

Kémiai Panoráma

2022. évfolyam 1. szám

A KÉMIAI ELEMOK KELETKEZÉSE

AZ ÉGHAJLATVÁLTOZÁSRÓL RÖVIDEN

AZ AUTÓZÁS JÖVŐJE

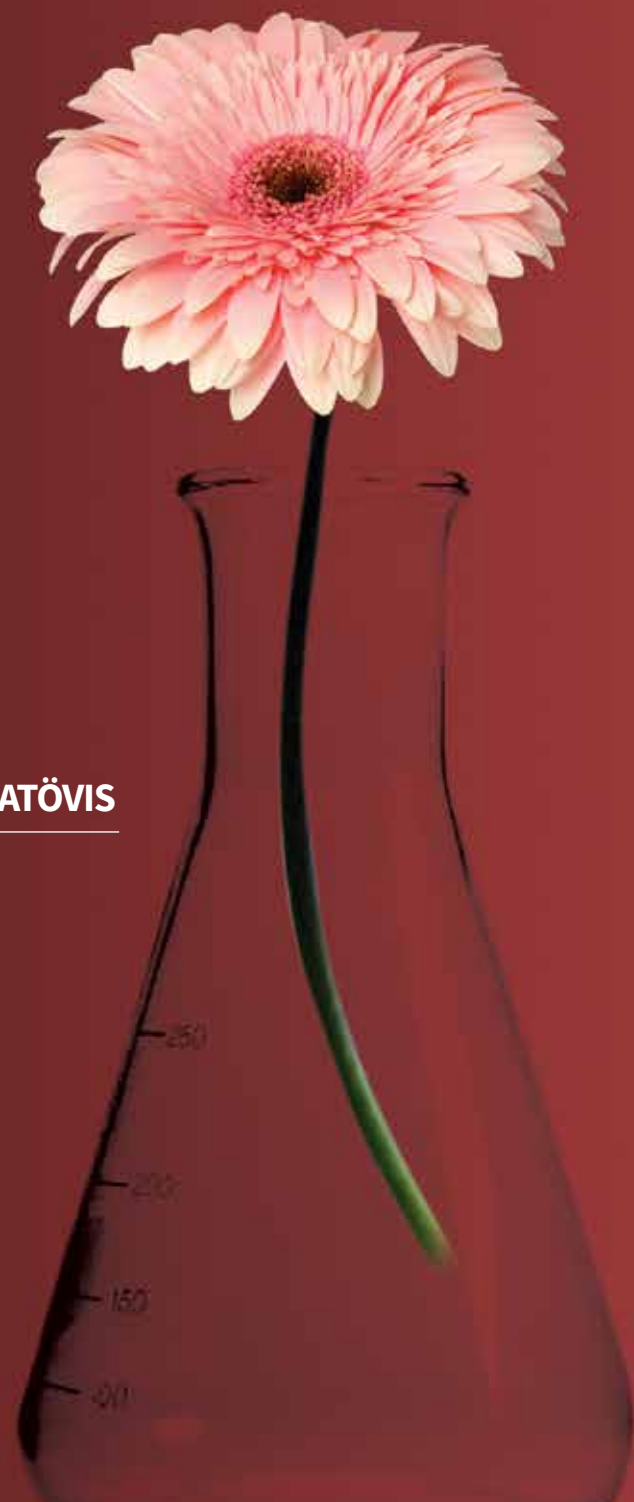
AZ ELSŐ DUPLÁZÓ NOBEL-DÍJAS

MESTERSÉGES INTELLIGENCIA A KÉMIÁBAN

GYÓGYÍTÓ MOLEKULÁK NÖVÉNYEKBEN: A MÁRIATÖVIS

ÍGÉRETES ANTIVIRÁLIS GYÓGYSZEREK

ERWIN SCHRÖDINGER 1887-1961



TARTALOMJEGYZÉK

4-11

NEMES LÁSZLÓ:

A kémiai elemek
keletkezése

'Isa csillagpor . . . vogmuc'

16-19

SIMONYI MIKLÓS:

AZ AUTÓZÁS JÖVŐJE

A lítium-ion akkumulátorok
problémája



20-23

MÉNES ANDRÁS:

HARMINC ÉVE

HUNYT EL JOHN BARDEEN



12-15

AZ ÉGHAJLATVÁLTOZÁSRÓL

RÖVIDEN

Rekordhőmérséklet 2020



A szerkesztőség köszönetet mond az MTA Természettudományi Kutatóközpontnak, az MTA Folyóirat-pályázatának, továbbá az MTA Kémiai Osztályának a támogatásáért.

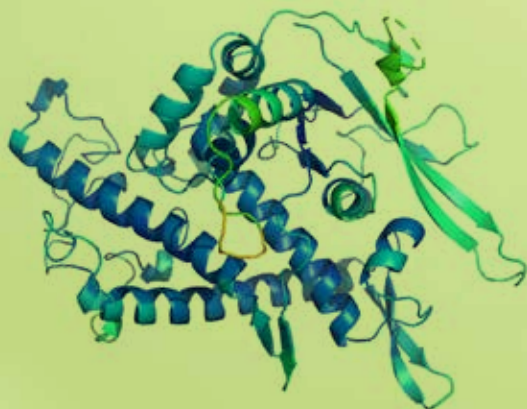
A Kémiai Panoráma magazin az ÚMFT TÁMOP 4.2.3 KMR/1/2008-0006 pályázat keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával (3-6. számok), továbbá az MTA Kémiai Osztálya (4-6. számok) és a Servier Gyógyszerkutató Intézet (5-6.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





24-26

SIMONYI MIKLÓS:
MESTERSÉGES INTELLIGENCIA
A KÉMIÁBAN
A fehérjekutatás szolgálatában



27 A TERMÉSZETTUDOMÁNYOS OKTATÁSÉRT SZABÓ SZABOLCS EMLÉKÉRE KÖZHASZNÚ ALAPÍTVÁNY FELHÍVÁS

Országos Kémia tantárgyi hírlevél indul



A Természettudományos Oktatásért
Szabó Szabolcs Emlékére Közhasznú Alapítvány
Charitable Foundation for Natural Sciences Education in Memoriam Szabolcs Szabolcs

TUDÁS. KÖZÖSSÉG. ÉRTÉK.

28-31

KŐSZEGI LÍDIA:
GYÓGYÍTÓ MOLEKULÁK
NÖVÉNYEK BEN
Máriatövis



32

AZ ÉGHAJLATVÁLTOZÁS HATÁSA AZ
ERDŐKRE
szerkesztőség



33-39

PÁLINKÁS GÁBOR:
ÍGÉRETES
ANTIVIRÁLIS
GYÓGYSZEREK
Harcban a
vírusokkal

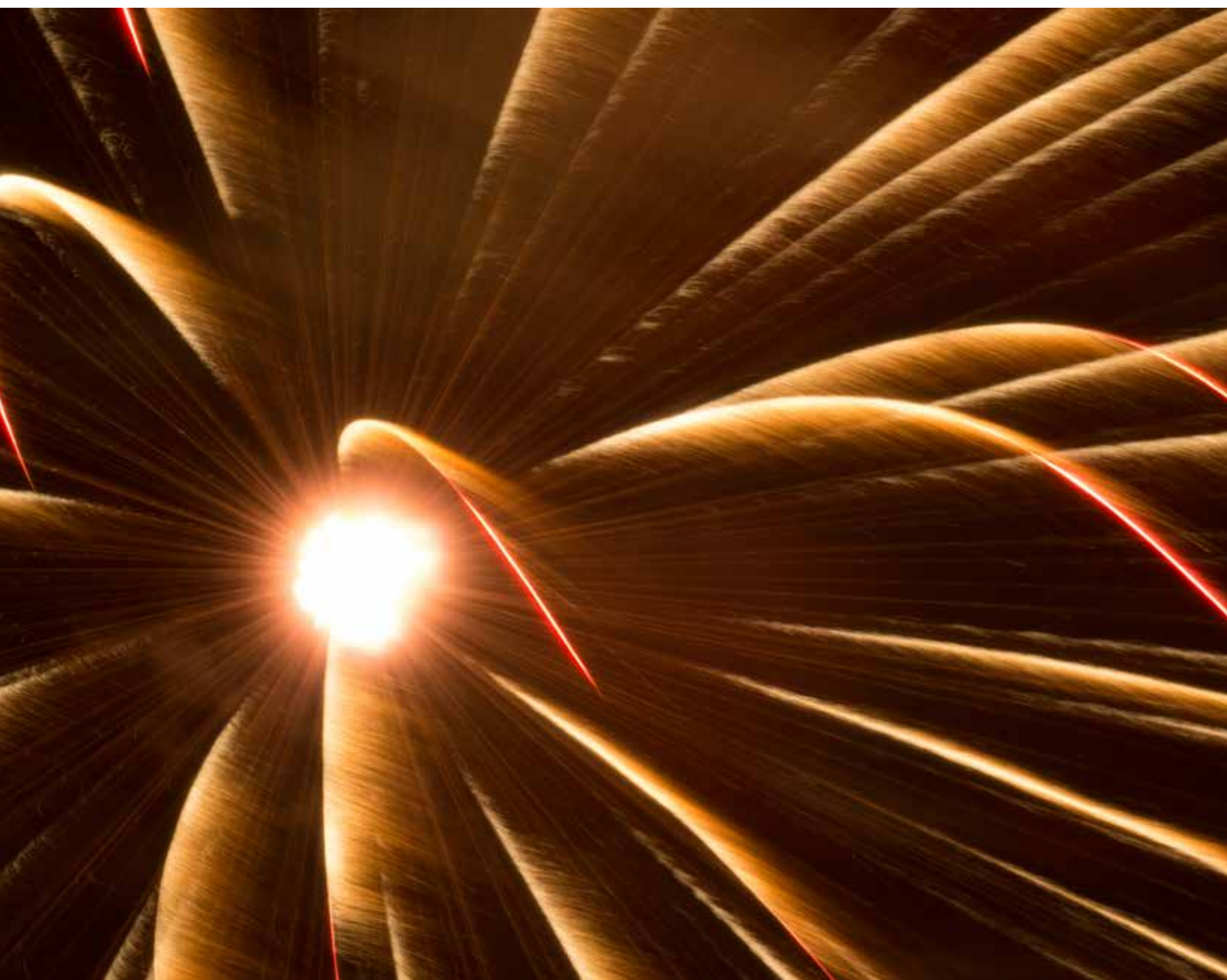


40-41



ERWIN
SCHRÖDINGER
1987-1961

'Isa csillagpor . . . vognuc'



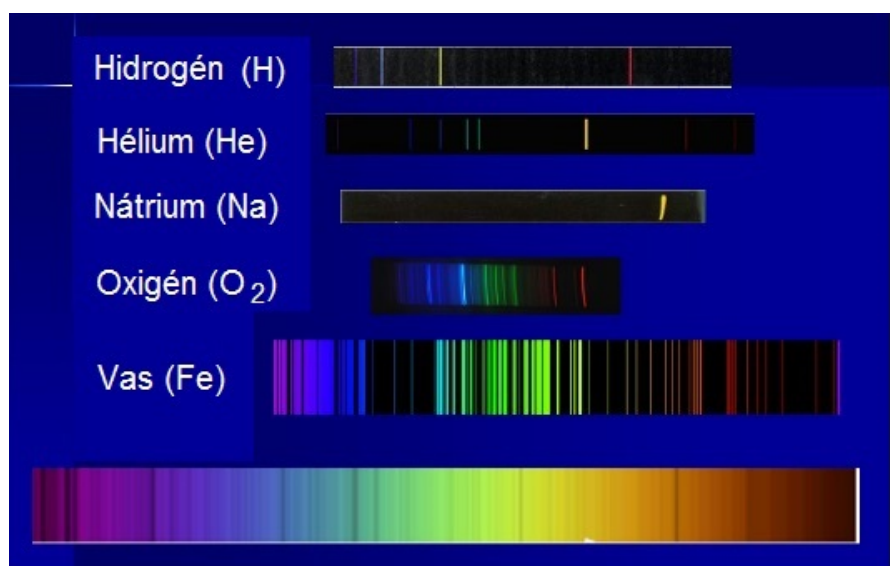
Takashi Hososhima: Ősrobbanás-tűzijáték



A kémia elsősorban vegyületekkel, molekulákkal és ezek reakcióival foglalkozik. Így a molekulákat felépítő atomok keletkezésének kérdése voltaképpen nem kémiai probléma, hanem a fizika különböző területeinek (atomfizika, részecskefizika, asztrofizika és csillagászat) a kutatási kérdése. A jelen szerző azonban nem fizikus, egyik említett területnek sem a művelője, így ez a cikk csak hozzávetőleges ismereteket nyújthat. Amint látni fogjuk: a legszorosabb kapcsolat e téren a csillagászzal mutatható ki.

Ezért az első kérdés mindjárt az, milyen módon tud a csillagászat a kémiai elemekre vonatkozó információt adni. Mivel a csillagokról elsősorban elektromágneses sugárzások útján lehet ismereteket szerezni, azok spektroszkópiai tanulmányozása a legfontosabb rendelkezésre álló mód megismerésükhöz (persze az elméleti módszerekkel, a kozmológiával, asztrofizikával és asztrokémiával karöltve).

A spektroszkópia úttörő lépésének Isaac Newton kísérletét tekinthetjük, aki elsőként bontotta fel a napsugárzás fényét színtelepekre egy üvegprizma segítségével 1666-ban. Az első csillagászati spektroszkópiai felfedezés, ami elvezetett a kémiai elemek csillagászati vizsgálatához, így keletkezésük problematikájához, [Joseph von Fraunhofer](#) (1787–1826) német optikus napszínkép vizsgálataiból született 1814-15-ben, aki sokat foglalkozott az abban megjelenő fekete (abszorpciós) vonalakkal (noha előtte már 1802-ben az angliai vegyész és fizikus William Hyde Wollaston, a palládium és ródium elemek felfedezője is észrevett néhány ilyen vonalat a nap színekében, de nem foglalkozott azokkal részletesebben. Fraunhofer összeségében 574 ilyen abszorpciós vonalat azonosított a nap színekében. A XX. század elején Cecilia Helene Payne angol csillagász nő a Harvard Egyetemen 25 évesen megírt PhD értekezésében elemezte a csillagok színekében a kémiai elemek gyakoriságát és ionizációs állapotukat. A csillagok atmoszférájáról 1928-ban könyvet írt. Mintegy 18 kémiai elem spektroszkópiai



1. ábra: A nap színeképe a Fraunhofer féle vonalakkal, néhány összehasonlító színekkel

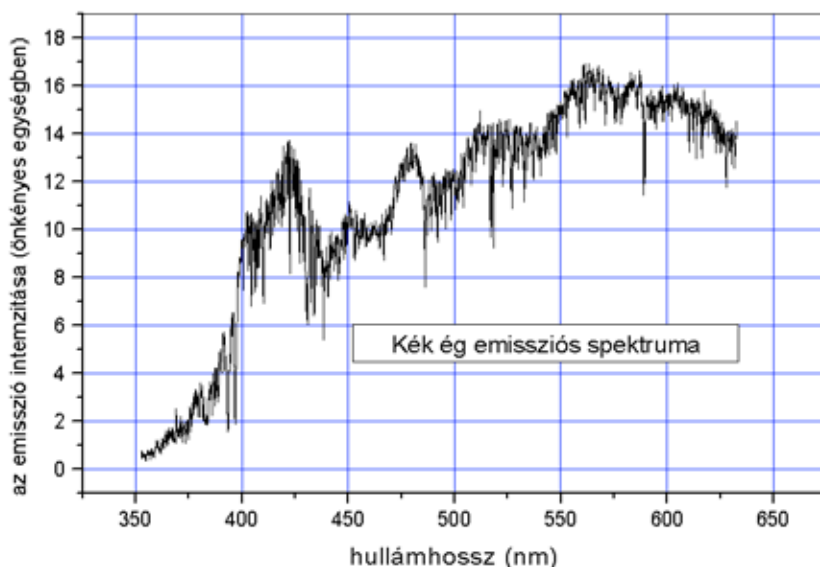
vizsgálatával foglalkozott és megállapította, hogy a csillagok főként hidrogénből és héliumból állnak, ami drasztikusan eltér a Föld és a szilárd bolygók elemi összetételétől.

Nem kell azonban a Napba nézni, hogy pár Fraunhofer vonalat lássunk a színekben. A 2. ábra mutatja a kék tiszta égbolt látható tartományú színeképét egy száloptikás miniatűr spektrométerrel felvéve.

Ezen az ábrán könnyen azonosíthatók a hidrogén Balmer spektrumának béta, gamma és delta vonalai, továbbá a vas néhány vonala és a kalcium két vonala. Ezekon kívül még számos más abszorpciós (lefelé mutató) vonalat is láthatunk, de a színekép zajos, így azonosításuk nehéz. Mivel a légkörben számos molekuláris komponens található, azoknak is

megtalálhatók gyenge abszorpciós vonalai, illetve sávjai. A hullámzó spektrális háttér a minispektrométer adottságainak tulajdonítható, az intenzitás lefutását pedig a detektor érzékenység görbéje határozza meg, azon az alapvető eloszlási görbén kívül, amit a hőmérsékleti sugárzás Planck görbéje határoz meg.

Az egyes kémiai elemek azonosítása tehát spektroszkópiai úton történik, de még egy fontos tényező játszik szerepet: a spektrumvonalak frekvenciájának megváltozása az úgynevezett nyugalmi értékhez képest. Ennek az oka az egyes csillagászati objektumoknak a (Földhöz viszonyított) sebessége, aminek a hanghullámok Doppler-féle eltolódásával analóg frekvencia módosító hatása van. Ha az objektum távolodik tőlünk, földi



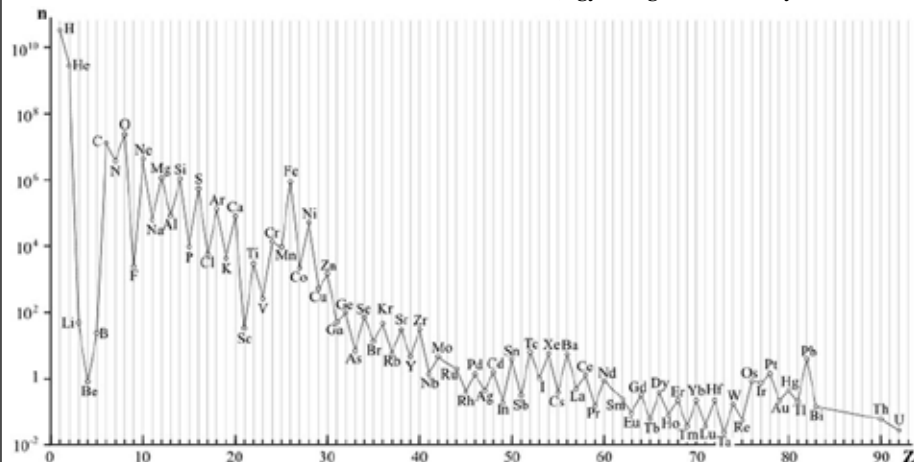
2. ábra: A kék ég spektruma a látható tartományban (a Szerző felvétele)

megfigyelőktől – ez az általános helyzet – a spektrumvonalak frekvenciája csökken, tehát hullámhossza nő, azaz vörös eltolódás lép fel. Ezt a jelenséget elsőként Edwin Powel Hubble amerikai csillagász figyelte meg részletesen 1929-ben és megállapította, hogy ez a vörös eltolódás arányos az objektum földtől mért távolságával. Ez az ún. Hubble-törvény. A Hubble űrtávcső Edwin Hubble nevét örökíti meg. A vörös eltolódás figyelembevétele nélkül nem volna lehetséges a kémiai elemek azonosítása a csillagászatban. Ezen kívül a vörös eltolódás az egyik legfontosabb érv a világegyetem tágulásának bizonyításában, ami viszont az ősrobbanás (Big Bang) kozmológiai elméletének alapköve. Ezt azért fontos itt leszögezni, mert a könnyű kémiai elemek keletkezésének ma elfogadott elmélete az ősrobbanás modelljén alapul.

Ezután a rövid bevezető után, ami igyekszik utalni a csillagászat és az elemek kémiaja közötti talán nem általánosan ismert kapcsolatokra, nézzük hogyan került sor a kémiai elemek létrejötté talányának vizsgálatára. Ehhez elsősorban az elemek kozmikus gyakoriságát kell áttekinteni. Ehhez az egyes csillagok, galaxisok, csillagködök és

egyéb objektumok (pl. aszteroidák és üstökösök) spektroszkópiái, illetve laboratóriumi analízise szükséges. A 3. ábra tünteti fel a súly szerinti relatív gyakoriság logaritmusaának függését az elemek rendszámától. A földfelszín elemeloszlása ettől természetesen eltér, hiszen hidrogén és hélium – a kozmosz fő elemei – a Földön alig találhatók, az idők során elillantak a világűrbe, a nehéz elemek pedig a Föld kialakulásakor lesüllyedtek a bolygó magja felé.

