

Kémiai Panoráma

2025. évfolyam 30. szám

FIZIKAI NOBEL-DÍJ 2024

Mesterséges neurális hálózatok tanítása

JONAS SALK ÚTTÖRŐ MUNKÁSSÁGA

Harc a poliovírus ellen

GYÓGYÍTÓ MOLEKULÁK NÖVÉNYEKBEN

Borsmenta, a 2024-es év gyógynövénye

ABIOTIKUS OXIGÉNTERMEELÉS

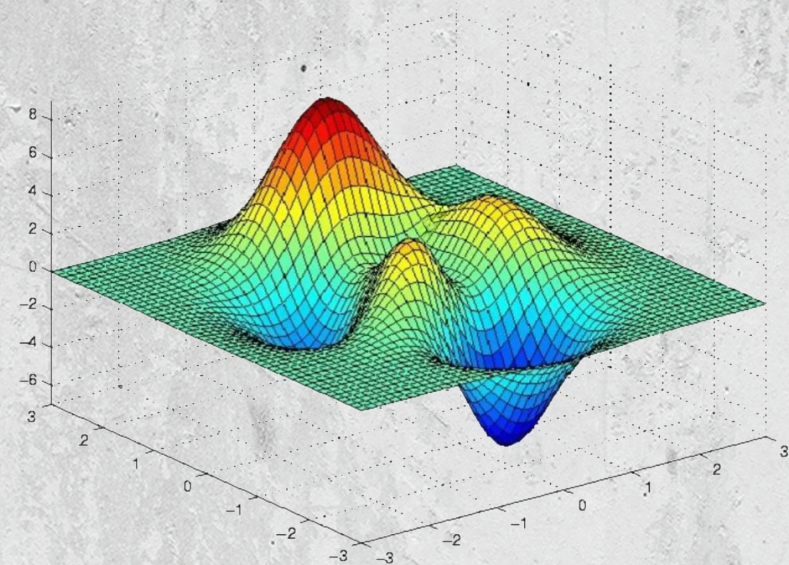
Sötét oxigén – természetes battériák?

NMR SPEKTROSZKÓPIA

Szerkezet, dinamika, molekuláris kölcsönhatások

GYÓGYHATÁSÚ NEMESFÉM

Arany nanorészecskék és nanoklaszterek orvosbiológiai alkalmazásai



4

Bevezető

Kedves Olvasónk!
Szerkesztőség

5

Fizikai Nobel-díj 2024

Mesterséges neurális
hálózatok tanítása
Nobel-bizottság



John J. Hopfield

Geoffrey E. Hinton

6

Tanulás, modellezés, mintafelismerés

Mesterséges intelligencia,
mesterséges neurális hálózatok
Pálinkás Gábor



11

Egy egyszerű neurális hálózat példája

Tanítsunk alakzatot!
Pálinkás Gábor

13

Jonas Salk úttörő munkássága

Harc a poliovírus ellen
Ménész András



15

Gyógyító molekulák növényekben

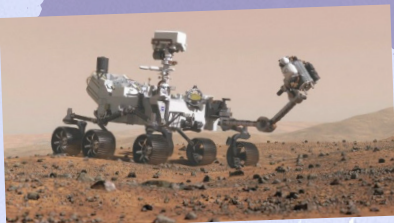
Borsmenta, a 2024-es év
gyógynövénye
Kőszegi Lófia



18

Asztorkémiai hírek

Marsi minták nyomában
Aminosavak, cukrok és
gamma-sugárzás
Szerkesztőség



A Kémiai Panoráma magazint kiadja a Magyar Tudományos Akadémia támogatásával a Hun-REN Temészettudományi Kutatóközpont. A 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 Kutatóközpont és a Servier Gyógyszerkutató Intézet (5-6. szám) támogatásával valósult meg.



21

Gyógyító nemesfém
Arany nanorészecskék és
nanoklaszterek orvosi-
biológiai alkalmazásai
Csapó Edit



25

Abiotikus oxigéntermelés
Sötét oxigén – természetes
battériák?
Nemes László

28

Ajánló
Magyar Kémikusok
Lapja
Szerkesztőség



31

Nyári kutatótábor
AKI kíváncsi Kutató a
Természettudományi
Kutatóközpontban
Tompos András



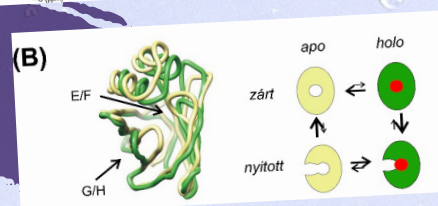
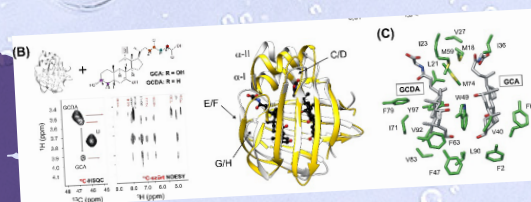
29

**Az Élet és Tudomány
írja**
Kozmetikumok és
környezet
Fekete-Kertész Ildikó,
Márton Rita, Molnár
Mónika, Feigl Viktória



34

NMR spektroszkópia
Szerkezet, dinamika,
molekuláris
kölsönhatások
Tőke Orsolya



Olvasóinkhoz

A Nobel-díj Bizottság az elmúlt évben mind a Fizikai mind a Kémiai Nobel-díjat a mesterséges intelligencia neurális hálózatainak kidolgozásában végzett munkásságuk elismeréseként ítélte oda a díjak nyerteseinek.

A fizikai Nobel-díjat John J. Hopfield (Princeton University, NJ, Egyesült Államok) és Geoffrey E. Hinton (University of Toronto, Kanada) „olyan alapvető felfedezésekért és találmányokért nyerték el, amelyek lehetővé teszik a gépi tanulást”. John Hopfield kidolgozta a minták alapján tanuló neurális hálózatok felügyelt gépi tanulásának algoritmusát, Geoffrey E. Hinton pedig megalkotta a felügyelet nélküli tanulás algoritmusát, mely képes önállóan tulajdonságokat találni az adatokban, és így olyan feladatokat végezni, mint például a képek jellemző mintázatainak azonosítása. (KP No29)

A Kémiai Nobel-díjat **David Baker** (University of Washington, Seattle, WA, Egyesült Államok), **Demis Hassabis** (Google DeepMind, London, Egyesült Királyság), és **John Jumper** (Google DeepMind, London, Egyesült Királyság) nyerték el a mesterséges neurális hálózatok kétféle kémiai alkalmazásáért. „2003-ban David Bakernek a természetben nem létező globuláris (gombolyag-szerű) fehérjét sikerült felépíteni a neurális hálózati algoritmussal. Azóta kutatócsoportja egyik fehérjealkotást a másik után hozta létre, beleértve a gyógyszerekként, vakcinaként, nanoanyagokként és apró szenzorként felhasználható fehérjéket.”

Demis Hassabis és John Jumper pedig 2020-ban egy neurális hálózati modellt (AlphaFold2) fejlesztettek ki, amelynek a segítségével előre jelezhető a természetes fehérjék háromdimenziós szerkezete. „Az eltelt időben az AlphaFold2-t 190 ország több mint kétmillió embere használta. Az MI modell segítségével a kutatók ma már jobban megérthetik az antibiotikum-rezisztenciát, és képeket készíthetnek például olyan enzimekről, amelyek képesek lebontani a műanyagot”.

A díjazottak munkásságára alapozva a mesterséges intelligencia ma már számos

lehetőséget kínál a kémiai alkalmazásokra, például a spektroszkópiai elemzésekre, reakciók előrejelzésére, vagy elektrosztatikus potenciálok elemzésére.

A mesterséges intelligencia kémiai alkalmazásának példáira álljanak itt magának a mesterséges intelligencia „egyszerű” internetes verziójának (ChatGPT) a szerkesztőségünk által feltett kérdésekre adott válaszai.

Kérdés: Tudnál egy összefoglalót készíteni a neurális hálózatok kémiai alkalmazásairól?

ChatGPT válasza:

A neurális hálózatokat egyre gyakrabban használják a kémiában összetett kémiai jelenségek modellezésére, előrejelzésére és elemzésére. Íme egy tömör összefoglaló a főbb alkalmazásairól:

1. Molekuláris tulajdonságok előrejelzése

Célkitűzés: A molekulák fizikai, kémiai vagy biológiai tulajdonságainak előrejelzése (pl. oldhatóság, toxicitás, reakcióképesség).

Eszközök: Gráf neurális hálózatok (GNN-ek), üzenettovábbító neurális hálózatok (MPNN-ek) és transzformátorok.

Bemenet: SMILES karakterláncok, grafikonok vagy 3D konformációk formájában ábrázolt molekuláris struktúrák.

2. Kvantumkémia és molekuláris szimuláció

Célkitűzés: A kvantummechanikai tulajdonságok (pl. energiák, erők, elektronsűrűség) közelítése sokkal gyorsabban, mint a hagyományos módszerek, például a DFT.

Példák: DeepMind DeepMind21, SchNet, PhysNet.

Előny: Jelentősen csökkenti a kvantumpontosságú szimulációk számítási költségeit.

3. Reakció előrejelzés és retroszintézis

Célkitűzés: Kémiai reakciók termékeinek előrejelzése vagy szintetikus útvonalak javaslata a célmolekulához.

Módszerek: Szekvencia-szekvencia modellek, gráf alapú megközelítések.

Alkalmazások: Gyógyszerfejlesztés, anyagtervezés, szerves szintézis tervezése.

4. Anyagok felfedezése

Célkitűzés: Azonosítsa a kívánt tulajdonságokkal rendelkező új anyagokat (pl. katalizátorok, polimerek, félvezetők).

Megközelítés: Nagy anyagadatbázisokon (pl. Materials Project) kiképzett neurális hálózatok a sávhézagok, a stabilitás stb. előrejelzésére.

5. Spektroszkópia és szerkezeti elemzés

Célkitűzés: Spektrális adatok (pl. NMR, IR, UV-Vis) értelmezése vagy spektrumok előrejelzése molekuláris szerkezetek alapján. Felhasználási eset: Felgyorsítja a szerkezeti tisztázást és jellemzést.

6. Gyógyszerkutatás

Célkitűzés: A bioaktivitás előrejelzése, az oldóanyagok optimalizálása és a gyógyszer-cél kölcsönhatások modellezése.

Megközelítés: Mély tanulás használata virtuális szűréshez, molekuláris dokkoláshoz és de novo gyógyszertervezéshez.

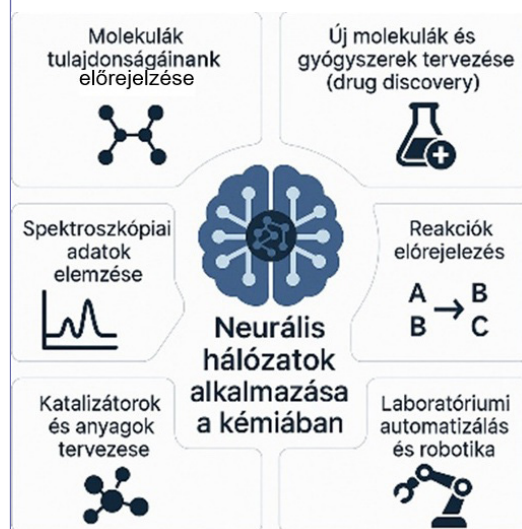
Szeretne vizuális összefoglalót vagy példákat a használt modellekre?

