedezője a radioaktív elemek körében – úgy találta, hogy ezek azonos helyet foglalnak el a periódusos rendszerben és kémiaiilag egymástól elválaszthatatlanok. Azóta sok víz folyt le a hidak alatt és ma már az izotópokról nem kémiaiilag elválaszthatatlan elem-fajtákról beszélünk, hanem mint azonos magtöltésű, de különböző tömegű atomokról. Azt hiszem, senki nem vitatja, hogy a nehéz hidrogén magtöltése ugyanannyi, mint a hidrogéné, s így benne egyetlen elektron kering a mag körül, tehát helyesen tekinthető a hidrogén izotópjának. Természetesen megérttem Professzor Soddy nehézségének okát. Az izotóp elnevezést először nehéz radioaktív elemek atomjaira alkalmazta, amelyek tömegük arányában csak kis mértékben különböztek, nagyon nehezen voltak szeparálhatók, vagy kémiaiilag megkülönböztethetők. Ma az izotóp nevet adjuk a nehéz hidrogénnek, amely a közönséges hidrogéntől könnyen elválasztható és nagyon sajátos tulajdonságokat mutat. Ez annak következménye, hogy a hidrogén izotópok tömegének aránya 1 a 2-höz, és ezért ezek minden olyan tulajdonságukban különböznek, ami a tömegtől függ.

Remélem sikerült meggyőzőnöm Professzor Soddy-t arról, hogy nem mondunk ellen azoknak a lényeges elveknek, amelyek alapján ő először alkalmazta az izotóp elnevezést.”

(lásd táblázat), de a k_H/k_{14} hányados csak néhány %-kal haladja meg az egységet. Ugyanígyen értékű volna a k_H/k_D hányados akkor, ha a D atom nem az elszakadó kötésben, hanem valamelyik metil-cso-

portban lenne jelen (szekunder effektus). Mivel a deutérium-szubstitúció egy, míg a ^{14}C -helyettesítés két atomsúlyegységgel növelte meg a reaktáns tömegét, nyilván nem ez a tényező határozza meg a kinetikus izotóp-effektus értékét. Hanem mi?

Ennek megértéséhez méltatnunk kell egy másik nagy eredményt, a kvantumelmélet felfedezését. Max Planck (1858–1947) német fizikus a fekete test sugárzásának méréséből azt találta, hogy a kibocsátott energia nem lehet tetszőleges értékű, hanem csak bizonyos diszkrét értékeket vehet fel. 1900-ban leírta, hogy a ν [s⁻¹] frekvenciával rezgő rendszer energiája $E = h\nu$, ahol a h állandó szám:

$$h = 6.63 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

amit ma Planck-állandónak neveziünk. A tudományos világ azt a felfedezést, hogy az energia-skála nem folytonos, hanem csomagokból (kvantumokból) tevődik össze, sokáig nem tudta megemészteni. Erről tanúskodik Planck keserű vallomása:

„Egy tudományos igazság nem úgy diadalmaskodik, hogy meggyőzi az ellenfeleit, hanem inkább olyan módon, hogy az ellenfelek meghalnak, és egy új generáció nő fel, amelyik hozzá szokik az igazsághoz.”

Planck eredményeinek elismerése csaknem két évtizedig váratott magára. 1918-ban fizikai Nobel-díjra javasolták, de azt csak 1919-ben kapta meg „az energia

A kétségek ezután hamar eloszlottak, nem utolsósorban azért, mert Rutherford korábbi doktorandusza, a fizikus James



James Chadwick

Chadwick (1891-1974) 1932-ben felfedezte a neutron, és ezzel az izotópok létezése érthetővé vált: a rendszámnak megfelelő magtöltéshez eltérő számú neutron társulása hozza létre az eltérő tömegszámokat.

Mivel a neutronnak nincs töltése, könnyen áthalad a töltéssel bíró anyagokon, és behatol az atommagba is, ahol maghasadást idéz elő. Ez a felfedezés elindította az atombomba kifejlesztését.



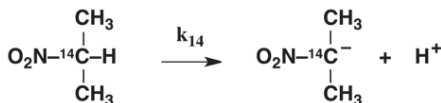
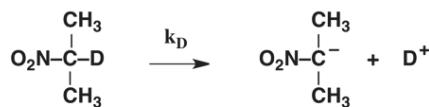
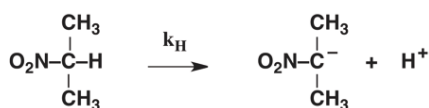
Az atombomba gombafelhője Nagasaki felett

Az atombomba ledobásának cselekedete a mai napig kétségek tárgya, és a tudomány megítélését alapjaiban változtatta meg. Korábban nem félték a tudomány eredményeitől, ezt követően azonban kétségek merültek fel a tudomány „áldásai” tekintetében.

Egyidejűleg sokan elfordultak a tudománytól és ezotériákban, áltudományokban kerestek vigasztalást. A tudomány művelői részére felértékelődött a tevékenységük társadalmi hatása iránt érzett felelősség.

Izotóp-effektus

Most térjünk vissza az izotópok békés alkalmazására! Az a jelenség, amikor az izotópos helyettesítés következtében a reakció sebessége megváltozik, szerves kémiai reakció-mechanizmusok vizsgálatának alapvető módszere lett. Miután a deutérium lassabban reagál, mint a hidrogén, a két izotóp tartalmában eltérő reaktánsok reakciósebességének hányadosát kinetikus izotóp-effektusnak nevezik. Amikor a reakcióban felszakadó kötés tartalmaz két izotópot, az effektust primernek nevezzük. Példaként nézzük meg a 2-nitro-propán C-H kötésének ionos hasadását:

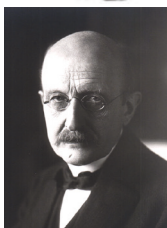


A 2-nitropropán deutérium és ^{14}C kinetikus izotóp-effektusa

A sebességi állandók hányadosával kifejezett kinetikus deutérium-effektus (k_H/k_D) a körülményektől (ionizáló bázis, hőmérséklet) függően 10-nél nagyobb is lehet

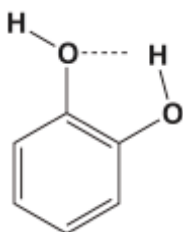
kvantumok felfedezésével a fizika fejlődésének tett szolgálatait.”

Ezután vegyük szemügyre a deutérium-helyettesítés hatását az infravörös spektrumra, amelyet nem a frekvencia, ν hanem a hullámszám, $\nu^* = \nu/c$ [cm^{-1}] függvényében szoktak ábrázolni. (1. ábra)



Max Planck

http://hu.wikipedia.org/wiki/Max_Planck



Pirokatechin

A pirokatechin két hidroxil-csoportja kétféle állapotú, az egyik szabadabban végez rezgéseket, míg a másik hidrogén-kötésben van. Ennek megfelelően kétféle energiájú vegyértékrezgések nyoma látszik az infravörös spektrumban. A szabadabb rezgés 3460 cm^{-1} energiájú fényt nyel el, míg a hidrogénkötésű OH kisebb (3330 cm^{-1}) energiájú abszorpciót jelez. A deutérium helyettesítés következtében az elnyelések helye jelentősen eltolódik (2560 és 2470 cm^{-1}), ami azt jelzi, hogy az O–D kötés rezgése alacsonyabb energiánál következik be. Megjegyzendő, hogy a spektrum-sávok a rezgések alapállapotból (a legkisebb energiájú állapotból) történő gerjesztéséhez tartoznak. A kvantummechanika következménye az, hogy a kémiai kötések rezgéseinek energiaszintjeit számítani tudjuk. Az n -edik energiaszint értéke:

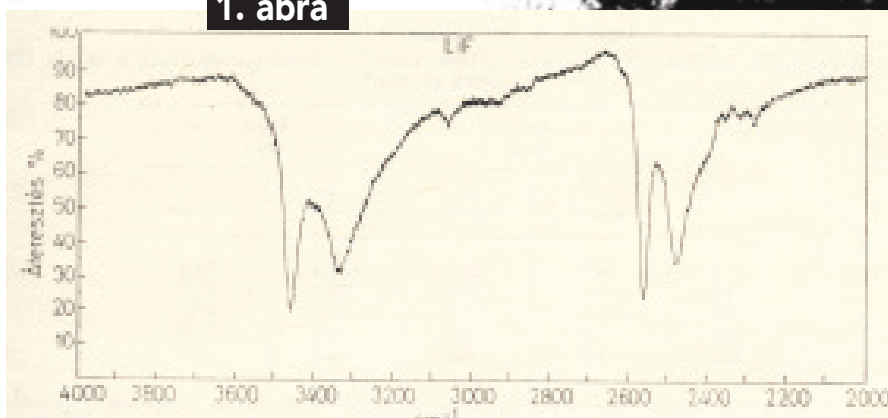
$E_n = (n + 1/2) h\nu$, tehát az $n = 0$ szinthez tartozó, úgy nevezett zéruspont energia (ΔZPE) értéke nem nulla, hanem $E^0 = 1/2 h\nu$. Ebből következően a zéruspont energiák az izotópos helyettesítés következtében különböznek (ΔZPE):

$$\Delta ZPE = E_H^0 - E_D^0 = 1/2 h (\nu_H - \nu_D)$$

A kémiai kötés alapállapotban harmonikus rezgéseket végez, amelynek frekvenciáját a következő képlettel számíthatjuk:

$$\nu = 1/2\pi \sqrt{k/\mu}$$

1. ábra



50 %-ban deuterált pirokatechin infravörös spektruma

ahol k az erőállandó és $\mu = (m_1 \cdot m_2) / (m_1 + m_2)$ a rezgésben lévő rendszer redukált tömege. Mivel az erőállandó a két izotópos kötésre nem különbözik, a frekvenciák különbsége a redukált tömegek különbségétől származik: pl. esetiinkben O–H kötésre $\sqrt{16/17} = 0.970$, O–D kötésre $\sqrt{32/18} = 1.33$. Ennek alapján a frekvenciák hányadosa:

$$\nu_H/\nu_D = 1.33 / 0.970 = 1.375$$

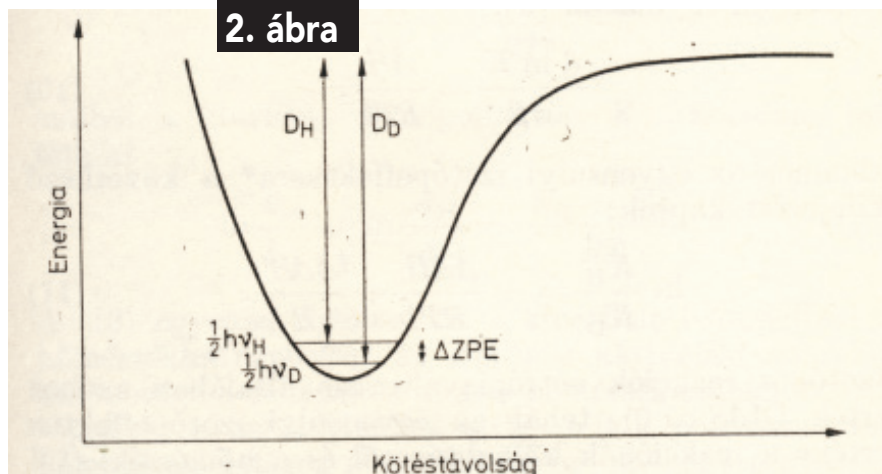
míg a spektrum sávok hányadosa: $3460 / 2560 = 1.352$, ill. $3330 / 2470 = 1.348$, amelyek jó közelítésben egyenlők a számított értékkel és nincsenek messze a $\sqrt{2} = 1.41$ értéktől. Mint látható, a redukált tömeg értékét a kisebb tömeg (H, ill. D) határozza meg.

A zéruspont energia fogalma lehetővé teszi, hogy a kinetikus izotóp-effektust szemléletesen ábrázoljuk. (2. ábra)

Ha egy C–H, ill. C–D kötés gázfázisban disszociál, a kötések alapállapotának különbsége (ΔZPE) a disszociációs energiák különbségében tükröződik. A disszociáció útjában ugyanis a stabilis kötések reprezentáló energia-völgyből a felszakadt kötéseknek megfelelő energia-plátóra való feljutáshoz szükséges energia elnyelése áll. A hidrogént tartalmazó kötés tehát kisebb energia felvételével disszociálhat, mint a nála alapállapotban alacsonyabb energiaszinttel jellemezhető C–D kötés.

Amennyiben a kötések újabb kötésekbe alakulnak át, úgy a reakció termékeit is energia-völgy reprezentálja. A két völgy

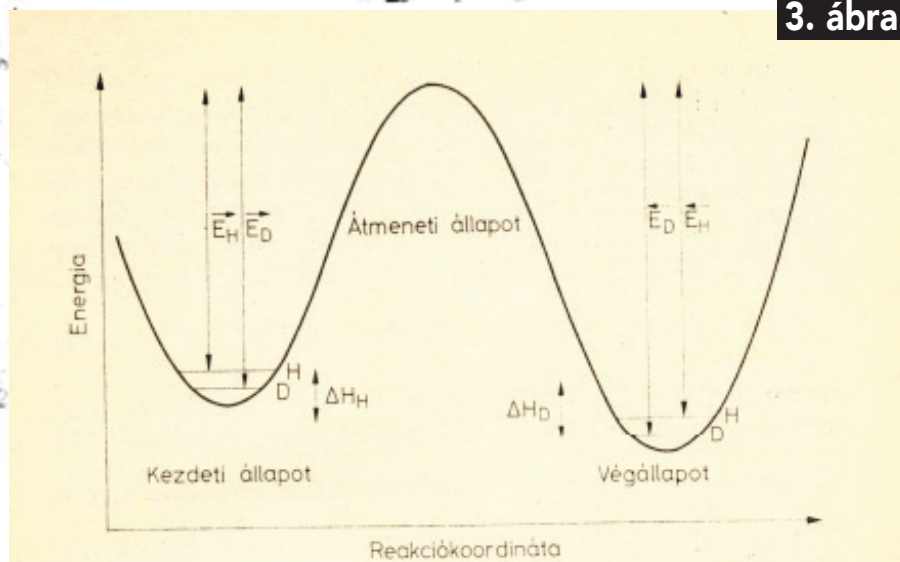
2. ábra



Izotópos kötések disszociációs energiája



3. ábra



ben Ronald P. Bell számításai alapján. (4. ábra)

Összetett mechanizmusú reakciók esetén, amikor az egymást követő lépéseknek csak egyike tartalmazza az izotópos kötés felszakadását, a helyzet bonyolultabb. Ilyen pl. az elektrofil aromás szubsztitúciós reakció. (5. ábra)

A reakció első lépésében (1) átmeneti komplex képződik, ami nem stabilis és kétféle úton bomlik: visszaalakul (–1), vagy deprotonálódik terméké (2). Az izotópos C–H kötés a 2-es lépésben szakad fel. A teljes reakció kinetikai megoldása a következő:

$$\text{Sebesség} = \frac{k_1 k_2 [\text{B}]}{k_{-1} + k_2 [\text{B}]} [\text{ArH}] [\text{E}^+]$$

Mivel a deprotonálás (különösen prótikus oldószerben) gyorsan megy végbe, érvényesül az alábbi egyenletlenség:

$$k_2 [\text{B}] \gg k_{-1}$$

aminek az a következménye, hogy a sebességben az izotópos kötés felszakadásának sebességi állandója (k_2) nem jelenik meg (kiesik), tehát izotóp-effektus nem lép fel (a hidrogén- és deutérium-tartalmú

Izotópos reakciók kezdeti és végállapota közötti energiagát

Hőmérséklet (°C)	$\frac{k_H}{k_D}$			
	C–H	N–H	O–H	S–H
200	4,3	4,6	5,0	3,6
100	6,3	6,9	7,7	5,1
50	8,3	9,3	10,5	6,6
25	9,9	11,2	12,8	7,7
0	12,2	14,0	16,1	9,3
– 25	15,8	18,3	21,3	11,7
– 50	21,5	25,4	30,1	15,4
– 100	52,1	64,6	80,5	33,8
– 200	11700	19500	32800	4200

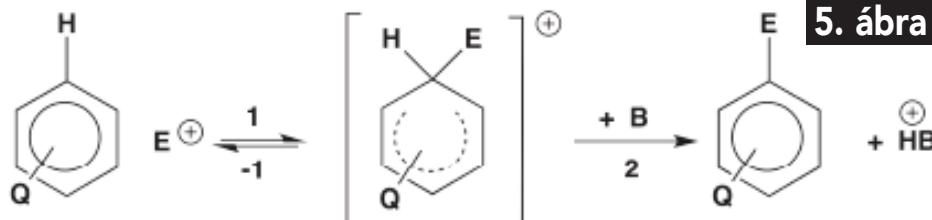
4. ábra

C–H, N–H, O–H és S–H kötések felszakadásával járó reakciók félklasszikus határértékei

között emelkedik a reakció útját álló energiagát, amelynek csúcsát átmeneti állapotnak is hívják. (3. ábra)

A rendszer energiájának a reakciókoordináta mentén történő ábrázolása lehetővé teszi az izotóp-effektusok úgy nevezett félklasszikus határértékének kiszámítását egyetlen lépésből álló, ún. elemi reakciók esetére. A határérték a reakció körülményei által megengedett maximális értéket jelenti, (a félklasszikus jelző arra utal, hogy a zéruspontenergiát a klasszikus fizika nem ismerte, de a számítás figyelembe veszi) azaz a teljes ΔZPE -t tekinti az izotópos reakciók aktiválási energiái különb-

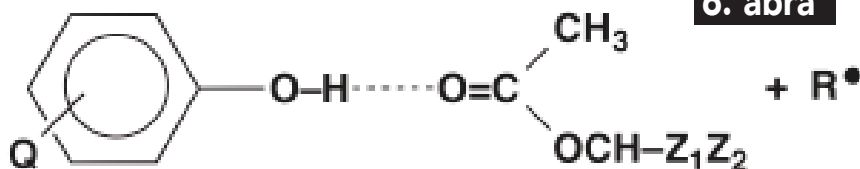
ságének, ami vagy megmérhető (az infravörös spektrumban), vagy számítható. A fenti táblázatban a C–H, N–H, O–H és S–H kötések felszakadására jellemző értékeket láthatjuk a hőmérséklet függvényé-



5. ábra

Elektrofil aromás szubsztitúció kétlépéses mechanizmusa

6. ábra



reaktánsok sebessége megegyezik). Ha azonban a reakció aprótikus oldószerben megy végbe, elérhető, hogy az egyetlőtlenség megforduljon:

$$k_{-1} \gg k_2[B]$$

s ekkor a reakció sebessége a k_2 sebességi állandótól függ, tehát izotóp-effektus mérhető.