Ezt az elemeloszlást elsőként részletesen és elméleti módszerekkel



3. ábra: A kémiai elemek relatív tömeg szerinti csillagászati előfordulási aránya logaritmikus ábrázolásban a rendszám függvényében

Georgij Antonovitch Gamow (George Gamow) orosz származású amerikai fizikus elemezte 1946-ban megjelent cikkében, ami a világegyetem tágulását (ősrobbanás, Big Bang) és az elemek keletkezésének mechanizmusait tárgyalta. Későbbi cikkében, R.A. Alpher és Hans Bethe szerzőtársakkal az elemek keletkezését a primordiális neutronanyagból kiindulva, a termikus egyensúlyi feltételeket elvetve magyarázták. Szerintük elsőként deutérium magok jöttek létre, amit a világegyetem lehűlését és tágulását követően a további kémiai elemek keletkezése követett a nukleáris szintézis folyamataiban. A 3. ábrán látható eloszlást jó közelítéssel tudták leírni. Gamow humorára jellemző, hogy Hans Bethet azért vette be a szerzők listájába – noha ő nem volt a munkatársuk – mert így a szerzők nevének kezdőbetűi megegyeztek a görög ábécé első három betűjével.

Az ősrobbanás vázlatos (művészi) elképzelését mutatja be az alábbi ábra:

Az első fázis az Univerzum fantasztikusan gyors kiterjedése, amit egy sűrű, igen magas hőmérsékletű plazmaállapot követ. Ebből eleinte nem jutott ki sugárzás az elektronokkal ütköző fotonok miatt, majd kb. 378000 év után az elektronok egyesültek a protonokkal, kialakultak az első hidrogén és hélium atomok, így a sugárzás akadálytalanul



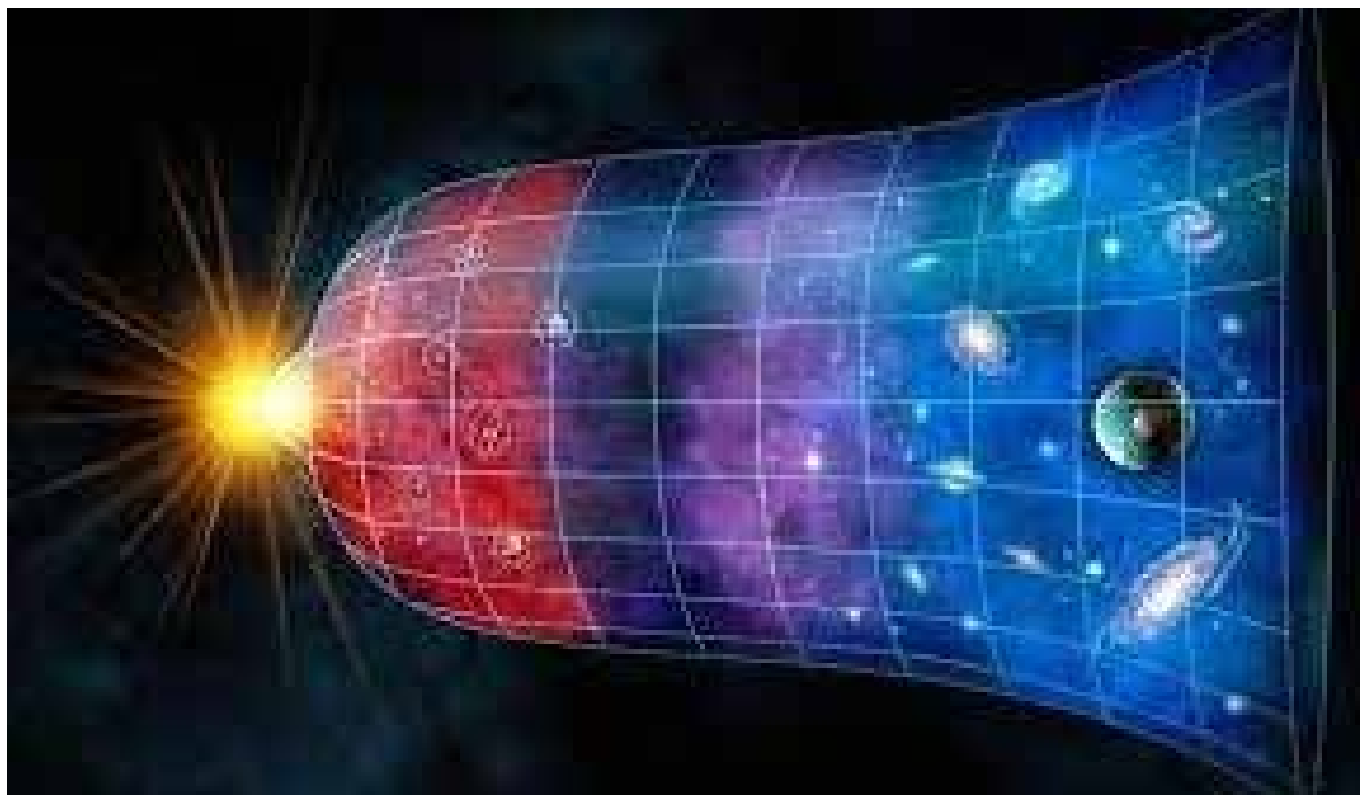
megjelent. Ennek mai maradványa az úgynevezett kozmikus mikrohullámú háttérsugárzás (cosmic microwave background, CMB), ami kb. 2.7 K hőmérsékletű feketetest sugárzásának felel meg. Majd kb. 400 millió évvel később létrejöttek az első csillagok, ezt követték a galaxisok és a bolygók, majd a Naprendszer kialakulása is kb. 4 milliárd évvel ezelőtt. Eközben a kozmosz tágulása gyorsult az úgynevezett sötét energia hatására (ennek természete ma még nem világos). Az ősrobbanás a mai becslés szerint 13.8 milliárd évvel ezelőtt következett be.

Gamow és kollegái elméletét később módosította Sir Fred Hoyle, először egy 1946-ban megjelent cikkében, majd később, 1954-ben. Hoyle hipotézise szerint a lítiumnál nehezebb kémiai elemek a csillagokban lejárló nukleoszintézis termékei, míg a hidrogén, a hélium és kis mennyiségű lítium az ősrobbanás kezdeti stádiumában keletkeztek (lásd fentebb).

Hoyle hipotézisét Geoffrey Burbidge, William A. Fowler, és Fred Hoyle csillagászati és laboratóriumi adatok alapján igazolta az azóta B2FH formában ismeretes cikkükben 1957-ben. A munka az úgynevezett p-, r- és s-folyamatok alapján (neutronok elnyelődése és kibocsátása által kiváltott magszintézis folyamatok) igazolták a H, He és Li elemeknél nehezebb elemek keletkezését különböző tulajdonságokkal bíró csillagokban. Ezeknek a nehéz elemeknek és izotópjaiknak a gyakorisága mintegy öt nagyságrenddel kisebb, mint az előbbi három elemé. Ez egybehangzott Hoyle eredeti 1954-es hipotézisével, miszerint ezek az elemek masszív csillagokban lejárló magszintézis folyamatokban jöttek, ill. jönnek létre. Az 1983-as fizikai Nobel-díjat William Alfred Fowler és Subrahmanian Chandrasekar kapták elméleti és kísérleti munkájukért, ami a kémiai elemeknek a csillagokban lejátszódó termonukleáris folyamatokban történő szintézisére vonatkozott.



4. ábra: George Gamow (1904-1968)



5. ábra: Az ősrobbanás sémája



6. ábra: Sir Fred Hoyle (1915-2001)

Érdekes, hogy Hoyle a Nobel-díjas munkában úttörő volt (többek szerint a B2FH cikk alapvetően az ő munkája volt), mégsem kapott Nobel-díjat. Talán agresszív emberi magatartása, sértő viselkedése tudóstársaival (és a Nobel bizottsággal) szemben, továbbá az állandó állapotú (steady state) Univerzum elméletéhez való ragaszkodása – amikor az Univerzum fejlődését már régen elfogadták – járulhattak hozzá mellőzéséhez,

legalábbis így vélte Sir Harold Kroto, az 1996 évi kémiai Nobel-díjas.

A szén a kémiai elemek nukleáris szintézisének az egyik döntően fontos állomása, míg a másik ilyen állomás a vas. Különösen érdekes és fontos Hoyle-nak a szén magszerkezetével kapcsolatos hipotézise.

A csillagok magjában két ^4He mag (alfa részecske) fúziójából egy ^8Be mag keletkezik, ez azonban nagyon rövid élettartamú (felezési idő: 8.19×10^{-17} sec), de ha ezidőn belül egy harmadik alfa részecskével fuzionál, akkor a ^{12}C mag egy gerjesztett rezonancia állapotra jön létre (ezt az állapotot nevezik Hoyle-állapotnak). A rezonancia annyit jelent, hogy a $^8\text{Be} + ^4\text{He}$ magok energiája majdnem pontosan egyenlő a ^{12}C mag egy gerjesztett állapotának energiájával. Ez a mag igen gyorsan vissza alakul három ^4He részecskévé, kivéve kb. 2400 alkalomból egyetlen alkalmat, amikor is stabil ^{12}C maggá alakul át. Hogy ez a folyamat lejátszódhasson a szénmag rezonancia állapotának energiája 7.596 MeV and 7.716 MeV közé kell essen.

Amikor a csillag hidrogén tartalma jelentősen lecsökken, mert fuzionál héliummá (ez a fúziós folyamat zajlik

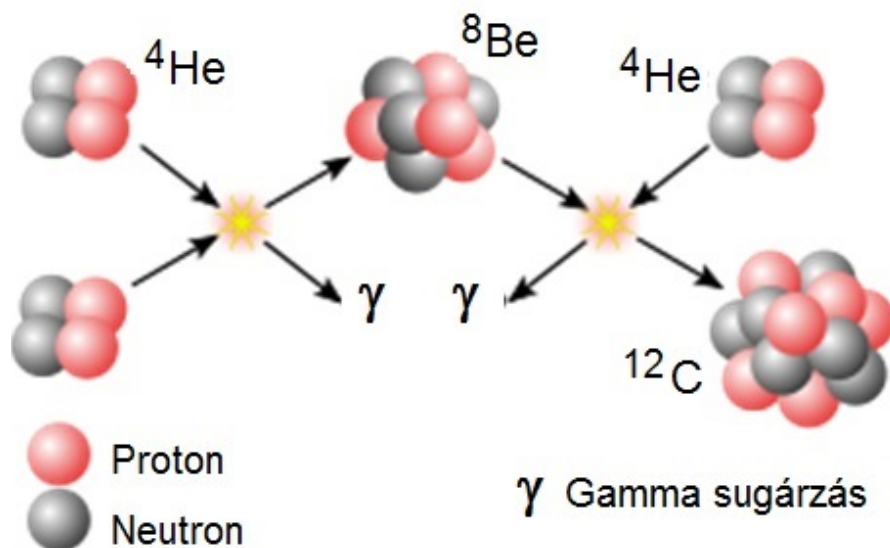
jelenleg is a Napban, és ez a termonukleáris reakció hevíti a Napot), a mag gravitációsan összehúzódik, mert a gravitációt már nem kompenzálja a fúziós reakció sugárzási nyomása, és felhevül 10 millió K-re. Ebben az állapotban három alfa részecske a ^8Be képződési energiagátján átjut és nagy mennyiségű ^{12}C szenet termel.

A 7.67 MeV energiájú állapotot Hoyle eleinte csak feltételezte, mert enélkül a termonukleáris folyamat nem juthatna el a szén (és további nehéz elemek) szintéziséhez. Később Fowler segítségével sikerült ennek az állapotnak a kísérleti igazolása.

A következő lépésben a ^{12}C fuzionál egy ^4He maggal, és ^{16}O mag keletkezik. Az oxigén magnak van egy állapota, aminek az energiája nem esik eléggé közel a fuzionáló szén és hélium magok energiájához. Ha ez a rezonancia állapot létezne, a ^{12}C magok teljes egészükben átalakulnának ^{16}O magokká, és nem jönne létre nagy mennyiségű szén a világegyetemben. Ezek a kritikus rezonancia állapotok teszik lehetővé, hogy elegendő mennyiségű szén keletkezzen, amiből a további termonukleáris folyamatok lépései létrehozhatják a nehéz elemeket. A fúziós folyamatok a hőmérséklet további növekedésével a csillagokban csak az ^{56}Ni izotópig jutnak el, ami vassá bomlik el. Ez a csillagokban termelődő kémiai elemek utolsó állomása. A vastól induló további termonukleáris folyamatok energiaigénye nagyobb a fúziókból származó energiáknál. A vason túli nehéz elemeket főként neutronok befogása hozza létre. A neutron befogásnak van lassú változata (s-folyamat) és gyors változata (r-folyamat). A lassú folyamat kb. a vason túli elemek felét hozza létre, a többieket a gyors folyamat kelti. Az r-folyamat szupernóváknál és összeolvadó neutroncsillagokban zajlik. A vason túli elemek szintéziséhez a rendkívül magas hőmérséklet és neutronáram szükséges, ezek pedig a csillagok magjában nem jönnek létre, de a szupernóvák és összeolvadó neutron csillagok explozív



7. ábra: Az 1983. év fizikai Nobel-díjasai: Subramanyan Chandrasekhar és William Alfred Fowler (képek forrása: Nobel Alapítvány Archívuma)



8. ábra: A hármas alfa folyamat vázlata

folymataiban igen. A 9. ábrán egy speciális periódusos rendszert láthatunk, ami feltűnteti a kémiai elemek keletkezési módját.

A cikk elején említettem, hogy a csillagászok elektromágneses sugárzások révén jutnak információkhoz a különböző kozmikus objektumok és folyamatok analizésében. Nos ez a hagyományos helyzet pár éve drasztikusan megváltozott, és pedig a gravitációs hullámok sikeres észlelésével. Az első ilyen megfigyelésre 2015 szeptemberében került sor az Amerikai Egyesült Államokban, a LIGO (Laser Interferometer Gravitational-Wave Observatory – Lézer interferometer gravitációs-hullám obszervatórium) telephelyén. A gravitációs hullámokat elsőként Henri Poincaré jósolta meg 1905-ben, de elméletüket Einstein adta meg általános relativitás elméletében 1916-ban. Eleinte Einstein maga sem hitt a gravitációs hullámok megfigyelhetőségében, mivel azok rendkívül kis intenzitásúak. A döntő megfigyelésre száz évvel később, 2017 szeptemberben került sor (a LIGO és Virgo obszervatóriumok

együttműködésében), ez alkalommal sikerült két neutroncsillag ütközése és egybeolvadása során kibocsátott gravitációs hullámokat észlelni. Ami különösen fontos, hogy a gravitációs hullámokon kívül sikerült elektromágneses sugárzást is észlelni, és pedig az optikai tartományban is. Ezt a komplex jelenséget nevezték el “multi-messenger astronomy”-nak (amit magyarra talán többforrású

csillagászatnak lehetne fordítani). A 2017 évi fizikai Nobel-díjat felerészben Rainer Weiss, és felerészben megosztva Kip S. Thorne, és Barry C. Barish kapták a LIGO detektor megalkotásáért és a gravitációs hullámok észleléséért.

Ezeket a sugárzásokat a neutroncsillagpár összeolvadásából keletkező kilonova bocsátja ki és az optikai spektrális tartományban megjelennek az intenzív neutronáramban szintetizált nehéz elemek spektrális vonalai. A 9. ábra jelöli a neutroncsillag kilonovában gyors neutronbefogással (r-folyamat) keltett kémiai elemeket -- lásd a lila színnel jelölteket.

Az ütköző neutroncsillagokban keletkező nehéz elemek a Plutóniumig terjedően megjelennek (lásd a lila színnel jelölt elemeket a 9. ábrán). Közöttük van a Földön oly nagy fontosságú arany is. Az eljegyzési gyűrűkben, mobil telefonokban, számítógépekben és sok más helyen található arany azonban nem a Naprendszer kialakulásakor olvadt állapotú Föld magjába (sok nehéz elemmel együtt) lesüllyedt aranyból származik., ami sajnálatos, mert becslések szerint az ott található arany mennyiség a Föld felszínét 30 cm vastagságú rétegben fedné be. Igaz ugyan, hogy ez az arany mennyiség felborítana a világ gazdaságát, hiszen pl. a Fort Noxban tárolt aranyrudak ehhez képest elenyésző mennyiség és megszűnné az arany



A földi arany a Naprendszer kialakulásakor jött létre

A KÉMIAI ELEMEL KELETKEZÉSI PERIODUSOS RENDSZERE

9. ábra

mesterséges radioaktív elemek

**kozmikus sugárzás okozta
maghasadás,**

neutroncsillagok ütközése

értékmérő szerepe. A földi arany a Naprendszer kialakulásakor jött létre, de igen kis mennyiségben aszteroidákkal és meteoritokkal érkezett, ill. ma is érkezik hozzánk, a Föld belsejében rejtőző aranyhoz pedig vulkanikus folyamatok révén lehet hozzáférni általában kvarc telérekbe zárva.

Ami számunkra nagyon fontos a neutroncsillagokkal kapcsolatban, az az Amerikai Egyesült Államokban dolgozó két magyar csillagász: Bartos Imre és Marka Szabolcs felfedezése, amit 2019-be közöltek a Nature folyóiratban. Ők meteoritok aktinida (főleg Curium és Plutónium) izotóparányai alapján megállapították, hogy a gyors neutron elnyelődési, r-folyamatokban keletkezett nehéz elemek nem a viszonylag gyakori szupernova robbanások révén, hanem a mintegy ezerszer ritkább neutroncsillag összeolvadásból jöttek létre, még a Naprendszer kialakulását kb. 80 millió évvel megelőzően. Az ütköző neutroncsillagok

viszonylag közel voltak a pre-szoláris anyagfelhőhöz, kb. 300 parsec (1 parsec = 3.26 fényév) távolságra.

A pre-szoláris anyagfelhőben a ^{24}Cm , ^{129}I , ^{244}Pu és ^{238}U előfordulási arányának időfüggését számítógépes szimulációval modellezték (meteoritokban talált izotóp arányok alapján) és azt találták, hogy az izotóparányok több korai maximumot mutattak. Amennyiben a nehéz elemek a sokkal gyakoribb szupernova robbanásokból keletkeztek volna, az izotóparányok sokkal egyenletesebb lefutást mutatnának, mivel az izotópok felezési ideje sokkal rövidebb, mint a Naprendszer kialakulása óta eltelt kb. 4 milliárd év.

Mindezt figyelembevéve kissé átfogalmazhatjuk ennek a cikknek a címében idézett XII. századi magyar halotti beszéd elhíresült mondatát modern nyelvhasználattal:

Íme, neutroncsillagpor vagyunk!

Nemes László

TOVÁBBI OLVASNIVALÓK:

G. Gamow: Expanding Universe and the origin of elements, Phys.Rev. 70, 572(1946)
R.A.Alpher, H. Bethe, G. Gamow: The origin of chemical elements, Phys.Rev. 73, 8504 (1948)
F. Hoyle: The chemical composition of the stars, MNRAS 106,255 (1946)
Qubit, 2018.12.02: Fred Hoyle. Az ember aki több Nobel díjat is megérdemelt volna, mégsem kapott egyet sem
T. Rauscher, A. Patkos: Origin of the chemical elements, Handbook of Nuclear Chemistry, Springer 2011, p. 611
Carolyn Ruth: Where do chemical elements come from, Chemmatters (ACS), October 2009
Bartos, S.Marka : A nearby neutron star merger explains the actinide abundances in the early solar system, Nature, May 1, 2019



Dominik R. Hykman: Ősrobbanás című festménye

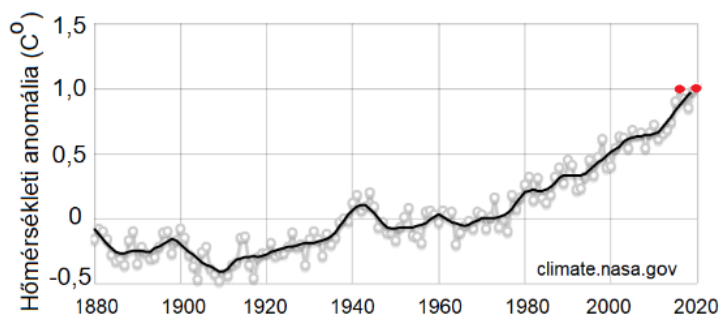


Rekordhőmérséklet 2020

A rekordhőmérséklet általában – így 2016-ban is – egybeesik egy El Niño eseménnyel (óriási meleg vízsáv, amely néhány évente képződik a Csendes-óceánban), ami az óceán felszíni hőmérsékletének nagymértékű felmelegedését eredményezi. A 2020-as év azonban szokatlan volt, mert egy La Niña esemény játszódott le (az El Niño fordítottja, hidegebb vízsáv képződésével). Így, ha a La Niña nem csökkentette volna a globális hőmérsékletet, 2020 még melegebb lett volna. A kivételesen nagy meleg váltotta ki a valaha feljegyzett legnagyobb erdőtüzeket az Egyesült Államok Kalifornia és Colorado államaiban, valamint a tüzeket Szibériában és Ausztrália keleti részén is.

Klímatudósok szerint világunk nagy valószínűséggel tovább fog melegedni ebben az évszázadban és azon túl is. Ez a következtetés az éghajlati rendszer működésével kapcsolatos korábbi ismereteink és a Föld éghajlatának szimulálására tervezett számítógépes

Az elmúlt évtized az eddigi legforróbb volt. A 2020-as év több mint 1,2 Celsius fokkal volt melegebb, mint a XIX. század átlaghőmérséklete. Európában ez volt a valaha mért és megörökített legmelegebb év, míg globálisan 2020 és 2016 bizonyult a legmelegebbnek.



Agrafikon a globális felszíni hőmérséklet változását szemlélteti az 1951-1980 közötti időszak átlaghőmérsékletéhez képest.