Kérdés:

Tudnál készíteni egy összefoglaló képet a kémiai alkalmazásokról?

ChatGPT:

Image created



A magazin jelen számában a mesterséges neurális hálózatok algoritmusával, a következő számokban ezek néhány kémiai alkalmazásával szeretnénk megismertetni Olvasóinkat.

Szerkesztőség



Mesterséges neurális hálózatok tanítása

A 2024-es fizikai Nobel-díjat John J. Hopfield (Princeton University, NJ, USA) és Geoffrey E. Hinton (University of Toronto, Canada) „olyan alapvető felfedezésekért és találmányokért, amelyek lehetővé teszik a gépi tanulást.” Vagyis a tudósok mesterséges neurális hálózatokat tanítottak a fizika segítségével.

Az idei két fizikai Nobel-díjas a fizika eszközeit használta olyan módszerek kifejlesztésére, amelyek a mai erőteljes gépi tanulás alapját képezik. John Hopfield létrehozott egy asszociatív memóriát, amely képes képeket és más típusú mintákat tárolni és rekonstruálni az adatokban. Geoffrey Hinton feltalált egy módszert, amely képes önállóan tulajdonságokat találni az adatokban, és így olyan feladatokat tud végrehajtani, mint például a képek bizonyos jellemző elemeinek azonosítása.

Amikor mesterséges intelligenciáról beszélünk, gyakran mesterséges neurális hálózatokat használó gépi tanulásra gondolunk.

Ezt a technológiát eredetileg az agy szerkezete ihlette. Egy mesterséges neurális hálózatban az agy neuronjait különböző értéket hordozó csomópontok képviselik. Ezek a csomópontok olyan kapcsolatokon keresztül befolyásolják

egymást, amelyek a szinapszisokhoz hasonlíthatók, és amelyek erősebbé vagy gyengébbé tehetők. A hálózatot például úgy oktatják, hogy erősebb kapcsolatokat alakítanak ki az



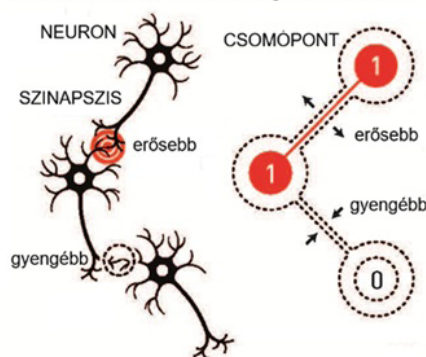
egyidejűleg magas értékekkel rendelkező csomópontok között.

Az agy neurális hálózata élő sejtekből, neuronokból épül fel, fejlett belső gépezettel. A neuronok jeleket küldhetnek egymásnak a szinapszisokon keresztül. Amikor megtanulunk dolgokat, egyes neuronok közötti kapcsolatok erősebbé válnak, míg mások gyengülnek. A mesterséges neurális hálózatok értékkel kódolt csomópontokból épülnek fel. A csomópontok egymáshoz kapcsolódnak, és amikor a hálózatot kiképzik, az egyidejűleg aktív csomópontok közötti kapcsolatok erősebbé válnak, különben gyengülnek.

A díjazottak az 1980-as évektől kezdve foglalkoztak a mesterséges neurális hálózatokkal.

John Hopfield feltalált egy a mintázatok mentésére és rekonstruálására alkalmas hálózatot. A hálózat csomópontjait úgy képzelhetjük el mind a pixeleket a képeken. A Hopfield hálózat az anyag mágnességének atomi spintől függő fizikai leírását hasznosítja. A hálózat egészének

Természetes és mesterséges neuronok



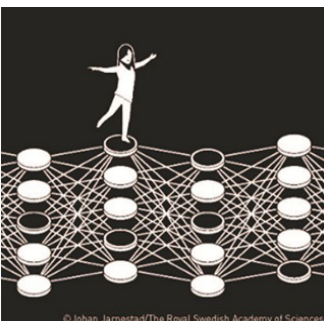
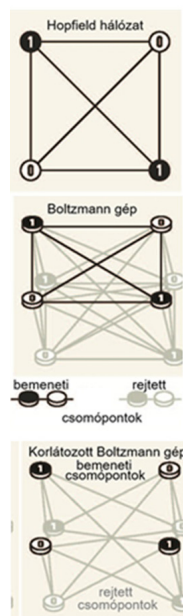
leírása hasonlít a spinrendszerek energiájának fizikai leírásához és a csomópontok közötti kapcsolatok értékeinek megkeresésével úgy képezik ki, hogy a mentett képek alacsony „energiája” legyenek. Amikor a Hopfield-hálózat torzított vagy hiányos képet kap, módszeresen végigmegy a csomópontokon, és frissíti azok értékeit, hogy a hálózat energiája csökkenjen. A hálózat így lépésről lépésre keresi meg azt a mentett képet, amelyik a legjobban hasonlít a betáplált, tökéletlen képhez.

Geoffrey Hinton a Hopfield-hálózatot alapján egy más módszert a Boltzmann gépet alkalmazó új hálózatot vezetett be. Ez, képes megtanulni, felismerni egy adott típusú adatban a jellemző elemeket. Hinton a statisztikus fizika eszközeit, a sok hasonló komponensből felépülő rendszerek tudományát használta fel. A gépet úgy képezik ki, hogy olyan példákat adnak neki, amelyek nagy valószínűséggel felmerülnek a gép

futtatása során. A Boltzmann-gép, használható képek osztályozására, vagy új képek létrehozására a betanított mintázat típusa alapján. Hinton munkája hozzájárult a gépi tanulás jelenlegi robbanásszerű fejlődésének elindulásához.

„A díjazottak munkájának már most is nagy haszna van. A fizikában, a mesterséges neurális hálózatokat, számos területen használjuk, például új, specifikus tulajdonságokkal rendelkező anyagok fejlesztésében” – mondta Ellen Moons, a Fizikai Nobel-bizottság elnöke.

Nobel-Bizottság sajtóközleményének fordítása



Mesterséges intelligencia, mesterséges neurális hálózatok

A mesterséges intelligencia (MI) a gépek azon képessége, amely alapján humán intelligenciát igénylő feladatokat hajtanak végre. Ilyen feladatok például a problémamegoldás, a tanulás, a beszéd, a szöveg, a nyelv megértése, a képek felismerése és az adatok alapján történő döntéshozatal. A mesterséges intelligencia hatalmas adathalmazokon működik, és matematikai algoritmusokat alkalmaz az elemzéshez, előrejelzéshez. Különböznek a hagyományos algoritmusoktól abban, hogy míg azok előre megírt szabályokat követnek, az MI-algoritmusok tanulni képesek adatokból.

A hagyományos programozás során minden szabályt kódolni kell, míg az MI, különösen a neurális hálók, képesek megtanulni és alkalmazni szabályokat anélkül, hogy azokat előre megkapták volna. Az MI a számítástechnikát olyan statisztikai modellekkel ötvözi, melyek lehetővé teszik az algoritmusnak, hogy tanuljon az adatok mintáiból, adatbányászata során felismerje az adatok jellemző mintázatait és javítsa képességeit, a nagyszámú adaton.

A mesterséges intelligencia rohamosan fejlődött az elmúlt évtizedek során és jelentősen befolyásolta a körülöttünk lévő világgal való kapcsolatainkat is. Naponta használjuk, bár sokszor nem is vagyunk ennek tudatában. Néhány valós példa a mesterséges intelligenciára:

INTELLIGENS ASSZISZTENSEK:

Ilyenek a Google és Microsoft Edge böngészők, vagy az olyan virtuális asszisztensek, mint például a Siri, az Alexa és a Google Asszisztens, melyek mesterséges intelligenciát használnak a hangutasítások megértésére és megválaszolására.

SPAM DETEKTOR

A Google Gmail szolgáltatása például MI algoritmusokat használ az e-mailek „spam” vagy „nem spam” kategóriába sorolására. Modelljük hatalmas mennyiségű adatból tanul, felismeri a mintákat, a kulcsszavakat és a feladó viselkedését, hogy pontos spamészlelést biztosítson.

AJÁNLÓ RENDSZEREK:

Az olyan platformok, mint a Netflix, a Spotify és a YouTube, mesterséges intelligenciát használnak szokásaink elemzésére, és az ízlésünkre szabott filmeket, dalokat vagy videókat javasolnak.

EGÉSZSÉGÜGYI ALKALMAZÁSOK:

A mesterséges intelligencia segíti az orvosi diagnosztikát, például a röntgenfelvételek, UH vagy az MRI-k értelmezését. Hordható eszközöket is működtet, amelyek figyelik az egészségügyi mutatókat és ajánlásokat adnak.

NAVIGÁCIÓ ÉS UTAZÁS:

Az olyan alkalmazások, mint a Google Térkép vagy a Waze, mesterséges

intelligenciára támaszkodnak a forgalmi minták elemzéséhez, az optimális útvonalak javaslatához és az utazási idők becsléséhez.

E-KERESKEDELEM:

Az online áruházak mesterséges intelligenciát használnak személyre szabott termékajánlásokhoz, készletkezeléshez és chatbotokhoz, hogy segítsék az ügyfeleket a kérdésekben.

BANKI ÉS PÉNZÜGYI:

A mesterséges intelligenciát a csalások felderítésében, az ügyfélszolgálati chatbotokban és a pénzügyi tervezési alkalmazásokban alkalmazzák a költsési szokások elemzésére és költségvetési stratégiák javaslatára.

KAMERA ÉS FÉNYKÉPEZÉS:

Az okostelefonok kamerái mesterséges intelligenciát használnak olyan funkciókhoz, mint az arcfelismerés, a jelenetoptimalizálás és a portréeffektusok.

NYELVI FORDÍTÁS:

Az olyan eszközök, mint a Google Fordító és a Microsoft Word mesterséges intelligenciát használnak a szöveg vagy beszéd feldolgozására, nyelvhelyességi ellenőrzésre és különböző nyelvekre történő lefordítására.

SZÖVEG- ÉS KÉPFELISMERÉS

Képről szöveg konvertálása nyomtatható szöveggé, dokumentummá. Ilyen például az Adobe Acrobat szoftver is.

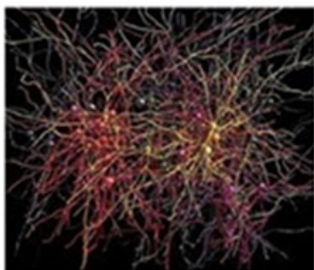
ÖNVEZETŐ AUTÓK:

Az önvezető autók mesterséges intelligenciát használnak a környezet

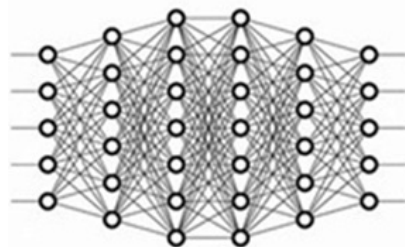


érzékelésre és a vezetési döntések meghozatalára.

A mesterséges intelligencia egyik gyakran használt típusát mesterséges neurális hálózatokon (MNH) valósítják meg. Az agy biológiai neuronjaihoz hasonló hálózatok «neuronok» vagy csomópontok hálózatai, amelyeket súlyozott kapcsolatok „szinapszisok” kötnék össze, amelyeket az adatok mintáin megtanulnak bizonyos feladatokat elvégezni.