A félklasszikus határértékek tehát azt is megmutatják, hogy a fenti összetett reakcióban a második egyetlőtlenség milyen mértékben teljesül, ill. határesetben a k_H / k_D hányados maximálisan mekkora lehet. Legalább is addig volt ez így, ameddig kísérletileg nem mértek nagyobb hányadosokat. Ez bizony több esetben is előfordult, pl. különböző fenolok észterek oldatában lejátszódó gyökös reakciójában, ami az O–H kötés felszakadásával jár. (6. ábra)

A reakcióban 50°C hőmérsékleten

$k_H / k_D = 18$ értéket is mértek és a szubsztituensek változtatásával az izotópeffektus maximumgörbe szerint változott. (7. ábra)

Alagúteffektus

A kvantumelméletnek egy másik következménye az energiagáton történő áthaladásra vonatkozik. A kis tömegű hidrogén ugyanis részleges hullámtermészete miatt a gát csúcsánál alacsonyabb energiával is áthatolhat. Erre vonatkozott Polányi Mihály feltevése az 1933-ban tartott Nehéz Hidrogén konferencián, jóllehet a gáton keresztüli áthatolást (alagúteffektust) az Eyring-féle átmeneti állapot elmélet hatása alatt nem értelmezte helyesen. Ronald Bell (1907–1996) nemzetközi hírt szerzett a proton-transzfer reakciók tanulmányozása során és élharcosa lett annak, hogy az alagúteffektust figyelembe kell venni a hidrogén izotóp-effektusok értelmezésében.



Ronald P. Bell
(E. Caldin, V. Gold: Proton-Transfer Reactions, Chapman, 1975)

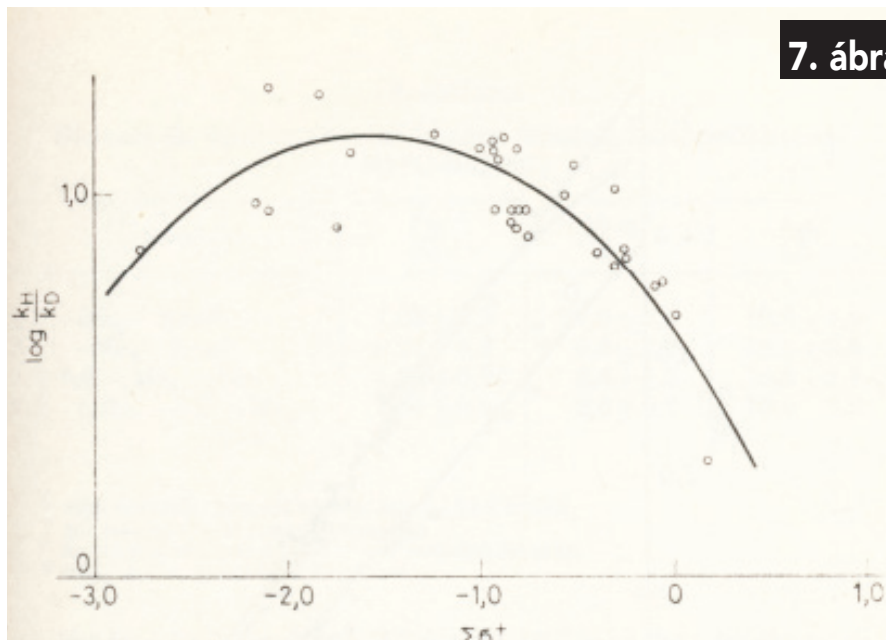
Bell terminológiája – a félklasszikus határérték – arra utal, hogy ezek a számok még az alagúteffektust elhanyagolják. Az izotóp-effektusok teljesebb értelmezése a következő ábrán látható. (8. ábra)

Az izotópos reakciók aktiválási energiája (E_A) tehát két tényező miatt különbözik: az aktiválási energiák különbsége a

kétféle különbség összege lesz. (9. ábra)

Első pillanatra talán meglepőnek látszik, hogy az ábrán a deutérium részére is megengedünk alagút-nívót, amikor sokan még a hidrogén alagút-áthatolását is kétségbe vonják. Az energiagáton való áthatolás azonban nem csak a redukált tömeg értékétől függ, hanem az energiagát szélességétől is, ami reakciónként változhat. Valójában az alagúteffektus nemcsak a félklasszikus határértéket meghaladó k_H / k_D értékekre ad magyarázatot, hanem az izotóp-effektus maximum-függvényét is értelmezni tudja. A szerkezeti paraméterek változtatása révén az energiagát szélessége is változik és ez eleinte csak a hidrogén részére engedi meg a gáton történő átszivárgást, ami a sebességet exponenciálisan növeli. A nagyon keskeny gátakon a hidrogén sebessége már nem sokat nő, azonban a deutérium részére jelentős sebességnövekedés áll be és ez a k_H / k_D értékét telítésbe viszi, majd

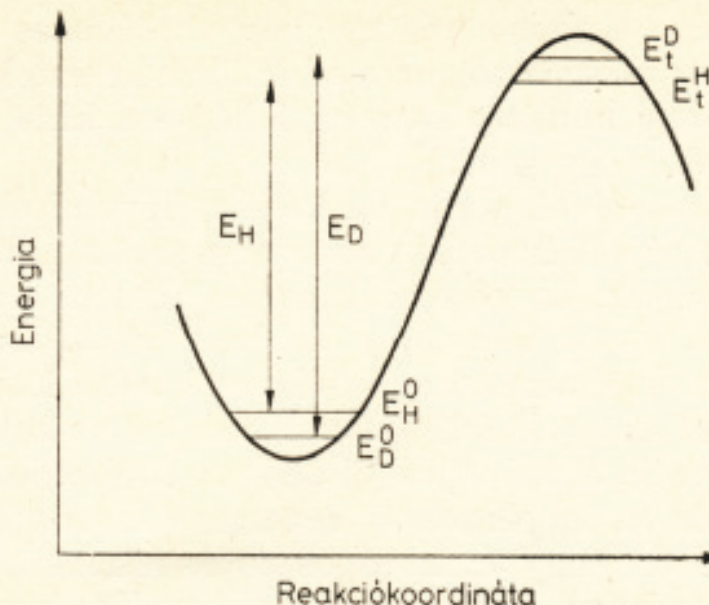
7. ábra



A k_H / k_D maximális értéke nagyobb, mint a félklasszikus határérték fenolok gyökös reakciójában



8. ábra



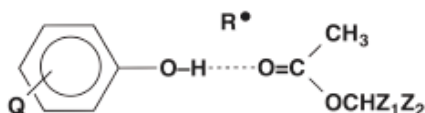
Hidrogén izotóp-effektus értelmezése a zéruspont energiák és alagút-szintek különbségeinek figyelembevételével

9. ábra

$$\Delta E_A = E_D - E_H = \Delta ZPE + \Delta E_t = (E_H^0 - E_D^0) + (E_t^D - E_t^H)$$

csökkenti kezd, s ezáltal maximális értékben viszi át.

Indoklást igényel azonban, hogy miért keskeny az energiagát a bemutatott gyökös reakcióban:



Mint azt az infravörös spektrumban látuk, a pirokatechin hidrogénkötésben lévő O-H kötésének energiája kisebb (stabilitása nagyobb) a szabad állapotú kötésénél. A kinetikus izotóp-effektus bizonyítja, hogy ebben a reakcióban az O-H kötés sebességmeghatározó módon felszakad. Ha

az R[•] gyök az O-H kötést oldalról támadja, a H atom kilépése a két oxigén szomszéd közül olyan mértékű elmozdulással jár, ami meghaladja a kémiai kötések hosszát (> 1 Å) tehát széles energiagátnak felel meg. Ahhoz, hogy keskeny energiagáton történjen az O-H kötés felszakadása, a hidrogénnek a hidrogénkötésen belül kell mozognia. Ez akkor valósulhat meg, ha a reakció két lépéses mechanizmus szerint játszódik le. (10 ábra)

Első lépésben a gyök a karbonil szénatomján addicionál és a gyök a karbonil oxigénatomjára kerül. Ez a köztitermék kétféle úton reagálhat: k₁ sebességi állandóval visszaalakul, vagy k₂ szerint tovább reagál. Az O-H kötés a 2-es sebesség-meg-

határozó lépésben szakad fel, tehát k₁ >> k₂ és a hidrogénatom a hidrogénkötésen belül ≈ 0.3 Å távolságot tesz meg, tehát az energiagát nagyon keskeny. Ezt a mechanizmust más, az izotóp-effektustól független módszerek is igazolták.

A kinetikus izotóp-effektus módszere tehát értékes eszköz szerves kémiai reakciók mechanizmusának kutatásában. Alkalmazásával makroszkópikus mérésekből egyetlen kötésre kapunk jelzést, mégpedig annak átalakulása közben, azaz abban a pillanatnyi időszakban, amely általában el van zárva a közvetlen észlelés lehetőségétől.

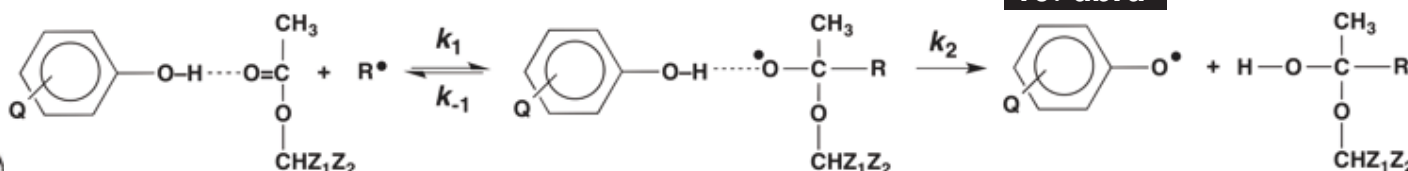
Simonyi Miklós
MTA Természettudományi
Kutatóközpont



TOVÁBBI OLVASNIVALÓK:

- Proc. Roy Soc. A 1934, 144, doi: 10.1098/rspa.1934.0032
- R. P. Bell: Chem. Soc. Rev. 3, 513, 1974
- R. P. Bell: The Tunnel Effect in Chemistry, Chapman, 1980
- M. Simonyi, I. Mayer: J. Chem. Comm. Chem. Commun, 1975, 695
- J. Kardos és mtsai: J. Chem. Soc. Perkin Trans. II, 1978, 405
- Simonyi M. Fitos I.: A Kémia Újabb Eredményei, 1980, 11-129
- D O'Leary: Nature Chem.4, 236, 2012

10. ábra



Egyszerű reakciók kinetikája

Kémiai reakciók olyan folyamatok, amelyek során egy (vagy több) anyag átalakul egy (vagy több) más anyaggá. Egyszerű esetben a reaktáns(ok) teljesen átalakul(nak) termék(ek)ké és a reakció mechanizmusának leírása nem okoz nehézséget. Ilyen elemi folyamatok leírására matematikai egyenleteket vezettek le és azokat változtatás nélkül tanítják több mint egy évszázada.

A kreativitás gyermekkorban a legnagyobb, idővel csökken. A diák még közelebb áll legkreatívabb korszakához, mint a tanár, s ezért időnként meglepő választ adhat kérdéseinkre. Egy klasz-szikus példa a következő.

1904-ben egy fizika vizsga feladata az volt, hogyan mérhető meg barométer segítségével egy felhőkarcoló magassága? A diák így válaszolt: kössük rá a barométert egy hosszú zsinórra, és a felhőkarcoló tetejéről lógassuk le a földig. A zsinór hosszának (l_1) és a barométer magasságának (l_2) összege megegyezik a felhőkarcoló magasságával: $h = l_1 + l_2$.

A vizsgáztató a vizsgát sikertelennek minősítette. A diák úgy vélte, hogy teljesen helyes választ adott és a rektorhoz fordult. A rektor egy másik tanárt jelölt ki, akinek meg kellett állapítania, vajon a diák fizikai ismeretei elégségesek-e. A kérdés ugyanez volt, amire diák 6 percet kapott. Miután 5 percig gondolkodott, a 6. percben megkezdte feleletét:

“Az első ötletem az, hogy a barométerrel felmegyünk a felhőkarcoló tetejére, és ledobjuk onnan. Megmérjük a földet érésig eltelt időt, és a kérdéses magasságot kiszámítjuk a $h = 0.5gt^2$ képlettel. Elismerem, hogy a módszer a barométer szempontjából végzetes.

Amennyiben süt a nap, megmérhetjük mekkora a barométer magassága (l_2) és árnyéka (s_2). Ezután megmérjük a felhőkarcoló árnyékának hosszát (s_1), és aránypár segítségével kiszámíthatjuk a magasságát: $h = l_2 s_1/s_2$.

Ha nagyon tudományosak akarunk lenni, a földön (g_o) és a tetőn (g) mért gravitációs erők különbségéből meghatározhatjuk az épület magasságát. Ehhez egy l hosszúságú zsinórt kötve a barométerre ingaként használhatjuk azt. Megmérve az inga lengésidőjét mind a földön, ($T_1 = 2\pi\sqrt{l/g_o}$), mind a tetőn ($T_2 = 2\pi\sqrt{l/g}$), a $h = 2R(T_2^2 - T_1^2)/T_1^2$ képlettel kiszámíthatjuk a kért magasság értékét ($R = 6400$ km, a Föld sugara).

Ha a felhőkarcolónak van tűzlétrája, akkor megszámlálhatjuk hányszor fér rá a barométer hossza, majd egyszerű szorzással megkapjuk a kívánt eredményt.

Hanem amennyiben Ön arra a közönséges módszerre kíváncsi, amikor a barométert légnyomás mérésére használjuk, a földön és a tetőn mérhető légnyomás különbségéből is

Ne bosszankodjunk, ha a diák nem azt feleli, amit elvártunk tőle

megállapítható a felhőkarcoló magassága. Egy millibar légnyomás különbség közelítően húsz láb magasságnak felel meg.

A legegyszerűbb módszer mégis csak az, ha bekopogunk a portáshoz, és azt mondjuk neki: ‘Ha megmondod, milyen magas ez az épület, neked adom ezt a barométert.’

A diák a vizsgán átment, 1913-ban megalkotta az atom modelljét és 1922-ben fizikai Nobel-díjat kapott. Ő volt Niels Bohr.¹

Elemi kémiai reakcióban a reaktáns koncentrációjának időtől való függését elsősorban gondosan kivitelezett kísérletben határozták meg. A.V. Harcourt, az Oxfordi Egyetem kémikus diákja, és barátja, az Egyetem fiatal matematikus tanára, W. Esson 1865-ben arra szövetkeztek, hogy a reakcióban a kémiai változást állandó körülmények (hőmérséklet, nyomás) között az idő függvényében kvantitatív formában leírják. Különböző koncentrációjú hidrogénperoxid oldatokat készítettek és az elreagálás idejét úgy mérték, hogy a képződő jódot (amit a keményítőtartalmú oldat kék színnel jelzett) hiposzulfit oldat csepegtetésével jodiddá alakították vissza. Ezzel a módszerrel a reakció alatt a jodid ion koncentrációját állandó értéken tartották. A reakció végét az utolsó hiposzulfit adagolása jelezte, ami után a kék szín már nem tért vissza. A mért reakcióidőket a hidrogénperoxid bemért koncentrációjának függvényében ábrázolták. A nagyszámú kezdeti koncentráció – reakcióidő értékpárból a pillanatnyi koncentráció időtől való függésére következtettek. Dolgozatukban a következő megállapításokat tették²:

A koncentráció (y) az idő (t) függvényében az (1) egyenlet szerint változik:

$$1. \quad y = ae^{-\alpha t}$$

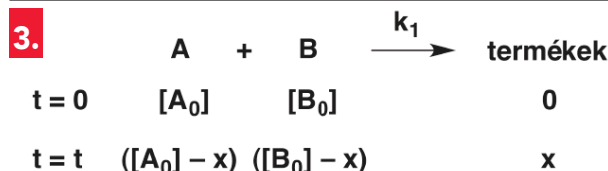
ahol a a hidrogénperoxid kezdeti ($t=0$ –hoz tartozó) koncentrációja, és α értéke független az időtől. Az egyenlet idő szerinti deriváltja:

$$2. \quad \frac{dy}{dt} = -\alpha y$$

vagyis a koncentráció időbeli fogyása csak az időben változó koncentráció pillanatnyi értékétől függ. A mechanikai analógia miatt az utóbbi egyenletet a kémiai változás sebességének nevezték el, az α értéket pedig sebességi állandónak. A sebességi állandó tehát nem elméleti megfontolás eredménye, hanem kísérleti tapasztalat. A konstans a reaktáns idő-



egység alatt átalakuló hányadát adja meg. A ma is használatos tankönyvek részére egy kézikönyv foglalja össze a kinetikai levezetéseket³. Nézzük meg a hidrogénjodid oxidációjához hasonló bimolekulás reakció két egyszerű esetét. **A** és **B** molekulák reagálnak egymással, **t** = **0** időpontban, legyen **[A]₀** és **[B]₀** a molekulák kezdeti koncentrációja, amiből **t** időpontban **x** termék képződik (**k₁** a sebességi állandó):



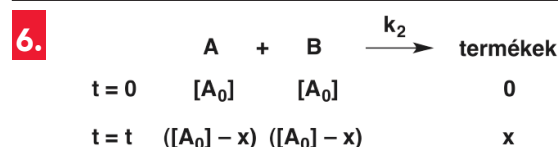
ekkor a sebességet így írhatjuk fel:

$$\text{4.} \quad \frac{dx}{dt} = k_1([\text{A}]_0 - x)([\text{B}]_0 - x)$$

ami integrálás után a következő eredményt adja:

$$\text{5.} \quad k_1 t = \frac{1}{([\text{B}_0] - [\text{A}_0])} \ln \left[\frac{[\text{A}_0]([\text{B}_0] - x)}{[\text{B}_0]([\text{A}_0] - x)} \right]$$

Ez az egyenlet **0/0** határozatlan alakot vesz fel akkor, ha a reaktánsok kezdeti koncentrációja megegyezik, azaz **[A]₀ = [B]₀**. A kézikönyv³ ezért új levezetést ad meg, ami azonos azzal, amit Harcourt és Esson 100 évvel korábban leírt:



amikor a sebesség:

$$\text{7.} \quad \frac{dx}{dt} = k_2([\text{A}_0] - x)^2$$

és integrálás után az eredmény:

$$\text{8.} \quad k_2 t = \frac{x}{[\text{A}_0]([\text{A}_0] - x)}$$

Egy – Niels Bohr-nál kevésbé híres – magyar diák azt kérdezte egyszer:

„Ugyan miért szükséges egy második levezetés arra az esetre, amikor **[A]₀ = [B]₀**? Vajon a reagáló molekulák más függvény szerint fogynak, amikor koncentrációjuk egyenlő? Különben is, az Avogadro szám hatalmas értéke miatt a kon-

centrációk pontos megegyezése csak elméleti határeset.”