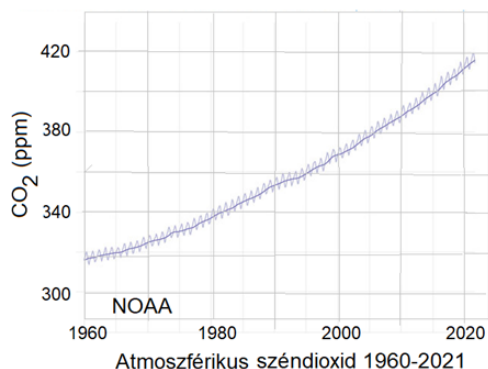
modelleken alapul. Az éghajlati modell szimulációinak széles köréből származó eredmények arra utalnak, hogy bolygónk átlaghőmérséklete 1,1–5,4 °C-al lehet melegebb 2100-ban, mint napjainkban. Ennek a hőmérséklet-emelkedésnek a fő oka a széndioxid és más, az emberi tevékenység által termelt, „üvegházhatású” gáz. A szén-dioxid legnagyobb forrása a szén és más fosszilis tüzelőanyagok égetéséből származik.

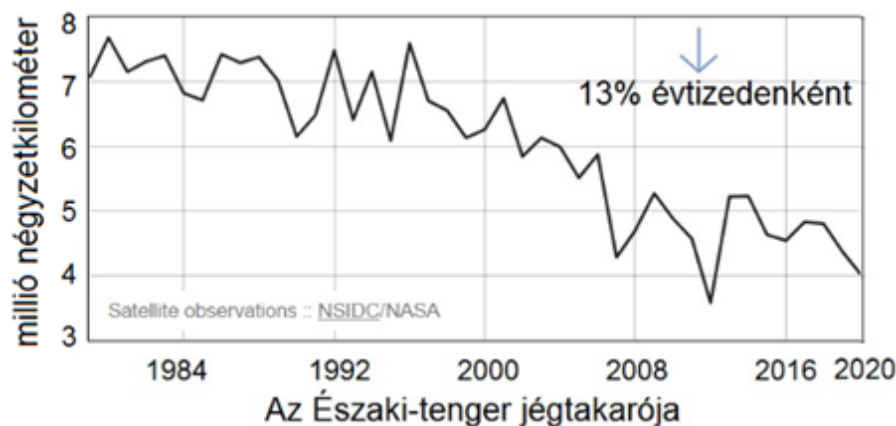
A LÉGKÖRI SZÉNDIOXID KONCENTRÁCIÓJA

A légkörben lévő CO₂ mennyisége 2020-ban rekordszintet ért el, májusban elérte a 417 ppm-t. A CO₂-szint utoljára körülbelül négymillió évvel ezelőtt, a pliocén (5,3-2,6 millió évvel ezelőtt)

korszakában haladta meg a 400 ppm-t, amikor a globális hőmérséklet 2-4 fokkal volt melegebb, a tengerszint pedig 10-25 méterrel magasabb a jelenleginél. Az elmúlt 60 évben 100 ppm-el nőtt a légköri szénmonoxid koncentrációja. az 1950-et megelőző egymillió évben a légköri CO₂ maximális értéke nem haladta meg a 300 ppm -t.

A Meteorológiai Világszervezet szerint a koronavírus miatti korlátozások hatása a légkör CO₂-koncentrációjára olyan csekély volt, hogy alig volt megkülönböztethető a légköri széndioxid évről évre történő ingadozásaitól. Klíma kutatók szerint „ha tovább is ilyen mértékben növekszik a széndioxid mennyisége a légkörben, a század végére a szintje 800 ppm lesz”.





ÉSZAKI-SARKI JÉGTAKARÓ

Sehol sem érezhető jobban a hőemelkedés, mint az Északi-sarkon. 2020 júniusában Kelet-Szibériában elérte a 38 fokos hőmérsékletet, ami a valaha mért legmelegebb volt az Északi-sarkkörön belül. A kánikula felgyorsította a tengeri jég olvadását a Kelet-szibériai és a Laptev-tengeren, és csaknem két hónappal késleltette a szokásos sarkvidéki fagyot. Az északi sarkkör eurázsiai oldalán a jég szokatlan későn, csak október végén fagyott meg. 2020 nyarán a tengeri jég területe a második legkisebb volt, és a tengeri jég kiterjedése (nagyobb mérőszám, amely magában foglalja azokat az óceáni területeket, ahol legalább 15% jég jelenik meg) szintén a második legkisebb értékű volt.

Amellett, hogy az éghajlatváltozás egyik tünete a jégta-ko-ró mennyiségének csökkenése, ugyanakkor hajtóereje is annak. A fényes fehér tengeri jég fontos szerepet játszik a Nap hőjének visszatükrözésében az űrbe. De mivel az Északi-sarkvidék kétszer olyan gyorsan melegszik, mint a Föld többi része – és mivel kevesebb jég marad a meleg nyári hónapokra, lecsökken a fényvisszaverő hatása. A többéves jég vastagabb és jobban tükröződik, mint a vékony, sötét, szezonális jég, amely egyre inkább átveszi annak helyét. 1979 és 2018 között a legalább öt éves sarkvidéki tengeri jég aránya 30%-ról 2%-ra csökkent. Helyette a nyílt, sötét víz nagy területe és a vékony szezonális jég is több hőt nyel el, tovább táplálva a globális felmelegedést. A

sarkvidéki tengeri jég mennyiségének csökkenésével felgyorsul a globális felmelegedés.



PERMAFROSZT

Az északi féltekén a permafroszt – az a talaj, amely két vagy több évig egész évben fagyos marad – gyorsan felmelegszik. Amikor a levegő hőmérséklete 2020 nyarán elérte a 38° C-t (100° F) Szibériában, a szárazföldi hőmérséklet az Északi-sarkkör több pontján 45 fokos rekordot döntött (113° F), ami felgyorsította a permafroszt felolvasását a régióban. Mind a folyamatos örökfagy (hosszú, megszakítás

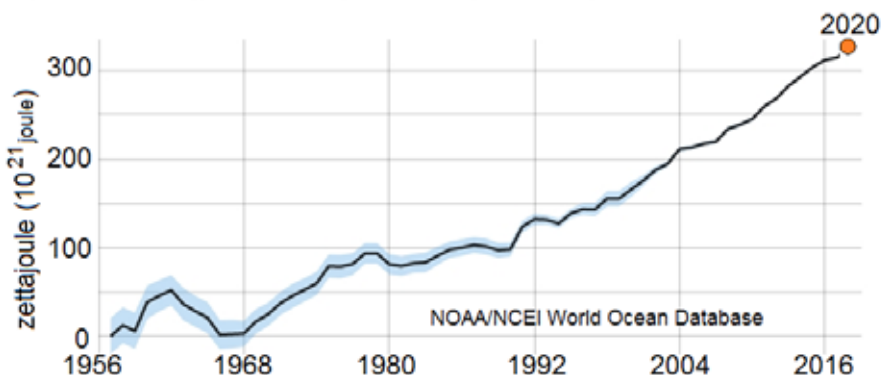
nélküli örökfagyszakaszok), mind a nem folyamatos (egy töredezettség fajta) hanyatlóban van.

A permafroszt hatalmas mennyiségű üvegházhatást okozó gázt tartalmaz, beleértve a CO₂-t és a metánt is, amelyek felolvasás közben kerülnek a légkörbe. A Szibériában, Grönlandon, Kanadában és az Északi-sarkon átívelő, mintegy 23 millió négyzetkilométeren elterülő permafroszt régió talajai kétszer annyi szén-tartalmaznak, mint a légkör – csaknem 1600 milliárd tonnát. Ennek a szénnek a nagy része metán formájában raktározódik, egy erős üvegházhatású gáz, amelynek globális felmelegedési hatása sokszorosa a CO₂-nek. A felmelegedés és a permafroszt szén gyorsabb mikrobiális lebomlása következtében a légkörbe történő további szén-dioxid (CO₂) és metán (CH₄) kibocsátás felgyorsíthatja az éghajlat felmelegedését

AZ ÓCEÁNOK HŐTARTARTALMA

A Föld felszínének több mint 70%-át borító globális óceán nagyon nagy hőkapacitású. Az elmúlt évtizedekben a növekvő üvegházhatású gázok miatt bekövetkezett felmelegedés 90%-át elnyelte, és az óceán felső néhány méteres rétege annyi hőt tárol, mint a Föld teljes légköre.

A globális felmelegedés 90 százaléka az óceánokban megy végbe, ami a víz belső hőjének növekedését okozza. 1956, az adatgyűjtés kezdete óta, az óceánok hőtartalma mintegy 300 zettajoule-al (300x10²¹ joule) növekedett. Az óceánban tárolt hő hatására a víz kitágul, ami a globális tengerszint-emelkedés





A koralok kifehéredése az óceánok felmelegedése miatt

harmadaért-feléért felelős. A hozzáadott energia nagy része a felszínen tárolódik, a felszín és 700 méter közötti mélységben. Az elmúlt 10 év volt az óceán legmelegebb évtizede az 1800-as évek óta. A 2020-as év volt az óceánok legmelegebb éve és a legmagasabb volt a globális tengerszint is.

Az óceánok felmelegedésének hatásai közé tartozik a hőtágulás miatti tengerszint emelkedés, a korallok kifehéredése, a Föld fő jégtakaróinak felgyorsult olvadása, felerősödő hurrikánok, valamint az óceánok biokémiájában bekövetkezett változások.

ERDŐK

1990 óta a világ 178 millió hektár erdőt (690 000 négyzetmérföldet) veszített el. Ez akkora terület, mint Líbia. Az elmúlt három évtizedben az erdőirtás üteme lelassult, de a szakértők szerint ez nem elég gyors, tekintve, hogy az erdők létfontosságú szerepet játszanak a globális felmelegedés megfékezésében. 2015–2020-ban az éves erdőirtás mértéke 10 millió hektár (39 000 négyzetmérföld, azaz körülbelül Izland nagysága) volt, szemben az előző öt év 12 millió hektárjával (46 000 négyzetmérföld).

Brazília, a Kongói Demokratikus Köztársaság és Indonézia azok az országok, amelyek a leggyorsabban veszítenek erdeikből. 2020-ban az amazóniai esőerdők erdőirtása 12 éves csúcsra emelkedett.

Az erdők pusztulását okozták az egyre jobban elszaporodó hatalmas erdőtüzek is. 2020. évben a világ számos erdőségei, Indiában, Egyesült Államokban, Törökországban, Szibériában, Spanyolországban, Északi-sarkkörön ritkultak meg erdőtüzekről.

2020-ban Észak-Amerika, Európa és Szibéria egyes részein végigsöpő szélösödéses erdőtüzek nemcsak helyi károkat okoznak, de sűrű füstöt is bocsátanak ki a légkörbe. A hosszú ideig lángoló erdőtüzek az éghajlatra is jelentős hatással vannak.

A tüzek károsítják az erdőket, amelyek egyébként eltávolítanak a CO₂-t a levegőből, kormot és egyéb aeroszolosokat

juttatnak a légkörbe, amelyek komplex hatással vannak a felmelegedésre és a hűtésre is. Becslések szerint a szárazföldön lévő összes szén 45%-a a fákban és az erdőtalajban raktározódik. Az erdők kivágása, felégetése vagy felégetése során a talaj is felbolydul, és szén-dioxid szabadul fel.

Januártól augusztusig a tudósok becslése szerint csak az Északi-sarkkörön belüli erdőtüzek közel 244 megatonna szén-dioxidot bocsátottak ki. Ez eredményezett rosszabb levegőtisztaságot Kanadában, Oroszországban és Európában. A becslések szerint a következő években is hasonló számokat jósolnak.

A Világgazdasági Fórum idén indított kampányt egy milliárd fa ültetésére és a szén elnyelésére.

Klímakutatók szerint az erdők természetes újranövekedésének lehetővé tétele és a hatalmas földterületek újjáépítése – ez a természetes regenerációnak nevezett folyamat – a legköltséghatékonyabb és legtermékenyebb módja a CO₂ megkötésének és az általános biológiai sokféleség növelésének.

EXTRÉM IDŐJÁRÁS

A felmelegedés következményeként ciklonok, árvizek és erdőtüzek





Hurrikán az Atlanti-óceánon

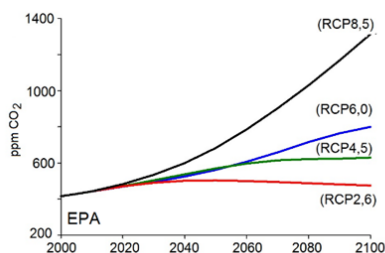
nagyszabású pusztítást okoztak az egész földgolyón. A szélsőséges időjárási események, például trópusi ciklonok, árvizek, heves esőzések és aszályok – a globális felmelegedés jól ismert következményei – a világ számos részét érintették. A legdrámaibb a rekordot döntő atlanti hurrikánszezon volt, amely novemberben is tartott még.

A szezonban 30 nevesített vihar volt június 1. és november 30. között, ami a valaha feljegyzett legmagasabb érték. A viharok is sokkal korábban alakultak ki az évben, mint általában, megdöntve a feljegyzett történelem legkorábbi viharai rekordjait. Rekordszámú vihar ért partot az Egyesült Államok partjai mentén is. Számos vihar és ciklon más ázsiai országokat is érintett, például ciklonok Indiában és afrikai országokban, valamint a szomáliai Gati ciklon, amely két nap alatt két évnyi esőt hozott.

A leginkább érintett régiók Afrikában, valamint Ázsiában (Kína, India, Korea és Japán) voltak. Dél-Amerikában viszont súlyos szárazság volt tapasztalható, amiben Észak-Argentína, Paraguay és Brazília nyugati területei voltak a legsúlyosabban érintettek. Egyedül Brazília mezőgazdasági vesztesége 3 milliárd dollár volt.

ELŐREJELZÉSEK

A kutatók számos matematikai modellel dolgoztak ki a klímaváltozás több mint százéves adatai alapján a változás mértékének előre jelzésére. Az alábbi ábrákon egy 2013-ban különböző scenáriókra (RCP) kidolgozott matematikai modellek 2100-ig tartó előrejelzései láthatóak az Egyesült Államok Környezetvédelmi Hivatalának



(EPA Environmental Protection Agency) egy ismertetőjéből.

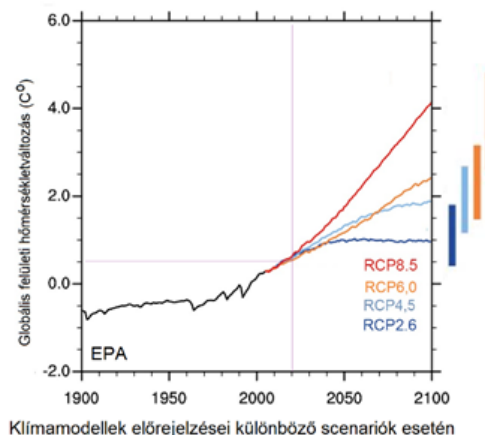
A fenti ábra az üvegházhatású gázok várható koncentrációját mutatja négy különböző kibocsátási útvonalra (RCP) vonatkozóan. A legfelső pálya azt feltételezi, hogy az üvegházhatást okozó gázok kibocsátása a jelenlegi évszázad során tovább fog növekedni. Az alsó pálya azt feltételezi, hogy a kibocsátások 2010 és 2020 között érik el a csúcst, majd csökkennék.

Az RCP 8.5 (a legrosszabb scenárió) a szén azon koncentrációjára vonatkozik, amely átlagosan 8,5 watt/négyzetméteres globális felmelegedést okoz a bolygón. Az RCP 8.5 útvonal (~1350ppm CO₂ a légkörben 2100-ra) körülbelül 4,3°C-szal növeli a hőmérsékletet az évszázad végére, az iparosodás előtti hőmérséklethez képest.

A globális átlaghőmérséklet megfigyelt és előre jelzett változásai négy kibocsátási útvonal szerint. A jobb oldali függőleges sávok a különböző modellek által jósolt század végére várható hőmérséklet-tartományokat mutatják, míg a vonalak a különböző éghajlati modellek átlagait mutatják. A változások az 1986-2005-ös átlaghoz képest vannak feltüntetve.

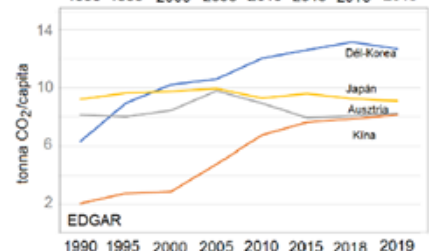
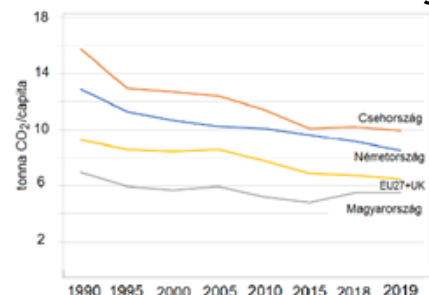
A globális felszíni hőmérséklet növekedésének jelenlegi trendje szinte lineáris. Az elmúlt évtizedben ~0,3 tizeddel megnövekedett globális átlaghőmérséklet hatására bekövetkező éghajlatváltozások káros hatásait magunk is tapasztalhatjuk. Egyértelmű a kapcsolat az üvegházhatású gázok kibocsátásának növekedése és a hőmérséklet növekedése között.

Nagyon fontos a 2015 decemberi „Párizsi megállapodás”, melyben 196 ország delegáltja, megegyezett arról, hogy a fenntartható klímaváltozás érdekében a globális átlaghőmérséklet folyamatos emelkedését „az iparosodás előtti szinthez képest 2 °C alatt” szükséges tartani,



miközben „törekedni kell a hőmérséklet-emelkedés 1,5 °C-ra történő korlátozására. Ennek érdekében meg kell állítani, ha lehet csökkenteni kell az üvegházhatású gázok kibocsátásának növekedését a világ minden ipari országában.

Szerkesztőség



Az országok egy főre jutó széndioxid kibocsátása 1990-2019 között



IRODALOM

Az összefoglaló a következő források alapján készült:
NOAA, Global Climate Report 2020
NASA Global Climate Change
Isabelle Gerretsen The state of the climate in 2021 - BBC Future , 11th January 2021
Emission Database for Global Atmospheric Research
https://edgar.jrc.ec.europa.eu/report_2021



A lítium-ion

Ma már kevesen vitatják az éghajlatváltozást, a forró nyarakat és időjárási katasztrófákat, valamint ezek mérsékléséhez szükséges intézkedéseket (fosszilis üzemanyagok visszaszorítása, üvegház hatású gázok kiküszöbölése, karbon-semlegesség). E törekvések egyik mindennapos jele az elektromos autók egyre nagyobb számú megjelenése.

Energiaforrásuk a lítium ion akkumulátor. Töltéskor a lítium ionok a pólusokat elválasztó elektrolitban a szénelapú anódhoz, kisütéskor a fém katódhoz

vándorolnak. A világ autóiparának ellátásához jelentős mennyiségű lítiumra van szükség, ami a mobiltelefonok és laptopok gyártásának szükségletét messze meghaladja, így érthető, hogy megnőtt az igény új



Tervezett lítium-bánya Nevadában



akkumulátorok problémája

lítium lelőhelyek feltárására. Az Amerikai Egyesült Államok Nevada államában egy kialudt tűzhányó tetején robbantás és ásás útján óriási gödör formálódik. Az „Amerikai Lítium” nevű projekt keretében az Egyesült Államok első hatalmas lítium-bányáját akarják létesíteni, hogy az elektromos autók akkumulátorait hazai forrásból láthassák el és megszüntessék az idegen országoktól való függést. Ámde ez tiltakozást vált ki az őslakosság törzsei, farmerek és környezetvédelmi csoportok részéről az értékes talajvíz felhasználása, elszennyezése, és a várhatóan hatalmas mennyiségű hulladék keletkezése miatt.

„Egy hegy felrobbantása nem egészen zöld akármilyen üzleti érdeket is kevernek bele” véli egy környezetvédő, aki sátorban lakik a készülő bánya területén és két eljárást is indított a Szövetségi Bíróságon a projekt leállítására céljából.

A nevadai sivatag egyik hegyoldalában működő tehenészetben minden nap korán kelnek, hogy kihajtsák a közel 500 szarvasmarhát a sovány földre és meggyőződjenek róla, hogy lesz mit legeljenek. Generációk óta csinálják már, de eddig még soha nem szembesültek hasonló veszedelemmel. A birtoktól néhány mérföldre hamarosan megkezdí működését az Amerikai Lítium, az amerikai történelem legnagyobb lítium bányája, kiegészítve egy helikopter leszálló hellyel, kémiai feldolgozó üzemmel és szemétkerakóval. A bánya tervezett mélysége meghaladja a 100 métert.

A birtok gazdája, Edward Bartell legnagyobb féltelme az, hogy a bánya elveszi az állatok vizét.

„Felhíborító, hogy a vállalkozást környezetbarát projektként hirdetik,

pedig ez egy óriási ipari létesítmény” mondja Bartell, aki bíróságon próbálta leállíttatni a bányát. A társaság bejelentése alapján a bánya percnként 12 m³ vizet használ el, ami szakértők szerint 4 m-rel csökkenti a talajvíz szintjét. Emellett a tervezett évi 66000 tonna lítiumkarbonát kitermelése során a talajvizet antimon és arzén szennyezheti. A lítiumot a kitermelt agyagból napi 5800 tonna kénsavval extrahálják és kevés radioaktív uránium is lehet benne, amint azt az engedélyezési dokumentum említi. Hatósági szakemberek véleménye alapján a bánya 41 év alatt több mint 1 millió holdnyi növényzetet tesz tönkre, beleértve az Arany Sas fészkelési helyét, amelynek tolla nélkülözhetetlen a helyi törzsek vallásos ceremóniájához.