Az agy neurális hálózata



Mesterséges neurális hálózat

Az emberi agyban a tanulás a biológiai neuronok összekapcsolt hálózatainak kölcsönhatásán keresztül történik. Az agy ideghálózata élő sejtekből, idegsejtekből épül fel. A szinapszisokon keresztül jeleket küldhetnek egymásnak. Amikor megtanulunk dolgokat, egyes idegsejtek közötti kapcsolatok erősödnek, míg mások gyengülnek. A mesterséges neurális hálózatok súlyokkal ellátott csomópontokból (neuronokból) épülnek fel. A csomópontok kapcsolódnak egymáshoz, és a hálózat betanításakor az egyidejűleg működő csomópontok közötti kapcsolatok megerősödnek, súlyaik növekednek, a többiek gyengülnek.

Bár a mesterséges neurális hálózatokon alapuló gépi tanulás lehetősége már a múlt század közepén felmerült. Sokoldalú

hatékony eszközzé válását, a mindennapi és fejlett tudományos alkalmazásokban egyaránt, -a nagy adatbázisok igénye miatt-, csak a számítógépek számítási sebességének növekedése, méretük csökkenése és az internet kapacitásának az utolsó három évtizedben lejátszódott rohamos fejlődése tette lehetővé. A modern processzorok és grafikus feldolgozó egységek képesek kezelni az MI algoritmusokhoz szükséges összetett számításokat. Az internetről, a közösségi médiából származó digitális adatok számának robbanásszerű növekedése biztosítja az MI-modellek betanításához szükséges hatalmas mennyiségű adatot.

Az internet, a világháló vagy egyszerűen a Web, összekapcsolt dokumentumok és erőforrások rendszere, amelyeket hipervivatkozások és webcímek URL-ek kötnék össze szerte a világon. Magán-, állami, tudományos, üzleti és kormányzati hálózatokból áll, amelyek helyi és globális hatókörűek, és amelyeket elektronikus, vezeték nélküli és optikai hálózati technológiák széles skálája köt össze.



A webkiszolgálók nagy teljesítményű számítógépek, amelyek webes tartalmakat, például szöveget, képeket, videókat, e-könyveket és egyéb multimédiás tartalmakat tárolnak. Számos webhely használ adatbázisokat nagy mennyiségű adat tárolására és kezelésére. Az adatbázisok olyan strukturált adatgyűjtemények, amelyek könnyen elérhetők, kezelhetők és frissíthetők. A webböngésző (az ügyfél) kéréseket küld a webkiszolgálóknak. A szerverek feldolgozzák ezeket a kéréseket, és visszaküldik a megfelelő weboldalakat vagy adatokat. A weboldalak HTML (HyperText Markup Language) nyelven íródnak és más oldalakra és forrásokra mutató hivatkozásokat tartalmaznak. A tartalomkézbesítés sebességének és megbízhatóságának javítása érdekében számos webhely tartalom kézbesítő

szervert hálózatot használ. Ezek a világ minden táján elosztott szerverek hálózatai (CDN, Content Delivery Network), amelyek tárolják a webes tartalmak másolatait, ami meggyorsítja az MI algoritmusok adatbányászatát.

A Web a hagyományos analóg információt, karaktert, számot, képet, konverzióval egységesen digitális formára alakított formában- bitekkel ábrázolva (1,0) tárolja.

KÉP ÉS SZÖVEG DIGITÁLIS TÁROLÁSA

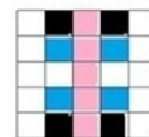
KÉP

A kép számítógépen való tárolásához a képet apró elemekre, úgynevezett képpontokra, pixelekre bontják. A pixel egy szint jelöl. A pixelek száma határozza meg a kép felbontását. Az 1024 x 798 képpont felbontású kép mérete 1024 x 798 képpont (817152 képpont). Minden pixelt bináris érték képvisel. A fekete-fehér kép 1 pixelje 1 bittel jellemezhető (0 fehér, 1 fekete).

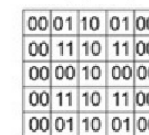
Minden bit megduplázza a rendelkezésre álló színek számát, például 2 bit 4 szint képes kódolni 00, 01, 10, 11, és n bit 2^n szint képes tárolni.



00 01 10 11
A négy szín



A kép pixeljei



A 25 pixeles kép bináris ábrázolása

SZÖVEG

A szövegek betűket, számokat, jeleket (pld. +, ?, @, pont, szóköz, etc.) tartalmaznak. Például a szöveg kódoláshoz használt kiterjesztett ASCII kódok 8 bitesek így összesen $2^8=256$ írásjelet kódolnak. (számok, betűk, jelek, utasítások).

A 01000001
b 01100010
| 01101100
a 01100001
k 01101011

Például egy 5 karakterből álló szavat 48 bitből álló bitalakzat tárolja.

Az adathalmazok egységes bináris tárolása, a gépi felismerést sokszor igen nagyméretű bitalakzatok azonosítása jelenti.

A GÉPI TANULÁS

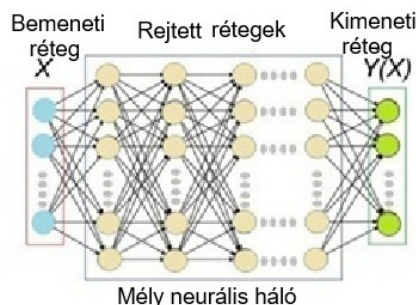
Többféle gépi tanulási algoritmus létezik. A különböző megközelítések mindegyike különböző típusú problémák megoldására alkalmas. Az egyik ilyen a felügyelt tanulás, amely során a gép a bemeneti adatok mellett helyes kimeneti adatokat is kap. Vagyis olyan adatokat is kap, amelyeket megjelölnek, megcímkéznek helyes adatként vagy válaszként. A hálózat tanul a címkézett példákban. Például az emailek vizsgálatakor a gép az adatok között több spam-ként megjelölt emailt is kap. A későbbiekben ezek tulajdonságainak felismerésével tudja eldönteni egy e-mailről, spam vagy sem. Ilyen példák a termékeket ajánló alkalmazások is, vagy a különböző napszakokban leggyorsabb útvonalat megjósoló forgalom-elemző alkalmazások, mint a Waze.

A felügyelet nélküli tanulási modellek nem kapnak mintákat a helyes eredményről. Az algoritmus tanulmányozza a bemeneti adatokat és maga azonosítja a jellemző mintázataikat és korrelációikat, az összes releváns, hozzáférhető adatot felhasználva. A felügyelet nélküli tanulás hasonlít ahhoz, ahogy az emberek megfigyelik környezetüket, majd később a tapasztalataik alapján tájékozódnak. Ahogy egyre több jellemzőt felismernek, egyre pontosabbá válik az a képességük a tájékozódásra. A gépek esetében a „tapasztalatot” a rendelkezésre bocsátott adatok mennyisége határozza meg. A felügyelet nélküli tanulási alkalmazások példái, az arcfelismerés, a génszekvencia elemzés, a piackutatás vagy a kiberbiztonság.

A következőkben a mesterséges intelligencia algoritmusai közül a neurális hálózatokon alapuló, -ezek közül is az egyszerűbbek- működésébe és a felügyelt gépi tanulásba szeretnénk betekintést

nyújtani. Mélyebben érdeklődő olvasóinknak ajánljuk a megjelölt irodalmat.

A MESTERSÉGES NEURÁLIS HÁLÓZATOK SZERKEZETE ÉS FUNKCIÓI



A mesterséges neurális hálózat (MNH) olyan csomópontok (neuronok) hálózata, amelyek az agy neuronjaihoz hasonlóan kapcsolódnak egymáshoz. Ezeket a hálózatokat különféle mesterséges intelligencia problémák megoldására használják, mint a modellezés és a mintafelismerés. A neurális hálózat egy olyan algoritmust használ, amely képes megtanulni megoldani a problémákat.

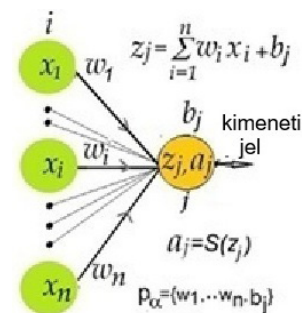
Az egyes rétegekben előforduló neuronok, vagyis a csomópontok száma a rétegekben és a rétegek száma is igen változatos lehet, attól függően, hogy milyen feladatokat oldanak meg. Az egyszerű neurális hálózatokban néhány száz vagy ezer neuron található, és egyszerűbb feladatokra használják őket, mint például alapvető minta-felismerési problémák.

A nagyobb méretű hálózatok (a mély neurális hálózatok) akár több millió vagy milliárd neuront is tartalmazhatnak. Az OpenAI GPT-3 modellje például 175 milliárd paraméterrel (vagyis súly és torzítás értékkel) rendelkezik, ami az egyik legnagyobb ismert hálózatot jelenti. Az olyan hálózatok, mint például a képfelismerésre vagy a beszédfelismerésre tervezett modellek, szintén több millió neuront tartalmaznak. Ezek a komplex feladatok jelentős számítási kapacitást és összetettséget igényelnek.

Az egyszerű MNH három különböző típusú rétegekből áll. Ezek a bemeneti adatokat, például képek vagy szöveg digitális mintázzait fogadó bemeneti réteg, a számításokat végző és a mintázatokat matematikai függvények segítségével észlelő rejtett rétegek és a kimeneti réteg, amelyen megjelenik az eredmény. Ez utóbbi felismer például egy arcot egy képen jellegzetes részletei alapján, vagy előállítja egy szöveg lefordított mondatát.

Minden csomópont kapcsolódik a következő réteg minden csomópontjához. Ezeken a kapcsolatokon (szinapszis) keresztül áramlik az információ. A kapcsolatokhoz súlyok (w_j) tartoznak, amelyek meghatározzák, hogy az egyik csomópont milyen erősen befolyásolja a másikat. Ezeknek a súlyoknak egy tréning közbeni beállításával, finomítja a hálózat képességét a pontos előrejelzések készítéséhez.

A jelek a hálózatban a bemeneti rétegből a kimeneti réteg felé haladnak (előrehaladás). Az előrehaladás során a következő réteg minden csomópontjához az előző réteg csomópontjai jeleinek súlyozott összege érkezik (z_j), melyhez még maga a csomópont is hozzájárulhat (b_j), melyet torzításnak neveznek. A b_j paraméter minden egyes csomópont számára egy az előző rétegtől nem függő további paraméterérték.

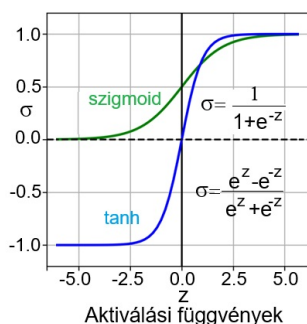


A rejtett rétegekben minden csomópont értékét, kimeneti jelét (a_j) az előző réteg csomópontjaitól érkező jelek súlyozott összegétől (z_j) függő aktiválási függvény állítja elő $a_j = S(z_j)$. Ez a kimeneti jel határozza meg a csomópont hozzájárulását a következő réteg



csomópontjainak aktivitásához. A j . csomópont a_j kimeneti jelét meghatározó paraméterek p_a a w_i súlyok és a b_j torzítás.

Gyakran használt aktiválási függvények a szigmoid (σ) és a tangens hiperbolikus ($\tanh$) függvények. A szigmoid és $\tanh$ aktivációs függvények fontos tulajdonsága, hogy normalizálják az egyes neuronok kimenetét. A neuronok kimenete 0 és 1 vagy -1 és 1 közé fog esni. A következőkben példáinkban a szigmoid aktiválási függvényt fogjuk alkalmazni.