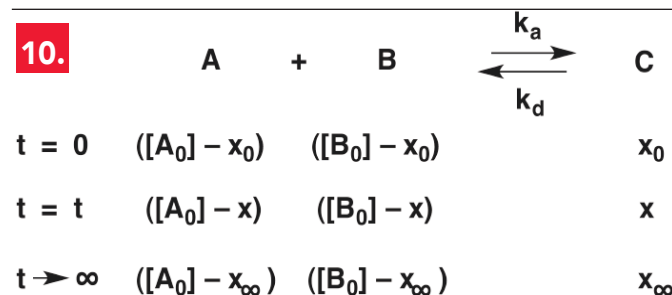
Ennek a diáknak is volt egy matematikus barátja, aki így válaszolt:

„Valóban, az (5) egyenlet **[B]₀ → [A]₀** feltétel esetére határérték számítással megoldható“:

$$\text{9.} \quad \lim_{[\text{B}_0] \rightarrow [\text{A}_0]} \left\{ \frac{1}{([\text{B}_0] - [\text{A}_0])} \ln \left[\frac{[\text{A}_0]([\text{B}_0] - x)}{[\text{B}_0]([\text{A}_0] - x)} \right] \right\} = \frac{x}{[\text{A}_0]([\text{A}_0] - x)}$$

és eredményül megkapjuk a (8) egyenletet.

Követve a logikát, hogy egyszerűbb reakció egyenlete általánosabból származtatható, levezethető egy olyan alapvető képlet, amiből különböző határesetek képzésével megkapható az összes egyszerű megoldás⁴. Induljunk ki az alábbi reverzibilis reakcióból:



A reakció az egyenlet bármelyik oldaláról indulhat és egyensúlyban (**t** → ∞) felírható:

$$\text{11.} \quad K_d = \frac{k_d}{k_a} = \frac{([\text{A}_0] - x_\infty)([\text{B}_0] - x_\infty)}{x_\infty} = Q - [\text{A}_0] - [\text{B}_0] + x_\infty$$

ahol **Q** egy segédmenyiség:

$$\text{12.} \quad Q = \frac{([\text{A}_0])([\text{B}_0])}{x_\infty} = K_d + [\text{A}_0] + [\text{B}_0] - x_\infty$$

A reverzibilis reakció differenciálegyenlete:

$$\text{13.} \quad \frac{d(x - x_\infty)}{dt} = k_a(x - x_\infty)[(x - x_\infty) - (Q - x_\infty)]$$

amelynek megoldása:

$$\text{14.} \quad x = \frac{x_\infty(Q - x_0) + Q(x_0 - x_\infty)e^{-k_a(Q - x_\infty)t}}{Q - x_0 + (x_0 - x_\infty)e^{-k_a(Q - x_\infty)t}}$$

Lássuk, mit tud a (14) egyenlet. Ha $t \rightarrow 0$, az exponenciális kifejezések értéke 1-gyel lesz egyenlő és $x \rightarrow x_0$. Ha $t \rightarrow \infty$, az exponenciális faktorok zérussá válnak és $x \rightarrow x_\infty$, ahogy mindkettőt a (10) reakció felírásánál definiáltuk. Tehát x változik x_0 -tól x_∞ -ig; amennyiben $x_0 < x_\infty$, az egyenlet egyensúlyi asszociációt ír le, ha $x_0 > x_\infty$, az egyenlet egyensúlyi diszszociációra vonatkozik. A reverzibilitás megszűnik, ha k_a , ill. k_d sebességi állandók bármelyike 0-hoz tart. Így $k_a \rightarrow 0$ esetben a (14) egyenlet kinetikailag elsőrendű, irreverzibilis disszociációt fejez ki és számos tényező egyszerű alakot vesz fel:

$$15. \quad k_a \rightarrow 0; \quad x_\infty \rightarrow 0; \quad Q \rightarrow \infty; \quad \{(Q - x_0)/(Q - x)\}^{-1}; \quad k_a Q \rightarrow k_d;$$

amelyek felhasználásával (11) -ből azt kapjuk, hogy:

$$16. \quad \lim_{k_a \rightarrow 0} x = x_0 e^{-k_d t};$$

ami nem más, mint Harcourt és Esson (1) egyenlete.

Amennyiben a k_d állandó tart 0-hoz, a felírt egyensúly bimolekulás asszociációvá válik. Legyen $[A]_0 < [B]_0$, amikor a következő egyszerűsítések lehetségesek:

$$17. \quad k_d \rightarrow 0; \quad x_\infty \rightarrow [A]_0; \quad Q \rightarrow [B]_0; \quad x_0 \rightarrow 0;$$

amelyek felhasználásával azt kapjuk, hogy:

$$18. \quad \frac{1}{([B]_0 - [A]_0)} \ln \left[\frac{[B]_0 ([A]_0 - x)}{[A]_0 ([B]_0 - x)} \right] = -k_a t$$

ami nem más mint a (-1) -gyel szorzott (5) egyenlet. Ha most a kiindulási koncentrációk megegyeznek, azaz:

$$19. \quad k_d \rightarrow 0; \quad x_\infty \rightarrow [A]_0; \quad x_0 \rightarrow 0; \quad Q \rightarrow [B]_0;$$

és $[B]_0 \rightarrow [A]_0$;

akkor a (14) egyenletből származtatott (18) határértékének számításával:

$$20. \quad \lim_{[B]_0 \rightarrow [A]_0} \left(\frac{\ln \left[\frac{[A]_0 ([B]_0 - x)}{[B]_0 ([A]_0 - x)} \right]}{[B]_0 - [A]_0} \right) = \frac{x}{[A]_0 ([A]_0 - x)} = k_a t$$

megkapjuk a (8) egyenletet.

Ha a reagáló molekulák koncentrációi nagymértékben különböznek, az egyensúly gyakorlatilag egyirányúvá válik:

$$21. \quad [B]_0 / [A]_0 \rightarrow \infty; \quad x_\infty \rightarrow [A]_0; \quad Q \rightarrow (K_d + [B]_0);$$

$$k_a Q \rightarrow (k_d + k_a [B]_0);$$

valamint $Q \gg x, x_0, x_\infty$;

és a (14) egyenletből ezt kapjuk:

$$22. \quad \lim_{[B]_0 / [A]_0 \rightarrow \infty} x = [A]_0 + (x_0 - [A]_0) e^{-(k_d + k_a [B]_0)t}$$

ami formailag egy elsőrendű reverzibilis asszociációs reakció, amelynek sebességi állandója: $(k_d + k_a [B]_0)$. Amennyiben a reverzibilitást kizáró további feltételeket is alkalmazunk:

$k_d \rightarrow 0$, és $x_0 = 0$, akkor a formálisan elsőrendű irreverzibilis asszociációs reakció megoldását kapjuk:

$$23. \quad \lim_{[B]_0 / [A]_0 \rightarrow \infty} x = [A]_0 (1 - e^{-k_a [B]_0 t})$$

amelynek sebességi állandója $k_a [B]_0$.

Végül, ha megvizsgáljuk az egyensúlyi reakciónak azt a határesetét, amikor $t=0$ esetén $x=0$, ennek általános megoldása:

$$24. \quad \frac{1}{(Q - x_\infty)} \ln \left[\frac{Q (x_\infty - x)}{x_\infty (Q - x)} \right] = -k_a t$$

ami nagymértékben hasonló az irreverzibilis asszociációt leíró (18) egyenlethez. Ez a hasonlóság azt jelenti, hogy a koncentráció időtől való függését ábrázoló görbék önmagukban nem tesznek különbséget az egyirányú és egyensúlyra vezető asszociációs reakciók között az $[A]_0$ és $[B]_0$ koncentrációk ismerete nélkül.

Belátható, hogy a (14) egyenletből határesetként megkaphatjuk mindazon kifejezéseket, amelyeket a tananyag külön-külön esetekként tárgyal, s így a reakciókinetikai ismereteket egymástól látszólag független osztályokba sorolja. Valójában, az általánosabb érvényű kinetikai egyenlet megteremti a kapcsolatot az egyszerűbb reakciók sebességi kifejezéseivel és nem osztja fel a tudást különféle megoldásokra. Ezáltal nem is ösztönzi a diákokat arra, hogy különböző formulákban gondolkodjanak.

Vajon mikor kerül be a (14) egyenlet az egyetemi tananyagba?

Simonyi Miklós, Mayer István
Természettudományi Kutatóközpont



OLVASNIVALÓK:

1. <http://www.sg.hu/listazas.php3/listazas.php3?id=1067516807&order=timeline&index=44>
2. M.H. Back, K.J. Laidler: *Selected Readings in Chemical Kinetics*, Pergamen, 1967.
3. C. Capellos, B.H.J. Bielski: *Kinetic Systems*, Wiley, 1972.
4. M. Simonyi, I. Mayer: *Education in Chemistry*, 1985, 22, 52.



Zöld, fehér, oolong és fekete tea



Az oolong tea szárított levele

A tea nevű közismert és közkedvelt ital a teacserje (*Camellia sinensis*) szárított leveleiből készülő főzet. Különböző feldolgozási módjai révén a tealevelekből egészen különleges teák nyerhetők. A teák tulajdonságaikban ugyan különböznek egymástól, de abban megegyeznek, hogy zamatos, illatos és serkentő hatásúak. A tea őshazája Kína és Korea, ahol az emberek már több mint ezer éve isznak teát. Innen terjedt el Japánba, Indiába és más Dél-Kelet Ázsiai országokba. Európába a XVII. században hozták el a hajósok.

A teázás az egyes kultúrákban különösen fontos szerepet játszott. Japánban még ma is szertartásos keretek között fogyasztják a zöld teát. Angliában pedig a teázás része az étkezéseknek és a társasági életnek.

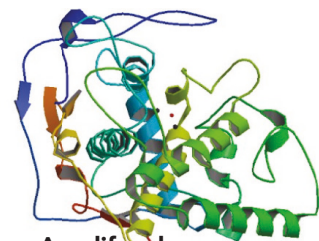
A teacserjét 0,5-1,5 m magas, lapos, gömbös alakú formára nyesik. A cserje gyökérrendszerében az oldalágak sekélyek, főgyö-

medicinában zöld teát használtak számos betegség gyógyítására és mentális folyamatok javítására. Igen gyenge, napon történő oxidáció eredményezi a fehér teát. Ez az eljárás a tea legrégebbi feldolgozási módja. Az Európában legnagyobb mértékben fogyasztott fekete teát jelentős mértékű oxidációval nyerik, míg az oolong tea esetében a levelek oxidációját a folyamat közepén állítják le.

Teaszedés után a leveleket hervasztják, kiterítik a szabadba, amíg megfionnyadnak, sodorják, majd a következő lépésben többé-kevésbé szárítják. A sodrás, amit ma már ritkán végeznek kézzel, segít összekeverni a levélben található különböző vegyületeket, és elősegíti az fermentálást. A folyamat során a levél sejtfalai felszakadnak, és a sejtnedvek a levél felületére kerülnek, ahol az enzimekkel levegő jelenlétében keverednek el. A fermentálás során képződnek azok a vegyületek, amelyek a fekete tea jellegzetes ízét adják. A fermentálás során szinte az összes aromaanyag mennyisége nő, és új vegyületek is képződnek. A fermentáció a levelekben jelenlevő enzim, a polifenol-oxidáz enzim segítségével oxigén dús atmoszférában játszódik le. A fermentáció során a levelekben jelentős mennyiségben előfor-

duló polifenolok, elsősorban katechinek oxidálódnak. Emellett a friss levelekben számos más enzim is előfordul, így például peroxidáz, amiláz, a peptidáz és foszfatáz is. A friss levelek ásványi anyagai közül az alumínium és a réz a legfontosabb. A réz a tea fermentációjában fontos polifenol-oxidáz enzimből fordul elő.

A polifenol-oxidáz enzim előfordul a gyümölcsökben és zöldségfélékben is, különösen a héjukban. Közismert, hogy gyümölcsök sérülésekor a héjuk megbarnul. A héjban és a héjhoz közeli anyagokban jelenlevő, de egymástól izolált polifenol molekulák és az enzim a gyümölcs sérülésekor kapcsolatba lépnek és a polifenol molekulákat az enzim kinonná oxidálja. Ez okozza például az alma barnulását.



A polifenol-oxidáz enzim szerkezete

A tealevél kémiai összetétele függ a növény fajtájától, a levél korától, a talajtól, az éghajlattól és a termesztés módjától. Kémiai összetevői a polifenolok, elsősorban a katechinek (15-30%), flavonoidok (2-4%), aminosavak (4-5%) és szénhidrátok (4-5%), továbbá a koffein (4%). Egyéb összetevői a keményítő (2-5%), fehérjék (15%) és bizonyos poliszaharidok (12%). A tealevél vízben oldhatatlan komponensei a cellulóz (7%), a lignin (5-6%) és lipidek (3%), továbbá festékek (3%) és illékony anyagok (0,5%). A tealevelek feldolgozása során a koffeintartalom nem csökken jelentősen.

A friss levélben előforduló aminosavak közül elsősorban a teanin (5-N-etil-



A teázás szertartása Japánban

kerük azonban a 6-8 m mélységet is elérheti és igen sok tápanyagot raktároz.

A tea négy fő típusa, a zöld, a fekete, az oolong és a fehér tea. Számos különböző fajta létezik a négy fő kategórián belül is. Mindegyik típust ugyanabból a teacserjéből készítik. A fő különbség közöttük az eltérő feldolgozás. A feldolgozás első fázisa a teaszedés, majd utána következik az fermentációval történő oxidáció. A különböző típusoknál az oxidáció eltérő ideig zajlik.

Az oxidáció nélkül készülő zöld tea tartalmazza a legnagyobb koncentrációban az antioxidáns vegyületeket, amelyek semlegesítik a DNS sérülést és sejthalált okozó szabad gyököket. A tradicionális kínai és indiai

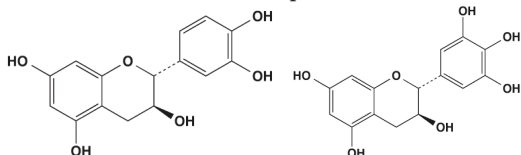


Teaföld Kínában



glutamin) jelentős, amely a tealevelek szárazanyag-tartalmának 2%-át teszi ki, és kizárólag a teában fordul elő. A teanin a zöld tea ízének fontos komponense; ezen kívül számos más aminosav is kimutatható a levelekben.

A friss tealevélben előforduló leggyakoribb zsírsavak: a linolénsav, palmitinsav és linolsav. A zsírsavak reakciói szerepet játszanak az aromaképződésben. A zöld tea

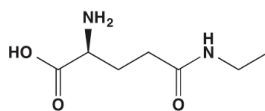


Katechin

Gallo catechin

jellegzetes illata, alkohol és karbonil tartalmának tulajdonítható.

A teát sohasem szabad főzni, vagy forralni, hanem kevés forró vízzel kell leönteni, hogy a tealevelek szétnyíljanak. Ezután öntsünk hozzá több forralt vizet, majd a kannát fedjük le és 3-5 perccig hagyjuk állni. Ezután leszűrve válik fogyaszthatóvá. Hosszú idejű állás esetén a tea jelentősen kilógozódik és fanyar ízt kap a kioldódó csersavtól.



Teanin

Az interneten számos honlap foglalkozik a zöld és a fekete tea különböző betegségekre gyakorolt gyógyító hatásával. Tény az, hogy a tradicionális kínai és indiai gyógyászat felhasználta a zöld teát vízhajtásra, légzési- és szívbetegségek enyhítésére, a vércukor szabályozására és az emésztés javítására. A rákbetegségek megelőzésében játszott szerepéről is számosan meg vannak győződve. Különösen Japánban, ahol fogyasztása igen általános, és ahol sokkal kevesebb a tüdőrákos megbetegedéseinek száma, mint Európában vagy az Egyesült Államokban. Természetesen a daganatos megbetegedésekben szerepük van az étkezési módoknak és a környezeti hatásoknak. Az elmúlt évtizedekben számos klinikai és állatkísérletben tanulmányozták a zöld és a fekete tea daganat megelőző hatását, különösen a bőr, a máj, a gyomor, az emlő és vastagbélrákkal

kapcsolatban. Kimutatták, hogy a mind a zöld tea, mind a fekete tea csökkenti a szervezet koleszterin és triglicerid szintjét. Továbbá, hogy napi 3 csésze tea 11%-al csökkenti a szívinfarktus esélyét.