A Fort McDermitt Indián Rezervátumon nagy felháborodást váltott ki a bánya terve, pedig az országos átlag kétszeresét ígérték azoknak, akik munkába állnának. „Miután elszennyezték a vizünket, mit fogunk inni 300 évig?” kérdezték a szövetségi hivatalnokot a törzs képviselői.

A nevadai bánya körüli harc egy világméretű feszültséget szimbolizál: az elektromos autó nem annyira környezetbarát, mint amennyire látszik: a lényeges nyersanyagok (lítium, kobalt, nikkel) előállításuk gyakran tönkretesz a földet, vizet, élővilágot és az embereket. A környezeti kárt gyakran figyelmen kívül hagyják a nagyhatalmak (USA, Kína, Európa és más államok) között folyó verseny miatt, korábbi példákra emlékeztetve, amikor arany, nyersolaj, vagy ásványi kincsek birtoklása révén évtizedekre szóló gazdasági és technológiai dominancia volt a tét.

Bár az Amerikai Egyesült Államok nagy lítium-érc kincset birtokol, az országban jelenleg az 1960-as években megnyitott egyetlen nagyüzemű bánya működik (Silver Peak, Nevada), amelynek évi termelése 5000 tonna. Ez a világ éves szükségletének 2 %-a. Az ország lítium igényének zöme Latin-



Bartell a legelőjén

Amerikából vagy Ausztráliából származik, és ennek nagy részét Kínában, vagy más ázsiai országokban alakítják át akkumulátor cellákká.

„A tiszta-energia iránti igényünk – jó szándéka ellenére is – nagy kárt okozhat, amit nem engedhetünk meg” véli a Felelősségteljes Bányászat Biztosítása nevű amerikai egyesülés, amely nagy vállalatok (BMW, Ford Motor) nyersanyag forrásait ellenőrzi.

A társadalmi feszültség következtében egyfajta verseny indult el annak érdekében, hogy a szükséges nagy mennyiségű lítiumot a bányászat szokásos módszereinél sokkal kíméletesebb módszerrel állítsák elő. A feladat végrehajtásához óriási összeg áll rendelkezésre: a lítium bányák létesítésére eddig 3,5 milliárd US\$-t biztosítottak.

A befektetők egy része alternatív megoldást szorgalmaz: lítium kinyerését a Salton-tóból. A Salton-tó egy sós, lefolyástalan tó Kaliforniában, felszíne a tengerszintnél kb. 70 méterrel van lejjebb és sótartalma nagyobb a Csendes Óceánénál. A tó lítiumban gazdag iszapját hőforrások segítségével hoznák felszínre. A hozzá csatlakozó geotermikus erőművel elektromos áramot is termelnének és regenerálnák a tavat, amit a környező földek gazdálkodói és a szárazság tett tönkre. Az Egyesült Államoknak rövid időn belül meg kell oldania a lítium ellátást, mivel az autógyárak nagy ütemben



Az őslakosok tiltakozása a bánya ellen

készítenek elektromos járműveket. Lítium az elektromos autók akkumulátorainak nélkülözhetetlen eleme, mert könnyű, sok energia tárolására képes és ismételt sokszor újratölthető. Szakértők szerint az évtized végére a lítium iránti igény tízszeresére nő meg, ahogy a nagy vállalatok (Tesla, Volkswagen, General Motors és mások) az elektromos modellek tucatjait állítják elő. Jelenleg a világ útjain 11 millió

elektromos autó fut, 2030-ra a számuk 145 millióra becsülhető.

De van az elektromos autók gyártásának másik kényes pontja is: a környezetvédelem érdekében meg kell oldani a gyártási veszteségek újrahasznosítását. Ennél is nehezebb feladat a tönkrement akkumulátorok recirkulációja.

Az akkumulátorok szerkezete a Matryoska babához hasonló: a kész



A Salton-tó Kalifornia legnagyobb tava



Az egykori üdülőterület ma haldoklik

akkumulátor nagyszámú modulból áll, amelyekben sok-sok cella van összeépítve. Az akkumulátorokat aszerint osztályozzák, hogy milyen fémből készült a katód.

A három alaptípus: nikkel-kobalt-alumínium, vas-foszfát és nikkel-mangán-kobalt.

A recirkuláció jelenleg elsősorban a drága katódfémek visszanyerésére, főként kobaltira és nikkelre irányul (a többi összetevő és a lítium túl olcsó ahhoz, hogy visszanyerésük gazdaságos legyen). De a fémek kicsiny mennyisége miatt a feladat olyan, mint tűt találni a szalmakazalban.

Az értékes fémek visszanyerésére jelenleg kétféle technikát alkalmaznak: a piro- és hidrometallurgiát. A pirometallurgia a gyakoribb, amihez először felaprítják a cellákat, majd elégetik és eredményül a fémek, műanyag és ragasztók kátrányos masszáját kapják. A fémek extrakcióját általában további égetés után végzik úgy, ahogy egy bányából származó kőzetből. A hidrometallurgia módszere az akkumulátor-hulladék savval történő megbontása, ami fém-tartalmú folyadékot hoz létre. Míg a pirometallurgia energiaigényes, de egyformán alkalmazható az akkumulátorok különböző fajtáira és nem igényli azok teljes kisütését. A hidrometallurgiai módszer extrahál olyan anyagokat is, amelyeket égetés után nem lehet (pl. egészségre káros komponenseket), de a kívánt fémek kinyerése nehézkes. Kidolgoztak olyan eljárást is (savas és lúgos extrakciót) amely mindent felold a nikkelen kívül, így annak kinyerése egyszerű. De mindkét módszer nagy mennyiségű hulladékot és üvegház hatású gázokat produkál és megvalósításuk attól függ, hogy a visszanyert fémeket el lehet-e adni, mert az akkumulátor készítőik a visszanyert kobaltot drágának találják.

A recirkuláció könnyebb lenne, ha az akkumulátor gyártók ezt figyelembe vennék. Egy példa erre a BYD gyár Kínában, amelyik lítium ferfoszfát

Penge Akkumulátorokat készít és a cellákat nem ragasztja modulokba, hanem közvetlenül az akkumulátorba építi úgy, hogy a cellák kézzel könnyen kivehetők. Ez a technika 2018-ban indult és jelenleg Kínában több lítium-ion akkumulátort recirkulálnak, mint a világon összesen. Mivel a szemét szállítása drága, a recirkulációs centrumokat el kell terjeszteni világszerte.

De azt a jogi problémát is meg kell oldani, hogy ki a felelős az akkumulátor-szemétdombok felszámolásáért. Vajon a vevő, aki megvásárolta az elektromos

autót, vagy a gyártó, amelyik készítette és eladta azt? Az autózás jövője világméretű problémák megoldásától függ, amelyekben egymásnak feszülnek az emberiség jövőjét érintő természet- és környezetvédelmi törekvések, valamint a társadalom életét befolyásoló ipari vállalkozások. A küzdelem kimenetelét a jövőendő évtized fogja eldönteni.

Simonyi Miklós



IRODALOM

Nature 596, 336-339 (2021, augusztus 17)



Tönkrement akkumulátorok szemétdombja



John Bardeen a modern fizika mérhetetlenül sokat ígérő és hatalmas gyakorlati következményekkel járó két alapvető felfedezésének is a kulcsfigurája. Amikor a második világháború után a Bell Laboratóriumban dolgozott, egyike volt a három vezető kutató fizikusnak, akik kifejlesztették a tranzisztort. A tranzisztor néhány éven belül a világ minden táján a legfontosabb tényezője lett az elektronikának. Az ötvenes években pedig Bardeen elméleti megoldást talált a szupravezetés problémájára.

Az első duplázó Nobel-díjas



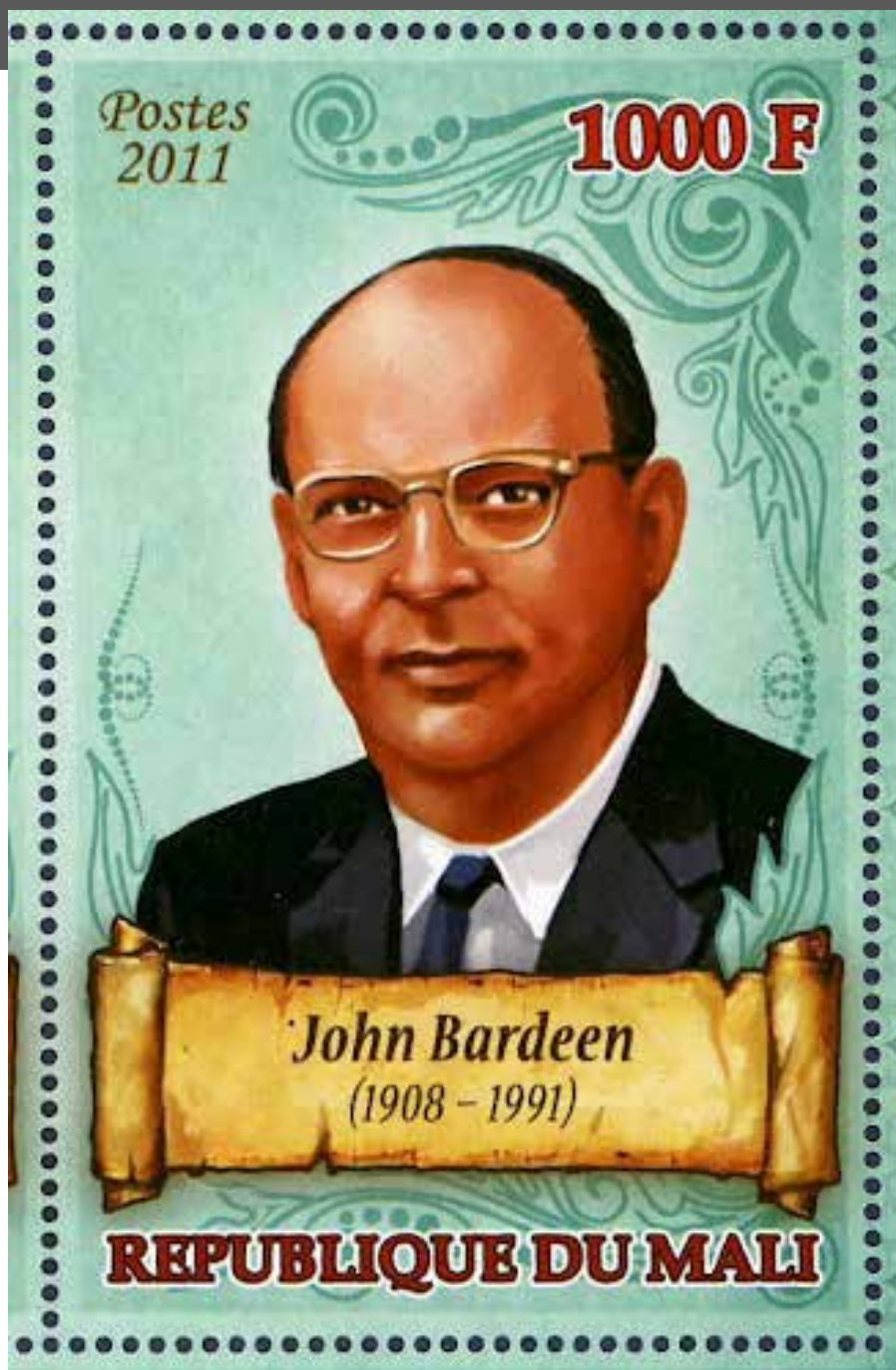
A szupravezetés nem más, mint az, hogy bizonyos fémeknek az a tulajdonsága, hogy alacsony hőmérsékleten minden ellenállásukat elvesztik az elektromos vezetéssel szemben. A (John Bardeenről, Leon Cooperről és John R. Schiefferről elnevezett) BSC – elmélet lett a máig folytatódó kutatásoknak az alapja, amelyek hatalmas, globális gazdasági hatásokat ígérnek. A rendkívül hatékony szupravezető motorok, generátorok és más gépek jelentik a huszonegyedik századi kutatások forradalmát az elektronikában.

John Bardeen 1908. május 23-án született a Wisconsin állambeli Madisonban. Apja, Charles Russell Bardeen anatómiaprofesszor, később a Wisconsini Egyetem orvosi karának dékánja. Anyja, Althea Harmer tanár és festőművész, aki fia kamaszkorában meghalt. Bardeen a szellemi fejlődésének kedvező otthoni légkör bátorításával az iskolában kiváló teljesítményt nyújtott, tíz éves korában elkezdett algebrával foglalkozni, és többször ugrott át osztályokat. 1923 – ban, tizenöt éves korában iratkozott be a Wisconsini Egyetemre, ahol Paul Dirac látogatása után érdekelni kezdte a matematikai fizika. 1928 – ban mérnöki oklevelet szerzett, 1929 – ben lediplomázott.

A gazdasági válság éveiben geofizikusként dolgozott a pittsburgi Gulf Research and Development Corporationnél, elektromágneses

módszerekkel keresett olajmezőket. A harmincas évek közepén végre megvalósíthatta alapkutatások iránti vágyát, és beiratkozott a Princetoni Egyetem emeltszintű továbbképző tanfolyamára. 1936-ban szerezte meg a doktorátust matematikai fizikából. Az egyetemen az egyik nagy magyar fizikusnak, a Nobel-díjas Wigner Jenőnek

volt a konzulense. (Wigner Jenőt a szilárdtest-fizikai kutatásai tették híressé.) A doktorátus után Bardeen a Harvard Egyetemen kutatott, tanított a Minnesotai Egyetemen, a második világháború alatt az Egyesült Államok tengerészetének hadianyag-laboratóriumában dolgozott, ahol a torpedóelhárításban használt vették korábbi geofizikusi gyakorlatának.





A háború után az Egyesült Államok ipari egyeduralma előrevetítette az elektronikára épülő jövőt, amelyben meghatározó szerepet játszik az újítás és az új termékek kifejlesztése. Ez volt a háttér a szilárdtestfizika fejlődésének, amelynek során tanulmányozták bizonyos fémek anyagok, mint a szilícium és germánium vezetőképességét. A Bell Laboratórium tudósai remélték, hogy ezekkel a „félvezetőkkel” fel tudják váltani az elektroncső-technikát. Az elektron- vagy vákuumcsövek olyan áramkörök, amelyekben az elektromosság könnyen és minden pillanatban ellenőrizhető. Széles körben alkalmazták ezeket a rádió- és a fejlődésben levő számítástechnológiában. Csakhogy ezek a csövek nagyok, terjedelmesek, és csupán korlátozott mértékben alkalmazhatók. A félvezetők viszont sokkal kisebbek, megbízhatóbbak és olcsóbbak, a szilícium például a második leggyakoribb (!) elem a Földön.

Bardeen ugyan fontolgatta, hogy az atomfizika felé fordul, ám 1945-ben a Bell

Laboratórium meghívta a szilárdtestfizika kutatásokhoz. W. H. Brattainnal együtt tagja lett egy híres csoportnak, amelyet William Shockley vezetett. A germániumkristályok felhasználásával Bardeen és Brattain 1948-ban feltaláltak egy „pontérintkezőt”, amellyel erősíteni lehetett a rádiójeleket. Megmutatták, hogyan lehet elérni az elektromos áram ugyanolyan pontos irányítását a félvezetőkkel mint vákuumcsövekkel. Az ellenállást irányítani lehet a félvezető „szennyezésével”, és hatások egész sorozatát lehetett kimutatni, beleértve a fényérzékenységet is. Ezek a korai tranzisztorok azonban – ahogy elnevezték őket – törekenyek voltak, és a gyakorlatban nem lehetett őket használni, amíg Shockley 1952-ben ki nem fejlesztett egy szilárdabb változatot. Ezen a munkán alapult az integrált áramkörök és szilícium csippek minden ezt követő fejlesztése. Nem csoda, ha 1956-ban Bardeen Shockleyvel és Brattainnal megkapta a Nobel-díjat. A huszadik

századi fizika egyik megrázkéztető eseménye az volt, amikor Heike Kammerlingh-Onnes holland fizikus 1911-ben észrevette, hogy a higany nagyon alacsony hőmérsékleten hirtelen elveszti



Wikipedia

A Bell Laboratórium. első tranzisztorának másolata



az elektromos árammal szembeni ellenállását. Később bebizonyosodott, hogy ugyanez a helyzet számos más fémrel és fémvegyülettel, noha a jelenségre a fizika egyetlen törvénye sem adott magyarázatot. Kammerlingh-Onnes helyesen feltételezte, hogy a választ a kvantumelmélet alkalmazásával találhatják meg. Ennek ellenére negyven év telt el eredmény nélkül. „Johnnak az volt minden vágya, hogy ő vezethesse a szupravezetés megfigyelésére irányuló munkát” – írta Bardeen kollégája, Conyers Herring. Ennek érdekében Bardeen 1951-ben elfogadta az Illionis Egyetem fizikai és mérnöki karának professzori székét. Ebben az is befolyásolhatta, hogy a Bell Laboratóriumban sorozatosan összetűzött a hírhedten rossz munkatárs Shockleyvel.

A BCS-elméletet 1950 körül kezdték kidolgozni, amikor Bardeen megtudta, hogy bizonyos elemek izotópjai, azaz különböző tömegszámú formái különböző hőmérsékleten hajlamosak a szupravezetésre. Ez azt a gondolatot sugallta, hogy haladás közben különleges kölcsönhatás van az elektronok és az atomrács rezgése között. Közreadta az elmélet korai, nem teljes változatát, majd tovább dolgozott Leon N. Cooper New York-tudóssal – akit „keletről jött kvantummechanikusomnak” hívott – és John R. Schrieffer végzős diákkal. 1957-ben nyilvánosságra hozták az általános elméletet, amely megmagyarázza a szupravezetés jelenségét.

Az elegáns BCS elmélet, amelyet Niels Bohr egyszerűségében szépnek nevezett, megmutatja, hogy a szupravezetés az elektronok és a „fononok” közötti kapcsolat következménye. A fononok a rezgési energia kvantumjai. Ezek segítenek megszakítani az elektron mozgását, ezért alakul ki a fémekben vezetés közben az ellenállás. Alacsony hőmérsékleten azonban ezek a rezgések csökkennek. Ez hatással van az elektronokra: „párokat” alkotnak, egyesítve két, ellentétes perdületű és nyomatékú elektront. (Ezeknek a Cooper-pároknak a matematikai elemzését

Schrieffer dolgozta ki.) Amikor áram keletkezik, a párba állt elektronok ugyanazzal a nyomatékkal és ellenállás nélkül keresztül haladnak a szuperhideg szilárdtesten.

A BCS-nek nevezett elméletet gyorsan elfogadták. Bardeen, Cooper és Schrieffer kapta meg az 1972-es fizikai Nobel-díjat. (John Bardeen volt az első tudós, aki kétszer kapott Nobel-díjat ugyanazon a tudományos területen.) A szupravezetést a létrehozásához szükséges alacsony hőmérséklet miatt nem lehet azonnal alkalmazni, viszont született egy gyakorlati cél: olyan anyagok keresése, amelyek magasabb hőmérsékleten is képesek a szupravezetésre. 1986-ban bemutattak egy olyan kerámiát, amely 35 Kelvin fokon is képes a szupravezetésre – vagyis a hideg elkezdett melegedni. Rövid időn belül találtak olyan anyagokat, amelyek 100 Kelvin foknál

szupravezetők. Ez a technológia lehetővé tette SQUID-ek (superconducting quantum interference devices, azaz szupravezető kvantuminterferenciás berendezések), vagyis apró készülékek kifejlesztését, amelyek a gyógyászatban, földtanban és más területeken használnak. Reális lehetőségnek tűnik, hogy fognak találni csaknem szobahőmérsékleten is működő szupravezető anyagokat. Ez gyökeres változást jelenthet a hétköznapi életben.

John Bardeen az Illionis Egyetem emelt szintű képzésében tanított 1959-től az 1975-ös visszavonulásáig. Csendes, barátságos emberként jellemezték, aki könnyed is tudott lenni, noha meglehetősen indulatos természetű volt. Feleségétől, Jane Maxwelltől két lánya és egy fia született. A fiából elemirészecskefizikus lett. John Bardeen 1991. január 30-án halt meg szívinfarktushoz.

Ménész András



IRODALOM

- [1] RÖMPP Vegyészeti Lexikon, Műszaki Könyvkiadó, 1984.
- [2] Fizikai Kislexikon, Műszaki Könyvkiadó, 1977.
- [3] Magyar Nagylexikon, Magyar Nagylexikon Kiadó, 2003.
- [4] Fizikai Kézikönyv Műszakiaknak, Műszaki Könyvkiadó, 1980.
- [5] Műszaki Lexikon, Akadémiai Kiadó, 1974.
- [6] Természettudományi Lexikon, Akadémiai Kiadó, 1968.
- [7] Új Magyar Lexikon, Akadémiai Kiadó, 1962.
- [8] Cambridge Enciklopédia, Mecenás Kiadó, 1992.
- [9] Vészits Ferencné (szerk): A Nobel – díjasok kislexikona, Gondolat Kiadó, 1974.
- [10] Kurt Mendelsohn: The Quest for Absolute Zero: The Meaning of Low-Temperature Physics, Taylor and Francis, 1977.
- [11] Bruce Schechter: The Path of No Resistance: The Story of the Revolution in Superconductivity, Simon and Schuster, 1989.
- [12] Jacobus de Nobel: The Discovery of Superconductivity, Physic Today, Vol.49., No. 9., pp. 40-42, September 1996.
- [13] Johns Simmons: The Scientific 100,

Carol Publishing Group, 1996.