Az aktiválási függvénynek fontos szerepe van, mert nemlinearitást vezet be a rendszerbe. Aktiválási függvények nélkül a neurális hálózat egyszerűen egy lineáris regressziós modell lenne, amely nem képes bonyolult mintákat kezelni és nem volna képes nem lineáris kapcsolatokat megtanulni az adatokból.

A FELÜGYELT GÉPI TANULÁS

Mivel a hálózatok sok réteggel és azokban sok csomóponttal rendelkezhetnek, számos p_a paraméterből álló összetett súlykészlet kell értékeket kapjon hálózat feladatához igazodó működéséhez.

$$P_a = \{w_1, \dots, w_n, b_1, \dots, b_m\}$$

Amikor a hálózat megtanul adott mintázatokat felismerni, az egyidejűleg aktív csomópontok közötti kapcsolatok erősebbé válnak. A tanuláshoz a neurális hálózatok az ellenkező irányba haladva, visszaterjedést (visszacsatolás) használnak, mely során iteratív módon módosítják a hálózat paramétereit, hogy megtanulja felismerni a kívánt $y = f(x)$ kapcsolatot, mintázatot. Ezt a folyamatot

a tanítás vagy másnéven a tréning vezérli, amely a neurális hálózatok tanulásának alapvető algoritmus. Ennek során a hálózat a bemeneti értékek (x) mellett, címkézve megkapja az elvárt kimeneti értékek (y_c) adatait is. A tanulás során minden egyes előrehaladások a becsült y és az elvárt y_c értékek közötti eltérést egy hibafüggvénnyel (H) (nevezik veszteség- vagy költségfüggvénynek is) méri az algoritmus. Gyakran használt hibafüggvények a négyzetes hiba és az abszolút hiba.

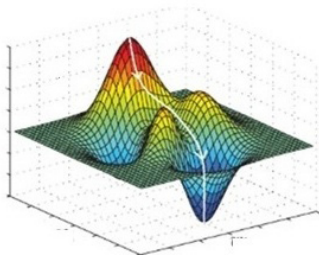
$$H_j = (y_c - a_j)^2$$

$$H_j = |y_c - a_j|$$

A visszaterjedés célja a hálózat paramétereinek $\{w_i, b_j\}$ beállítása a hibafüggvény minimalizálásával. Olyan tanulási, minimalizálási algoritmusra van szükség, amely lehetőség szerint úgy módosítja a hálózat paramétereit, hogy a hibafüggvény monoton haladjon minimuma felé a visszacsatolások során. Ehhez el kell döntse, milyen irányba változtassa a jelenlegi paramétereit, növelje vagy csökkentse értékeiket és mekkora legyen a változás mértéke, a lépések nagysága. A kérdések eldöntésére alkalmas módszer a gradiens csökkentés módszere.

A gradiens megadja egy függvény megváltozásának irányát (csökkenő, vagy növekvő) és sebességét változója értékének növekedésekor.

Az eljárás lényege, hogy az adott paramétereit a hibafüggvény gradiens alapján frissítjük, és az adott pontban mindig a legnagyobb csökkenést elérő irányban keresve haladunk a függvény minimuma felé. Szemléletesen ezt úgy képzelhetjük el, mint amikor a víz magaslatról lefolyik egy táj völgyei mentén.



A GRADIENS CSÖKKENTÉSÉNEK ALGORTMUSA

A hibafüggvény $H(x_i, p_k)$ adott p_k paramétertől függő gradiense ($\text{grad}H$), változásának sebessége, a függvény p_k paraméter szerinti deriváltja, vagy szemléletesen a függvényhez egy p_i pontban húzott érintőegyenes meredeksége, iránytangense $m = \text{tg}\alpha$, mind a két kérdésre választ ad számunkra.

A függvény változásának sebessége

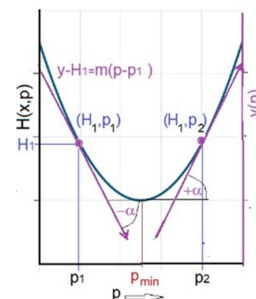
$$v_H(p_k) = \text{grad} H(p_k) = \frac{\delta H(p_k)}{\delta p_k}$$

A hibafüggvényt (p_1, H_1) pontban érintő egyenes egyenlete:

$$H - H_1 = m(p - p_1)$$

ahol az egyenes meredeksége m a gradiens függvény értéke a p_1 pontban. Az m előjele megmutatja merre csökken a hibafüggvény. Nagysága megmutatja, hogy milyen távol vagyunk a minimum ponttól.

Ha a gradiens értéke negatív adott pontban, (a hozzá húzott érintőegyenes iránytangense negatív), akkor a változóját pozitív irányba elmozdítva csökken a hibafüggvény. Pozitív gradiens esetén ellenkezőleg, a változót negatív irányba elmozdítva csökken a hibafüggvény. Tehát a gradiens előjele dönti el, hogy a minimumhoz közeledve növelni vagy csökkenteni kell-e az adott paramétert.



(p_1, H_1) pontban érintő egyenes egyenlete:

$$y - H_1 = m(p - p_1) \quad m = \text{grad} H(p_1)$$

$m < 0$: H csökken, ha p nő,

$m > 0$: H csökken, ha p csökken

Vagyis, ha az előreterjedési ciklust követően a visszaterjedés során a paramétereit úgy változtatjuk, hogy a

paraméter szerinti gradiens értékét kivonjuk a paraméter előző értékéből, akkor a hibafüggvény értéke a minimum felé fog elmozdulni. Mivel a minimumhoz közeledve a gradiens értéke egyre csökken, – a minimumpontban 0 lesz –, a paraméterváltozás Δp is egyre kisebb lesz közeledve a minimumhoz a további iterációs ciklusokban. A ciklusok számát a kívánt pontosság elérése határozza meg. Használunk ún. tanulási sebességet is (rátát) η , amelynek beállításával lassítani, vagy gyorsítani lehet a minimum felé közeledés sebességét. A függvény minimumhelyéhez tartozó $p_{\min}$ pontban húzott érintő párhuzamos lesz a p tengellyel $\text{grad}H = \text{tg}\alpha = 0$. A $p_{\min}$ paraméterérték, (vagy egy ehhez közeli érték) amit a hálózat az iterációs ciklusok végén beállít a hálózat minden paraméterének végső értékének.

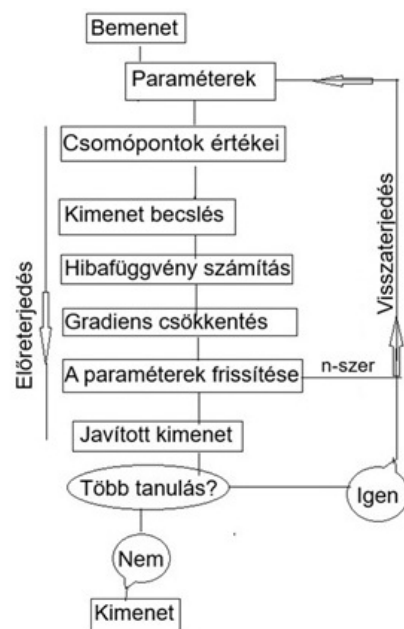
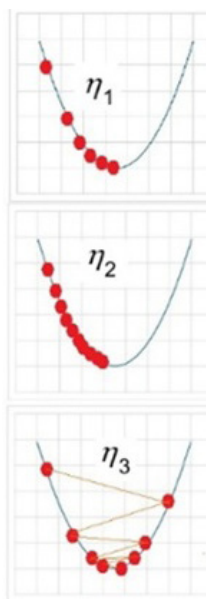
A hibafüggvény összetett függvény, $H(a(z(p)))$. Emiatt a p paraméterek szerinti gradiensek az egyes változók szerinti gradiensek szorzatai lesznek (láncszabály:

$$\text{láncszabály} \\ \text{grad}H(p_i) = \frac{\delta H(p_i)}{\delta a} * \frac{\delta a}{\delta z} * \frac{\delta z}{\delta p_i}$$

$$\Delta p_i = \text{grad}H(p_i) \\ p_i' = p_i - \eta \Delta p_i$$

A ráta értéke befolyásolja a minimum megközelítési módját is.

Összefoglalva az algoritmus lépései a következők: Első lépés a kezdeti paraméterek $\{w_i, b_j\}$ beállítása véletlenszerűen. Ezt követi a rejtett csomópontok értékeinek z_j , és kimeneti értékeinek a_j kiszámítása. Majd a kimeneti réteg csomópontjainak értékei és az elvárt címkézett adatok különbségei meghatározzák a hibafüggvényt és az összes paraméter szerinti gradienseit. Az algoritmus ezt követően módosítja az összes paramétert a H függvény paraméterek szerinti gradienseivel, a hibafüggvény értékét csökkentő irányba. Az új paraméterkészlettel ismételtén kiszámítja az új kimeneti hibafüggvényt. Majd a lépéseket, addig ismétli, míg a hibafüggvény eléri a minimumát.



Az adott neurális hálózat, a hibafüggvényt minimalizáló paraméterkészlettel ellátva, más bemeneti adatokban is felismeri a tréningjéhez megadott yc címkézett bináris mintázatokat.

Az alábbiakban részletesebben érdeklődő olvasóink számára egy egyszerű példán illusztráljuk a neurális hálózatok tanulási algoritmusát.

Pálinkás Gábor



IRODALOM

Sajó Zsolt Attila gépi tanulás

Sajó Zsolt Attila Gradiens-csökkentés

H. Bommana, Introduction to Neural Networks

What is a Neural Network? | GeeksforGeeks

Charles Zaitontz, Neural Network Basic Concepts



Tanítsunk alakzatot!

Az Excel munkalapon is megvalósítható példát Charles Zaiontz munkája alapján ismertetjük (Simple Neural Network Example)

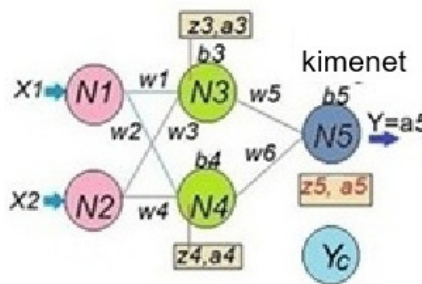
Tekintsük a következő egyszerű feladatot! Tanítsunk meg egy egyszerű neurális hálózatot, hogy felismerje a bemeneti adatok között a 01 vagy 10 két bites digitális mintázatokat. Ez lehet például fekete-fehér képeken egymás melletti pixel oszlopban fehér-fekete vagy fekete-fehér alakzat felismerése.

0	1
1	0

A lehetséges kombinációkat állítsuk elő 2 négy bites alakzattal X_1, X_2 . Az $f(X_1, X_2) = Y$ függvény, amelyre a hálózatot meg szeretnénk tanítani, $Y_k = 0$, ha $X_{1k} = X_{2k}$ és $Y_k = 1$ egyébként. Adjuk meg adatként az elvárt eredményt is, amelyet címkézzünk meg Y_c . Y_c komponenseinek értéke 1 ha teljesül a feltétel, 0 ha nem. Vegyünk fel egy hálózatot 5 csomóponttal.

k	X_{1k}	X_{2k}	Y_{ck}
1	0	0	0
2	0	1	1
3	1	0	1
4	1	1	0

Két bemeneti csomópont, N_1, N_2 , egy két csomópontos N_3, N_4 rejtett réteg és egy kimeneti csomópont N_5 . (A fenti igen egyszerű feladat logikai függvényekkel is megoldható. Neurális hálózattal történő megoldása a hálózatok működésének illusztrációját szolgálja. Bonyolultabb mintázatok felismeréséhez jóval összetettebb hálózatra van szükség.)