A teák hatóanyagai közül a polifenolok (különösen katechinek) betegségmegelőző szerepét is vizsgálták. A kísérletek számos esetben pozitív eredményre vezettek, de általánosan nem sikerült igazolni a teák, illetve hatóanyagaik daganatos betegségeket kivédő hatását. Az eredmények azt jelzik, hogy a tea hatékonyságát a rák gyógyításában illetve megelőzésében továbbra is vizsgálni kell. Ismeretes, hogy számos betegség kialakulásában a szabadgyökök és az általuk okozott oxidatív folyamatok játszanak szerepet. Ezekben a betegségeken kimutatható a szervezet antioxidáns védekezésének csökkenése. Emiatt nem meglepő, hogy a természetes antioxidáns anyagok, mint például a polifenolok, pótlásával az oxidatív károsodás csökkenthető, és a betegségek kialakulása lassítható.

Hogy korrekt képet kapjunk a teák gyógyító hatásáról, érdemes idézni az USA National Institute of Health (NIH, Nemzeti Egészségügyi Intézet) könyvtárának Természetes Gyógymódok adatbázisából (U.S. National Library of Medicine). Az adatbázis mai tudományos ismereteink alapján a természetes anyagokat az alábbi osztályokba sorolja: **1. Hatékony, 2. Nagy valószínűséggel hatékony, 3. Valószínűleg hatékony 4. Valószínűleg hatástalan, 5. Nagy valószínűséggel hatástalan, 6. Nincs elég adat a hatékonyságra**

A zöld és fekete tea hatásáról az adatbázisból néhány adat:

1. Nagy valószínűséggel hatékony

- a genitális szemölcsök gyógyítására
- a mentális figyelem növelésére (elsősorban a koffein tartalma miatt)

2. Valószínűleg hatékony

- a szédülés megelőzésében (különösen idősek körében)
- a méhnyak- és a hasnyálmirigyrák megelőzésében (azoknak a nőknek akik rendszeresen isznak zöld vagy fekete teát, szignifikánsan kisebb az esélyük az említett betegségek kialakulására)
- a Parkinson kór kialakulásának csökkentésében, vagy kéleltetésében

- a vér koleszterin és a triglicerid tartalmának csökkentésében (érelmeszesedés)
- a human Papilloma vírus hatása ellen (a méhnyakban kialakuló abnormális sejtnövekedés csökkentésében)

3. Valószínűleg hatástalan

- a tüdőrák megelőzésében
- Nincs elég adat megítélni hatékonyságát
- a magas vérnyomás megelőzésében (egy kísérletek alátámasztják, mások elvetik hatását)
- a szívinfarktus megelőzésében (japán vizsgálatok szerint azon nők esetében, akik napi három csésze zöld teát isznak kisebb a szívinfarktus esélye, mint azoknál, akik csak napi egy csészét isznak, vagy egyet sem)
- a csontritkulás, a 2. típusú cukorbetegség, a mellrák és a prosztata rák megelőzésében (a különböző földrészekben, különböző populációkon végzett kísérletek eredményei eltérőek)

A világ számos klinikáján jelenleg is folynak kísérletek a gyógynövények hatékonyságának felderítésére. A tudományos igazoláshoz, azonban egyértelmű adatokra van szükség és ezek összegyűjtése hosszú időt vesz igénybe, a gyógyszerek hatékonyságának megítéléséhez hasonlóan.

Bár a gyógynövények számos összetevője – így a teák molekulái is – a növényekből kivonva számos esetben gyógyszerek hatóanyagaivá válnak, a gyógynövényekben kicsi a koncentrációjuk. Így csak rendszeres fogyasztás esetében várható hatásuk bármely betegség megelőzésében, vagy esetleges gyógyításában. Hatékonyságukat csökkentheti más körülmény, például az étkezési szokások és a környezeti hatások is.

Kőszegi Lidia



Irodalom:

- <http://hu.wikipedia.org/wiki/Erjedés>
- <http://www.kfki.hu/~cheminfo/hun/teazo/tea/kemia.html>
- <http://umm.edu/health/medical/altmed/herb/green-tea>
- Fehér J, Vereckei A. szabadgyök reakciók jelentősége az orvostudományban. Medicina, Biogal, Budapest, 1985
- <http://www.nlm.nih.gov/medlineplus/druginfo/natural/960.html>
- http://phd.lib.uni-corvinus.hu/708/1/Mednyanszky_Zsuzsanna.pdf



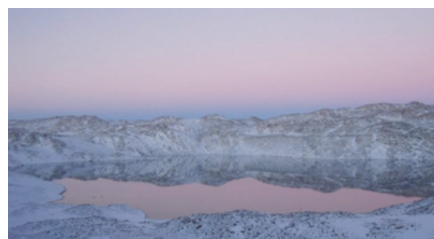
A földrajzi Déli-sarkot két felfedező érte el: 1911. december 14-én a norvég Roald Amundsen, 1912. január 17-én Robert Falcon Scott. Teljesítményüket közös emléktábla őrzi. Munkásságuk nemcsak a geográfia tudománytörténetében játszott fontos szerepet, hanem említést érdemel a biokémia vonatkozásában is.



Mikrobák az Antarktiszon

Az Antarktisz az 5. legnagyobb kontinens. 14 millió km² -nyi területe közel kétszer akkora, mint Ausztrália. Felületének 98%-át jég borítja, amelynek átlagos vastagsága 1600 m. Legmagasabb csúcsa (4897 m) a Vinson-hegységben található, legmélyebb pontja a jéggel borított Bentley-árok (2555 m a tenger szintje alatt), amely egyben a földkéreg legnagyobb mélysége, amit nem óceán borít.

Az Antarktiszon a jégpáncél alatt 150 tavat is felfedeztek, de kivételt képez a jéggel nem fedett Deep Lake, amelynek partja – az Antarktisz legmélyebben fekvő megközelíthető pontja – 50 méterrel a tenger szintje alatt helyezkedik el. Földrajzilag a Ross jégzátayon található (77° 35' déli szélesség, 166° 15' keleti hosszúság) nem messze Scott kapitány bázisától, ahová ő – szerencsétlen módon – 1913. március végén már nem ért vissza.



A Deep Lake képe

A Deep Lake korát 3500 évre becsülik, víze olyan sós (4 M ~ 20%), hogy az év során be sem fagy. A tó vizének hőmérséklete 8 hónapon át 0 °C alatt marad, télen a -18 °C-t is eléri. A tó a kutatók részére különleges hely annak tanulmányozására, hogy milyen életforma lehetséges ennyire szélsőséges körülmények között.

Az élő szervezetek egyik nagy csoportját képező ősbaktériumok nagy sótartalmú közeget igénylő fajtái, az úgynevezett haloarcheák élnek a Deep Lake vízében. Ezek egysejtű, sejtmag nélküli prokarióta szervezetek, amelyek szaporodásához legalább 10%-os sótartalom szükséges, de megélnek telített sóoldatban (37%) is. Haloarcheák megtalálhatók melegebb éghővi sós tavakban is, amelyekben elszaporodva rózsaszínűre festik a vizet a szervezetükben található karotinoid pigmentek miatt, ami védelmet nyújt számukra az UV sugarak ellen.

A Maryland Egyetem (Baltimore, USA)

A proteinek szerkezete ad választ arra, hogy mi teszi lehetővé az élet fenntartását különleges körülmények között



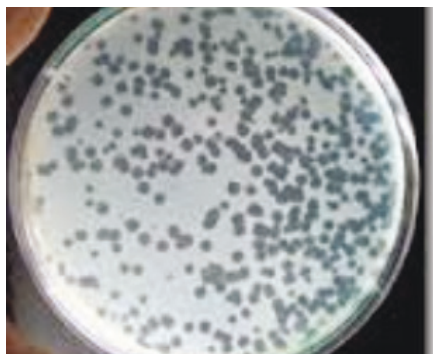
Sós tavak San Francisco mellett

kutatói szerint a mikrobák proteineinek szerkezete választ ad arra, hogy mi teszi képessé őket életük fenntartására ennyire különleges körülmények között. A Deep Lake hideg és a tengervíznél jóval sósabb vízből izolálták a Halorubrum lacusprofundi nevű ősbaktériumot, ami laboratóriumban is tenyészthető.

Az ősbaktérium génállományát vizsgálva és összehasonlítva mérsékelt éghővi



HIDEG- ÉS SÓTÚRÓ ŐSBAKTÉRIUMOK



Halorubrum tenyészet

variánsaival fontos megállapításokat tettek a fehérjét felépítő aminosavak előfordulását illetően. Kiválasztottak 604

olyan proteint, amelyek a haloarcheák hidegtűrő és mérsékelt égővi fajtáiban egyaránt megtalálhatók, és összehasonlították ezek aminosav összetételét. A grafikon szemlélteti a kétféle család különbségeit.

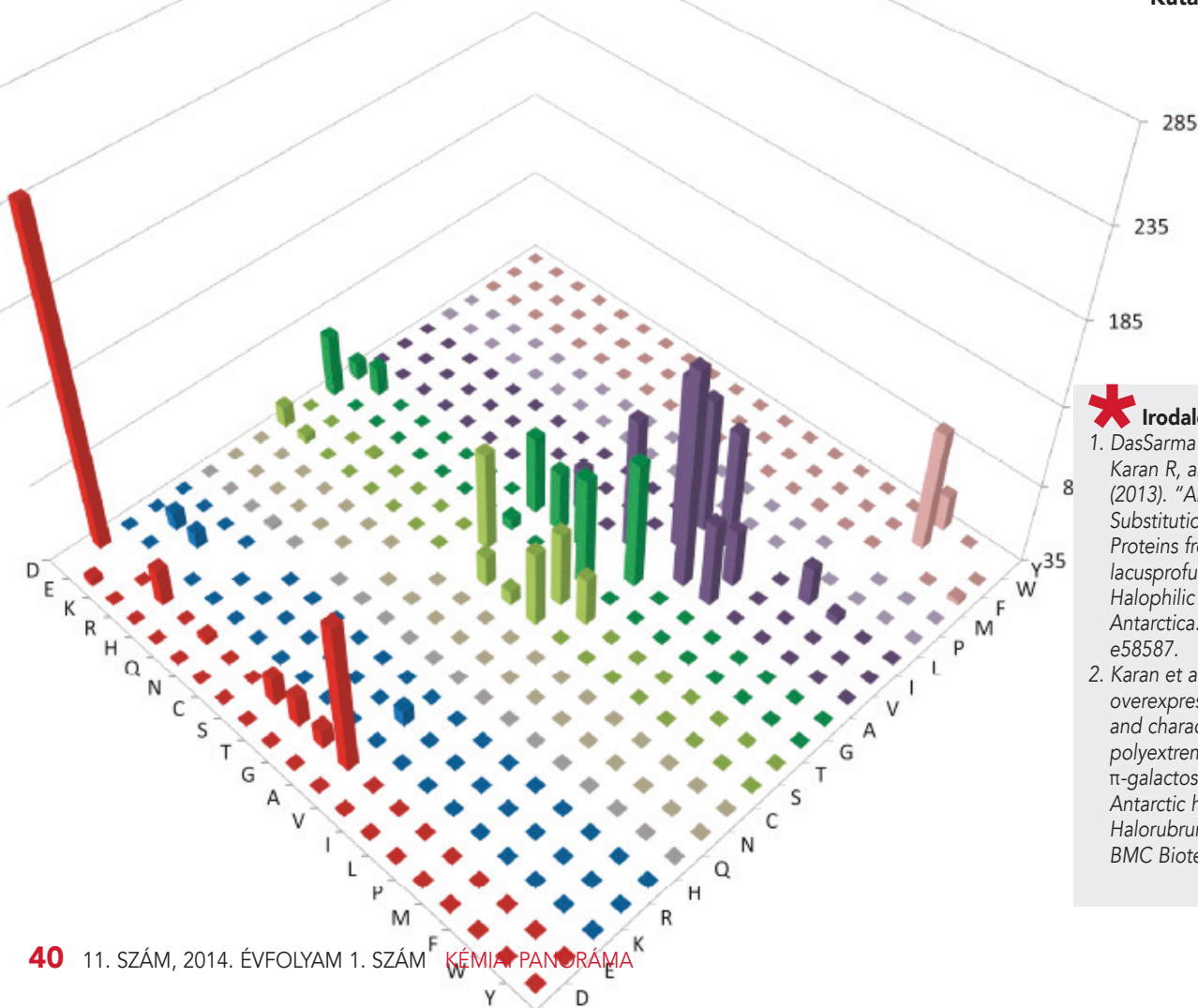
Aminosavak szubsztitúciója a *Halorubrum lacusprofundi* (baloldali tengely) és mérsékelt égővi haloarcheák (jobboldali tengely) 604 konzervált fehérjéi között. A helyettesítések számát a függőleges tengely mutatja, amelynek skálája 35-től indul.

A helyettesítések számát külön is megvizsgálták savanyú, bázikus és nem-polá-

ris aminosavak esetére. Megállapították, hogy a hidegben élő mikróbák fehérjemolekuláinak felülete kevésbé negatív, mint a mérsékelt égővi fajtáké. Utóbbiak hidrátburokot vonnak maguk köré, ami védi őket a kiszáradástól. A fagyos környezetben azonban a hidrátburok lerontaná a fehérjék működését, így a kevesebb negatív töltés csökkenti a fehérjék kölcsönhatását a vízzel. Azt is megfigyelték, hogy a fehérjék belsejében olyan aminosavak cseréjére kerül sor, amelyek a fagyos környezetben flexibilisebb szerkezetet biztosítanak a *Halorubrum profundi* számára.

Ezek a kémiai trükkök tették képessé az ősbaktériumokat arra, hogy a fagyos környezetben is élhessenek és szaporodjanak.

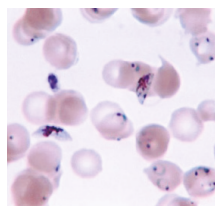
Simonyi Miklós
MTA Természettudományi
Kutatóközpont



Irodalom:

1. DasSarma S, Capes MD, Karan R, and DasSarma, P. (2013). "Amino Acid Substitutions in Cold-Adapted Proteins from *Halorubrum lacusprofundi*, an Extremely Halophilic Microbe from Antarctica." *PLoS ONE* 8(3): e58587.
2. Karan et al. (2013). "Cloning, overexpression, purification, and characterization of a polyextremophilic π -galactosidase from the Antarctic haloarchaeon *Halorubrum lacusprofundi*. *BMC Biotechnology*, 13:3.

A malária előfordulási gyakorisága a világon



Az ember harca a Plasmodium génhez tartozó egysejtű parazitákkal évezredek óta tart, évente jelenleg is több mint egymillió életet követel. Az Anopheles szúnyogfajok nyálában élő paraziták terjesztik a maláriát trópusi és szubtrópusi országokban. Korábban azt hit-

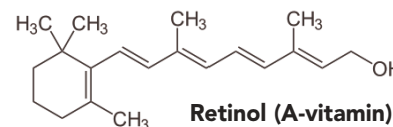
A gazdagabb országokban sikerült a betegséget leküzdeni

ne. Mái g sem sikerült malária ellen védőoltást létrehozni. Jóllehet a malária leküzdése nagymértékben társadalmi probléma (egészségügyi ellátás színvona- la, hozzáférés orvoshoz és gyógyszerhez, stb.) a kutatás nem szűnik újabb gyógy- szerek és terápiás módszerek érdekében. Néhány sztenderd gyógyszer szerkezetét az ábrán mutatjuk.

CC1(C)C=CC(C)=C/C=C/C(C)/C=C/C(C)/C=C/C(=O)O

Retinolsav

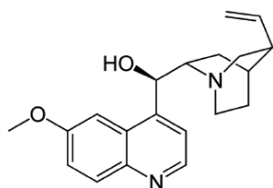
Retinolsav



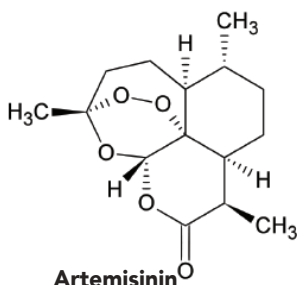
Retinol (A-vitamin)

A parazitából felszabaduló retinolsav membránkárosító hatása miatt megtámadja a magzatot is és koraszülést okoz, vagy a magzat növekedését hátráltatja. Ezért a malária elleni küzdelem új koncepciója az, hogy a parazita A-vitamin metabolizmusát kell megtámadni.

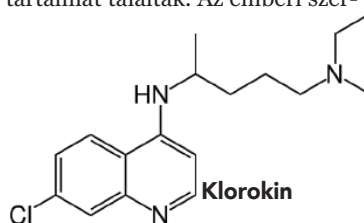
Simonyi Miklós



Kinin



Artemisini

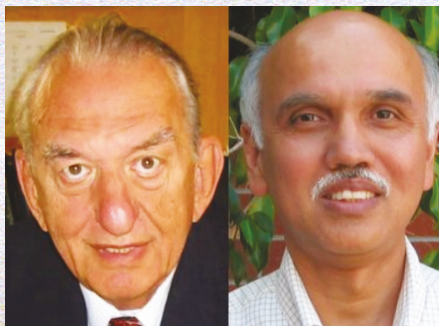


Klorokin



Annals of Tropical Medicine and
Parasitology
Volume 107, Number 3, April 2013, pp.
122-128.