- [14] http://de.wikipedia.org/wiki/BCS_theory
- [15] E. S. Edlén: The rocky road to superconductivity, Compilation at NRL Publications on high temperature superconductivity, Naval Research Laboratory, 1987.
- [16] <http://hu.wikipedia.org/wiki/Szupravezet%C3%A9s>
- [17] R. K. Merton: The sociology of science, Chicago University Press, 1973.
- [18] http://en.wikipedia.org/wiki/Scientific_priority
- [19] S. Tanaka: Research on high Tc superconductivity in Japan, Phys. Today, 1987.
- [20] http://en.wikipedia.org/wiki/Chu-Ching_wu
- [21] R. Pool: Superconductor credits bypass, Alabama. Science (1988) 241, pp. 655.
- [22] http://en.wikipedia.org/wiki/Woodstock_of_physics
- [23] http://hu.wikipedia.org/wiki/Fizikai_Nobel-d%C3%ADj
- [24] P. M. Grant: The great quantum conundrum. Nature (2011) 476, pp. 37.
- [25] J. E. Hirsch: BCS theory of superconductivity: the world's largest Madolf schene, arXiv: physics/0508025, 2005.

A fehérjekutatás szolgálatában

John Jumper, a DeepMind vezető kutatója

Egy fehérje molekula háromdimenziós szerkezetének felderítése a kutatás hagyományos módszereivel nagy teljesítménynek számít. Az Alphabet Inc. Londonban működő vállalkozása (DeepMind Technologies) mesterséges intelligencia alkalmazásával olyan komputer-programot (AlphaFold) dolgozott ki, amely egy fehérje aminosav sorrendjéből órák alatt megbízhatóan állítja elő a fehérje szerkezetét.





A 2010-ben alakult DeepMind eleinte játék-programokat fejlesztett, amelyek megtanítják a számítógépet problémák megoldására:

2016-ban az AlphaGo program legyőzte a go játék 18 éves világbajnokát, Lee Sedol-t, majd a fejlettebb AlphaZero program legyőzte a sakk, go és shogi (japán sakk) legjobb programjait. A függetlenként indult vállalkozást 2014-ben megvette a Google, majd 2015-ben az Alphabet. Fehérje programokkal 2018-óta végeznek kísérleteket.

A fejlesztés kezdetén ismert fehérjeszerkezetek ezreit táplálták be egy neurális hálózat típusú programba, hogy a gép megtanulja a háromdimenziós szerkezetek létesítését. De ez a program még nem adott elfogadható eredményt. Ezután a biológusokból, fizikusokból és számítógépes szakemberekből álló csapat Dr. John Jumper vezetésével új program (AlphaFold) kidolgozásába kezdett. Az AlphaFold program gyorsan adott eredményt és a protein alakját helyesen adta vissza, míg az egyes atomok helyzetét olyan hibával, ami kisebb volt az atomok átmérőjénél. Ez már megközelíti a fizikai kísérletek pontosságát [1]. A felhasználók tájékoztatására az adatbázisban szereplő szerkezetekre konfidencia-intervallumot adnak meg.

Az AlphaFold technológiája hasonló ahhoz, ahogy a mobiltelefonok megértik az élő hanggal adott utasításokat, felismerik az arcokat, vagy lefordítanak szöveget egyik nyelvről a másikra. Sokak szerint az AlphaFold egyike a technológia csúcsteljesítményeinek [2-3].

A DeepMind kutatók által tanulmányozott egy kisebb fehérjemolekula számítógépes modellje jobbra fent látható.

Az AlphaFold program több fehérje együttes jelenlétét is képes modellezni. A következő oldal felső ábrája a muslica (*Drosophila melanogaster*) fehérjeit együttesen ábrázolja:

A DeepMind adatbázisában jelenleg 350 000 fehérje háromdimenziós szerkezete szerepel, köztük a humán



Egy kiválasztott molekula AlphaFold szerkezete

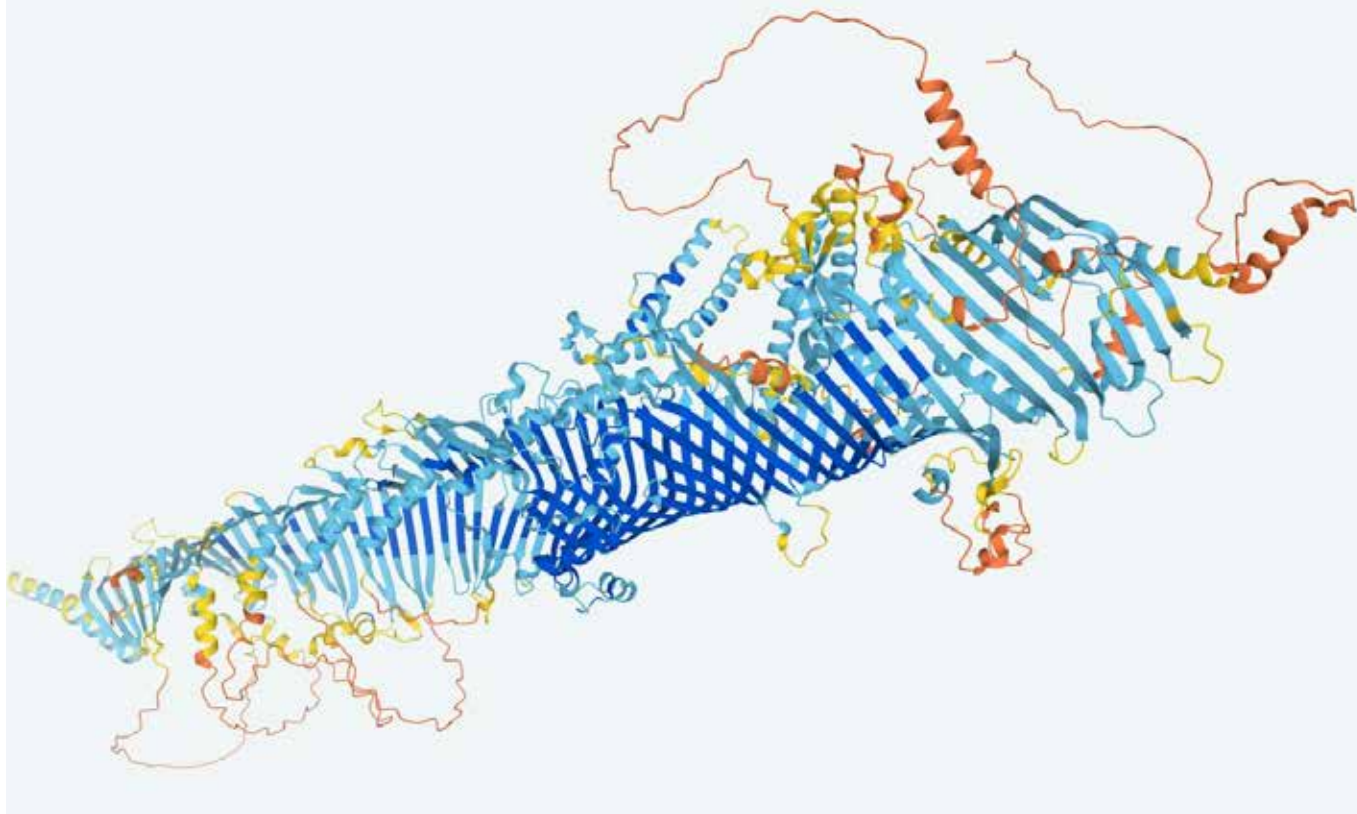
genom által meghatározott összes fehérje, valamint 20 más élő szervezet teljes fehérje készlete. Legújabbban úgy határoztak, hogy a teljes adatbázist nyilvánosságra hozzák.

A fehérjék szerkezetének ismeretében felfedezhetők kötőhelyek, ami segítheti a gyógyszerkutatást. Baktériális fehérjék vizsgálata fényt vethet az antibiotikum rezisztencia okára és annak lehetséges kiküszöbölésére. Példaként szolgáljon az *Escherichia coli* baktérium által expresszált fehérje (következő oldal alsó ábrája).

Az AlphaFold program sikere felkeltette John McGeehan, a Center for Enzyme Innovation (Portsmouth, Anglia) igazgatójának figyelmét, aki olyan enzimeket keres, amelyek képesek lebontani műanyagokat, hogy sikerüljön a világot megszabadítani a felgyülemlett 150 millió tonna PET palack hulladéktól. Remélve, hogy kutatásait az enzimek 3D szerkezetének ismerete segíti, 7 enzim aminosav-szekvenciáját egy munkahét végén megküldte a londoni labor

kutatóinak. Közölte velük, hogy kettőnek már ismeri a 3D szerkezetét, de nem árulta el, melyik kettőnek a hét közül. Hétfőn megkapta mind a hét enzim alakját; az AlphaFold jól teljesített, mind a két ismert szerkezetet helyesen állapította meg. McGeehan később megtudta, hogy az AlphaFold a feladatot néhány óra alatt megoldotta.

A DeepMind vállalkozásnak kutatási központjai vannak Kanadában, Franciaországban és az USA-ban. A társaság szabad hozzáférést enged fehérje adatbázisához azért, hogy segítse az élettudományok fejlődését. Különböző kutatóhelyek élnek is ezzel a lehetőséggel. Az AlphaFold alkalmazásával a University of Colorado Boulder kutatói azonosítottak egy fehérjét, amin már több mint egy évtizede dolgoztak. A University of California San Francisco kutatói megpróbálják alkalmazni a programot a koronavírus jobb megismerésére. A módszerrel azonosítottak egy fehérjét abból a 26-ból, amivel a vírus szervezetünket megtámadja. Bár a



A muslica fehérje molekulái

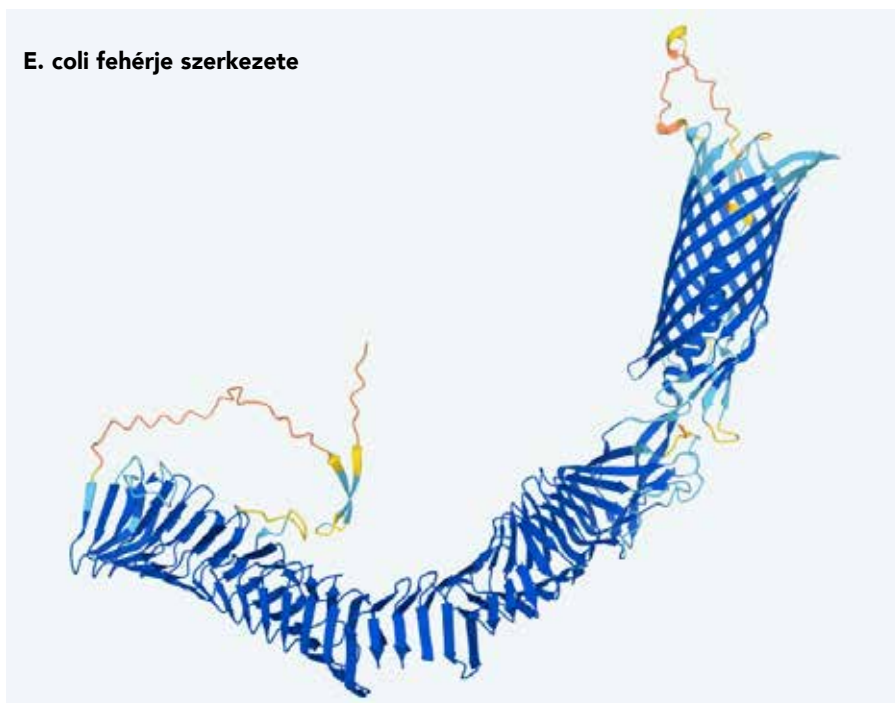
módszer későn jött ahhoz, hogy a járvány leküzdésében segíthessen, hasznos lehet egy következő járvány esetén. De a

módszer sebesen terjed további problémák megoldására. Legújabbán RNS molekulák 3D szerkezetének felderítésére

is kiterjesztették [4]. A DeepMind folytatja az együttműködést az enzim-kutatókkal. A hét enzim szerkezetének sikeres felderítése után Dr. McGeehan további 93 enzim-jelöltet küldött vizsgálatra, amin a csoport jelenleg dolgozik.

Simonyi Miklós

E. coli fehérje szerkezete



IRODALOM

1. J. Jumper, R. Evans, Demis Hassabis: Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature*, 596, 15 July 2021, 583–589.
2. Editorial: Artificial intelligence in structural biology is here to stay. *Nature*, 595, 29 July 2021, p.635
3. Robert F. Service, Huge protein structure database could transform biology, *Science*, 30 July 2021, 373, 478.
4. R. J. L. Townshend, S. Eismann, A. M. Watkins, R. Rangan, M. Karelina, R. Das, R. O. Dror: *Science*, 27 August 2021. 373, Issue 6558, pp. 1047-1051



ORSZÁGOS KÉMIA TANTÁRGYI HÍRLEVÉL

A Természettudományos Oktatásért Szabó Szabolcs
Emlékére Közhasznú Alapítvány (<https://sz2a.hu/>)
rendszeres, szerkesztett kémiatanári hírlevelet indít.

A hírlevél szerkesztőbizottsága gyűjti az információkat eseményekről az ország minden részéről, és tartja a kapcsolatot szakmai szervezetekkel, iskolákkal, egyetemekkel, versenyszervezőkkel, és más intézményekkel.

A hírlevél, heti-kétheti rendszerességgel eljuttat minden releváns hírt, információt, újdonságot az általános iskolai és középiskolai tanároknak, valamint minden érdeklődőnek (magánszemélyek, szervezetek), akik feliratkoznak rá.

A hírlevél tervezett szerkezete az alábbi (ez természetesen bővíthető, alakítható).

1. AKTUÁLIS PROGRAMOK (ORSZÁGOSAN)

- programsorozatok, előadássorozatok aktuális epizódjai
- eseti előadások, rendezvények
- kiállítások
- továbbképzések

2. PÁLYÁZATOK, VERSENYEK

- országos versenyek, diákpályázatok
- MATEHETSZ pályázatok
- tanári díjak, ösztöndíjak (MOL MesterM, Kémiaoktatásért Díj, Bonis Bona, Rácz Tanár Úr, Pro Progressio Alapítvány stb.)

3. EGYEBEK

- pl. álláshirdetések
- érdekességek a tudomány és technika világából.

A kémiatanári hírlevéllel a versenyek és programok szervezőinek, szakmai szervezeteknek is szeretnénk segítséget nyújtani abban, hogy felhívásaik közvetlenül eljuthassanak a kémiatanárokhoz, így hatékony módon érjenek célba. A hírlevél tehát egyfajta híd-szerepet tölt be a kémiatanárok és a szakmai szervezetek között.

A hírlevél megjelenésében közreműködnek:

A szerkesztőbizottság tagjai: Basa Bettina,
Feketéné Györe Szilvia, Füzesi István,

valamint Holtzer Péter elnök és

Szakmány Csaba szakmai vezető.

A Természettudományos Oktatásért Szabó Szabolcs
Emlékére Közhasznú Alapítvány



A Természettudományos Oktatásért
Szabó Szabolcs Emlékére Közhasznú Alapítvány
Charitable Foundation for Natural Sciences Education in Memoriam Szabó Szabolcs

TUDÁS. KÖZÖSSÉG. ÉRTÉK.



Máriatövis

A máriatövis (*Silybum marianum*) egy bogáncsfajta virágos évelő növény a fészkesvirágúak családjába tartozik. A növény Európa mediterrán vidékein, Észak-Afrikában és a Közel-Keleten őshonos, népies neve „Boldogasszony teje”.

Viaszos levelei, karéjosok, fogazottak vagy tüskések. A szár végén található virága, a rózsaszíntől a liláig változik, de fehér is előfordul. Angol nevét (Milk thistle - tejbogáncs) két tulajdonságáról kapta: leveleiről és a belőle kifröccsenő, fehér, tejszerű nedvről.

A növény kivonatait évszázadok óta használja a népi gyógyászat, elsősorban vese-, lép-, máj- és epehólyag-betegségek kezelésére. A Középkorban használták veszettség és kigyómarás kezelésére, melankolikus betegségek és láz gyógyítására is. Terméséből (kaszat) és magjából napjainkban standardizált kivonatok készülnek (szilimarín), amelyek étrendkiegészítők, patikában is kaphatóak toxikus májkárosodás, idült gyulladásos májmegbetegedések és májsugor (májcirrózis) kiegészítő kezelésére. Gyógyszerek is készülnek hatóanyagából. Az MGYT Gyógynövény Szakosztálya 2013-ban az Év Gyógynövényének választotta.

KÉMIAI ÖSSZETEVŐI

A szilimarín a máriatövis standardizált kivonata, flavonolignánok (70-80%) keveréke. A növény kivonatainak hatóanyag tartalma – mint minden más



gyógynövény esetében – különböző földrajzi helyeken és évszakokban eltérő. Ennek megfelelően a kereskedelmi forgalomban kapható standardizált kivonatok hatóanyag tartalma is eltérő lehet.

A flavonolignánok természetes fenolok, amelyek részben flavonoidot, részben lignánt tartalmaznak. A flavonoidok a flavon származékai. A lignánok kis molekulatömegű polifenolok nagy csoportja, amelyek megtalálhatók a növényekben, különösen a magvakban, teljes kiőrlésű gabonákban és zöldségekben.

A flavonoidok széles körű kémiai és biológiai aktivitással rendelkeznek. Bizonyos flavonoidokat (pl. rutin)

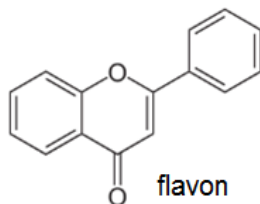
napjainkban is használnak a gyógyászatban, jellemzően érvédő hatásuk miatt. A rutint először Szent-Györgyi Albert Nobel-díjas tudósunk izolálta. Munkatársaival kimutatta, hogy a C-vitaminnal együtt előforduló vegyület erősíti annak hatását. A rutin a kvercetin flavonol és a rutinóz diszacharid glikozidja.

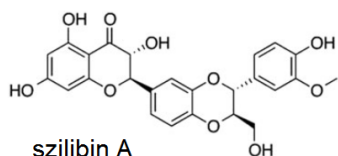
A szilimarín fő összetevői (~50%) szilibinek (szilibin A és B), izoszilibinek (~5% izoszilibin A és B), szilikrisztin (~20%) és szilidianin (~10%). Kisebb mennyiségben más flavonokat, taxifolint, kempferolt és kvercetin is tartalmaz. A szilibin A és B a leggyakoribb diasztereomerek a szilimarínban.

Sztereioizomériának vagy térizomériának nevezik az izomériának azt a formáját, amikor a molekulának ugyanaz az összegképlete és bennük az atomok kapcsolódási sorrendje (konstitúciója) is megegyezik, de az őket alkotó atomok térbeli elrendeződése különböző.

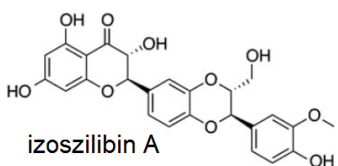
A diasztereomerek olyan sztereioizomerek, melyek egymásnak nem tükörképei.

A növény fő farmakológiai komponense

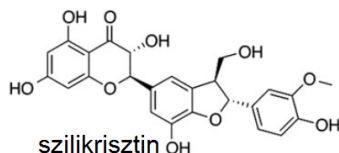




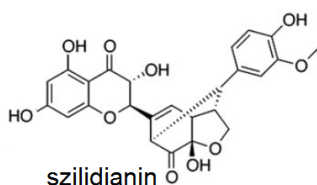
szilibin A



izoszilibin A



szilikrisztin

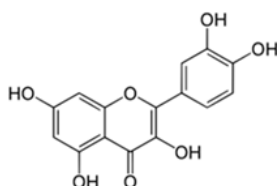


szilidianin

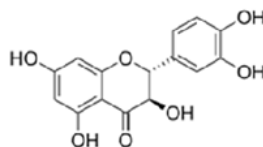
a szilibin, kicsi erősen funkcionális molekula, váltakozó karbociklusokkal és heterociklusokkal, és szerkezete miatt ellenáll a redukciónak, de könnyen oxidálódik 2,3-dehidro-szilibinné. A szilibin savas körülmények között stabil és Lewis-savak jelenlétében vagy bázikus körülmények között instabillá válik, erős bázisok vagy hevítés szerkezetének bomlásához vezet. Semleges vizes oldatokban a szilibin gyenge savként viselkedik.

Lewis-savak: olyan elektronhiányos molekulák vagy ionok, amelyek legalacsonyabb energiájú üres molekulapályájuk révén elektrópár befogadására alkalmasak, tehát elektrópár-akceptorok.

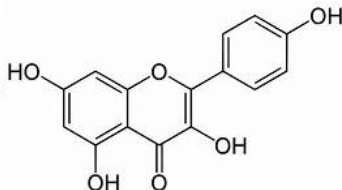
A máriatövis hatóanyagainak kutatásában magyar kutatók is részt vettek. A Gyógynövénykutató Intézet kutatói, Nyiredy Szabolcs és munkatársai a növény flavonolignánjainak azonosításával és kémiai vizsgálatával járultak hozzá a hatóanyagok ismeretéhez. A Semmelweis Egyetemen Fehér János és munkatársai a növény kivonatainak hatékonyságát vizsgálták májbetegségek gyógyításában preklinikai és klinikai kísérletekben.



kvercetin



taxifolin



kempferol

A SZILIMARIN GYÓGYHATÁSA

A növény teaként nem hatásos, flavonolignánjai vízben oldhatatlanok.