A jelek a bemeneti rétegből a kimeneti rétegbe kerülnek. A bemeneti réteg csomópontjaiból érkező jelek z_j , minden csomópontnak értéket adnak a_j . A rejtett és kimeneti rétegek csomópontjai hozzájárulást is tartalmaznak b_j . A hálózat tanításához használjuk a gradiens csökkentés módszerét, szigmoid aktivációs függvénnyel és a H hibafüggvény legyen a komponensei (k) négyzetes hibáinak átlaga. A hálózatnak 9 paraméterre van $p_a = \{w_i (i=1,6), b_j (j=3-5)\}$. A rejtett csomópontok értékei a_j , $j=3-5$ és a hibafüggvény értéke is 4 bitesek.

z_j	a_j
z_{j1}	a_{j1}
z_{j2}	a_{j2}
z_{j3}	a_{j3}
z_{j4}	a_{j4}

$j=3-5$

A HÁLÓZAT TANULÁSI ALGORITMUSA

Előreterjedés

A rejtett és kimeneti csomópontok értékeinek komponensei:

$$\begin{aligned} z_{3k} &= x_{1k}w_1 + x_{2k}w_3 + b_3 \\ z_{4k} &= x_{1k}w_2 + x_{2k}w_4 + b_4 \\ z_{5k} &= a_{3k}w_5 + a_{4k}w_6 + b_5 \\ a_{jk} &= \frac{1}{1 + e^{-z_{jk}}}, \quad j=3-5 \end{aligned}$$

A GRADIENS CSÖKKENTÉS A VISSZATERJEDÉS SORÁN

A H hibafüggvény, melynek a paraméterek szerinti minimumait fogjuk keresni, legyen komponenseinek átlagos értéke (átlagos hibanégyzet). A hibafüggvény komponensei H_k , $k=1-4$ a címkézett elvárt eredmény y_c és a kimeneti csomópont komponensei különbségeinek a négyzetei,

$$H = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 H_k$$

$$H_k = (y_{ck} - a_{5k})^2$$

A HIBAFÜGGVÉNY PARAMÉTEREK SZERINTI GRADIENSE:

$$\begin{aligned} \text{grad } H(p_a) &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 \text{grad } H_k(p_a) \\ \text{grad } H_k(p_a) &= \frac{\partial H_k}{\partial a_{jk}} \frac{\partial a_{jk}}{\partial z_{jk}} \frac{\partial z_{jk}}{\partial p_a} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta w_i &= \text{grad } H(w_i) \\ \Delta b_j &= \text{grad } H(b_j) \\ w_i' &= w_i + \eta \Delta w_i, \quad (i=1-6) \\ b_j' &= b_j + \eta \Delta b_j, \quad (j=3-5) \end{aligned}$$

Mivel a hibafüggvény összetett függvény a paraméterek szerinti gradienseinek komponenseit $\text{grad } H_k(p_a)$ láncszabály határozza meg.

Például a Δw_4 részletesen:

$$\begin{aligned} \Delta w_4 &= \text{grad } H(w_4) \\ &= \frac{1}{4} \sum_{k=1}^4 -2(y_{ck} - a_{4k}) * a_{4k}(1 - a_{4k}) * x_{2k} \\ w_4' &= w_4 + \eta \Delta w_4 \end{aligned}$$

A rejtett és kimeneti rétegek csomópontjainak értékei szigmoid függvények.

A szigmoid függvény gradiense

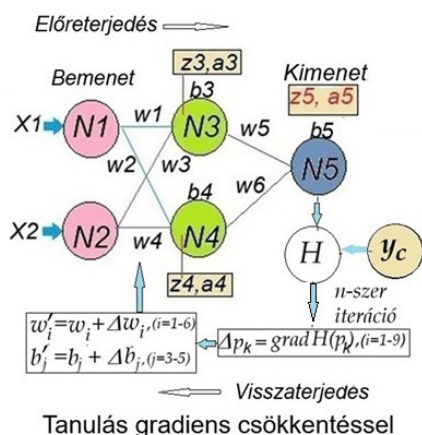
$$\frac{\partial \sigma(z)}{\partial z} = \sigma(z)(1 - \sigma(z))$$

EGY EGYSZERŰ NEURÁLIS HÁLÓZAT PÉLDÁJA

A REJTETT ÉS KIMENETI RÉTEG KIKÉPZÉSE

A $p' = p + \Delta p$ iterációt az összes p paraméterre n -szer megismételve kapjuk meg a hálózat azon paramétereinek értékeit melyekkel képes felismerni a tréninghez megadott címkézett bináris mintázatot. Az n értéke az elérni kívánt pontosságtól függ.

Az Excel munkalapon megvalósított algoritmus letölthető az alábbi honlapról Neural-Network-Examples.xlsx (Charles Zaiontz).



Az algoritmus 165 iterációs lépést követően 90% biztonsággal felismeri a megadott címkézett y_c feltételt.

pontosság 90%

iteráció szám 165

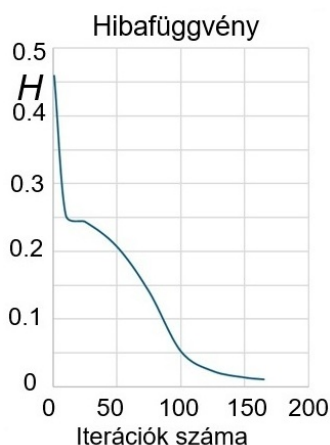
η ráta =5

ni	H
1	0.459
165	0.011

$x_1 \ x_2 \ y_c \ y = a_5$

0	0	0	0.120
1	0	1	0.902
0	1	1	0.900
1	1	0	0.095

Az alábbi ábrák a hibafüggvény és a paraméterek változását az iterációs lépések előrehaladtával illusztrálják.



A 165. iterációt követően kialakult paraméterekkel megvalósított hálózat működése tesztelhető az alábbi letölthető néhány soros Excel munkalapon.

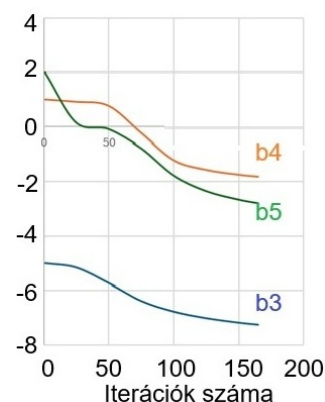
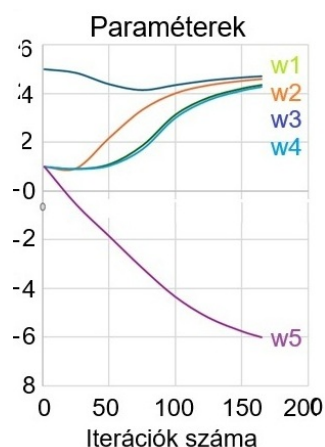
Pálíknás Gábor



HIVATKOZÁSOK:

Neural-Network-Examples.xlsx

Drew Clark Neural network in Excel example



0	1
1	0

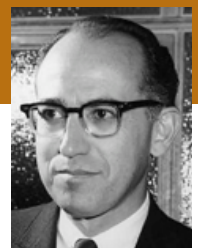
[kattints ide](#)

A hálózat, amely megtanulta felismerni a 01 és 10 mintázatot

Ha változtatjuk a zöld alapú bemeneti értékeket a kék alapú kimenet felismeri a mintázatot

pontosság % ≥ 90

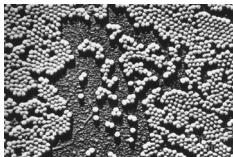
	Bemenet		Kimenet
neve	x1	x2	
B	0	0	.
C	1	0	C
G	0	1	G
E	1	1	.
T	0	1	T
U	1	0	U
W	0	0	.
H	1	0	H



Harc a polióvírus ellen

Három nevet mindenképpen meg kell említeni a fertőző gyermekbénulás leküzdésében. Albert Sabin megfejtette a fertőzés terjedésének titkait, és kifejlesztette a szájon át alkalmazható oltóanyagot. John Enders Nobel-díjas tudós már kémcsőben tudta szaporítani a polióvírust. Viszont Jonas Salk volt az, aki a történelmi áttörést véghezvitte: elkészítette az első oltást, ami megvédett a járvány terjedése ellen.

A polióvírus a Picornaviridae víruscsaládba tartozik, és a járványos



gyermekbénulás oka. Három típusa van (PV-1, PV-2, PV-3), és a leggyakrabban a széklet-orális úton terjed. A vírus egyszálú RNS genomból áll, amely egy fehérjekapszidba van zárva. A vírus az emésztőrendszerben szaporodik, de súlyos esetekben elérheti a központi idegrendszert, bénulást okozva.

A világméretű oltási programok jelentősen csökkentették a polio előfordulását. A PV-2 és PV-3 vadvírusok már eltűntek, de a PV-1 még mindig előfordul Pakisztánban és Afganisztánban. Az egyetlen hatékony védekezés ellene a polio elleni védőoltás, amely többszöri beadással élethosszig tartó védeltséget biztosít.

Jonas Salk 1914. október 28-án született New Yorkban. Dora Press és Daniel Salk gyári munkás három gyermeke közül ő volt a legidősebb. Az okos és szorgalmas fiú ortodox zsidó közegben nőtt fel. Középiskolás a Townsend Harris Gimnáziumban volt, amit különleges képességű tanulóknak tartottak fenn, és ott érettségizett tizenöt évesen. Ezután a New York-i City College-ban folytatta tanulmányait, ahol 1933-ban végzett. Salkot eleinte nem érintette meg a természettudományok szeretete, ügyvédnek készült. Pénzszerzésképpen laboratóriumi asszisztensként dolgozott, és csak érdeklődésből néhány tanfolyamon részt vett. Utána már megváltozott a világlképe. Sokféle

ösztöndíj segítségével 1939-ben ledoktorált a New York-i Orvostudományi Egyetemen. 1942-ig segédorvos volt a Mount Sinai Kórházban, ezután ifjú Thomas Francis virológus csapatában dolgozott a Michigani Egyetem Közegészségügyi Intézetében.

Salk első munkái az influenza elleni védőoltások voltak. Ezt a projektet a hadsereg finanszírozta. Salk munkája fontos volt a vakcina kifejlesztésében. Az 1940-es évek végére már híres virológusnak és tehetséges ifjú kutatónak tekintették.

FELVETTE A KÉSZTŰT A GYERMEKBÉNULÁSSAL SZEMBE

A második világháború után Salk elkezdett a gyermekbénulással foglalkozni, mert a gyermekbénulás egyre gyakoribb lett. A betegséggel kapcsolatos tudásanyag lassan, de biztosan bővült. Tudták, hogy a fertőzés az emésztőrendszeren keresztül jut a véráramba. Főleg gyermekeknél lázat, fejfájást, rosszulletet és egyéb tünetet okozott. Ezek rövid idő elteltével elmúltak. A betegséget elszenvedők csaknem 2 százalékában a vírus rátelepedett az agyhártyára, kárt téve azon sejtekben, amik a perifériás idegeket vagy egyéb életfunkciókat vezérelnek. A hatás pedig: különböző mértékű bénulás vagy halál. Azon megbetegedettek, akik nem haltak meg, sokszor nyomorékok lettek, vagy úgynevezett vastüdőben voltak kénytelenek leélni az életüket.