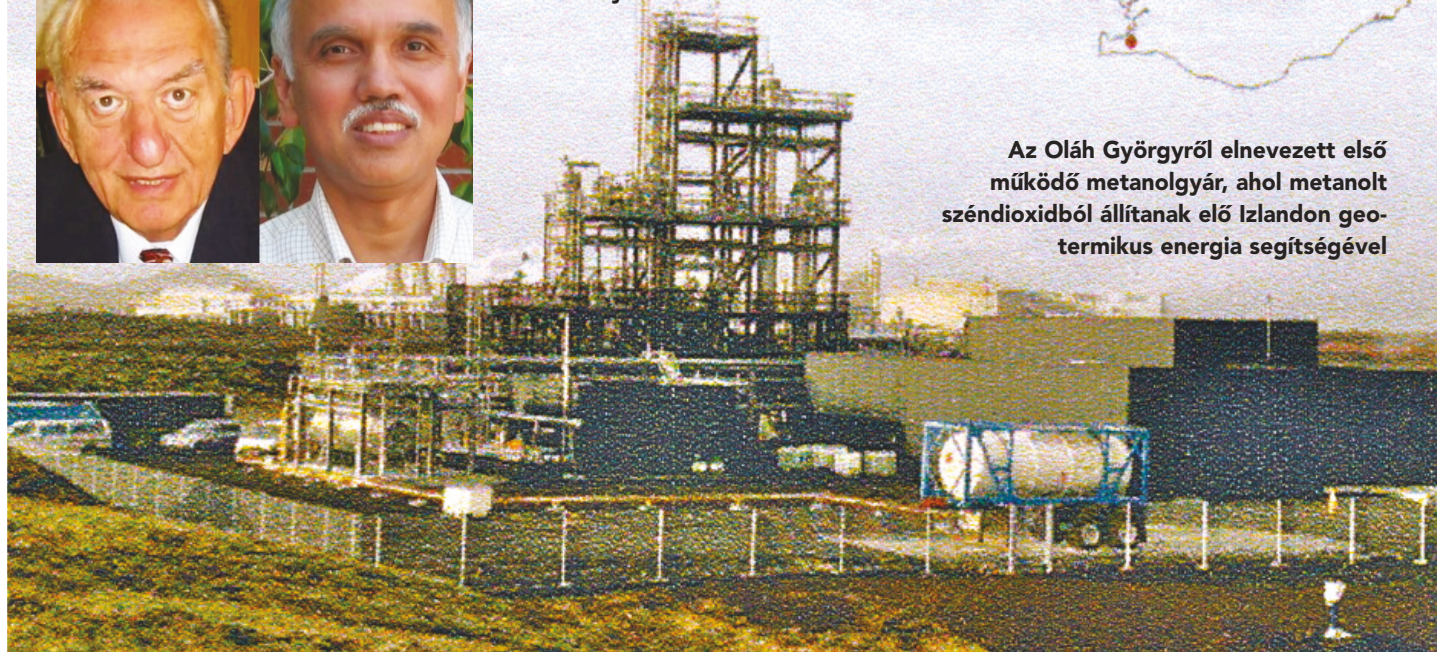
Díjazott metanol-kutatások



George A. Olah
és G.K. Surya Prakash



Az Oláh Györgyről elnevezett első működő metanolgyár, ahol metanolt széndioxidból állítanak elő Izlandon geotermikus energia segítségével



Forrás: Carbon Recycling International, Iceland.

Oláh György, az 1994. évi kémiai Nobel-díj nyertese és munkatársa, G.K. Surya Prakash, a University of Southern California (USC, Los Angeles, USA) tudósai 1 millió dollár (USD) összegű díjban részesültek az alternatív üzemanyagok fejlesztése érdekében végzett kutatásaikért.

A díjat Eric és Sheila Samson alapította, és Izrael állam miniszterelnöke 2013. november 12-én adta át a nyersolajtól való függőség csökkentésére indított nemzeti program keretében. Oláh és Prakash a díjat főként a metanol piac megteremtésével érdemelte ki: terveik szerint a jövő gazdaságában a metanol helyettesítheti a fosszilis üzemanyagokat (szenet, olajat, földgázt) különféle célok, köztük a felszíni szállítás érdekében.

Mint ismeretes, Oláh György a Budapesti Műszaki Egyetemen szerzett vegyészi diplomát, ahol 1954-ig dolgozott a Szerves Kémiai Tanszéken. Ekkor kinevezték a Szerves Kémiai Osztály vezetőjének és igazgatóhelyettesnek az MTA Központi Kémiai Kutató Intézetébe. 1956-ban elhagyta Magyarországot és először Kanadában dolgozott a Dow Chemical Company alkalmazottjaként, majd 1965-ben visszatért a kutatás területére Clevelandben (Case Western Reserve University), ahol a Kémiai intézet vezetője lett. 1977-óta dolgozik jelenlegi munkahelyén, ahol jelenleg professzor és egyben a Loker Hydrocarbon Research Institute társ-igazgatója.

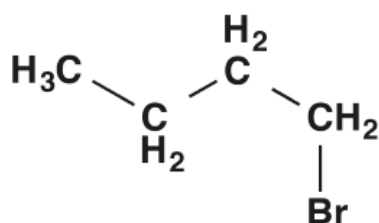
Prakash a Bangalore Egyetemen és az Indiai Műszaki Egyetemen, Madras-ban diplomázott 1974-ben, majd 1978-ban a jelenlegi munkahelyén (USC, Los Angeles) szerzett PhD-t Oláh vezetésével fizikai-szerveskémiai területen. Jelenleg az Oláh házaspár által alapított

Szénhidrogén Kémiai Tanszék professzora, egyben a Loker Hydrocarbon Research Institute igazgatója.

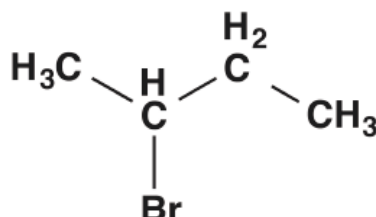


Publikációk:

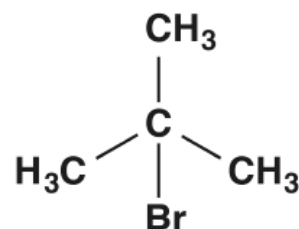
1. George A. Olah,* G. K. Surya Prakash, Alain Goeppert, Miklos Czaun, and Thomas Mathew: Self-Sufficient and Exclusive Oxygenation of Methane and Its Source Materials with Oxygen to Methanol via Metgas Using Oxidative Bi-reforming. *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135 (27), 10030–10031.
2. G. K. Surya Prakash, Federico A. Viva, George A. Olah: Electrochemical reduction of CO₂ over Sn-Nafion coated electrode for a fuel-cell-like device. *J. Power Sources* 2013, 223, 68–73.
3. George A. Olah: Towards Oil Independence Through Renewable Methanol Chemistry. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, 52, 104–107.



primer butil-bromid



szekunder butil-bromid



tercier butil-bromid



Az alkil-halogenidek tudósa

2013. október 28-án emlékezett a kémia tudománya Sir Christopher Ingold (1893-1970) születésének a 120. évfordulójára.

A szerves kémiai vegyületek elektron-szerkezetének és reakcióik mechanizmusának 1920-as, 30-as években született felfedezései nagyrészt Ingold munkásságának eredményei. Ekkor vezetett be olyan fogalmakat, mint elektrofil, nukleofil és rezonancia effektus továbbá definiálta a mechanizmusok jelölésének kódjait: SN1, SN2, E1, E2. Később résztvevője volt a királis vegyületek sztereokémiai jellemzésére szolgáló konvenció, a Cahn-Ingold-Prelog prioritási szabályrendszer megalkotásának. Egyik úttörője volt a fizikai-szerveskémiai szemlélet megerősítésének.

Ingold egyetemi tanulmányait megza-

varta az I. Világháború, amelyben rövid időre szolgálatot végzett. A londoni Imperial College-ban szerzett PhD-t 1918-ban és DSc fokozatot 1921-ben. 1924-től Leedsben a Szerves Kémia professzora, majd 1930-ban vissztért Londonba

(University College London) ahol 1937-től 1961-ig a Szerves Kémiai Intézet vezetője volt.

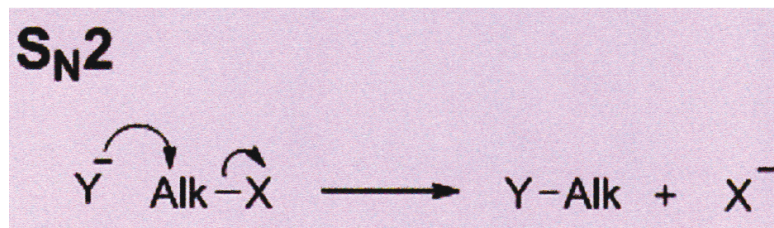
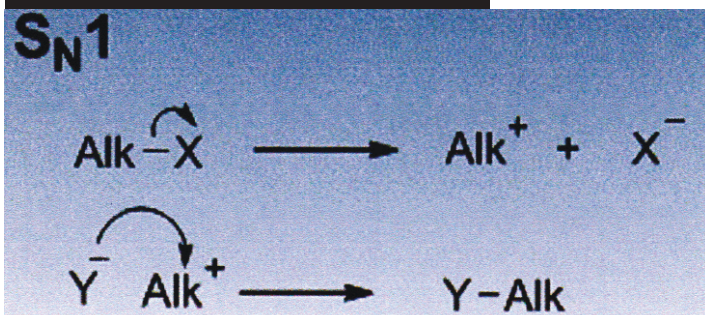
Legjelentősebb eredményeit az alkil-halogenidek szubsztitúciós reakcióinak tanulmányozása során érte el. Azt állapította meg, hogy a szekunder és terciér alkil származékok nukleofil reagensek-



kel kétlépéses reakcióban vesznek részt és a sebesség csak az alkil-halogenid koncentrációjától függ (SN1).

Ugyanakkor a primer alkil származékok nukleofil reakcióinak sebessége mind a nukleofil, mind az alkil-halogenid koncentrációjától függ és a reakció mechanizmusa egylépéses (SN2).

Sec/terc alkil-halogenidek nukleofil reakciójának sebessége csak a halogenid koncentrációjától függ: SN1



Primer alkil-halogenidek reakciójának sebessége mindkét reakciópartner koncentrációjától függ: SN2

Az Univerzum laboratóriumi

Az elmúlt fél évszázadban a csillagászok és űrkutatók komoly erőfeszítéseket tettek, hogy a Földön kívüli élet közvetlen vagy közvetett nyomait felkutassák. E kutatások egyelőre nem jártak eredménnyel. Mai ismereteink szerint Földünk az egyetlen olyan objektum, amelyen magas fokú szervezethez alkalmazkodó élő anyag előfordul. Igaz, megjelenésének története bolygónkon még ma sem ismert teljes bizonyossággal. Jelenlegi ismereteink alapján igen valószínű az a hipotézis, hogy az élet a fiatal Naprendszerben, magán a bolygónkon alakult ki.

Az élő anyagot tömegükben nagyrészt vízből, kisebb mértékben szerves anyagból álló sejtek hozzák létre, és nehéz elképzelni, hogy a sejteket zord körülményekből érkező meteoritok és üstökösök szállították a Földre. Igen valószínű, hogy sejtek csak óceánokkal és atmoszférával rendelkező bolygón alakulhatnak ki.

Az élő anyag létrejöttéhez, a bioszintézishez és reprodukcióhoz víz, úgynevezett biogenikus elemek, hidrogén, szén, oxigén, nitrogén, foszfor), szerves molekulák (aminosavak, cukrok) és energiaforrás (fény vagy kémiai energia) továbbá megfelelő környezeti körülmények („laboratórium”) szükségesek.

Földi ismereteink alapján élő anyag létezhet „normális” környezeti körülmények között, (pH ~7, kis ionerősség, 300 K körüli hőmérséklet, 1-2 bar nyomás és oxigén jelenléte) és létezhet „extrém” feltételek között is (lúgos, vagy savas közeg, alacsony vagy magas hőmérséklet, nagy nyomás, radioaktivitás, jég vagy száraz közeg).

szervezetek a növények, a legfontosabb kemoszintetizáló szervezetek a nitrifikáló baktériumok, a hidrogén-, vas- és kénbaktériumok. Kemoszintetizáló baktériumok telepek geotermikus forrásokban és a mélytengerek fenekén, hidrotermális források („füstölő kémények”) közelében telepednek meg.

A bolygónkon mintegy 3,5 milliárd évvel ezelőtti, korai primitív redukáló atmoszférát a hidrogén, víz, metán, ammónia, nitrogén és szén-dioxid molekulák, valamint -- a vulkáni aktivitás miatt -- kén-hidrogén molekulák alkották. Valószínű, hogy az első szerves molekulák fotoszintézise a primitív földi atmoszférában az ultraibolya, vagy radioaktív sugárzás és a légköri elektromos kisülések, a villámok energiáját hasznosította. Feltételezhető az is,

Az élet szükséges feltételei:

(G. Wald, 1964)

- H_2O
- a metabolizmushoz és reprodukcióhoz szükséges elemek, molekulák
- energiaforrás, fény és/vagy kémiai energia
- megfelelő környezeti körülmények

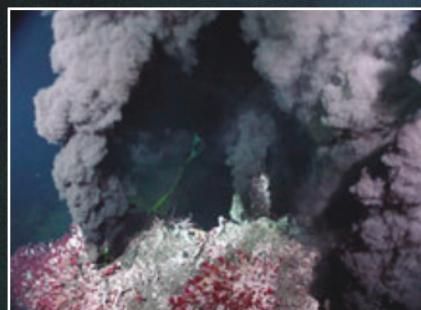
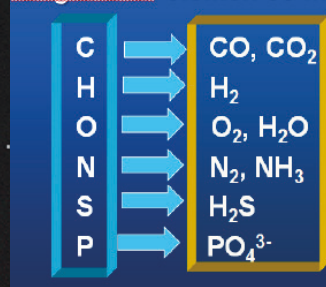
szervesanyag szintézis:

$CO_2 + H_2O$ (vagy plid H_2S) + energia $\rightarrow$ glükóz

energia $\rightarrow$ fényenergia, kémiai energia, fotoszintézis, kemoszintézis

$6CO_2 + 6H_2O + \text{fényenergia} \rightarrow C_6H_{12}O_6 + 6O_2$

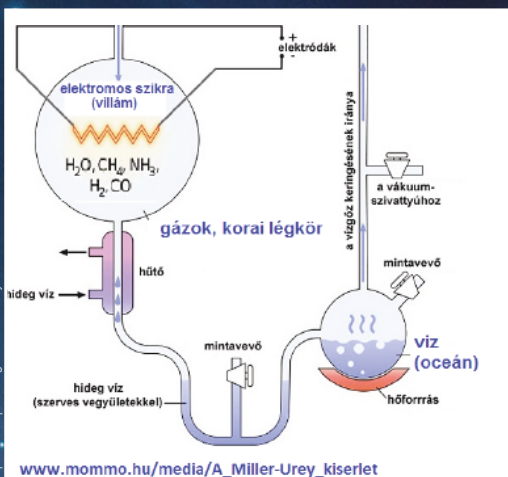
Biogenikus elemek és molekulák



Füstölő kémények az óceán mélyén

A bioszintézis első lépése során széndioxidból és a vízből szerves anyag, glükóz képződik fényenergia hatására (ez a fotoszintézis), vagy kémiai energia, vagyis a környezetben található eloxidálható vegyületek felszabaduló energiájának segítségével megy végbe (ezt nevezzük kemoszintézisnek). A legfontosabb ilyen oxidálható vegyületek: az ammónia, a nitrátok, a hidrogéngáz, a szén-monoxid, a metán, a vas- és mangán sók, a kén-hidrogén, a kén, a tioszulfát. Az élő szervezetek létrejöttét követően a fotoszintetizáló

Igen valószínű, hogy sejtek csak óceánokkal és atmoszférával rendelkező bolygón alakulhatnak ki.



hogyan a vulkánok közelében a geotermális források energiája kedvezhetett a kemoszintézis kialakulásához. Nagyon valószínű, hogy a kemoszintézissel első lépésben szén-hidrogének keletkeztek, majd ezek a szerves vegyületek képezték az alapját bonyolultabb vegyületeknek, s egyszerű aminosavak (ezek láncai képezik a fehérjét), szénhidrátok (egyszerű cukrok) képződésének. Ezek a molekulák akkumulálódtak az óceánokban.

A feltételezéseket erősen alátámasztották Miller és Urey primitív földi atmoszférát modellező laboratóriumi kísérletei, az elmúlt évszázad ötvenes éveiben. A kutatók H_2S , NH_3 , CH_4 és CO_2 gázokból villámot modellezve, 23 aminosavat, aminosavat és több szerves kénvegyületet szintetizáltak. Az aminosavak közül a glicin volt a leggyakoribb. Cukrokat, lipideket szintén találtak a létrejött szerves vegyületek között.

A sejtek kialakulásának talán leglemibb kémiai feltétele a biogenikus elemek és egyszerű szerves molekulák jelenléte. Bár Földön kívüli élő anyag nyomaira nem bukkantunk, azonban fény derült arra, hogy Naprendszerünk más bolygója, holdjai, sőt, más távoli naprendszerek és a távoli csillagközi anyag is mind-mind igen gazdagok az élet kialakulásához szükséges biogenikus elemekben: vízben és komplex szerves molekulákban. Mondhatjuk, hogy az Univerzumban számos igen nagy méretű „laboratórium” létezik, melyekben kémiai reakciók játszódnak le, molekulák keletkeznek -- még igen zord körülmények között is. Ilyen laboratórium volt Földünk,

a Vénusz és a Mars bolygó a Naprendszer kialakulásának korai szakaszában. S ilyen kémiai laboratórium létezik ma is a Naprendszer óriás bolygóinak számos holdján.

Az elmúlt évtizedekben számos űrszonda gazdagította ismereteinket a Naprendszerünk különböző égitestjeinek kémiai anyagairól, víz és szerves molekulák létezéséről hozva hírt. Az 1997 októberében pályára küldött, napjainkban is a Szaturnusz bolygó körül keringő Cassini űrszonda (NASA) 17 év alatt hatalmas mennyiségű adatot gyűjtött a Szaturnusz gyűrűiről és holdjairól. 2004 decemberében közel haladva a Szaturnusz legnagyobb holdjához, a Titánhoz, leeresztette felületére a Huygens szondát, amely feltérképezte a holdnak a földinél másfélszer nagyobb nyomású, metánban, nitrogénben és más szerves molekulákban gazdag atmoszféráját. A Huygens szonda mérési adatai szerint a Titán ma is Naprendszerünk egy gazdag, prebiotikus (a biológiai anyagot megelőző) kémiai laboratóriuma.