Az irodalomban számos közlemény foglalkozik a szilimarinnal és fő komponensével, a szilibinnel. A szilibin molekula különböző betegségekkel szembeni gyógyhatásának vizsgálatával laboratóriumi és állat kísérletekben és néhány humán klinikai vizsgálatban is. Bár a tudományos közlemények közölnek adatokat a növény kivonatainak, vérnyomáscsökkentő, antidiabetikus, érelmeszesedés-ellenes és elhízás-ellenes hatásáról is, többségük a szilimarinnal vagy a szilibinnel májvédő tulajdonságával foglalkozik.

A kutatók kimutatták, hogy szilimarinnal az antioxidáns és gyulladás gátló hatása miatt, hatékony oxidatív stressz által okozott betegségek – mint például az alkohol és zsír, drog, vagy a kémiai okozott májbetegségek – esetében. A szilimarinnal elősegíti a májsejtek regenerációját, stabilizálja a májsejtek membránjait és gátolja a májfibrózist, a májsugor (cirrózis) kialakulását. A preklinikai vizsgálatokban kimutatták, hogy a szilimarinnal hosszú távú alkalmazása

jelentősen megnöveli a túlélési időt alkohol által kiváltott májcirrózisban szenvedő betegek esetében.

A májsugor, cirrózis a krónikus májbetegség következménye, melyet a májszövetben kórosan felszaporodott kötőszöveti sejtek okoznak, heget létrehozva a májszövetben. Az elváltozás a májműködés fokozott romlásához, végül megszűnéséhez vezethet (májelégtelenség). A cirrózist leggyakrabban az alkoholizmus, a hepatitis B és a hepatitis C vírusok által kiváltott májgyulladás és a nem-alkoholos zsírmáj okozza. A májsugorodás és a nem-alkoholos zsírmáj a hepatocelluláris karcinóma kockázati tényezői. Az inzulinrezisztencia és az oxidatív stressz a fő mechanizmus, amely ezeknél a betegeknél a májsejt-károsodáshoz vezet. A hepatocelluláris karcinóma a májból kiinduló rosszindulatú daganatos betegség, amely legtöbbször valamilyen krónikus májbetegség kialakulását követően alakul ki (pl.: cirrózis, fertőző májgyulladás, egyes anyagcsere



betegségek). Inzulínrezisztencia során a szénhidrát anyagcserében részt vevő szervek (vázizom, máj, zsírszövet) nem reagálnak az inzulínra, emiatt a sejtek cukorfelvétele csökken. A csökkent felvétel miatt a vércukorszint megemelkedik. Az emelkedett vércukorszint hatására a hasnyálmirigy fokozza inzulintermelését, mely során az inzulintermelésért felelős sejtei kimerülnek és már nem képesek ideális tartományban tartani a vércukorszintet.

A kutatók kimutatták azt is, hogy a szilimarin májvédő hatásának oka vegyületeinek gyulladáscsökkentő, immun moduláló, fehérjeszintézis növelő, antifibrotikus (kóros kötőszövet képződés), antioxidáns tulajdonságai és toxinokat (mérgeket) blokkoló hatása. A hatásmechanizmussal kapcsolatban megállapították, hogy szilimarin gyulladáscsökkentő és immun-moduláló

hatását a citokinek felszabadulásának gátlásával fejt ki.

A citokinek (proteinek, peptidek, glikoproteinek) a sejt-kommunikációban alapvető szerepet játszó jelzőmolekulák. Fontos szerepük van az immunválasz szabályozásában és az információközlésben. Az immunmoduláció az immunrendszer túlreagálásának meggátolása.

A máj akut vagy krónikus sérüléséből történő helyreállításához a májsejtek regenerációjára van szükség, amely fokozott fehérjeszintézissel érhető el. Több preklinikai vizsgálatban a szilibin serkentette a riboszomális RNS képződést, amely a riboszómák gyorsabb képződéséhez vezetett és fokozta a fehérjeszintézist. A szilibin riboszómaképződést serkentő hatása terápiás hatást gyakorolhat a sérült májsejtek és a normál májfunkciók

helyreállítására. Állatkísérletek kimutatták, hogy a kóros kötőszövet képződés korai szakaszában a szilimarin a kollagén redukciójával gátolja a kötőszövet képződés mechanizmusát és a kezdeti májfibrózis előrehaladását.

A szilimarin gátolja a mérgeanyagok felszívódását a májsejtekbe a kötőhelyek elfoglalásával, valamint számos transzportfehérje gátlásával a sejtmembránon. A szilimarin potenciális jelölt a gyógyszerek által kiváltott és toxikus májsérülés kezelésére. Szabályozó hatást fejt ki a sejt- és mitokondriális membránra a permeabilitás és a membránstabilitás növelésével.

A MÁJBETEGSÉGEK KLINIKAI VIZSGÁLATAI

Az elmúlt 30 évben számos humán klinikai kísérletben is vizsgálták a



szilimarín hatását különböző májbetegségekben, alkoholos zsírmájban, nem alkoholos zsírmájban, vírusos májbetegségben (hepatitisz), májrákban szenvedő betegeken. Azonban a klinikai kísérletek között kevés a randomizált kettős vak, placebo kontrollált klinikai vizsgálat.

A kettős vak, placebo-kontrollált klinikai vizsgálat olyan szigorú orvosi vizsgálat, amelyben a nagyszámú kiválasztott résztvevőt véletlenszerűen két csoportra osztják, az egyik csoport a vizsgálandó hatóanyagot kapja a másik hatóanyagot nem tartalmazó placebo. Sem a két csoport tagjai, sem az orvosok nem tudják, hogy ki kapott kezelést és ki placebo. A vizsgált hatóanyag hatékonyságát, a placebo és a hatóanyagot kapott résztvevők állapotának összehasonlításával állapítják meg. Meggyőző a klinikai vizsgálat eredménye, ha a kísérletben résztvevők száma nagy, és ha a vizsgálatot egymástól függetlenül több klinikán is elvégezve hasonló eredményre jutnak. Az igen költséges kettős vak, placebo-kontrollált klinikai vizsgálatokat megelőzően, a kutatók laboratóriumi vizsgálatokat, állatkísérleteket, kontrollcsoportot nem igénylő klinikai vizsgálatokat és egyszeri vak klinikai vizsgálatokat végeznek.

A kísérleti vizsgálatokban megfigyelt gyulladáscsökkentő, antioxidáns és antifibrotikus tulajdonságai ellenére az MT-készítmények hatékonysága májbetegségben szenvedő betegeknél még nem teljesen meggyőző. Bár a klinikai vizsgálatok eredményeinek értékelésénél beszámoltak a hatás bizonyos bizonyítékairól, de szükség van további jól megtervezett vizsgálatokra, különös tekintettel a dózisok és a kezelés ütemezésének standardizálására, a nem, az etnikai hovatartozás és az életkor hatására, a betegszám növelésére, valamint a jól definiált validált eredmények használatára.

Például egy közelmúltban megjelent szisztematikus áttekintés a randomizált és kontrollált klinikai vizsgálatok meta-analízisével kimutatta, hogy bár a

szilimarín kis mértékben csökkenti az alanin-aminotranszferáz (ALT=GPT) és az aszpartát-aminotranszferáz (AST=GOT) enzimek szérumszintjét, de klinikai jelentőség nélkül. A májbetegségek egyik indikátora a májenzimek kóros megnövekedése.

Mivel a szilibin hatásosan gátolja a májsejtek toxinfelvételét és fokozza a fehérjeszintézist, a szilimarínból és fő komponenséből a szilibinből gyógyszerek is készültek. Az egyik a Silegon, a máj krónikus megbetegedései, valamint toxikus májkárosodások kiegészítő kezelésére szolgáló tableta és a másik a Legalon, a májkárosodás, valamint idiott gyulladásoos májmebetegedések és májsugorodás (májcirrózis) kiegészítő kezelésére javallott kapszula. Az utóbbit használják a gyilkosgalóca-mérgezés hatásának csökkentésére is injekció formájában, a mérgezettnek intravénásan nagy dózisban a penicillin G-vel együtt alkalmazva, hatékonyan növeli a túlélés esélyét.

A szilimarín és a szilibin készítményeket jól tolerálják a betegek, és a gyógyszerkölsönhatások lehetősége kicsi. A szilimarín kivonatok huzamosan hosszú ideig biztonságosan fogyaszthatók, ritka mellékhatásuk a hasmenés. Ellenjavallat: túlérzékenység és epevezeték elzáródás fellépése esetében. Bizonyos gyógyszerekkel (például szterérváz vegyületekkel) kölcsönhatásba léphetnek, nem szedhetők együtt. Emiatt a kivonatok huzamos használata előtt tájékozódni kell szakorvosnál.

A szakirodalomban általános a vélemény, hogy bár a Máriatövis hatóanyagai gyógyhatásának bizonyítékai jelenleg még nem teljesen meggyőzőek, a szilimarín készítmények



Máriatövis (fehér)

alkalmazhatók kiegészítő terápiaként a toxikus májkárosodás, a máj krónikus megbetegedései, alkoholos és nem alkoholos eredetű hepatitisz és a májcirrózis esetében is. Szilimarín tartalmú készítmények vásárlásánál, - mint minden más étrendkiegészítő esetében is – célszerű olyan készítményeket előnyben részesíteni, melyek rendelkeznek az OGYI forgalombahozatali engedélyével.

A Máriatövisen kívül más, polifenolokat, triterpéneket, flavonoidokat, izoflavonoidokat tartalmazó növények, fűszernövények és élelmisznövények is rendelkeznek májvédő hatással (például oregáno, majoránna, kakukkfű, rozmaring, orvosi zsálya, bazsalikom, borsmenta, babér, paprika (kapszaicin), petrezselyem, kapor, citromfű, igazi édesgyökér, szőlőmag, vöröshagyma, fokhagyma, gránátalma, olívbogyó).

Kőszegi Lidia



IRODALOM

Csopor Dezső Gyógyszerészet 57, 413, 2013

Alberti Ágnes, Semmelweis Egyetem, Farmakognózi Intézet, 2017

Ludovico Abenavoli et al., Phytotherapy Research. 32, 2202-2213, 2018

János Fehér and Gabriella Lengyel, Current Pharmaceutical Biotechnology, 13, 210-217, 2012

Avelar et al. World Journal of Gastroenterology, 23, 5004, 2017

1. Afrika legöregebb fája

Az afrikai baobab fák a legkülönösebbek a világon. Termésük kolbászalakú, nem csak magasra, de terebélyesre is nőnek. Közülük is a leghíresebb Zimbabwe „Nagy Fája” – egy 25 m magas óriás – amit évente több ezer ember látogat útban a Viktória Vízesés felé. A baobab fák különlegessége, hogy évgűrűik szabálytalanul alakulnak ki; vannak évek, amikor egyet sem fejlesztenek, más években egynél többet is. Ezért koruk meghatározása problematikus.



A Zimbabwe-i Nagy Fa

Legújabb kutatók radio-szén kormeghatározással azt találták, hogy a Nagy Fa különböző törzsei három különböző generációt képviselnek. A legöregebb törzs korára 1150 évet állapítottak meg.

Az ilyen élő legendák korának meghatározása azért fontos, mert igazolja, hogy átéltek jelentős klímaváltozásokat. Sajnos, az utóbbi években Afrika legnagyobb baobab fái közül minden 6-ból 5 elpusztult; meglehet, hogy a jelenlegi klímát ők sem bírják ki. Science, 2021. november 12.

2. Betegek Amerika bükkfái

A 9 évvel ezelőtt Ohio államban észlelt fa-betegség ma fenyegeti Amerika északkeleti területeinek legfontosabb fáit. A még jószerevel ismeretlen „bükklevél-betegség” gyorsan terjed és elpusztítja nem csak a kifejlett bükkfákat, hanem fiatal egyedeket is.

Az amerikai bükk (*Fagus grandifolia*) megtalálható az USA keleti partvidékén és Kanadában. A fák megközelítően 40 m magasra nőnek, 400 évig élnek és sok erdő leggyakoribb fái.

Példaként említhető, hogy Vermont állam erdőinek több mint 25%-a bükkfa.



Amerikai bükkerdő

Korábban a bükk-kéreg betegségnek elnevezett ártalmat tartották a fajtát fenyegető legnagyobb veszélynek. Mostanra azonban a bükklevél-betegség még annál is rosszabb: a leveleket bórszerűvé alakítja, az ágakat elszáritja. Ez a vész egy kifejlett fát 6-10 év alatt megöl, amint ezt dokumentálták az USA 8 államában és Kanadában.



Beteg bükklevelek

A betegség erősen terjed. Rhode Island államban 2020-ban észlelték először egy kisebb területre korlátozva, de mára mindenütt jelen van. Ökológusok és Park-hatóságok összefogásával nagy területet vizsgáltak át Ohióban, Pennsylvániában, New York államban és Kanada Ontario tartományában. 894 db bükkfából közel a felében kimutatták a levélbetegséget, míg csak 34 esetben találtak kéregbetegséget. Korábbi vizsgálatokkal szemben megállapították, hogy fiatal fák mellett a kifejlett egyedeket is megtámadja a levélbetegség (Forest Ecology and Management). A nagyszámú beteg fa miatt az erdő már nem tudja ellátni ökológiai szerepét: oltalmat és élelmet biztosítani madaraknak és állatoknak. A betegség eredetéről

feltételezték, hogy egy nem ismert féreg okozhatja, amelyik a kérgen és leveleken élőszkodik. Újabb olyan Veszélybaktériumokat is gyanúsítanak, amelyek szimbiózisban élnek a féréggel (pl. *Wolbachia*). Azonban eddig még nem találtak költséghatékony módszert a fák megmentésére.

3. Veszélyben vannak a hazai bükkösök is

Az időjárási anomáliák mértéke és gyakorisága nálunk is növekedett. Magyarországon az egyik leginkább sérülékeny európai ország, mely egyre nagyobb területeit sújtja az aszály. Az aszály miatt meggyengült állományon belül a fákat kártevők, bogarak, szúk, gombák támadják meg. A legyengült fák pedig már nem tudnak védekezni a kártevők támadásai ellen.

A leginkább klímaérzékeny fajnak a Nyugat-Dunántúlon Zalaiban, Vas megyében előforduló bükk tekinthető. De az örökzöld fenyeveseknél is szembetűnő a változás, és a fiatal bükkösök és a tölgyesek is megszenvedik a szélsőséges időjárást.

Az egyik leglátványosabb magyarországi példa erre a Zala megyei bükkösök tömeges pusztulása volt a 2003-2004-es nyarán. Az évezred elejének sorozatos aszályai miatt legyengült fák pusztulását végül is egy szűbogár robbanásszerű elszaporodása okozta.



A szűbogár lárvája

A szűbogarak alapvetően a legyengült fákat szállják meg, de amikor sokan vannak jelen, akkor tömegesen megtámadják az egészséges fákat is. A szű befurakodik a fába, a járatban lerakja a petéit, és a kikelő lárvák tovább rágják a fát. Führer Ernő Erdészeti Lapok CLII, 2017. június

Szerkesztőség



Harcban a vírusokkal

A SARS-CoV-2 koronavírus által okozott COVID-19 betegség az elmúlt közel két évben, súlyos károkat okozott világszerte, beleértve a fertőzést, a halálozást és a pénzügyi válságokat is. A világjárvány során jelentős előrelépés történt a COVID-19 kezelésében és az életek megmentésében. Megjelentek a klinikai gyakorlatban az életfenntartó antitest-infúziók, és korábbi antivirális gyógyszerek. Vakcinák kerültek felhasználásra a fertőzések valószínűségének csökkentésére, és megkezdődtek az új antivirális gyógyszerek utáni kutatások is.

Bár a tudományos kutatóknak és gyógyszergyáraknak rekordidő – mintegy egy év – alatt sikerült kidolgozni a fertőzés megelőzését, a betegség lefolyásának súlyosságát, és a halálozás gyakoriságát jelentős mértékben (60-90%) csökkentő vakcinákat, céltzottan a Covid 19 betegség gyógyítására kidolgozott gyógyszer jelenleg még nincs forgalomban. A jelenleg engedélyezett vakcinákkal ez év eleje óta több milliárd embert beoltottak a világon, mégis a vírussal fertőzettek száma több hullámban ismételtén újra meg újra jelenősen megnövekszik és a betegek fogadása hullámozó mértékben leterheli a kórházakat, veszélyeztetve a normális betegellátást. A járvány intenzitásának az oltások ellenére történő ismételt megnövekedése nem jelenti azt, hogy a vakcinák hatástalanok. Azonban több alapvető probléma is fellép.

Az egyik az, hogy az oltások a világ különböző országaiban különböző időben kezdődtek meg. Fokozatosan először a fejlett országokban – ezekben sem egy időben – és ezt követően a fejletlen országokban. Ezenkívül a nagynépességű országoknak több 10 vagy 100 millió lakos beoltása minden igyekezzett ellenére is egy-másfél évig tart. Tekintve a népesség napjainkban történő nagymértékű, nagy távolságú mozgását, a fertőzés az oltások ideje alatt – az utazási korlátozások ellenére is – terjedni tud a világon.

Egy másik nehézség az, hogy a koronavírus ellen jelenleg kifejlesztett vakcinák hatása, hasonlóan az influenza elleni vakcinákhoz, korlátozott idejű; 6-8 hónap vagy némelyiké talán egy év. Tehát a védekezés fenntartásához ismételtén be kell oltani a lakosságot.

A harmadik ok az az általános tapasztalat, hogy sok országban a lakosság egy része fél az oltások vélt, vagy nagyon kisszámú mellékhatása miatt és idegenkedik; lassan szánja el magát az oltás felvételére vagy el is hárítja azt, lassítva ez által a védetség növekedését.

Azt sem szabad figyelmen kívül hagyni, hogy még a kiváló – 90%-os – vakcina

hatékonyság esetén is 1 millió beoltott közül 100 000 beoltott meg fog betegedni, még ha enyhe lefolyású is lesz a fertőzése. Azonkívül a betegség ellen védettek is lehetnek fertőzőképesek, még ha kisebb mértékben is, mint a nem oltottak. Azt még nem is említettük, hogy a betegséget okozó Sars-CoV-2 koronavírus genomja igen hajlamos mutációkra, amivel csak igen szélesspektrumú oltóanyagok fognak tudni megbirkózni. A vírusok gyors mutációs rátája azt is jelenti, hogy a rezisztencia meglehetősen gyorsan kialakulhat.

Ügy tűnik a fentiek miatt csak lassan fogunk tudni megszabadulni a koronavírus jelenlététől, emiatt aztán nagy szükségünk van a betegség lefolyását enyhítő, azt gyógyító gyógyszerekre is.

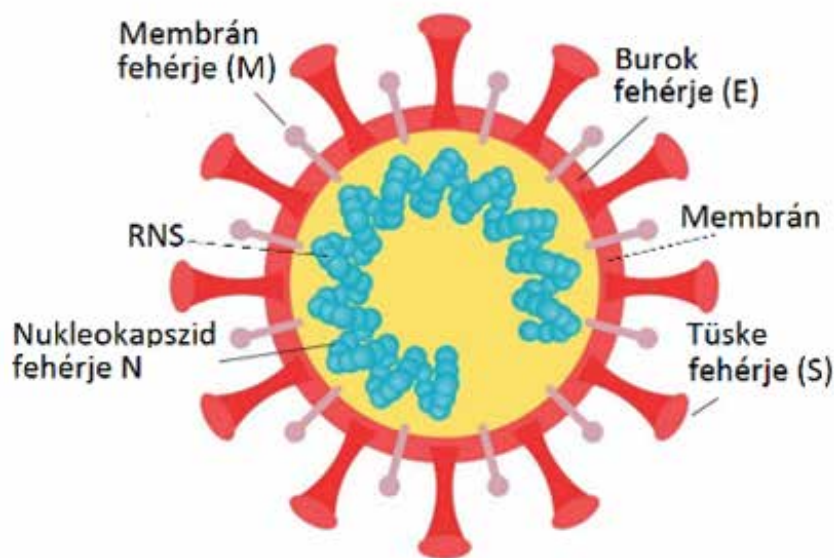
LEHETSÉGES GYÓGYSZERCÉLPONTOK

A vírusok egyetlen alapvető feladata szaporodásuk megvalósítása, vagyis másolataik legyártatása a gazdasejtekkel. A gyógyszereknek olyan támadási ponton kell beavatkozni a replikáció folyamatába, amely ponton az lassítható, optimális esetben le is állítható. Tekintsük át

röviden, milyen kritikus pontok vannak a Covid-19 betegséget okozó SARS-CoV-2 koronavírus szaporodásának mechanizmusában, amely pontokon az erre alkalmas gyógyszer lassíthatja, vagy leállíthatja további másolatok készítését.

A SARS-Cov-2 vírus egy fehérjebevonattal, kapsziddal ellátott ribonukleinsav (RNS) genomból és egy fehérje- és foszfolipid membránból álló külső burokból áll. A külső membránburokhoz a sejtekbe történő behatoláshoz glikoprotein tűskefehérjék kapcsolódnak.