1947-ben Salk a Pittsburgi Orvosi Egyetem docense és a Víruskutató

Laboratórium igazgatója lett. Nem sokkal ezután megkapta a Nemzeti Gyermekbénulás Alapítvány támogatását. Kutatásainak kezdetén a vírus tipologizálását végezte, három változatot különböztetett meg, ezeket Brünhildének, Lansingnak és Leonak □keresztelte□.

ROHAMOSAN TERJEDT A KÓR

A polióvírusnak különös története van. Egyes emlékek azt igazolják, hogy már az ókori Egyiptomban is létezett. Igaz, hogy az első írásos emlék a Svédországon végigsöprő 1887-es járványról szól. Az Egyesült Államokban 1894-ben jelent meg. 1916-ban az esetek száma megnégyszereződött, elérte a huszonhétezeret, amiből hatezer halállal végződött. Kiderült, hogy a vírus a beleken át fertőz. Ebből következően a higiénia kiemelten fontos lett. Évszázadokon át a legtöbb gyermek az anyatejes táplálás révén vagy kisgyermekként találkozott a vírussal. Ekkor természetesen enyhébb volt a lefolyás. Az orvostársadalom félrevezető tájékoztatása, a szülők mesterséges tápszerek irányába történő „kalauzolása” legyengítette az immunitást, így a nagyobb gyermekek és fiatal felnőttek védtelenül maradtak a szervezetbe kerülő vírus ellen.

1949-ben John Enders felfedezte, hogyan terjed a mumpsz vírus állati szövetekben. Salk használta ezt a technikát a gyermekbénulásnál, majomvesében tenyésztette ki a vírus három formáját. Ezek után a Johns Hopkins Egyetemen azt tapasztalták, hogy az élő vírus antitest termelésre serkenti a kísérletekbe vont majmokat. Salkban ez ültette el a gondolatot, hogy a gyermekbénulás elleni védőoltást inaktivált vírusból lenne jó elkészítenie. Az az elképzelés, hogy a legyengített mikrobák hatásosabb védelmet adnak az elpusztított kórokozóknál, nem huszadik századi ötlet.

KÍSÉRLETI OLTÁS A CSALÁDNAK

A Nemzeti Gyermekbénulás Alapítvány szponzorálásával Salk kifejlesztette a vakcinát. Mindhárom, formaldehiddel elölt vírustípust felhasználva, ásványi olajban krémes anyagot állított elő. A kísérlet első fázisa az volt, hogy az elölt vírust majmokon tesztelte. Aztán 1952-ben következett a klinikai teszt 100 felnőtt és gyermekén. A bizalom növelése érdekében beoltotta önmagát, feleségét és a gyermekeit is. 1953-ban ötezer gyermekén próbálták ki az oltást. 1954-ben kétszázezer gyermek részesült a védőoltásban. 1955. április 12.-én Salk bejelentette, a védőoltás biztonságos és hatékony. Néhány éven belül kétszázmillió ember kapta meg a védőoltást. Az új gyermekbénulás bejelentése jelentősen lecsökkent.

Jonas Salk egycsapásra híres lett. Életéről filmet készítettek Hollywoodban Marlon Brando főszereplésével, a címe: Jonas Salk története. Salkot családjával együtt meghívták a fehér Házba, ahol Eisenhower elnök fogadta. Könnyes szemmel az „emberiség jötevőjének” nevezte, hiszen neki is kis unokái voltak akkor. A gyógyszergyárak felajánlották Salknak, hogy nagyon gazdag emberré teszik.

NEHEZEN JÖTT ELISMERTSÉG

Salkból nem vált az elit réteg kedvence, nem választották a Tudományos Akadémia tagjává, nem jelölték Nobel-díjra, és még egyféle antiszemitizmust is tapasztalt. Még az oltások megkezdése előtt Albert Sabin

ellenezte az elölt vírus használatát. Vetélkedésük csúcspontja 1952-ben volt, amikor Sabin meg akarta tiltani a tömeges kísérletet.



JENNER ÉS VAKCINA-INNOVÁCIÓ

Edward Jenner (1749-1823) is kísérletezett vírusokkal. A feketehimlő halálos betegség volt. Jenner érdeklődését felkeltette egy tehenészlány megjegyzése, miszerint ő már nem kaphatja el a himlőt, hiszen átesett a tehenéhimlőn. Ez vette rá Jennert, hogy ezen a téren kísérletezésbe kezdjen. Úgy döntött, hogy a megfigyeléseit teszteli, és egy



tudomány iránt vállalkozó kedvű James Phipps nevű fiúnak napokig adagolta a Blossom (Virág) nevű tehenéhimlőhólyagjaiból származó váladékot, azaz tehenéhimlővel fertőzte meg a fiút, aki sikeresen átesett a betegségen. És később a feketehimlővel megfertőzve nem lett beteg. Így bebizonyosodott a vakcinázás jelentősége, amelyet azóta is alkalmaznak a fertőzések elleni védelemben. A tehenéhimlő latin neve vacca, innen ered a vakcinázás elnevezés. A kifejezést először Louis Pasteur használta Jenner iránti tiszteletből.

1959-ben Albert Sabin kifejlesztette a szájon át szedhető védőoltását, a Szovjetunióban is hozzáférhetővé tette. Sabin vakcinája népszerűbb lett, mint a Salk féle vakcina.

Salkot későbbi pályája folyamán a nevét viselő intézet tette híressé. 1963-ban La Jollában adták át a Salk Biológiai Kutatások Intézetét. Az intézetben híres tudósok végezték kutatásaikat, rövid ideig Szilárd Leó is az intézet lakója és

munkatársa volt. Salk természetesen itt folytatta a sclerosis multiplexre és a rákra irányuló kutatásait. A hetvenes évek első felében néhány filozófiai ihletésű könyvet publikált: A kibontakozó ember, A valóság anatómiája, A legokosabb túlélése és a Hogyan hasonlítsunk

egy angyalra. Élete utolsó éveiben megpróbált védőoltást kifejleszteni az emberi immunhiányos betegséget okozó (HIV) vírus ellen.

Az orvostudomány egyik hőse – Salk – megszállottan dolgozott és rajongott a családjáért. Donna Lindsayt vette feleségül 1939-ben az egyetem befejezése után, 1968-ban elváltak, de utána is barátok maradtak. 1970-ben Picasso egykori szeretőjét, Françoise Gilot vette feleségül. Jonas Salk 1995. június 24-én hunyt el szívészélhűdésben. Fiai követték az orvosi pályán.

Ménész András



IRODALOM

Bankston, John: Jonas Salk: Conquering Polio. Minneapolis, Minnesota, Lerner Publications 2002, pp. 33-37

Brown, Lester: World on the Edge. W.W. Norton 2011, p. 92.

Bookchin, Debbie and

Schumacker, Jim: The Virus and the Vaccine. Macmillan 2004.

Clark, Evert: Salk Receives Thanks of Nation For Triumph of Polio Vaccine. The New York Times. April 13. 1965.

Cohan, Jon: Shots in the Dark: The Wayward Search for an AIDS Vaccine. New York, W.W. Norton & Co. 2001.



Borsmenta, a 2024-es év gyógynövénye

A borsmenta (*Mentha piperita*) egy évelő, világszerte termesztett jellegzetes ízű és aromás illatú, légyszárú évelő aromás cserje, amely az ajakosvirágúak (rozmaring és a levendula) családján belül a *Mentha* nemzetségbe tartozik. A menta nemzetségbe 24 faj és számos hibrid tartozik. A borsmenta egy hibrid, a vízimenta (*Mentha aquatica*) és a fodormenta (*Mentha spicata*) keresztezése. Eredeti előfordulási területe az egész Eurázsia.

A különböző mentafajok őshonosok Afrika északi keleti és déli részein; Ausztrália keleti kétharmadában és Észak-Amerika legnagyobb részén is megteremnek. A nemzetség két legismertebb tagja a borsmenta és a fodormenta. A borsmenta illóolaja mentolban jóval gazdagabb, ezért erősebb, kissé csípős, mentolos íze van. A növény tavasszal és nyáron növekszik, levelei menta illatúak és, mentol tartalmú illóolajban gazdagok. Magassága 40–90 cm. A levelek lemezei lándzsa vagy nyújtott ellipszis alakúak, fűrészes szélűek. A levél egy része gyakran ibolyás színű. Virágai lila színűek, késő nyáron nyílnak.

A hagyományos ételízesítőként való felhasználása mellett a borsmenta a népi gyógyászat egyik kedvelt gyógynövénye, amelyet teakeverékek, és szeszes kivonatok formájában használják ma is. Hasznosnak tartják **emésztési problémák enyhítésére**, gyomor-, bél-, légúti- és szájüregi fertőtlenítésre, **görcsoldásra és fájdalomcsillapításra**,

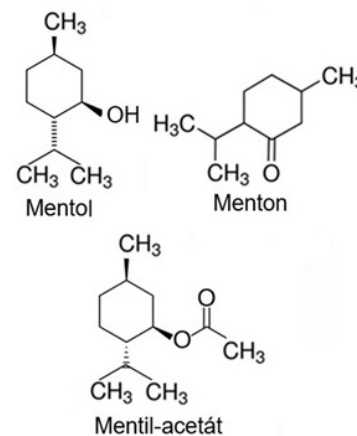


stresszoldásra, légúttisztításra, bőrviszketés csökkentésére, de használják fűszerként is és illatosításra és tisztításra is. Iparilag előállított illóolaját a rágógumi-gyártásban, a gyógyszerészetben, illetve a kozmetika- és az élelmiszeriparban hasznosítják. Az ókori görögök az olajat balzsamozáshoz használták.

A növény a gyógyhatását főleg aromás illóolajának köszönheti. A tudományos vizsgálatok kimutatták a növény több kémiai összetevőjének antioxidáns, antimikrobiális, vírusellenes, gyulladáscsökkentő, sugárvédő hatását. és antidiabetikus aktivitását is.

KÉMIAI ÖSSZETEVŐI

A borsmenta különböző részeiből kinyerhető illóolajokban monoterpenoidokat és számos flavonoidot, fenolos savakat, lignánokat, sztilbéneket izoláltak. A monoterpenoidok közül a legjelentősebb a **mentol** (kb. 40



%) és a **menton**. A terpének olyan szénhidrogének, amelyek több izoprén egységből állnak, míg a terpenoidok módosított terpének. Egyéb vegyületek közé tartozik az olaj körülbelül **3-5% -át kitevő mentil-acetát a mentol észtere**, amely szintén mentolos aromájú.

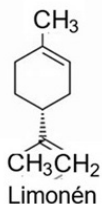
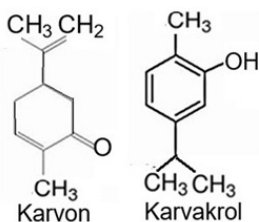
Ezenkívül a borsmenta más bioaktív összetevőket is tartalmaz, mint például a

karvon, a karvakrol a limonén és fenolos savak, mint a rozmarinsav és kávésav, amelyek szintén hozzájárulnak gyógyászati és aromás tulajdonságaihoz.

Az illóolajat a frissen szedett virágrügyes hajtásokból és leveleiből desztillálással vagy alkoholos kivonatokkal nyerik ki a növényből.