Szerves molekulák érkeznek a világűrből is bolygónkra a Földre hulló meteoritok felületén. Ilyen volt a Murchison meteorit, amely 1969-ben csapódott be Ausztráliában.



http://en.wikipedia.org/wiki/Murchison_meteorite

A Murchison még a Nap keletkezése előtti időkből származik, körülbelül 4,65 milliárd éves lehet. A kutatók szerint a meteorit a korai naprendszer ősfelhőin áthaladva gyűjtötte össze szerves molekulait a felületén.

Korábban is vizsgálták már a kutatók a meteorit összetételét, de újabban a korszerű, nagy felbontású spektrométerek birtokában megismételték a meteorit anyagának vizsgálatát. A közelmúltban így e

meteoriton több ezer különböző anyagot, közöttük 70 aminosavat is kimutattak.

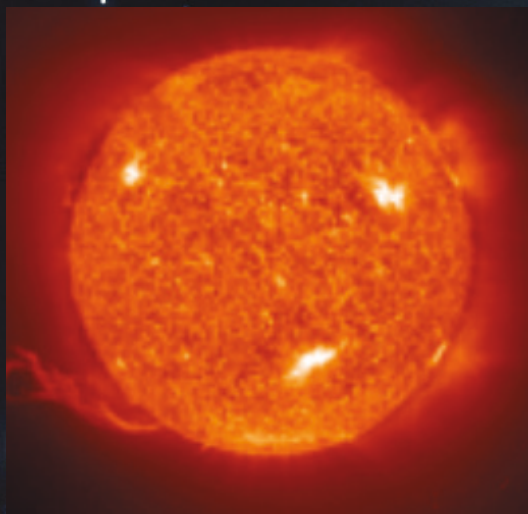
Földi és űrtávasöveink hírt adnak a világűrbeli érzékelő üstökösök és a néhány száz fényévnyi méretű gáz- és porfelhőből felépülő távoli csillagközi anyag extrém körülmények közt képződő molekuláris anyagairól. Napjainkig több mint 170 molekulát azonosítottak spektrumaik alapján -- köztük cukrokat, alkoholokat -- a csillagközi molekuláris felhőkben, ahol új csillagok és bolygók (exobolygók) és bolygórendszerek képződnek a gravitációs erők hatására. A csillagközi anyag is molekulák képződésére alkalmas gigantikus kémiai laboratórium. Ebben a laboratóriumban lejátszódnak kémiai jelenségeket az asztrokémia vizsgálja. Molekulák azonosítása a világűrbeli a Földre érkező elektromágneses sugárzás spektrumának vizsgálatával történik.

A molekulák a térben forognak és rezegnek. A forgási és rezgési állapotuk környezeti állapotuk függvénye. Minden molekulára jellemző forgási és rezgési állapota rendszere. Ha a molekula a körülmények hatására változtatja állapotait, ezt mindig specifikus mennyiségű energia kibocsátása, elektromágneses sugárzás (emisszió), vagy más objektum háttérsugárzásának elnyelése követi (abszorpció). Az emisszió és az abszorpció a molekulára jellemző, ezért a sugárzás spektruma ujjlenyomat-ként szolgál a molekula azonosítására. Az asztrokémikusok természetesen földi laboratóriumban is előállítanak extrém körülményeket, melyben vizsgálva az adott molekula elektromágneses spektrumát megkönnyítik a világűrbeli molekula azonosítását.

A következőkben az Univerzum laboratóriumaiban, a csillagokban, a csillagközi térben, a Naprendszerben és a korai Földön megjelenő molekulák kialakulásához vezető kémiai reakciókkal foglalkozunk.

A csillagok keletkezése és elmúlása

Az Univerzum jelenleg is állandó változáson megy keresztül, csillagok keletkeznek a csillagközi térben felhalmozódó anyag



csomósodásával, majd életpályájuk végén elmúlnak, anyaguk visszajut a csillagközi térbe.

A csillagok életciklusának három fázisa van. Keletkeznek, fejlődnek, majd elmúlnak. A mi közeli csillagunk a Nap, csillagközi térben gravitáció hatására összesűrűsödött anyagból (gravitációs kollapszus) jött létre. Jelenleg életciklusának felnőtt fázisát éli, mintegy 5 milliárd éves. Életének utolsó fázisába egy következő 5 milliárd év múlva planetáris nebulaként fog eljutni. A planetáris nebula egy csillagmaradvány, egy gázhéj vagy gázgyűrű, melynek anyaga valamikor a csillag anyagához tartozott, mielőtt abból kivetődött.



Két, a Naphoz hasonló tömegű csillag elmúlását megelőző planetáris nebula. A baloldali az Eszimo nebula (NGC2392), (NASA, Andrew Fruchter and the ERO Team), a jobboldali a Macskaszem nebula (NGC6543), (J.P. Harrington and K.J. Borkowski STsCI, NASA).

Ez a kivetődött anyag lassan távolodik a csillag magjától, majd a térben szétterülve, gyönyörű formát kialakítva beleolvad a csillagközi tér más anyagaiba.

Bizonyos idő elteltével a csillagközi anyag a gravitáció hatására ismét sűrűsödni, csomósodni kezd, majd egy kritikus méretet elérve összeroppan (ezt nevezzük gravitációs kollapszusnak) és megszületik az új protocsillag. (Egy csillag protocsillag állapota a magfúzió megindulását megelőző állapot) Amikor a protocsillag további anyagot gyűjt a térből, akkor a csillag magjában a gravitációs erő által megnövekedett nyomás hatására, 10 millió Kelvin hőmérsékletet elérve, megindulnak a ter-



monukleáris reakciók, s a csillag világítani kezd. Az Univerzum leggyakrabban előforduló eleméből, a hidrogénből további elemek keletkeznek.

A Napunk – sugarának negyedéig tartó – centrális magjában uralkodó 2×10^{15} Pa nyomás és $1,5 \times 10^5 \text{ kg/m}^3$ sűrűség hatására kialakuló 15 millió K-es hőmérséklet teszi lehetővé a termonukleáris reakciók, elsősorban a hidrogén-hélium fúzió lezajlását. Kezdetben, a csillag belsejében -- így Napunkban is -- a fő termonukleáris reakció: négy hidrogén atom fúziója héliummá.



A keletkező hélium atom tömege kisebb, mint a négy hidrogéné. A tömegdeficit energiává alakul, mely a felszínre jutva a csillag fényességének az oka. $\Delta E = \Delta m \cdot c^2$. A sugárzás formájában felszabaduló energia 26,72 MeV.

A napfény spektruma az infravörösztől a látható fényen keresztül az ultraibolyáig terjed. A 696 000 km sugarú, $1,99 \times 10^{30}$ kg tömegű, és 5780 K felszíni hőmérsékletű Nap $3,8 \times 10^{26}$ joule energiát sugároz ki másodpercenként a térbe. (A kisugárzott energia 4,3 millió tonna naptömeg veszteséget eredményez másodpercenként). A földi légkör 1 négyzetméterére másodpercenként merőlegesen beeső napsugárzás energiája 1361 joule. Ez a sugárzási ener-

gia fluxus tette és teszi lehetővé a földi élet kialakulását és fennmaradását. A Nap keletkezésétől kezdve napjainkig a 4,5 milliárd év alatt elfogyasztotta hidrogén üzemanyagának felét. A következő 4,5 milliárd év alatt teljesen elfogy majd a hidrogénje.

Bár a Napban a fő nukleáris reakció a hidrogén-hélium fúzió, a két leggyakoribb elem, vagyis a hidrogén és hélium mellett, kis mennyiségben nehezebb elemek (~2 tömegszázalék) is megtalálhatók, elsősorban a Nap fotoszférájában. (Lásd a táblázatot!)

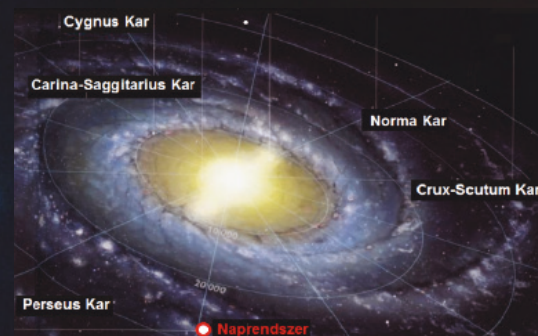
Elem	tömeg %
Hidrogén	71,00
Hélium	27,10
Oxigén	0,97
Szén	0,40
Nitrogén	0,10
Szilícium	0,10
Magnézium	0,08
Neon	0,06
Vas	0,01
Kén	0,04

A Nap kémiai összetétele

A Nap kémiai összetételét attól a csillagközi felhőtől, nebulától örökölte, melyben gravitációs összeroppanással protocsillagként keletkezett. A kémiai összetétel tükrözi a korai Naprendszer összetételét. (Egy csillag protocsillag állapota a magfúzió megindulását megelőző állapot)

Megjegyzendő, hogy a „kis mennyiség”





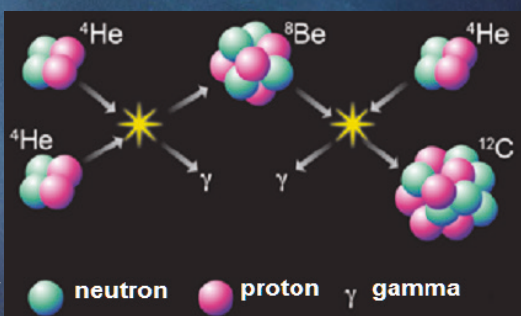
A mintegy 100 milliárd csillag halmazából álló Tejútrendszerünk (AngloAustralian Observatórium)

természetesen jelentős mennyiséget takar a Nap hatalmas tömege miatt. A 0,4 tömeg% széntartalom például 8×10^{27} kg szenet jelent, amely a Földnél (6×10^{24} kg) mintegy 1300-szor nagyobb tömegű bolygó felépítéséhez lenne elegendő.

A Nap életkorának előrehaladásával, hidrogén készletének fogytával, magjának hőmérséklete növekedni fog és így a nehezebb elemekre vezető magreakciók is intenzívebbé fognak válni.

A fejlődés: könnyű elemek szintézise

A csillagok élete, vagy más szóval öregeedésük során fizikai állapotuk, tömegük fejlődésen megy keresztül. Természetesen, az öregezés folyamata jelentősen eltérhet a különböző csillagok estében. A termionukleáris reakciók millió és millió éven keresztül biztosítják a csillagok fényességét. A csillagok élettartama összefügg tömegükkel, a nagyobb tömegűek rövidebb ideig léteznek. A fejlődésük során méretük növekszik. A mi Napunk is olyan méretűvé fog nőni néhány milliárd év múlva, hogy sugara nagyobb lesz, mint a jelenlegi Föld-sugár. Tehát növekedése során felemészti majd a Föld tömegét is. A csillagok méretének növekedését fényességük növekedése és hőmérsékletük csökkenése kíséri.



Hélium fúzió

A csillagok belsejében lezajló reakciók is elsősorban a kérdéses csillag tömegétől függenek. Nagyobb tömegű csillagban a nehezebb atommagokig folynak az átalakulások. Amint a csillag központi magjában a hőmérséklet meghaladja a 100 millió Kelvin fokot – az a vörös óriás, vörös szuperóriás állapot – beindul a hélium

fúzió, s berillium, majd szén keletkezik.

Phys. Rev. Lett. 106, 192501 (2011)

A Naphoz hasonló tömegű csillagok zömében csak a hidrogén-hélium fúzió megy végbe, kisebb részükben zajlik még szén- és oxigéntermelő reakció is proton befogással. Ezeknél nehezebb atommagok, például neon, nátrium, kén, szilícium, egészen a vas atommagokig, csak az 5-6 naptömeget meghaladó tömegű csillagokban keletkeznek magfúzióval.

Az elmúlás: nehéz elemek keletkezése

A csillagok elmúlásának útja tömegüktől függ. A Napnál 8-10-szer nagyobb tömegű csillagok késői állapotukban felrobbannak. Ezt a robbanást nevezzük szupernóva robbanásnak. A Napéhoz hasonló tömegű csillagok elmúlása lassúbb. Életciklusuk utolsó szakaszában pulzálni kezdenek, majd egy labilis pillanatban tömeget dobnak le magukról. A kidobott gázt megvilágítja a forró központi csillag. Az ilyen objektumokat planetáris nebulának nevezzük. Néhány ezer évet követően a központi csillagban leállnak a termionukleáris reakciók. A csillag lehűl és ekkor a fehér törpe nevet kapja. Mind a szupernóva, mind a planetáris nebula anyaga visszatér a csillagközi térbe, amíg a gravitációs kollapszus ismét csillagokat formál belőle.

A vasnál nehezebb elemek jellemzően neutronokban bővelkedő környezetben, gyors neutronbefogással extrém forró csillagokban keletkeznek, elsősorban életük legvégén. A nehéz elemek mint Cu, Zn, Br, I, Ag, Au, Pt, Pd, lantanidák és urán a csillagok elmúlását jelentő szupernóva-robbanások során keletkeznek.

A csillagok galaxisok építőelemei. A Nap a Tejútrendszer galaxis egyik spirál karján helyezkedik el. Bár egy galaxis több százmilliárd csillagból áll, a csillagok elhanyagolható kis térrészt foglalnak el, a közöttük levő óriási távolságok által kialakított galaxis térfogatban. A csillagközi tér nagy része üres, más részét felhők töltik ki. A sűrű gáz zömében, mintegy 90 százalékban hidrogénből áll. A kisebbik része molekulákat és mikroszkopikus granulátumokat vagy csillagközi

port is tartalmaz. Ezt az aránylag sűrű anyagot, poros gázfelhőt a gravitáció tartja egyben. A gáz akkumulálódása során növekszik a gravitáció és ez tovább növeli a felhő anyagának további akkumulálódását. Az akkumulációs folyamat a sűrűség növekedéséhez vezet, különösen a felhő középső magjában. A sűrűség növekedésével folyamatosan emelkedik a hőmérséklet.

Mint említettük, néhány száz fényévnnyi méretű gáz- és porfelhőből felépülő távoli csillagközi anyag is igen gazdag biogenikus elemekben, vízben és komplex szerves molekulákban. A csillagközi anyag is molekulák képződésére alkalmas gigantikus kémiai laboratórium.

Ezzel az extrém kémiai laboratóriummal és a laboratóriumnak a komplex molekulák képződésére vezető kémiai folyamataival a következők számunkban foglalkozunk.

Dr. Pálkás Gábor

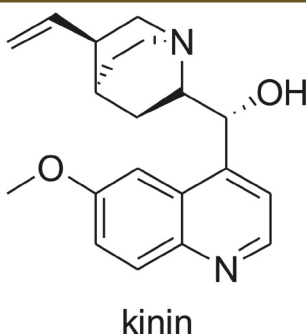


OLVASNIVALÓK:

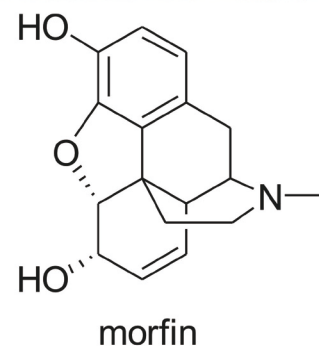
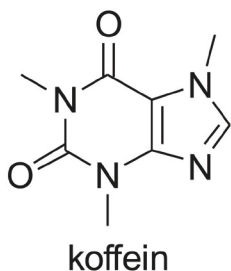
George Wald: *The Origins of Life*.
PNAS Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA.
1964 augusztus, 52(2): 595–611
http://www.nyf.hu/others/html/kornyezettud/oktatoanyag/segedlet/term_kor_kialak/csillagok_elete_elemek_szint/csillagok_index.htm
Gyürky György Magyar
Tudomány, 2008/04 486. o
<http://tudasbazis.csillagaszat.hu/csillagok-fejlode/>
<http://hu.wikipedia.org/wiki/Csillagfejl%C5%91d%C3%A9s>

SZEKUNDER

Az élőszervezetekben számos vegyület található, amelyeket az ember hosszú ideje alkalmaz élvezeti cikként, gyógyításra vagy éppen növényvédelmi célokra.



ALKALOIDOK



A megismerés hosszú évszázadai alatt, és főleg a XX. és XXI. század aktív felfedező munkájának és modern szerkezetvizsgáló módszereinek köszönhetően megszorodott az ismert természetes szerves vegyületek száma. A rendelkezésünkre álló hatalmas számú természetes anyagot (vagy más szóval anyagsere-terméket, metabolitot) két nagy csoportba

sorolhatjuk: a primer és a szekunder metabolitok családjába. Ezek közül az első (primer) család tartalmazza azokat a vegyületeket, amelyek az élethez közvetlenül szükségesek, mivel az élőszervezet fenntartásában és szaporodásában kulcsfontosságú szerepet játszanak. Ezek azok a vegyületek, amelyekről középiskolai tanulmányaink során kémiából és biológiából hallhatunk mint természetes vegyületek. Ilyenek a

... szekunder metabolitok segítségével sok új szerkezetre bukkanhatunk és érdekes biológiai hatásokat is fedezhetünk fel ...



METABOLITOK

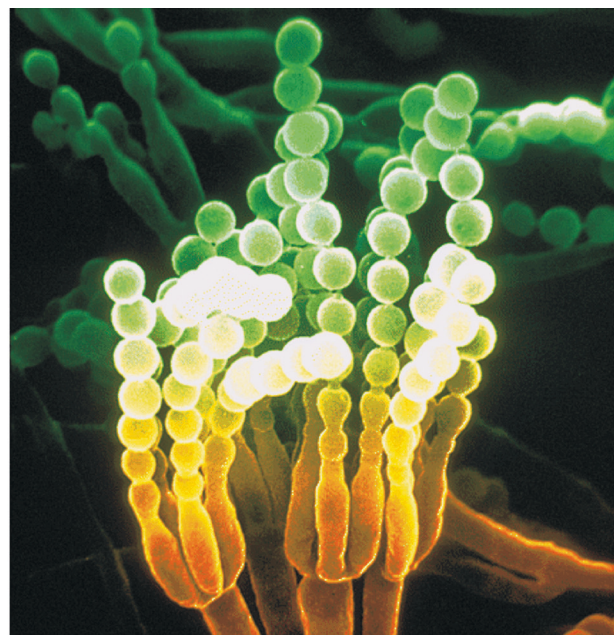
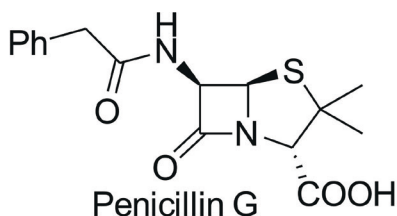
fehérjék, a nukleinsavak, a szénhidrátok egy jelentős része vagy éppen a sejtmembránok felépítésében fontos szerepet játszó lipidek.