A vírus szaporodása három részfeladattal megvalósítását jelenti. A szabályzó és szerkezeti fehérjéinek előállítását (transzláció), a nukleinsav genomjuk másolatainak elkészítését (transzkripció), majd ezekből a vírus másolatának pontos felépítését. A feladatokat a vírus a sejtekbe behatolva, vagy azok saját osztódásához használt molekuláris gépezeteivel, fehérjéivel végezteti el, vagy ha ez a szükséges gépezet nem áll rendelkezésre a gazdasejtben, akkor előállításának kódját maga a vírusgenom tartalmazza és ezt is legyártatja a gazdasejt molekuláris gépeivel. Elvonja ezeket a sejtmechanizmusból ezáltal gátolja a sejtek normális működését. A



A koronavírus szerkezete



sejteknek egyértelmű utasításokra van szükségük a feladatok egymást követő, adott sorrendben történő elvégzéséhez, ezeket a vírus genomja tartalmazza a nukleotidokkal kódolt fehérjéken keresztül. A genom recepteket tartalmaz a fehérjék felépítéséhez, és utasításokat amelyek szabályozzák ezeknek az előállítását.

Az RNS genomú vírusok replikációjához, genomjaik másolásához és szerkezeti fehérjék szintéziséhez három molekuláris gépezet szükséges.

1. Riboszóma (rRNS); ez olvassa a vírus replikációjának genomja

A járvány intenzitásának az oltások ellenére történő ismételt megnövekedése nem jelenti azt, hogy a vakcinák hatástalanok.

által nukleotidokkal kódolt programját és legyártja a másolatának elkészítéséhez szükséges fehérjéket (transzláció).

2. Transzfer RNS (tRNS); ez szállítja a fehérjék előállításához szükséges aminosavakat a riboszómához. 3. RNS-függő RNS polimeráz (RdRp), amely elkészíti a vírus genomjának másolatát. (A polimeráz hosszú láncú polimereket vagy nukleinsavakat szintetizáló enzim.)

Az első kettő a gazdasejt saját genomjának (DNS-ének) transzlációjához használt molekuláris gépezeti, amelyeket a vírus kivon a sejtmechanizmusból. A harmadikkal nem rendelkezik a gazdasejt. Ez a polimeráz szükséges a vírusgenom másolatának legyártásához. Érdekes módon ennek a molekuláris gépezetnek a kódját maga a vírus RNS genomja tartalmazza, majd transzlációja során legyártatja a gazdasejt riboszómájával. (A gazdasejtek DNS genomjuk másolásához

DNS-függő RNS polimerázt (DdRp) használnak).

A három alapvető molekuláris gépezeten kívül a vírus másolatainak elkészítéséhez szükség van a kémiai reakciók sebességét gyorsító enzimekre, az RNS templát és szintetizált RNS szálainak szétválását elősegítő helikáz fehérjékre, a poliproteineket kisebb fehérjékre lebontó proteáz enzimekre és másolt genom csomagolását ellátó szerkezeti fehérjékre is. Ezeket szintén maga a vírusgenom gyártja le a gazdasejt riboszómáival.

A SARS-CoV-2 fehérjéi két nagy nem-szerkezeti poliproteinből (pp1a és pp1ab), négy szerkezeti fehérjéből: tüskefehérje (S), envelope (E), membrán (M) és nukleokapszid (N), és 9 kiegészítő fehérjéből állnak. A szaporodás során a két nagy poliprotein proteolitikusan hasadva 16 kisebb nem szerkezeti fehérjére bomlik (1-16 Nsp). Összesen tehát 29 fehérje végzi el a vírus-másolat elkészítésének feladatát. (A terjedés során bekövetkező mutációk eltérő számú fehérjéket is előállíthatnak)

A proteolízis a fehérjéket összetartó peptidkötések hidrolízise, amelynek eredményeként a fehérjék komponenseikre, kisebb fehérjékre, peptidekre vagy aminosavakra bomlanak. A proteolízist proteázok, enzimek végzik, amelyek katalizálják a fehérjék lebomlását. A cisztein-proteázok, más néven tiol-proteázok, olyan enzimek, amelyek lebontják a fehérjéket.

A 16 KISEBB NEM-SZERKEZETI FEHÉRJE KÖZÜL

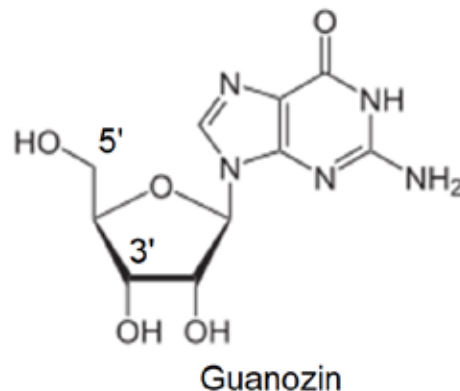
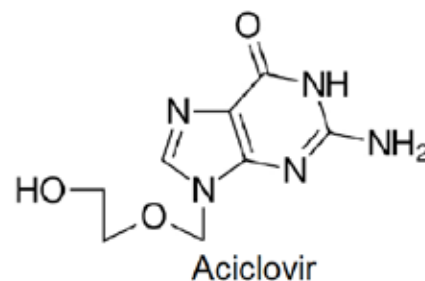
az **Nsp3**; a két nagy poliprotein proteolízist katalizáló fehérjének, az **Nsp5**; a poliproteineket kisebbekre hasító cisztein proteáz (3CLpro vagy fő proteáz Mpro),

az **Nsp12**; a vírus genomjának másolatát elkészítő RNS-függő RNS polimeráznak,

az **Nsp13**; helikáznak, az S tüskefehérjének kritikus szerepük van a vírus másolatának elkészítésében. Emiatt a felsoroltak hatásos vírusellenes gyógyszer-célpontoknak bizonyulhatnak amelyeken a fehérjék működését gátolva lassítható vagy le is állítható a vírus szaporodása.

KORÁBBAN KIFEJLESZETT VIRUSELLENES GYÓGYSZEREK

Jelenleg még nincs célzottan a Covid19 betegség kezelésére kidolgozott és jóváhagyott gyógyszer, bár már két új jelölttel is folynak biztató klinikai kísérletek. Több – más vírusos fertőzés kezelésére korábban kidolgozott – antivirális gyógyszer mutatott bizonyos mértékű terápiás hatásokat a betegség korai szakaszában, emiatt ebben az évben már a klinikai gyakorlat használta ezeket. Az antivirális készítmények elsősorban a betegség első, a vírusfertőzés által



meghatározott szakaszában alkalmazhatók sikerrel, általában a középsúlyos stádiumig. A gyulladásos szakaszban az antivirális terápia önmagában legtöbbször már nem elegendő.

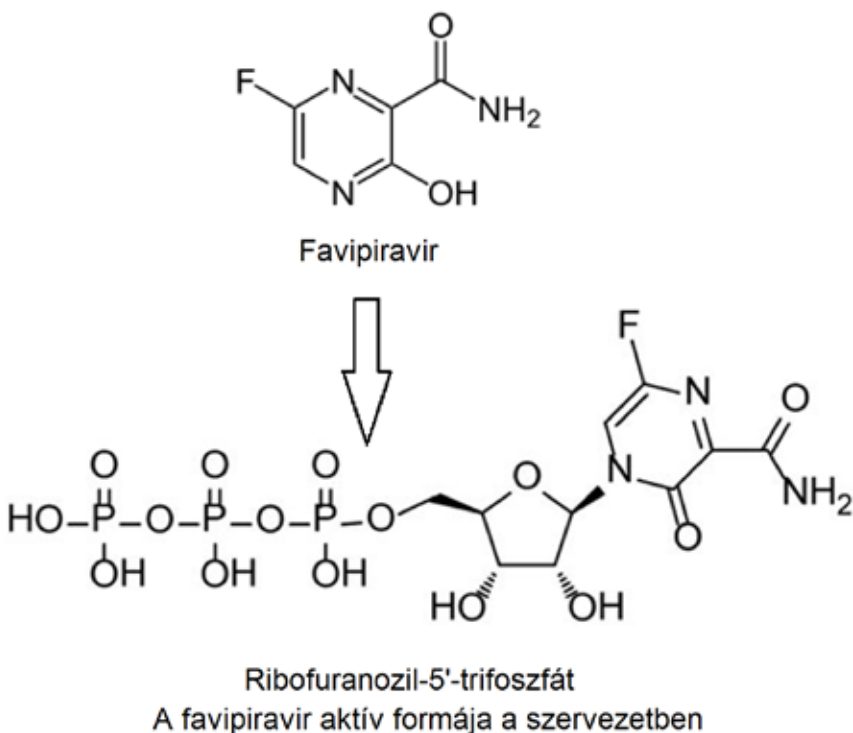
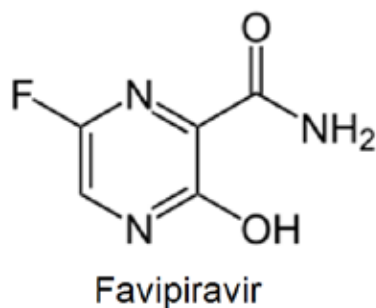
Két ilyen gyógyszer a nukleozid-analóg Favipiravir és a nukleotid-analóg Remdesivir. A nukleozid- vagy nukleotid-analógok támadási pontja a vírus genomjának másolatait készítő RNS-függő RNS-proteáz, a vírus Nsp12 fehérjéje.

A nukleozid-analógok olyan nukleozidok, amelyek egy nitrogénbázist és egy cukrot tartalmaznak. A nukleotid-analógok olyan nukleotidok, amelyek egy nitrogénbázist, egy cukrot és egy foszfátcsoportot tartalmaznak egy-három foszfáttal.

A nukleozid- és nukleotid-analógok terápiás gyógyszerekben használhatók, ideértve az influenzavírus, hepatitis B vírus, hepatitis C vírus, a herpes simplex, a HIV és az Ebola vírusok gyógyszereinek széles körét. Az analógok ribonukleotidokhoz hasonlítanak és beépülnek a növekvő RNS- vagy DNS-szálakba, majd leállítják a vírusgenom replikációját végző RNS vagy DNS-polimerázt.

Érdekes, a herpes simplex, a bárányhimlő és az övsömör kezelésére használt vírusellenes gyógyszer az Aciclovir hatóanyaga, amely nukleozid-analóggént működik utánozva a guanozint, de cukor helyett egy nyitott láncú szerkezetet tartalmaz.

Az RNS-vírusok szaporodását



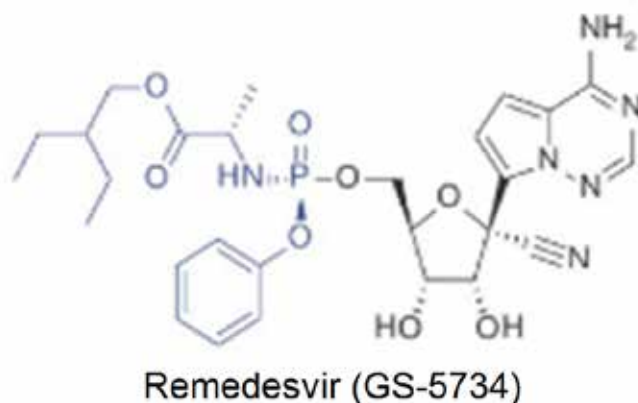
specifikusan gátolni képes gyógyszerek mellett a Covid-19-fertőzöttek kezelésére más antivirális gyógyszerek is felmerültek, azonban ezeknek a gyógyszereknek a hatékonyságát Covid-19-fertőzésben eddig nem sikerült egyértelműen bizonyítani.

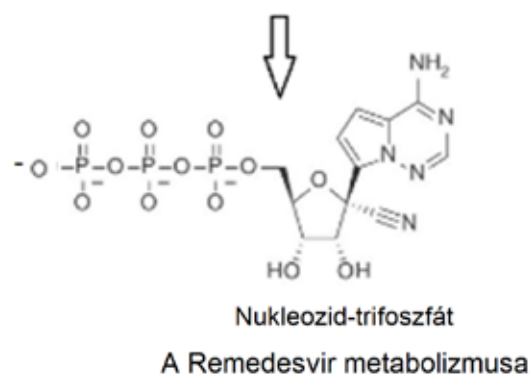
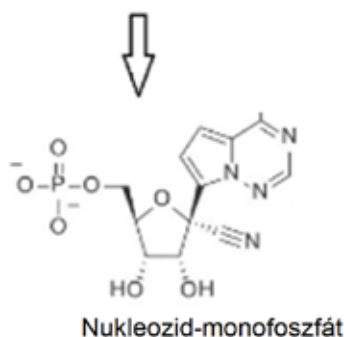
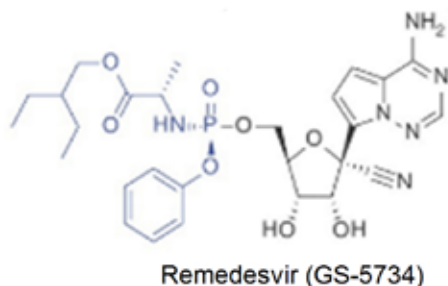
FAVIPIRAVIR

A favipiravirt Japánban 2014-ben engedélyezték a súlyos influenzafertőzések kezelésére. A SARS-CoV-2 koronavírus

ellen Wuhanban vetették be először. A gyógyszer a Covid19 világjárvány előrehaladásával Európa számos országában is engedélyt kapott sürgősségi használatra.

A favipiravir a szöveten belül intracelluláris foszfo-riboziláción megy keresztül és aktív formája, a favipiravir-RTP (favipiravir ribofuranosil-5'-trifoszfát) lesz. A vírus replikációjáért felelős RNS függő RNS-polimeráz (RdRp) az aktív formát purin nukleotidnak tartja, amely beépülve a vírus RNS-szállába

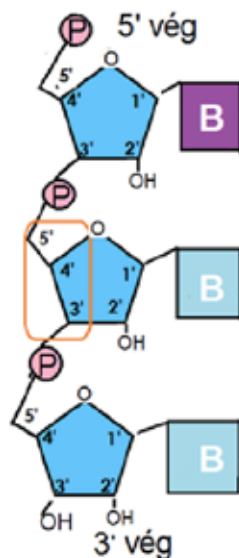
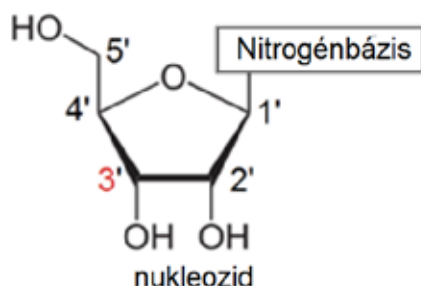




gátolja a vírus további replikációját és a fehérjeszintézis leállításához vezet. Mivel az RdRp katalitikus doménje a különböző típusú RNS-vírusokban hasonló, ez a hatásmechanizmus a favipiravir alkalmazhatóságának szélesebb spektrumát teszi lehetővé.

REMDESIVIR

A Veklury márkanéven forgalmazott Remdesivir széles spektrumú vírusellenes gyógyszert a Gilead



Sciences gyógyszergyár fejlesztette ki 2009-ben a hepatitis C vírus, Marburg-vírus, illetve az Ebola vírus fertőzések gyógyítására. Az elmúlt évben több klinikai kísérlet folyt a gyógyszer Covid-19 betegséggel szembeni hatékonyságának vizsgálatára és jelenleg is folynak ilyen kísérletek. Az amerikai Élelmiszer- és Gyógyszerügyi Hatóság (FDA) 2020-ban engedélyezte a COVID-19 betegség korhízi kezelésére felnőtt és 12 évesnél idősebb gyermekek gyógyításához. Ezt követően a Remdesivirt körülbelül 50 országban engedélyezték állandó vagy sürgősségi használatra a COVID-19 kezelésére.

A Remdesivir egy intravénás nukleotid-analóg prodrug, az adenozin analógja. Hasonlóan, mint a favipiravir szintén a vírus RNS-függő RNS-polimerázhoz kötődik, és az RNS-másolás idő előtti leállítása révén gátolja a vírus replikációját.

A prodrug olyan vegyület, amely beadás után átalakul a szervezetben (metabolizálódik) farmakológiailag aktív gyógyszerre. Az aktív hatóanyag közvetlen beadása helyett egy megfelelő prodrug használható a gyógyszer felszívódásának, eloszlásának, metabolizmusának javítására.

Működési mechanizmusa nem különbözik lényegesen más nukleotid analógoktól. A természetes nukleotidok szerkezeti utánzatait a sejtenzimek képesek trifoszfórilálni, és ezt követően a vírus polimerázok által beépülni a vírus RNS szálába.

A Remdesivir aktív metabolitja mint az adenozin-nukleotid-trifoszfát analógja megzavarja a virális RNS-függő RNS-polimeráz működését, és csökkenti a vírus RNS-termelését. Ellentétben sok más láncterminátorral, ez nem a következő nukleotid hozzáadását akadályozza meg, hanem először idegen bázisokat ad a növekvő RNS-lánchoz, amely aztán megszakítja az RNS szintézisét. A MERS-CoV, SARS-CoV-1 és SARS-CoV-2 vírusok RNS-függő RNS-polimeráza esetében az RNS-szintézis leállása három további nukleotid beépülése után következik be.

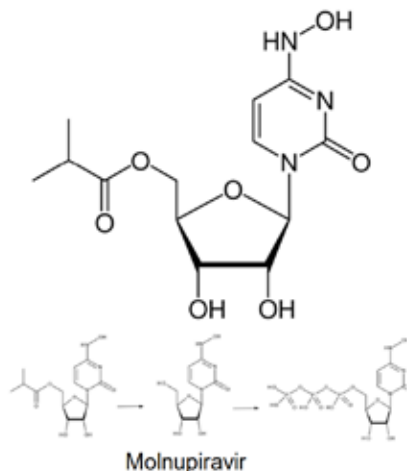
Több nukleotid analógból, például az Aciclovirből hiányzik a 3'-OH és ez megakadályozza a következő nukleotid beépülését az RNS másolatba, ezért végül is a nukleinsavszintézis idő előtti láncevésződését eredményezi.

A Remdesivir azonban megtartja a 3'-OH-t, ami nem akadályozza meg közvetlenül a foszfátészter kötések kialakulását. Ehelyett a más helyeken végzett módosítások (1'-CN a remdesivir esetében) sztérikus blokként működhetnek, amely leállítja az RNS szintézisét.

A két gyógyszer hatékonyságának értékelése és optimalizálása jelenleg is folyik, azonban nehéz cáfolni azt a tényt, hogy mindkét gyógyszer fontos szerepet játszott és játszik még ma is a COVID-19 betegség korai kezelésében, célzottan a koronavírusos betegek gyógyítására kidolgozott gyógyszerek hiányában.

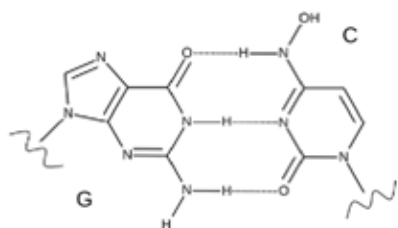
ÚJ ANTIVIRÁLIS GYÓGYSZERJELÖLTEK

A forgalomban levő antivirális gyógyszerek felhasználása és a vakcinák kifejlesztése mellett már az elmúlt évben megkezdődtek a kutatások hatékony orális gyógyszerek kifejlesztésére is, amelyek csökkentik a súlyos betegségek kockázatát a koronavírussal diagnosztizált betegeknél. Jelenleg két ígéretes gyógyszerjelölről jelentek meg biztató hírek. Az egyik az Emory Egyetem (USA) kutatói, továbbá a Merck és Ridgeback gyógyszergyárak által kifejlesztett Molnupiravir hatóanyagot tartalmazó Lagevrio nevű gyógyszer, amely az I és II.

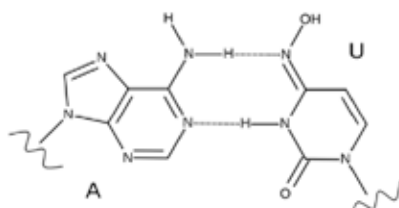


fázisú klinikai kísérletek szerint 50%-al csökkentette a kórházi kezelések számát.

A másik a Pfizer gyógyszergyár vírusellenes tablettája Paxlovid, amely a II. és III. fázisú klinikai kísérletek közbelső eredményei szerint 89 százalékkal csökkentette a kórházi kezelés vagy a halál kockázatát olyan felnőtteknél, akiknél különösen nagy volt az esélye a súlyos betegség kialakulásának. Mindkét gyógyszer célja a koronavírus szaporodásának megállítása, de kissé eltérő módszereket alkalmaznak. Míg a Paxlovid hatóanyaga közvetlenül kötődik a Sars-CoV-2 fő proteáz enziméhez blokkolva a vírus replikációját, addig a molnupiravir metabolitja egy nukleozid



EIDD-1931 mint citidin analóg



EIDD-1931 mint uridin analóg

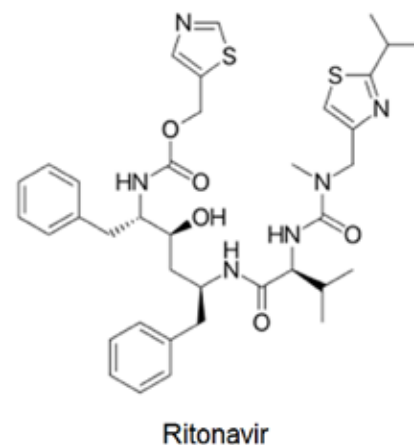
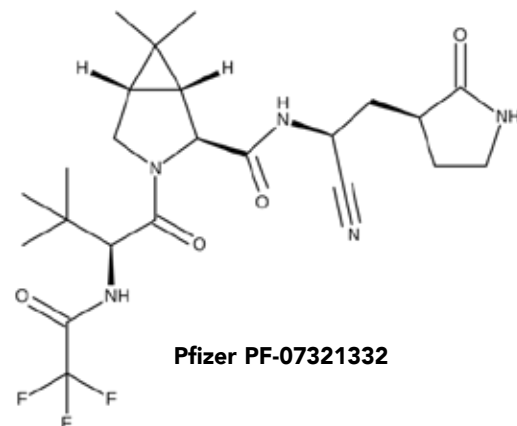
utánzó, amely beépül a replikálódó RNS-szállba, és katasztrofális mutációkat okoz.