A rokonvegyület a fodormenta (*Mentha spicata*) is sokféle monoterpént, fenolos vegyületeket és flavonoidokat, rozmarinsavat és lignánokat is tartalmaz. A fodormenta illóolaj legdominánsabb alkotóeleme azonban a **karvon (65-76%)**, amely a fodormenta jellegzetes aromáját adja. A **karvon** erős gátló hatást gyakorol az Alzheimer-kórra és az elhízáshoz kapcsolódó enzimekre, valamint antimikrobiális tulajdonságokkal is rendelkezik.

A NÖVÉNY GYÓGYHATÁSA



A borsmenta kivonatok számos orvosi alkalmazással rendelkeznek. Segíthet a gyomorpanaszok, puffadás és irritábilis bél szindróma tüneteinek enyhítésében. A mentol tartalmának köszönhetően lazítja az izmokat és csökkenti a fájdalmat. Segíthet a **légzőszervi panaszok enyhítésében és antivirális és antibakteriális hatása miatt** természetes fertőtlenítőként működik, segítve a szervezet védekezését.

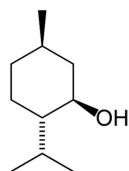
Az irritábilis bél szindróma egy funkcionális bélbetegség, ami azt jelenti, hogy a bélrendszernek valamilyen működésbeli zavara van, de szervi probléma nem áll fenn

A borsmenta különböző vizsgálatokban potenciális antidiabetikus hatásokat is mutatott. A kutatások szerint a borsmenta kivonata antioxidáns, gyulladáscsökkentő és anyagszere-moduláló tulajdonságai révén csökkentheti a vércukorszintet, valamint javíthatja a lipidprofil diabéteszes állapotban. cukorbeteg modelljeiben. Egy vizsgálatban diabéteszes Wistar patkányok utódainak glikémiáját és lipidprofilját elemezték, és azt találták, hogy a borsmentával kezelt cukorbeteg anyák utódai alacsonyabb glükóz-, koleszterin-, LDL- és trigliceridszinttel rendelkeztek, miközben a HDL-szintjük emelkedett. Ez arra utal, hogy a borsmenta potenciálisan segíthet a cukorbetegség és annak szövődményeinek megelőzésében, javíthatja az inzulinérzékenységet, elősegítve a sejtek glükózfelvételét.

A borsmenta antimikrobiális hatását a koronavírusban (Covid-19) is kimutatták. A borsmenta segít megelőzni a koronavírus és a gazdaszervezet közötti kölcsönhatást azáltal, hogy gátolja a vírusos tüskefehérje receptor komplexének és a gazdaszervezet ACE2 receptorainak képződését.

A MENTOL

A borsmenta (*Mentha × piperita*) biológiai hatásaiért elsősorban a növény jellegzetes hűsítő érzését és aromáját is **eredményező mentol** és a **menton** felelős. Természetesen ezen kívül más vegyületek is, mint például a flavonoidok is hozzájárulnak a borsmenta **antimikrobiális,**



gyulladáscsökkentő és antioxidáns tulajdonságaihoz. A mentol négy optikai izomerpárként fordul elő. A természetben az l-mentol található. Általában ezt a formát használják, mert nagyobb hűtési tulajdonságokkal rendelkezik, mint a többi mentol izomer. Vízben alig oldódik, de etanol, dietil-éter és kloroform is jól oldja. Teát, tisztított leveleit kissé lehűlt felforralt vízben 10-15 percig áztatva lehet készíteni.

Érdekes a Menta nemzetség tagjainak hűsítő hatása. Ezt azáltal érik el, hogy aktiválják az ún. hidegérzékeny transziens receptor potenciális kationcsatornát (TRPM8), amely az ionok sejtmembránokon keresztüli mozgataért felelős. A TRPM8 általában hideg hatására növeli az intracelluláris kalciumot és mobilizálja a kalcium fluxust a csatornákon keresztül, ami hideg válaszjeleket kelt az alkalmazás helyén. Ez a mechanizmus hasonló ahhoz, ahogyan a kapszaicin a hőérzékelő receptorokat stimulálja, csak nem meleg-, hanem hideghatást vált ki. A kiváltott hűsítő érzet fokozhatja a különféle gyógyszerek bőrbehatolását is. Ezért egy külsőleg használható készítmény, amely mentolt tartalmaz, hűsítő hatása, valamint behatolást fokozó hatása miatt, gyulladáscsökkentő fájdalomcsillapítóval kombinálva szinergikus hatást eredményezhet.

A mentol a vaníliával és a citrusfélékkel együtt az egyik legfontosabb ízesítő adalékanyag. Számos fogyasztási cikk, köztük gyógyszerek, kozmetikumok és növényvédő szerek, cukorkák, rágógumik, likőrök, fogkrémek, samponok és szappanok összetevője.

A MENTOL HATÁSA

A mentol fájdalomcsillapító, izomlazító és görcsoldó, antibakteriális és antivirális hatását, továbbá vérkeringést fokozó, és antidiabetikus gyógyhatásait, különböző in vitro és in vivo vizsgálatok dokumentálták.

A tanulmányok szerint a mentol fájdalomcsillapításának egyik legfontosabb mechanizmusa, szintén a hidegérzetért felelős **TRPM8 ioncsatornák aktiválása**. A folyamat, csökkenti a fájdalomérzetet is azáltal, hogy elnyomja a fájdalomérző receptorok aktivitását. Emellett a mentol **gyenge, de szelektív k-opioid receptor agonista**, ami azt jelenti, hogy képes befolyásolni a fájdalomérzetet az idegrendszerben. Ez a hatás különösen hasznos lehet helyi fájdalomcsillapításra, például izomfájdalmak vagy gyulladásos állapotok esetén. Az **izomlazító és**



görcsoldó hatás mechanizmusa a nátrium csatornák blokkolása, az idegi aktivitás csökkentése. A vérkeringés fokozását az oxigén és a tápanyagok érintett területre jutásának serkentésével éri el. Az antibakteriális aktivitásának oka a bakteriális enzimek és fehérjék anyagszere folyamatainak megzavarása és a molekula által termelt reaktív oxigén, amely károsítja a baktériumsejteket és megakadályozza a baktériumok biofilm képzését, melyek ezáltal érzékenyebbé válnak az antibiotikumokra. A mentol vírusellenes aktivitását a kutatók a gazdasejtekhez való kapcsolódási képességük csökkentésével és a vírus RNS- és DNS-szintézisének csökkentésével, a replikáció gátlásával magyarázzák. A mentol antidiabetikus hatását vizsgáló kutatások azt valószínűsítik, hogy a mentol segíthet szabályozni a glükóz homeosztázisát. Jelentősen csökkenti a vércukorszintet cukorbeteg állatmodelljeiben. Segít megelőzni a β -sejtes apoptózist, amely kulcsfontosságú az inzulintermeléshez. Modulálja a glükóz metabolikus enzimeket, javítva az általános glükózfelhasználást. Gyulladáscsökkentő

és antioxidáns tulajdonságai is hozzájárulnak a cukorbetegséggel kapcsolatos szövődmények csökkentéséhez.

A mentolról kiderült, hogy **rákellenes tulajdonságokkal** is rendelkezik, így ígéretes jelölt a rák kezelésére is. A kutatások azt valószínűsítik, hogy a mentol gátolja a rákos sejtek növekedését, programozott sejthalált vált ki a rákos sejtekben, csökkentve a daganatok növekedését. Rontja a rákos sejtek osztódását és megzavarja a daganatokat ellátó új erek képződését, korlátozva azok növekedését. A mentol fokozott rákellenes aktivitást mutatott, ha bizonyos kemoterápiás gyógyszerekkel, például **paklitaxellel és vinkrisztinnel** kombinálva alkalmazták. Bár a mentol ígéretesnek tűnik rákellenes szerként, további kutatásokra van szükség mechanizmusainak és lehetséges klinikai alkalmazásainak teljes megértéséhez.

BIZTONSÁG

A borsmenta fogyasztása általában biztonságos, ha megfelelő dózisban fogyasztják. In vivo vizsgálatok alacsony toxicitási potenciált mutattak ki

emberben. A túlzott fogyasztás potenciálisan mellékhatásokat okozhat. Nagy mennyiségű bevitel gyomorégést és reflux betegséget okozhat. Fontos figyelembe venni azonban, hogy bizonyos esetekben, például kisgyermekeknél vagy epilepsziás betegeknél nem ajánlott a fogyasztása.

A borsmentát 2024-ben az év gyógynövényének választott a Magyar Gyógyszertudományi Társaság Gyógynövény Szakosztálya.

Kőszegi Lídia



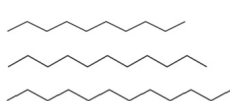
IRODALOM

- Muruganathan U. et al., *Biomed. & Pharmacoth.*, 92 229 (2017)
- Hui Zhao et al., *Biomed. & Pharmacoth.* 154 113559 (2022)0
- G. Mahendran, L. Rahman, *Phytotherapy Research.* 34 2088 (2020)
- Guy P.P. Kamatou et al., *Phytochemistry* 96 15 (2013)
- Yijia Zhao et al., *Front. Pharmacol.*, 14 1148790 (2023)
- Sanja Krstic et al., *Foods* 14 1182 (2025)
- Saleh A. Almatroodi et al., *Pharmacogn. J.* 13(3) 822 (2021)

Marsi minták nyomában

A Curiosity marsjáró minilaboratóriumában a kutatók újraelemeztek egy a robot által korábban fúrt üledékes talajmintát, és kimutatták a dekán, az undekán és a dodekán molekulák jelenlétét a mintában. A 10, 11 és 12 szénatomból álló vegyületek, lehetnek a mintában megőrzött zsírsavak bomlástermékei, de lehetnek abiotikus eredetűek is. A zsírsavak azon szerves molekulák közé tartoznak, amelyek a Földön az élet kémiai építőkövei.

A Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS) folyóiratban Caroline Freissinet és nemzetközi kutatócsoportjának munkatársai ez évi tanulmányban hosszú láncú szerves molekulák – dekán, undekán és dodekán – észleléséről számoltak be a NASA Curiosity marsjáró által elemzett marsi üledékes kőzetben. A 10-12 szénatomot tartalmazó alkánok a Marson eddig azonosított legnagyobb szerves vegyületek.



A mintákat a marsjáró a Gale-kráterben található Cumberland fúrási helyről nyerte 2013. június elején, egy olyan területről, amely körülbelül 3,7 milliárd évvel ezelőtt egy tónak adott otthont. Azt a mintát, amely a detektált alkánokat

tartalmazta, sokkal később elemezték egy módosított analízissel, amelyet a nagyobb szerves molekulák kimutatására optimalizáltak. Az agyagásványok jelenléte ebben a régióban jelentős. Az agyagos

kőzetekről ismert, hogy a szerves molekulákat réteges szerkezetükbe zárva megőrzik.

A molekuláknak a kimutatására a Curiosity rover kémiai analízisre (SAM) alkalmas műszere kétféle fűtési eljárást alkalmazott. Kezdetben a mintát 475 °C-ra melegítették, hogy lebontsák a perklorátokat és eltávolítsák az oxigént, amely oxidálhatja a szerves vegyületeket. Ezt követően a mintát 850 °C-ra melegítették, lehetővé téve az alkánok kimutatását.