A másik nagy család, a szekunder metabolitok számos csoportra bontható, és ezek a természetes szén-vegyületek lehetnek kis molekulák vagy nagy biopolimerekhez hasonló kémiai anyagok. A szekunder metabolitok napjaink szerves vegyészeti számára a természetes vegyületek egyfajta „aranybányája”. A kémiai kutatás során ugyanis ezek segítségével sok

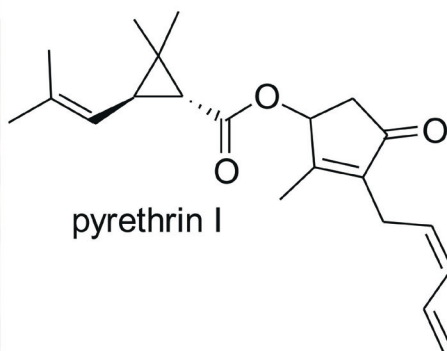
új szerkezetre bukkanhatunk és érdekes biológiai hatásokat is felfedezhetünk. Az így előállítható vegyületek új és hatékony gyógyszerek létrehozásának kiindulópontjai lehetnek, vagy eddig ismeretlen funkciós csoportok kombinációjával szokatlan szerkezeti elemekkel bővíthetők ki az ismert kémiai szerkezetek körét. A következőkben áttekintjük a szekunder metabolitok főbb fajtáit és példákon keresztül mutatjuk azok hasznosságát.

A természetes vegyületek egy jelentős része aminosavakból épül

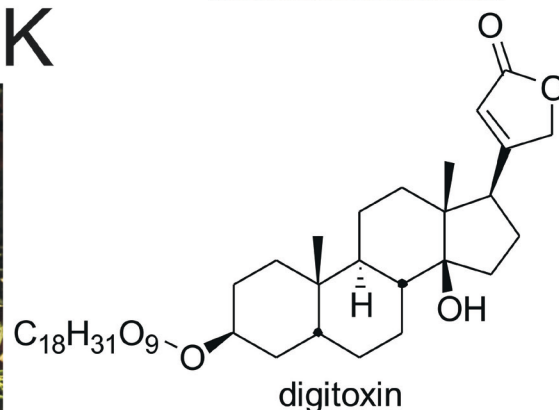
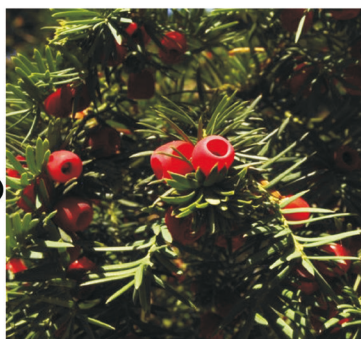
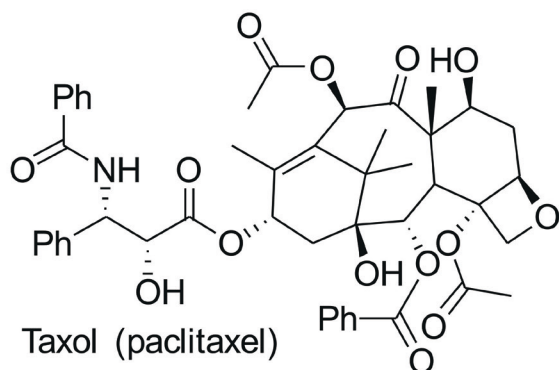
fel, vagy aminosavak átalakulásával képződik. Az egyik ilyen – aminosavakból származtatható – vegyület család az alkaloidok. Hol találkozhatunk ilyen vegyületekkel? Ezt a kérdést érdemes végiggondolnunk reggeli kávénkat kortyolgatva, amikor is a koffein nevű alkaloid segítségével próbáljuk felébreszteni magunkat. Vagy amikor egy forró délutánon a tonik keserű íze frissít minket, amelyet a kinin nevű vegyületnek köszönhetünk. Ez a természetes alkaloid nemcsak sokáig a malária egyetlen gyógyszere és így a nagy földrajzi felfedezések



β -LAKTÁMOK



TERPÉNEK



és gyarmatbirodalmak kiépítésének hathatós támogatója volt, hanem jelentősen hozzájárult a szerves kémiai vegyipar kialakulásához (erről részletesebben a Kémiai Panoráma 1. számában lehet olvasni). Egy másik, a kininhez hasonlóan történelmileg jelentős alkaloid a morfin, amelyet nagy mennyiségben Kabay János felfedezése nyomán lehet a mákszalmából kivonni, és napjainkig is az orvosi gyakorlatban használt erős fájdalomcsillapító (lásd a Kémiai Panoráma 4. számát).

Ám az aminosavak nemcsak az alkaloidok létrejöttében játszhatnak kulcsszerepet, hanem más, a gyógyászatban kiemelkedő jelentőségű kis molekulák, például a β -laktámok természetes „előállításában” is. Ezek a vegyületek a XX. század közepének egyik legnagyobb gyógyászati áttörésében, a penicillinben jelentek

meg. A β -laktámok számtalan emberéletet mentetettek meg azáltal, hogy hatékony fegyvert adtak az orvosok kezébe a bakteriális eredetű megbetegedések kezelésére (lásd a Kémiai Panoráma 7. számát).

Azonban a természetes szénvegyületek nemcsak aminosavakból épülhetnek fel, vagy ezek átalakulásával képződhetnek más biológiai „alap molekulákból”. Az egyik ilyen nagy vegyület család a terpének csoportja, amelynek tagjai számos esetben kulcsszerepet töltenek be növényi szervezeteknek a baktériumok, illetve kártevők elleni védekezésében. Ezen felül számos terpén az állatok közötti kémiai kommunikációban résztvevő hírvivő anyagként, ún. feromonként működik. A mindennapi élet számos területén találkozhatunk mi is a

terpének jelenlétével. A leginkább kézzel tapintható talán, amikor a fenyőfa gyantájától ragacos lesz a kezünk, ezt a fenyő által kiválasztott illatos és ragadós terpén keverék okozza. Ezenkívül számos illatszer, aromaanyag vagy éppen a sárgarépa és a paradicsom színanyaga is a terpének nagy családjába tartozik (lásd a Kémiai Panoráma 8. számát).

Általában a gyógyászatban használt vegyületeket szoktuk a szerves kémia legfontosabb termékeinek tekinteni, de hasonlóan fontos szerep jut a mezőgazdaság által használt vegyületeknek is. Ezek közé tartozik a pyrethrin I nevű terpén, amely az egyik fő komponense egy több mint 100 éve használt rovarellenes növényvédőszernek, amit sokáig perzsa pornak hívták. Ez az erőteljes hatású vegyület a természetben a krizantémok (*Chrysanthemum*)

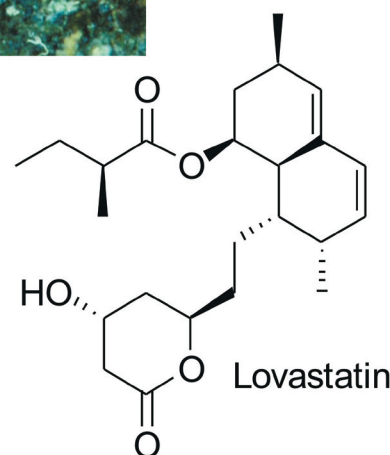
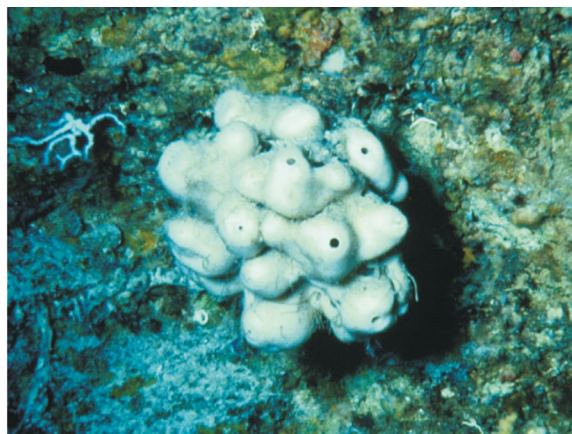
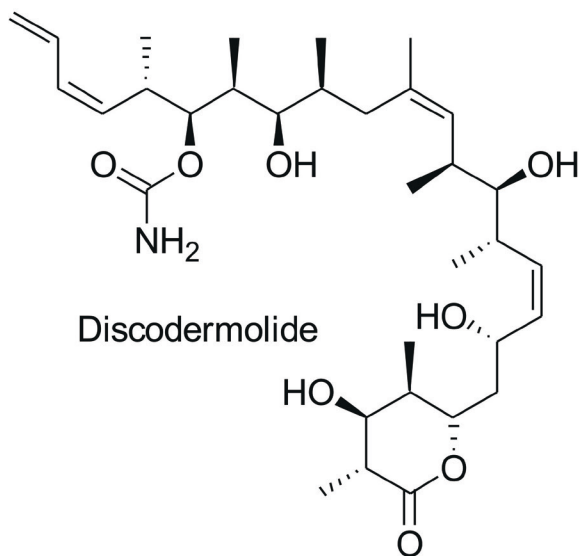


nemzetségébe tartozó növényekben fordul elő a legnagyobb gyakorisággal. Nemcsak a krizantémok tartalmaznak azonban értékes és a gyakorlatban használt terpéneket és ezek származékait, hanem például a piros gyűszűvirág (*Digitalis Purpurea*) és a tiszafa (*Taxus* sp.) is. A piros gyűszűvirág hatóanyaga egy roppant erős szívgyógyszer, a digitoxin forrása, amely egy szteránvázas vegyület (ezekről a vegyületekről többet is olvashatunk a Kémiai Panoráma 9. számában). Egy másik ilyen terpén a XX. század végének sikertörténete, amely egy új, hatékony kemoterápiás vegyületet adott a rákos betegek gyógyításával foglalkozó orvosoknak. Ez a vegyület a taxol nevezetű gyógyszer, amelynek előállításához a

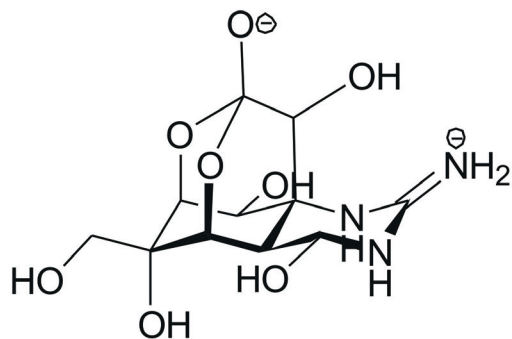
molekula nagyobbik részét adó baccatin III-t vonják ki az európai tiszafa (*Taxus bacatta*) leveléből, majd kémiai szintézissel állítják elő a hatóanyagot; az ilyen eljárást nevezik fél-szintetikus előállításnak.

Az eddigi vegyületek a két legismertebb családból kerültek ki, ezzel szemben egy másik család, a poliketidek, a mindennapokban kevésbé ismertek. Azonban korunk modern szerves kémiai kutatásaiban annál nagyobb érdeklődésre számottevő vegyület családról van szó. Egy részüket kismolekulás gyógyszerként használják. Ebbe a családba tartozik a lovastatin, amelyet elsőként a késői laskagombából (*Pleurotus ostreatus*) izoláltak és ma is alkalmazzák, mint az egyik hatékony koleszterin

csökkentőt. Érdekes módon a természetes gomba is tartalmaz annyi hatóanyagot, hogy állatkísérletekben kimutatták a gomba koleszterincsökkentő hatását. A nagyobb méretű poliketideket, amelyek nagysága néha már kisebb fehérjék méretével vetekszik, gyakran mélytengeri szivacsokból vonják ki, amelyekben azonban csak nagyon kis mennyiségben találhatók. Ezért sokszor nehézséget jelent a biológiai vizsgálatokhoz és a szerkezet-hatás összefüggés tanulmányozáshoz szükséges mennyiség kinyerése, így gyakran mesterségesen kell előállítani a hatóanyagokat a vizsgálatokhoz. Erre ad szép példát a Novartis kutatói által végrehajtott discodermolide szintézis. A svájci kutatók ebből a vegyületből

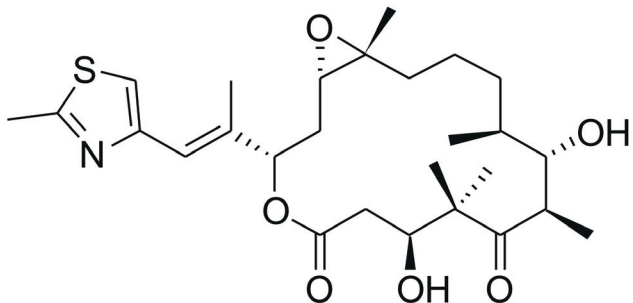


POLIKETIDEK

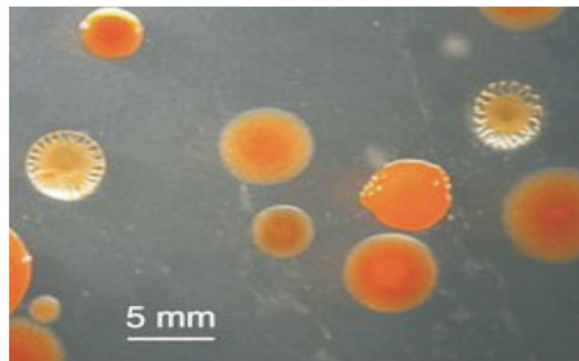


tetrodotoxin

HIBRID SZEKUNDER METABOLITOK



epothilone B



állítottak elő több mint 60 g-ot és vizsgálták kemoterápiás szerként. Sajnos hiába volt ez a hősi erőfeszítés a discodermolide előállítására a klinikai vizsgálatok során nem várt mellékhatásokat tapasztaltak, így leállították az erre a molekulára alapozott gyógyszerfejlesztést.

Egy másik hasonló mértetű és komplexitású szekunder metabolit az epothilone B, amelyet ugyancsak nehéz szintetikus munkával állítottak elő. Vizsgálták biológiai aktivitását és több analogonjával együtt állatkísérletekben és klinikai vizsgálatokban is kipróbálták. Majd nem sokkal később sikeresen vezették be a rákbetegek

kemoterapiás kezelésére. Az epothilone és rokon vegyületei nem sorolhatók egyik szekunder metabolit családba sem, mert egyes részletei más és más családba sorolhatók, az ilyen vegyületeket szekunder metabolit hibrideknek szokás nevezni. Nemcsak ilyen nagy és bonyolult vegyületek tartozhatnak ebbe a hibrid kategóriába, hanem ennél kisebb, ám sokkal mérgezőbb vegyületek is. Ilyen például a gömbhalak által termelt idegméreg, a tetrodotoxin, amely a jól elkészített japán étel különlegességben, a foguban már nem lehet jelen. Ez az érdekes vegyület, bár nem túl nagy, mégis egy aminosav, egy cukor és egy izoprén részből épül fel, ezért

nem tudjuk egyértelműen egy családba sorolni, csak azt tudjuk, hogy szekunder metabolit.

Az előzőekben felsorolt anyagokkal szerettük volna bemutatni, hogy a természetes szénvegyületek egy jelentős része az ún. szekunder metabolitok családjába tartozik. Ezek a vegyületek azonban nemcsak érdekességek, hanem hasznos, a mezőgazdaságban, illetve a gyógyászatban gyakran alkalmazott kémiai anyagok, amelyek nem pusztán izolálással, hanem nagyfokú kutatói munkával válhattak sikeres hatóanyagokká.

Varga Szilárd
MTA Természettudományi
Kutatóközpont



A KÉMIAI PANORÁMA

közösségi oldala

LABORATÓRIUMI TALLÓZÓ

Hírek, amelyeken megakad a kémikusok szeme



ELEFÁNTFOGKRÉM ÉS FÉMSÜNI

ZSOMBÓ – A Szegedi Tudományegyetem kémia szakos hallgatói Zsombón kísérleteztek. Az interaktív órán fémsüni, elefántfogkrém és fekete kígyó is készült.

Fekete kígyók szódabikarbónából, elefántfogkrém hidrogén-peroxidból, titkosírás kurkumával, fémsüni – az SZTE kémia szakos hallgatói a természettudományokat kémiai kísérletekkel népszerűsítették. A zsombói Szent Imre Katolikus Általános Iskolában kíváncsian fogadták csütörtökön a – részben tanári pályára készülő – egyetemistákat.

– Tizenkét kísérletet végeztek el a felső tagozatosok a hallgatók irányításával, akik rövid előadást is tartottak a saját témájukról – mondta el Nemes-Nagy Erika. Az iskola tanára szerint a diákokhoz az egyetemisták közelebb hozhatják a kémiát, mert hiába kedvelik a felsősök a tantárgyat, nehéznek találják.

– Nem szeretnék a természettudományokkal foglalkozni később, de a kémia érdekes tantárgy – vallja a nyolcadikos

Révész Gergely. Évfolyamtársa, Papp Nelli is bonyolultnak találja a tantárgyat, de hozzátette: – Jó, hogy sok kísérletet láthattunk, az egyetemisták könnyebben érthetővé tették a kémiát.

A hallgatók valóban nem tétlenkedtek: egész délelőtt meséltek a bemutatott folyamatokról a diákoknak. – A közhiedelem szerint „mumusnak számít” a kémia, de szép oldala is van – mondta a tanárnak készülő Nagy Márió. A harmadéves kémiai-biológia szakos egyetemista szerint a program a tudományok játékos oldala mellett azok gyakorlati alkalmazását is bemutatja.