A gyógyszerekkel fontos a kezelés korai megkezdése. A klinikai vizsgálatok során a Merck és a Pfizer a tünetek megjelenésétől számított öt napon belül megkezdte a kezelést. A III. fázisú klinikai kísérletek jelenleg is folynak és a kutatók remélik, hogy év végére benyújthatják kérelmüket a gyógyszerek forgalmazásának engedélyezésére.

LAGEVRIO

A Lagevrio hatóanyaga a molnupiravir szintén egy prodrug (lásd Remdesivir), amelynek metabolitja (EIDD-1931) a remdesivirhez hasonlóan egy nukleozid-analóg vegyület. Az RNS egy nukleotidját utánozva, ráveszi a vírus RdRp enzimjét, hogy a vírus RNS-szállába helyezze azt, katasztrofális mutációkat okozva. A különbség a többi nukleozid-analóg hatóanyaghoz képest az, hogy az EIDD-1931-et nem ismeri fel a vírus hibajavító gépezete, ezért nem távolítja el ezt a nem-természetes nukleozidot az RNS-szállból. A molnupiravir metabolitjának EIDD-1931 – két formája (tautomere) létezik, amelyek közül az egyik citidin-analóg (C), a másik pedig uridin-analóg (U). Amikor a vírus RNS polimeráz megkísérli

lemásolni az EIDD-1931-et tartalmazó RNS-t, néha citidin-nek, néha uridin-nak ismeri fel. Ez több mutációt okoz az összes másolatban, mint amennyit a vírus túlélni képes.



Egy 775 személyt – nem kórházban kezelt beteget és placebo személyeket – magába foglaló vizsgálat időközi elemzése szerint, a molnupiravir körülbelül 50%-kal csökkentette a kórházi kezelés vagy a halálozás kockázatát; A molnupiravirt kapó betegek 7,3%-a került kórházba a randomizációt követő 29 napon keresztül (28/385), szemben a placebóval kezelt betegek 14,1%-ával (53/377). A 29. napig nem jelentettek halálesetet a molnupiravirt szedő betegeknél, szemben a placebót kapó betegek 8 halálesetével. A vizsgálatban résztvevő Covid-19-cel diagnosztizált betegek legalább egy rizikófaktorral: elhízással, 60 év feletti



korral, cukorbetegséggel vagy szívbetegséggel rendelkeztek.

A virológusok szerint a gyógyszer mellékhatásai kockázatának meghatározásához nagyobb betegmintára és hosszabb megfigyelési időre lesz szükség. Emiatt a Merck úgy tervezi, hogy hogy az Egyesült Államok Élelmiszer- és Gyógyszerügyi Hatóságától (FDA) sürgősségi felhasználási engedélyért folyamodik, amely lehetővé teszi a gyógyszer forgalomba hozatalát, miközben folytatja a bizonyítékok gyűjtését a teljes jóváhagyás aláátmasztására.

PAXLOVID

A Pfizer által kifejlesztett második új vírusellenes gyógyszer a Paxlovid is ígéretesnek bizonyult a Covid-19 fertőzések súlyosságának csökkentésében az előzetes klinikai vizsgálati adatok szerint.

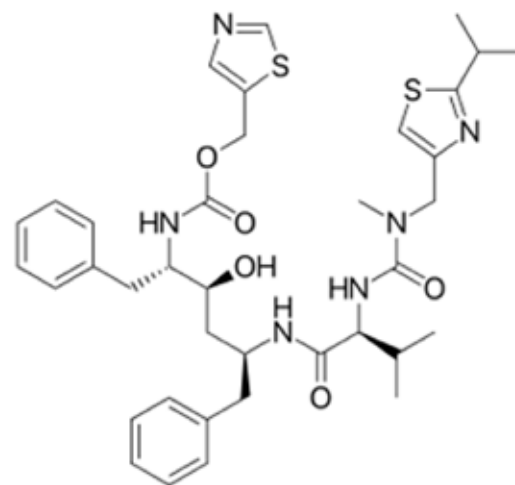
A gyógyszer két komponensből áll: a PF-07321332 nevű kísérleti molekulából és egy létező gyógyszerből, a ritonavirból.

Mindkét komponens proteázgátló inhibitor. A PF-07321332 gátolja a vírus replikációját, a genomja replikációja előtti proteolízis szakaszában. Blokkolja a vírus proteáz enzimjét (Nsp5), amely a nem

funkcionális vírusfehérjék hosszú szálaikat kisebb, funkcionális fehérjékre vágja szét. A kutatók szerint a nitril-csoport (a képleten bekarikázva látható) játszik döntő szerepet a komponens hatásmechanizmusában. A ritonavir funkciója a belekben és a májban előforduló proteázgátlókat metabolizáló enzimek gátlása. A hatóanyag kis dózisu ritonavirral történő együtt adása segít lelassítani a PF-07321332 hatóanyag metabolizmusát vagy lebomlását, hogy hosszabb ideig aktív maradjon a szervezetben magasabb koncentrációk mellett a vírus elleni küzdelem érdekében.

A Pfizer bemutatta egy 2/3 fázisú klinikai vizsgálatának közbenső eredményeit, amelyek azt mutatják, hogy a Paxlovid (PF-07321332 jelű molekula + ritonavir) 89%-kal csökkentette a kórházi kezelést vagy a halálozást, ha a Covid-19 kezdeti tüneteit követő három napon belül adták be. A gyógyszert kapott 389 betegből hármat (0,8%) kórházba szállítottak, míg a placebóval kezelt csoportban 385-ből 27 (7%) került kórházba, és hét később meghalt. A társaság sürgősségi engedélyezésért kíván a szabályozó hatóságokhoz fordulni.

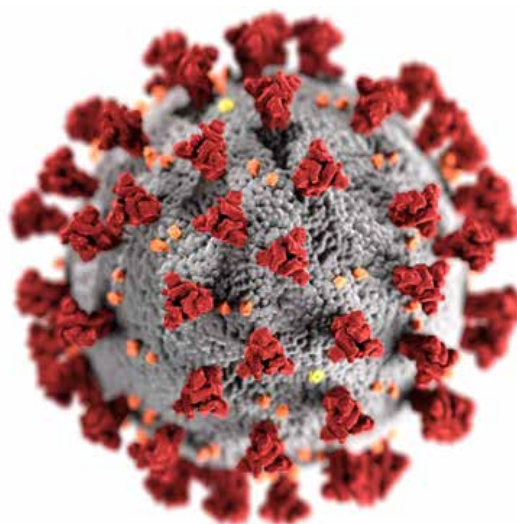
A gyógyszerjelölt erős in vitro antivirális aktivitást mutatott a SARS-CoV-2 és más koronavírusok ellen,



Ritonavir

ami arra utal, hogy a COVID-19 kezelésében, valamint a jövőbeni vírusfenyegetések ellen is alkalmazható.

Pálinkás Gábor



IRODALOM

O., S. Reddy, W. F. Lai, *Chembiochem*, 2020, Nov. 1.
Késérő György, https://mta.hu/tudomany_hirei/gyogyszerek-koronavirus-fertozottek-kezelesere-110793

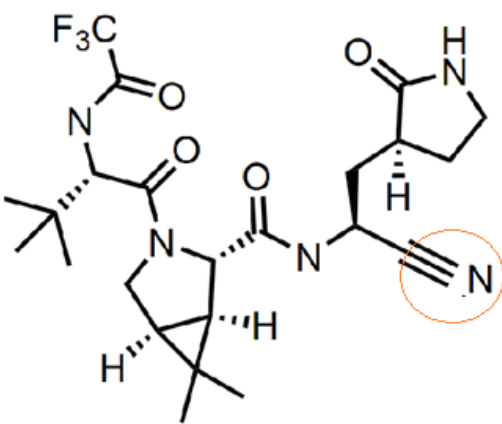
https://mta.hu/mta_hirei/a-koronavirus-helyzetrol-110465

Owen DR, et al. *Science*. 2021 Nov 2

Kabinger, F., et al. *Nat Struct Mol Biol* 28, 740 (2021).

<https://www.pfizer.com>

Lagevrio, <https://www.merck.com>



Paxlovid

Pfizer-PF-07321332

Hatvan éve hunyt el Erwin Schrödinger



Erwin Schrödinger kiemelkedő alakja a huszadik századi fizikának és biológiának. A húszas évek során ő teremtette meg a két önálló, de egyforma értékű egyenlet közül az egyiket, amely leírja az elektron viselkedését az atommag körül. Az első Heisenberg mátrixmechanikai egyenlete, a második Schrödinger hullámegyenlete, amelyet Max Born minden fizika „legnagyszerűbb teljesítményének” tart. Ráadásul Niels Bohr-hoz hasonlóan érdekelték az elméleti fizika legújabb teljesítményének filozófiai következményei is.

Ő volt a szerzője a *Mi az élet?* című rövid, de vélhetően a huszadik század egyik legnagyobb hatású könyvének, amely számos fizikust bátorított a biológia alapmechanizmusainak tanulmányozására. „Mindenki Schrödingert olvassa-írja Horace Freeland Judson. – Legelbűvölőbb tulajdonsága a világosság, amellyel nem mint algebrái egységhez, hanem valóságos anyagként közelít a génhez, amely csaknem tökéletesen stabil, ugyanakkor végtelenül változékony.”

Erwin Schrödinger 1887. augusztus 12-én született Bécsben, Rudolf Schrödinger és felesége Georgina egyetlen gyermekeként. Anyja imádta,

egyik nagynénje kényeztette, apja erős hatással volt rá. Erwinnek igazán ideális középosztálybeli gyermekkorra volt. Rudolf Schrödinger egy linóleumcég tulajdonosa volt, ugyanakkor amatőr botanikus, cikkei jelentek meg a növénygenetikáról, és szenvedélyesen érdekelte az itáliai festészet, fiának „barátja, tanára és fáradhatatlan beszélgetőtársa volt”. Erwin, miután tizenegy éves koráig magántanár oktatva, 1898-ban beiratkozott a híres humán Akademisches Gymnasiumba. Itt klasszikus világi nevelést kapott, irodalmat és filozófiát tanult. Mivel anyai nagynénje, Minnie Angliából származott, Erwin folyékonyan beszélt angolul, ezen felül megtanult franciául, spanyolul, ógörögül és latinul. Miközben csendesen sétálgattak Innsbruckban, anyja azzal készítette az angol nyelv gyakorlására, hogy azt mondta: „Most pedig egész úton angolul fogunk beszélni-egy szót se halljak németül.” Schrödinger kelletlenül bár, de elismeri: „csak később jöttem rá, mennyi hasznom volt ebből mind a mai napig”. 1906-ban iratkozott be az egyetemre, egy évvel azután, hogy Albert Einstein közzétette híres cikksorozatát, majd hamarosan lelkiismeretes diákja lett a fizika tanszéknek. 1910-ben doktorált a Bécsi egyetemen, és bent maradt tanítani. Az első világháborúban tüzértisztként szolgált, nevét megemlézték vitézsége miatt. Mint sok más nemzedéktársára, rá is mély hatással volt a háború, felkeltette érdeklődését a filozófia, azon belül az indiai filozófia iránt. 1925-ben közzétette személyes meggyőződésének rövid összefoglalóját, *A világ, ahogyan én látom* címmel. Spirituális hajlamú, ugyanakkor vallás-és hagyományellenes volt, és hatott rá a tizenkilencedik századi pesszimista filozófus, Arthur Schopenhauer. Sigmund Freud-ot és Alfred Kinsey-t nem számítva, a nagy tudósok közül leginkább ő érdeklődött a szexuális tapasztalatok iránt, amit eszköznek tekintett a transzcendencia eléréséhez. 1921-ben Schrödinger kutatói állást kapott Zürichben, ahol folytatta korai munkáját a gázok statisztikai mechanikájával,

a színelmélettel és az atomelmélettel kapcsolatban. Lépést tartott a kvantumelmélet fejlődésével, amelyben, az elektronok viselkedése terén, komoly problémák és ellentmondások gyűltek fel azóta, hogy Niels Bohr alkalmazni kezdte 1913-ban. 1924-ben nagy előrehaladás történt, amikor Louis Victor De Broglie feltételezte, hogy ha Einstein kimutatta a fénycsillagok részecsketermészetét, ugyanúgy az atom részecskéi is viselkedhetnek hullámként. Ez fontos hajtóerőt jelentett Schrödingernek, akit De Broglie szemináriuma sarkalt a kérdés vizsgálatára. A húszas évek közepére készen állt, hogy ő is hatalmas mértékben hozzájáruljon a kvantumelmélet fejlődéséhez.

A hullámelméletet 1925-ben, a karácsonyi szünetben találta ki. Érdekes érzelmi háttere volt hozzá: megcsalta a felesége, ő pedig vigasztalásul maga is viszonyt szőtt egy régi barátnőjével-akinek kiléte azóta is titok-a svájci Alpok egyik síparadicsomában. Itt rajzolódott ki benne a képzet kezdetleges formája, amelyről tudta, hogy ha sikerül kidolgoznia, akkor „nagyon szép” lesz. Egy éven át tartó kutatások vezettek a matematikai fizika történetének egyik legfontosabb differenciálegyenletéhez. Schrödinger hatásosan öntötte matematikai egyenletbe De Broglie feltevését, amely az elektront nem pontnak tekintette, amely különböző helyeken lehet az atommag körül, hanem állóhullámnak, amely meghatározott energiaszinteken körbe-körbe mossa a magot. A gondolatot 1926-ban hat cikkből álló sorozatban magyarázta el. Fontosságát azonnal felismerték. „Schrödinger hullámmechanikájának ereje félelmetes volt-írja David Cassidy tudománytörténész-, előnye nyilvánvaló, mélységes fontossága azonnal látható.” Nagyjából a hullámelmélettel egy időben fejlesztette ki Werner Heisenberg a mátrixmechanikát, amely szintén leírja az atomi részecskék viselkedését.



Hogy a „kvantumugrásokkal” járó problémákat megoldja, ez a képlet az elektront mint a számok sorozatát avagy mátrixát írja le. Schrödinger egyenletéhez képest valamivel nehezebb volt a használata. Mindazon által az anyag mátrixmechanikai és Schrödinger hullámelmélete szerinti leírása matematikai tekintetben egyenértékűek, ahogy ezt Neumann János és Paul Dirac is hamarosan kimutatta. Max Born a valószínűséget tartotta magyarázatnak az elektron hullámszerű viselkedésére. Új, tartós kvantumelmélet született.

Niels Bohrtól eltérően, aki szerint a részecskéket nem lehet teljes pontossággal leírni, Schrödinger úgy vélte, elmélete elvezet az atom teljes magyarázatához. Einsteinhez hasonlóan továbbra is reménykedett egy egyesített elméletben, ahol az okság fogalma nem tűnik el a statisztikai valószínűség kedvéért. Nem sokkal azután, hogy hullámegyenletét közreadta, meglátogatta Bohr-t Koppenhágában, és hosszú beszélgetéseket folytatott vele a kvantumelmélet filozófiai vonatkozásaival kapcsolatban. Azt mondta, amennyiben a kvantumugrás fogalma szükségszerű, „akkor sajnálhatom, hogy valaha is beleavatkoztam a kvantumelméletbe”. Bohr azt válaszolta: „Mi többiek viszont rendkívül hálásak vagyunk érte, hogy megtette, az ön hullámmechanikája olyan matematikai világosságot és egyszerűséget hozott, ami gigászi haladást jelent kvantummechanika

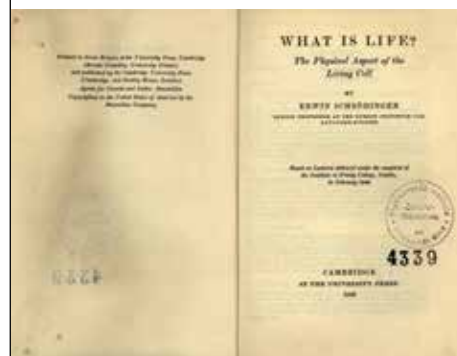
minden előző formájához képest.” Schrödinger 1927-ben átment a Berlieni Egyetemre, és átvette az elméleti fizika híres tanszékét, amely Max Planck visszavonulásával ürült meg. 1933-ban a náciizmus hatalomra jutásakor Schrödinger az elsők között hagyta el Németországot, de antifaszizmusa passzív volt, nem lett a tevékeny ellenzék tagja, amikor Hitlert kancellárrá választották. Ugyanebben az évben Paul Dirac angol fizikussal megosztva megkapta a fizikai Nobel-díjat. 1956-ban, miután három évig az oxfordi Magdalen College-ban tanított, visszatért Ausztriába, hogy a Grazi Egyetemen oktasson. A hamarosan, 1938-ban bekövetkező Anschluss-nak komoly következményei voltak Schrödinger számára, akit a náci megfigyelés alá helyeztek. Végül írt egy „vallomást”-amelyért kollégái hevesen bírálták, és később ő is megbánt-, s ebben támogatta a „Führer akaratát”.

A náci azonban ettől sem csitultak, Schrödingert elbocsátották állásából. Elkésve bár, de meggyőződött róla, hogy nem maradhat többé Ausztriában, ezért feleségével együtt elmenekült az országból, összesen tíz márkával a zsebében. Miután rövid ideig Olaszországban és az Egyesült Államokban tartózkodott, meghívták a dublini Elméleti Fizika Ír Iskolájába, amelyet nem sokkal korábban alapított az ír politikai vezér, Eamon de Valera. Schrödinger 1956-ig maradt itt.

Bizonyos értelemben megihlették Arthur Eddington csillagász kései filozófiai munkái, és 1935 táján elkezdődött számára az, amit C.W. Kilmster „lángelméje második virágzásának” nevezett. Dublinban írta a Mi az élet? című művét, amelyben lehetséges magyarázatot kínált a sejtműködésre a termodinamika törvényei szerint. Schrödinger úgy tekintet a génekre, mint amelyek megfékezik a minden rendszerben kiépülő entrópiát, a széthullást. Arra az állapotra helyezkedett, hogy az élet alapja teljes mértékben megérthető a kémiai és fizikai tulajdonságokból kiindulva. A Mi az élet?, írja Roger Penrose, „hatalmas erejű kísérlet, hogy megértsünk valamit az élet valódi rejtélyeiből”, és „a század legfontosabb tudományos művei közé tartozik”. Noha az írás fontos dolgokban tévedett, hatással volt Francis Crickre és James Watsonra, így módon intellektuális tényezője lett a DNS-működés felfedezésének.

A második világháború után Schrödinger szeretett volna hazatérni Ausztriába. Végül 1956-ban költözött haza, amikor elfogadott egy állást a Bécsi Egyetemen. Am hamarosan megbetegedett, élete utolsó éveiben keveset dolgozott. Nem mindennapi egyéniség volt, roppantul kulturált, világos fejű és nonkonformista. 1920-ban feleségül vette Annemarie Berthelt, akivel életrajzírója, Walter Moore szerint úgy bánt, mint egy cseléddel. Noha szexuálisan nem illettek össze, együtt maradtak, mindegyikük élte a maga szerelmi életét a két világháború közti felvilágosodott Zürichben. Erwin Schrödinger 1961. január 4-én halt meg, Alpach faluban temették el. Schrödinger olyan tudós volt, akinek munkássága fölött izgalmas

spekulációkat lehet folytatni, hogy hová is tartozik tulajdonképpen. Talán emlékszünk, hullámelméletét azzal a határozott szándékkal dolgozta ki, hogy megkerülje az (elkerülhetetlen) „kvantumugrást” és filozófiailag a régiesebb valóságfelfogáshoz kötődött. A Mi az élet? központi eszméje az élőlényeket jellemző „negatív entrópiát”-manapság tévedésnek minősítik.

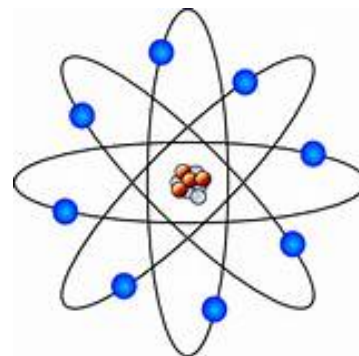


Csökkentik hatását ezek a „hibák”? Semmiképpen sem. Schrödinger csupán arra szolgáltat ékesszóló példát, hogyan hozhatnak ki a tudósok gyümölcsöző eredményeket téves kiindulási alapokból.

Hullámegyenlete akkor is döntő lépést jelentett a kvantummechanikában, viszonylag könnyű volt alkalmazni, szétágazó gyakorlati haszonnal bírt. A Mi az élet? jelentőségét is a molekuláris biológusok egész nemzedéke hitelesíti. Schrödinger hatása bizonyíték a tudományos haladás természetére.

Ménes András

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - E_p) \Psi = 0$$



Kémiai Panoráma

Felelős kiadó és főszerkesztő:

Pálinkás Gábor

Kiadja az ELKH Természettudományi

Kutatóközpont

Kapcsolat: 1117 Budapest,

Magyar tudósok körútja 2.

e-mail: panorama@chemres.hu

Tördelés-képszerkesztés: Szarka Bernadett

Szakmai tanácsadó: Gózon Ákos

Honlap: www.kemiaipanorama.hu