Amíg a hallgatók a felsősökkel közösen szívárványszínű achát-oldatokat állítottak elő, bemutatták a víz felületi feszültségét, elkészítették hidrogén-peroxidból az elefánt habzó fogkrémjét, vagy éppen a karbonlámpa működését tesztelték, a környezetvédelem többször is szóba került. Kiderült, hogy a mindennapi életünkben is ismert kémiai jelenségek gyakorlati alkalmazása veszélyes lehet a természetre, így például csínján kell bán-

nunk a vadvizetekbe kerülő mosogatószerekkel, olajszármazékokkal, vagy általában a savas kémhatású anyagokkal.

Az interaktív óra vége felé közeledve az SZTE Kémiai Tanszékcsoportjának munkatársa sikeresnek értékelte a Tudományos eredmények elismerése és disszeminációja a Szegedi Tudományegyetemen című pályázattal megvalósuló projektet, hiszen segítségével folytatódhat az a programsorozat, amit 2011-ben indítottak el. Eddig hat kistérségi iskolában kísérletezhettek a fiatalok az egyetemistákkal. – A természettudományokat népszerűsítő egyetemisták jövő héten kedden egy makói, csütörtökön pedig a szatymazi iskolában turnézhatnak – mondta Németh Veronika. – Évente tartunk nyitott, tudományos rendezvényeket, de ezekre a kistérségi iskolákba járók nehezebben jutnak el. Így mi megyünk hozzájuk a kémia és a vegyész szak hallgatóival.

(delmagyar.hu)
Paszternák András



A TERMÉSZETTUDOMÁNY NÉPSZERŰSÍTÉSE

2013. március 12-én az MTA Természettudományi Kutatóközpont lelkes fiatal kutatói, Drótár Eszter (AKI), Szabó Tamás (AKI), Pálmai Marcell (MFI) és Söptei Balázs (MFI) érdekes előadást tartottak a mikro- és nanotechnológiákról a budapesti Petőfi Sándor Gimnázium Mindentudás Napján. (ttk.mta.hu)

MI VAN A KÉMCSŐBEN? – programajánló nem csak a kémia íránt érdeklődőknek

Kutatók éjszakája 2013 és 2014

„Az első találkozás a tudománnyal olyan részegítő, mint a szerelem.”
Szerb Antal

2013-ban és idén is sor került a Kutatók éjszakája országos, tudománynépszerűsítő programsorozatra. További részletek www.kutatokejszakaja.hu weboldalon.



A KÉMIAI PANORÁMA

LABORATÓRIUMI TALLÓZÓ

Hírek, amelyeken megakad a kémikusok szeme

CHEMGENERATION ROADSHOW – TUDOMÁNYOS KALANDOK A KÉMIA VILÁGÁBAN

„A kémia jelen korunk és jövőnk egyik szükséges tudása, hiszen a gyors fejlődés miatt új dolgok, új tárgyak, új események születnek, amire a kémia szakértőinek segítségét várják.” - hangzott el a Chemgeneration Roadshow legutolsó állomásán, ahol diákoknak fedték fel a kémia szépségeit.

Hogyan oldja a mosogatószer a zsírt, hogyan viselkedik a keményítő, mennyi a margarinok víztartalma? Ezekre a kérdésekre is választ kaptak azok a diákok, akik a tudományokat - és azon belül is a kémiát - népszerűsítő sorozat részeként látogattak el az ELTE Kémiatudományi Intézetébe. A Chemgeneration Roadshow tavaly indult országos körútjára, a Magyar Kémikusok Egyesületének és a BASF-nak, a világ vezető vegyipari vállalatának közös programjaként, amelyhez már nyolc hazai felsőoktatási intézmény is csatlakozott.

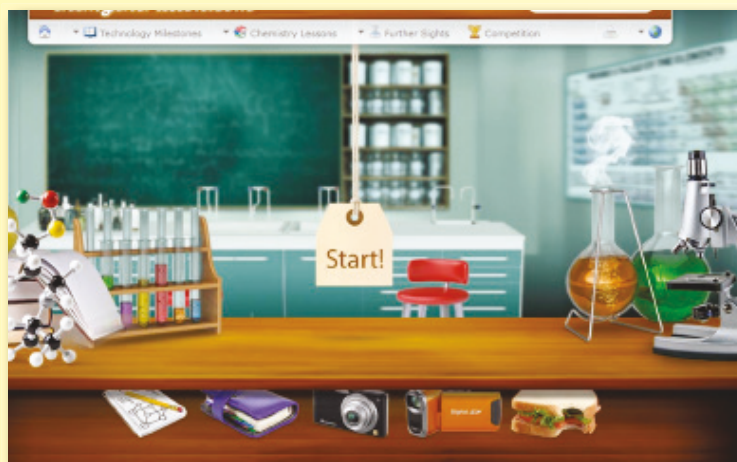
A program célja, hogy a mára kevésbé népszerű természettudományos szakok közül is a kémiát tegyék minél több diák számára vonzóvá, hiszen évente körülbelül öt kémia tanár szakos diplomázik le, így aggasztó az utánpótlás megoldása. A kémia és a vegyészmérnöki szakok valamivel nagyobb érdeklődésre tartanak számot, országos szinten 418, illetve 414 hallgató kezdte meg tanulmányait az idei tanévben. A biztató kezdés azonban az eddigi tapasztalatok alapján még nem ad túlzott okot az öröme, ezeket a szakokat ugyanis a felvételt nyertek 20 százaléka végzi csak el.

A Chemgeneration Roadshow-t ez alkalommal az ELTE

Kémiatudományi Intézete látta vendégül: Szentendréről érkezett egy osztálynyi diák, hogy izgalmas, tudományos kalandnak legyen részese.

A házigazda, Dr. Homonnay Zoltán intézetvezető, illetve Simonné Dr. Sarkadi Livia, a Magyar Kémikusok Egyesületének elnöke köszöntötte a diákokat, és az utánpótlás szükségességét, valamint a kémia, mint tudomány érdekességét hangsúlyozta. A BASF magyarországi ügyvezető igazgatója, Dr. Herbert Fisch köszöntő beszédébe interaktív módon vonta be a diákokat annak hangsúlyozására, hogy a kémia jelen korunk és jövőnk egyik szükséges tudása, hiszen a gyors fejlődés miatt új dolgok, új tárgyak, új események születnek, amire a kémia szakértőinek segítségét várják. Egy könnyű, golflabda méretű labdát adott körbe, hogy a diákok kitalálják, milyen anyag lehet, és mire való. Végül elmondta a megfigyelt, ez az anyag a mai legkorszerűbb sportcipők talpazatába kerül, hogy a lábakra és a gerincre mért terhelést minél jobban csökkenteni tudják.

Ezután következtek a kísérletek, amelyeket első körben tanárnők mutattak be a jelenlevőknek. Gyors és könnyűnek tűnő kísérleteik látványosak voltak. Készült egy hatalmas sárgás hab, amit elefánt fogkrémnek kereszteltek, voltak színváltoztató kísérletek, hatalmas, ijesztő robbanó hang egy palackból kiáramló gőz miatt. A legnagyobb sikert az a kísérlet aratta, amely lehetővé tette, hogy a diákok egy pillanat



erejéig tűzharcosnak érezzék magukat, és a tenyerükbe tett habot engedték teljes lángba borulni anélkül, hogy ezzel fájdalmat éreztek volna. A diákok ezek után a laborasztalokhoz vonultak, és mindenki más és más kísérletet mutatott be társainak, illetve magyarázta el a látott jelenségek okát.

Ezekben a bemutatókban volt, aki képzőművészeti alkotásokra emlékeztető ezüstvirágot rajzolt árammal, mások különféle mintákat, festményszerű képeket „festettek” vegyszerek egymásra hatása révén. Megtudhattuk, mi az a mézfraktál, és hogyan lehet rézpénzből ezüstpénzt varázsolni. A konyhában található jelenségek közül is néhány megfigyeltetésre került: hogyan oldja a mosogatószer a zsírt, hogyan viselkedik a keményítő, mennyi a margarinok víztartalma. Ezek a kísérletek mind látványosak és érdekesek voltak, mindeközben pedig a diákok új ismeretekre tettek szert.

A Chemgeneration Roadshow-ról tavaly, a Kémia Nemzetközi Évében megalapított Chemgeneration.com weboldalon további információkat találni, pl. azt is, hogy a roadshow még hét vidéki nagyvárosban folytatódik.

(agroinform.com)

A HÓNAP IDÉZETE

„Csak azért, mert valami nem azt csinálja, amire tervezted, nem jelenti azt, hogy haszontalan.”

Thomas Alva Edison



közösségi oldala

KUTATÓ KÖZÉPISKOLÁSOKAT LÁTOTT VENDÉGÜL AZ EGYETEM MÉRNÖKI KARA

VESZPRÉM – Több mint 110, a természet- és műszaki tudományok iránt érdeklődő középiskolás tanuló mérte össze tudását a Hlavay József Országos Környezettudományi és Műszaki Diákkonferencián. Ennek keretében rendezték a Lovassy László Gimnázium által meghirdetett II.

Mentovich Ferenc Természettudományi Verseny döntőjének két fordulóját is.

A Pannon Egyetem Föld- és Környezettudományi Tanszéke, a Magyar Tudományos Akadémia Veszprémi Területi Bizottságának Környezet- Föld és Energetikai Szakbizottsága, valamint a Magyar Kémikusok Egyesülete 2003-ban rendezte meg az első Középiskolai



Környezettudományi Diákkonferenciát. A konferencia megálmodója és létrehozója dr. Hlavay József tanszékvezető egyetemi tanár, halála óta a diákkonferencia az ő nevét viseli.

A diákok idén is több területen mérették meg magukat. Saját kutatómunkájukról a tanulók négy

szekcióban húsz előadásban számoltak be. A fizika és kémia feladatmegoldó versenyeken az írásbeli fordulók eredményei alapján húsz diák jutott a laboratóriumi feladatokat is tartalmazó döntőbe, míg a junior mérnökverseny záró fordulójában hat csapat mérte össze tudását kreatív építési és tervezési feladatok megvalósításában. A résztvevők harmincnégy intéz-

ményt képviseltek Zalaegerszegtől Debrecenig, felkészülésüket harmincnégy pedagógus segítette.

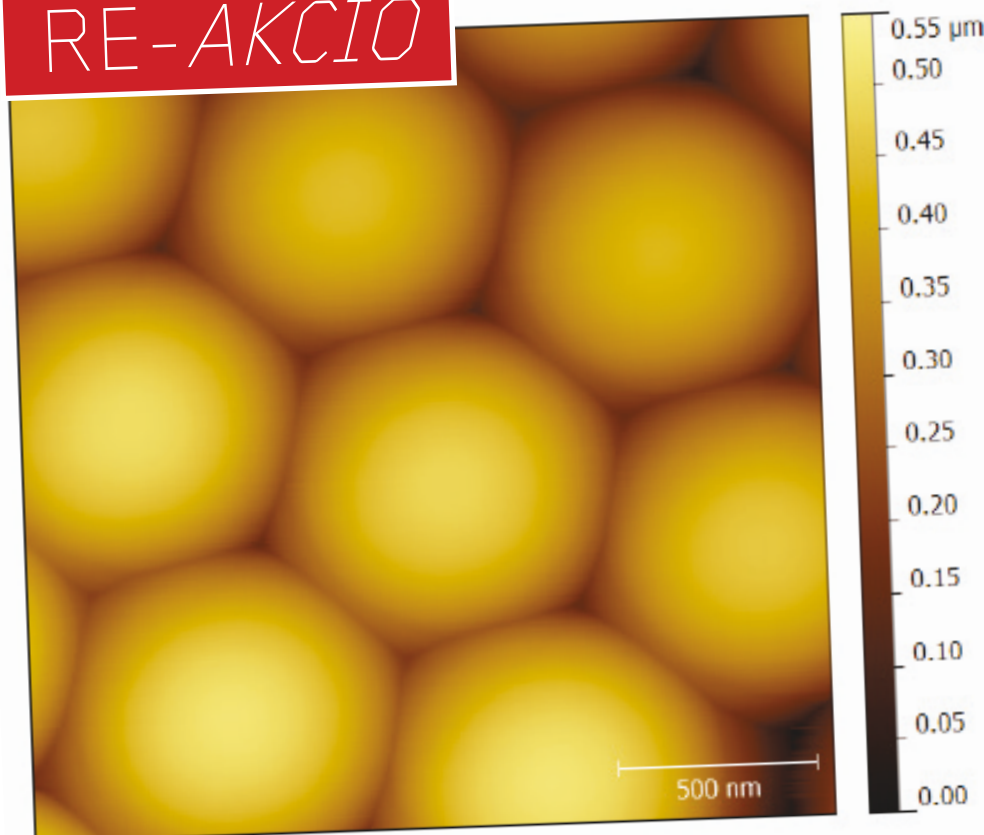
A Mentovich Ferenc Természettudományi Versenyt az Arany János Tehetséggondozó Programban tanuló gimnáziumi tanulók számára hirdette meg a Lovassy László Gimnázium. A döntőben huszonnyolc tanuló teszt-feladatokat oldott meg, majd a versenyzők lakóhelyünk ivóvízkincse témakörben végzett önálló kutatómunkájukat mutatták be, biológiai, fizikai és kémiai laboratóriumi feladatok megoldásával bizonyították tudásukat.

Míg a diákok versenyeztek, témavezető tanáraik a Pannon Egyetem Mérnöki Karának oktatóival közösen kerekasztal beszélgetésen vettek részt. A fórum elsődleges célja az volt, hogy a résztvevők megosszák egymás között

tapasztalataikat a természettudományos oktatás jelenlegi helyzetéről és jövőjéről. A jelenlévők megállapították, a felsőoktatásba belépéshez szükséges tudásanyagot az emelt szintű érettségi követelménye tükrözi, azonban a csökkenő óraszámok komoly kihívások elé állítják a tanulókat és tanáraikat. Ma egyre több fiatal választja a piacképes diplomát adó műszaki és természettudományos szakokat, ugyanakkor komoly veszélyt hordoz magában, hogy a természettudományos tanárképzés utánpótlása csaknem teljesen megszűnt.

(forrás: veol.hu)

RE-AKCIÓ



**KEMIKLIKK –
A HÓNAP FÉNYKÉPE**
Gömböcskék” – 800 nm
átmérőjű polisztirol gömbök
atómi erőmikroszkópiai fel-
vétele (Paszternák András,
Bar Ilan Egyetem)

A KÉMIAI PANORÁMA közösségi oldala

LABORATÓRIUMI TALLÓZÓ

Hírek, amelyeken megakad a kémikusok szeme



Hasznos új eszköz kémiantanároknak

Elkészült a Magyar Kémikusok Egyesülete (MKE) Kémiantanári Szakosztálya által a magyarul tanító kémiantanók számára létrehozott honlap, amely a következő címen érhető el: <http://www.kemtan.mke.org.hu/>

Szerkesztésekor és a feltöltendő tartalmak kiválasztásakor figyelemmel voltak a kémiantanár kollégák igényeire. A bármely látogató számára elérhető oldalakon nagyon sok hasznos linket és letölthető fájlt helyeztek el a kerettantervekkel, tankönyvekkel, digitális tananyagokkal, versenyztetéssel, pályázatokkal, szertárkarbantartással, szakmódszertannal, továbbképzésekkel, konferenciákkal, érettségivel, pályaaorientációval, kémiai kísérletekkel, kémia történettel, áltudományokkal, oktatástechnikával stb. kapcsolatban.

Az „Oktatási segédanyag I.” menüpontban letölthető és a kémia tanításához felhasználható, száznál is több Power Point prezentáció (PPT) viszont kizárólag az MKE tag kémiantanók számára elérhető.

(mke.org.hu)

LAPOZGATÓ – KÖNYVAJÁNLÓ KÉT KÍSÉRLET KÖZÉ

J. Balázs Katalin – Az alkimisták titka

Kalandos játék, avagy kreatív és interaktív kalandozás a kémia birodalmában

Az aranycsinálás titkát az ókor óta kutatják az emberek. Kezdetben a mágiáé, a varázslaté, sőt a boszorkányságé volt a főszerep, majd ahogy egyre többet tudtak meg az anyagokról, lassan inkább a tudomány került előtérbe. Könyvünk főszereplői mai gyerekek és tudósok, ám őket is ugyanúgy izgatja a kincskeresés, mint az alkimistákat. Meglelik-e vajon a titkot?

Kövesd őket útjukon, segítsd őket a rejtélyek megoldásában, és mire az izgalmas, interaktív könyv végére érsz, magad is számos titok és tudományos érdekesség birtokába jutsz.

Móra Kiadó, 2008



KETTŐS KÖTÉS

Kérdéseiket a következő e-mail címre: panorama@chemres.hu vagy hagyományos levélben a Kémiai Panoráma, MTA Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2. címre várjuk (a borítékra írják rá: „Kettős kötés”)

Munkatársaink

Rovatvezetők

Héja László (kémia a biológiában)
Lopata Antal (kémiai informatika)
Paszternák András (Re-Akció)
Varga Szilárd (szerves kémia)
Wajand Judit (kémia az oktatásban)

E szám szerzői

Csákó Zsófia
Héja László
Jórárt Balázs
Kőszegi Lidia
Mayer István
Nemes László
Pálinkás Gábor
Paszternák András
Simonyi Miklós
Szőri Milán
Varga Szilárd
Viskolcz Béla

Kémiai Panoráma

Felelős kiadó és főszerkesztő:

Pálinkás Gábor
Kiadja az MTA Természettudományi
Kutatóközpont
Kapcsolat: 1117 Budapest,
Magyar tudósok körútja 2.
e-mail: panorama@chemres.hu
Tördelés-képszerkesztés: Horák Ferenc
Szakmai tanácsadó: Gózon Ákos
Honlap: www.kemiaipanorama.hu



**Pálinkás
Gábor**
főszerkesztő



**Nemes
László**
szerkesztő



**Simonyi
Miklós**
szerkesztő