A 2012-es leszállás óta a Curiosity több mint 21 kilométert tett meg a Gale-kráterben és az Aeolis Mons, más néven a Mount Sharp, a kráter közepén található 5000 méteres hegy lejtőin. A marsjáró korán kimutatta, hogy több mint 3 milliárd évvel ezelőtt létezett egy lakható tó Gale-ben. Azóta az élet más lehetséges jeleit is észlelte: ragacsos szerves makromolekulákat, amelyek hasonlítanak a kerogénre, az olaj alapanyagára, és egy „könnyű” szénizotóp dúsulását, amely a Földön az életre utal.

A Földön végzett további laboratóriumi kísérletek azt valószínűsítették, hogy ezek az alkánok hosszabb láncú karbonsavak, például undekánsav, dodekánsav és tridekánsav bomlástermékei is lehetnek. Ezek a zsírsavak a földi sejtmembránok alapvető alkotóelemei, de abiotikus folyamatok révén is kialakulhatnak, például különböző geológiai folyamatok által kiváltott kémiai reakciók révén, víz és az



ásványi anyagok kölcsönhatása során a hidrotermális forrásokban.

undekánsav	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_9\text{COOH}$
dodekánsav	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{10}\text{COOH}$
tridekánsav	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{11}\text{COOH}$

Bár a felfedezés nem bizonyítja a múltbeli életet a Marson, azt mutatja, hogy az összetett szerves molekulák fennmaradhatnak marsi körülmények között, megerősítve biológiai eredetű molekulák kimutatásának lehetőségét a jövőbeni küldetések során. A tanulmány hangsúlyozza a marsi minták visszajuttatásának fontosságát a Földre a korszerű laboratóriumi eszközökkel végzett átfogóbb elemzések céljából.

Jelenleg a Perseverance marsjáró gyűjti és tárolja a Marsról származó mintákat. A robot fúrásokat végez a Mars felszínén és a kinyert kőzetmagokat titán csövekbe zárja későbbi visszatérítésre. A NASA és az Európai Űrügynökség (ESA) egy küldetésen dolgozik, amelynek célja, hogy ezeket a következő évtizedben visszahozza a Földre. A kutatók remélik, hogy a visszatérített minták választ fognak adni arra kérdésre, hogy volt-e valaha élet a Marson.



FORRÁS

Caroline Freissinet et al., PNAS 122 (13) March 24, (2025)

Paul Voosen, Science 387 Issue 6741, 1337 (2025)



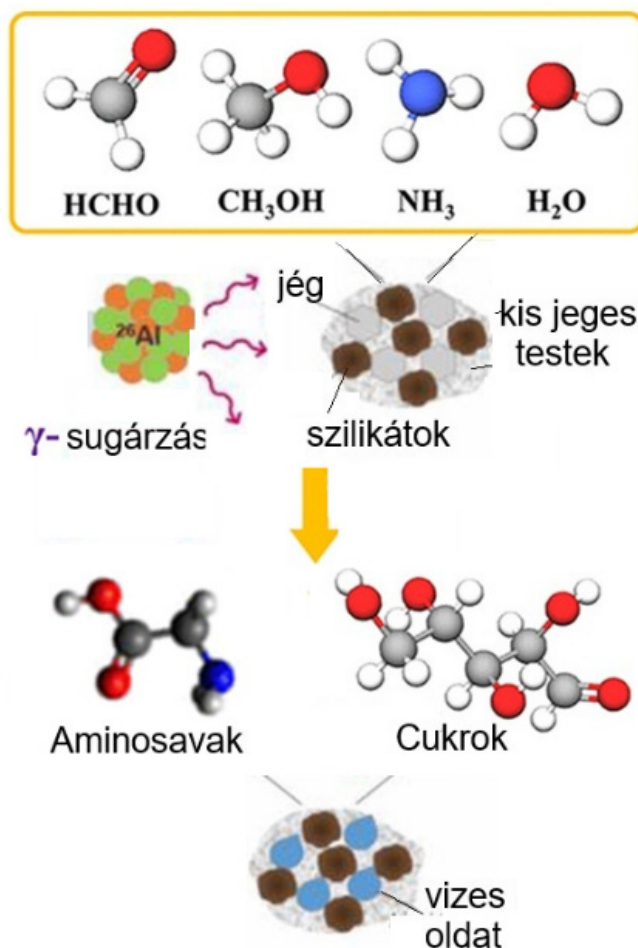
Aminosavak, cukrok és gamma-sugárzás

Az élet keletkezésének egyik fontos kémiai részletkérdése, hogy hogyan keletkezhettek prebiotikus környezetben a biomolekulákat felépítő aminosavak, cukrok, nukleotidok. Újabban japán kutatók eredményei rámutattak arra, hogy a Naprendszer kialakulásának korai szakaszában víz jelenlétében gamma-sugárzás is indukálhatta aminosav és cukor molekulák képződését.

Az elmúlt évtizedekben végzett laboratóriumi kísérletek eredményeiből ismert, hogy fontos prekursorok a formaldehid, hidrogénecianid, formamid, acetaldehid, ammónia, metán, kénhidrogén és a víz. A prekursorok jelen vannak meteoritokon, aszteroidákon, és a csillagközi térben is -- erről szolgálnak információkkal a Kölni Egyetem Molecules in space, vagyis Molekulák az űrben elnevezésű adatbázisa.

A prekursoraikon kívül aminosavat és egyszerű cukrot is észleltek csillagközi térben. Például nagy mennyiségű fehérje képző triptofán aminosavat fedeztek fel a Spitzer űrteleszkóp által a csillagképző IC348 csillagrendszer infravörös fényéből gyűjtött adatokban. A triptofán egyike annak a 20 aminosavnak, amelyek felelősek a földi életnek nélkülözhetetlen kulcsfontosságú fehérjék kialakításáért. Detektálták az egyszerű cukormolekula, a glikolaldehid (CH_2OHCHO) gyenge mikrohullámú jeleit is a Tejútrendszer középpontja közelében, tőlünk mintegy 26 000 fényévre található Sagittarius B2-molekuláris felhőben.

Az aminosavak előállíthatóak vízből, metánból, ammóniából és hidrogénből, vagy vízből, formaldehidből, metánból és



ACS Earth Space Chem. 2024, 8, 9, 1737
 ACS Cent. Sci. 2022, 8, 12, 1664

hidrogénecianidból is savas körülmények (Strecker reakció). A cukorképződés egyik lehetséges útja formaldehidből (Formóz reakció) vagy glikolaldehidből történő szintézise. A purin és pirimidin nukleotidok aminosavakból, szén-dioxidból, ribózból és foszfátból szintetizálódhatnak. Természetesen a szintézisekhez szükség van stabil környezetre, a reakciókat elősegítő katalizátorokra és környezeti hatásokra, a reakciókat beindító energiaforrásra is.

A kémiai reakciókat beindító

energiaforrásokra több javaslat is született. A lehetséges energiaforrásoknak a kutatók a hidrotermális hőforrásokat, elektromos kisüléseket, plazmakisüléseket, a kozmikus sugárzást és az UV sugárzást vagy aszteroida becsapódás lökéshullámainak valószínűsítették. A számos prebiotikus környezetet megvalósító laboratóriumi kísérletben is ezeket használták energiaforrásként. Felmerült a radioaktív bomlás is lehetséges energiaforrásként, de erre vonatkozó laboratóriumi kísérletek

hiányoztak. Az elmúlt években japán kutatók egy új prebiotikus útvonalat javasoltak az aminosav- és cukorképződéshez, amely szerepet játszhatott abban, hogy az esszenciális szerves vegyületek meteoritokon keresztül a korai Földre kerüljenek. Laboratóriumi kísérletekben bizonyították, hogy izotópok gamma-sugárzása is iniciálhatta aminosavak és aldóz cukrok, köztük a ribóz képződést olyan egyszerű molekulákból, mint a formaldehid, az ammónia és a metanol és víz. A gamma-sugárzás lehetséges forrásként az ^{26}Al izotópot valószínűsítették. A kutatók úgy gondolják, hogy ez a folyamat a széntartalmú kondritok szülőtestjeiben, aszteroidákon és üstökösökön ment végbe, melyek aztán hozzájárultak ezeknek az esszenciális vegyületeknek a korai Földre történő szállításához,

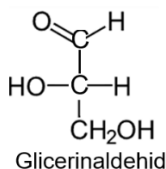
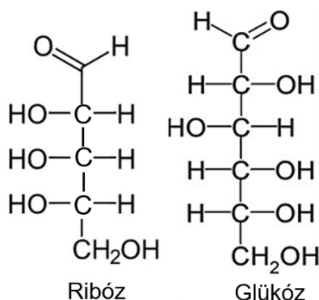
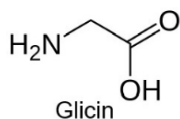
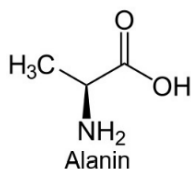
Az aldóz cukrok olyan monoszacharidok, amelyek molekulájában egy aldehidsoport található, amely jellemzően a lánc végén helyezkedik el. Emellett több hidroxilsoportot ($-\text{OH}$) is tartalmaznak. Az aldózok képesek gyűrűs szerkezetet is kialakítani, például a glükóz vízben oldva főként gyűrűs formában fordul elő.

Az alumínium-26 (^{26}Al) egy radioaktív izotóp, amely pozitron emisszióval vagy elektronbefogással bomlik magnézium-26-ra (^{26}Mg). A bomlás során gamma-sugárzás keletkezik, amelynek energiája kb. 1,8 MeV. Az alumínium-26 felezési ideje 717 000 év, és fontos szerepet játszhatott a korai bolygókeletkezésben, mivel elegendő hőt biztosított a planetezimálok olvadásához és differenciálódásához.

A kísérletekben a formaldehid HCHO , metanol CH_3OH , ammónia NH_3 vizes oldatait különböző idejű és intenzitású gammasugárzásnak tették ki. A vizes oldatok oldottanyag koncentrációinak arányai hasonlóak voltak a szenes kondrit meteoritokban észlelt arányokhoz. Sugárzásforrásként különböző dózist ^{60}Co izotóp gammasugárzását használták, és a minták elemzéséhez folyadékkromatográfiát és a tömegspektrometriát használtak.

A kísérleteik eredményei igazolták, hogy a formaldehid, ammónia és metanol vizes

oldatainak gamma-sugarakkal történő besugárzása számos α -aminosav, nagyobb mennyiségben alanin némi glicinnel, és aldóz cukrok, köztük a ribóz, képződéséhez is vezethet, az ammónia koncentrációja és a kiindulási anyagok arányától függően.



Az aminosavak hozama a teljes gammasugárzás dóziséval és a koncentrációk növelésével arányosan nőtt. Az ammónia alacsony koncentrációban növelte a cukorhozamot, a magasabb ammóniaszint gátolta a reakciót. Az ammónia teljes hiányában jóval kevesebb cukor képződött. A legjelentősebb aldóz termelés akkor következett be, amikor az NH_3/HCHO moláris arányok 0,1 és 0,2 voltak, és a hozam jelentősen csökkent az ammóniakoncentráció növekedésével.

A kutatók eredményei rámutatnak arra, hogy a Naprendszer kialakulásának korai szakaszában a kis testekben lévő víz jelenlétében, a gammasugárzás is indukálhatta aminosav és cukor molekulák képződését egyszerű molekulákból, például formaldehidből és ammóniából víz és metanol jelenlétében. Aminosavak és cukrok gamma-sugárzás által kiváltott szintézise egy új prebiotikus szintézis út lehet, amely hozzájárulhatott az élet eredetéhez a korai Földön.

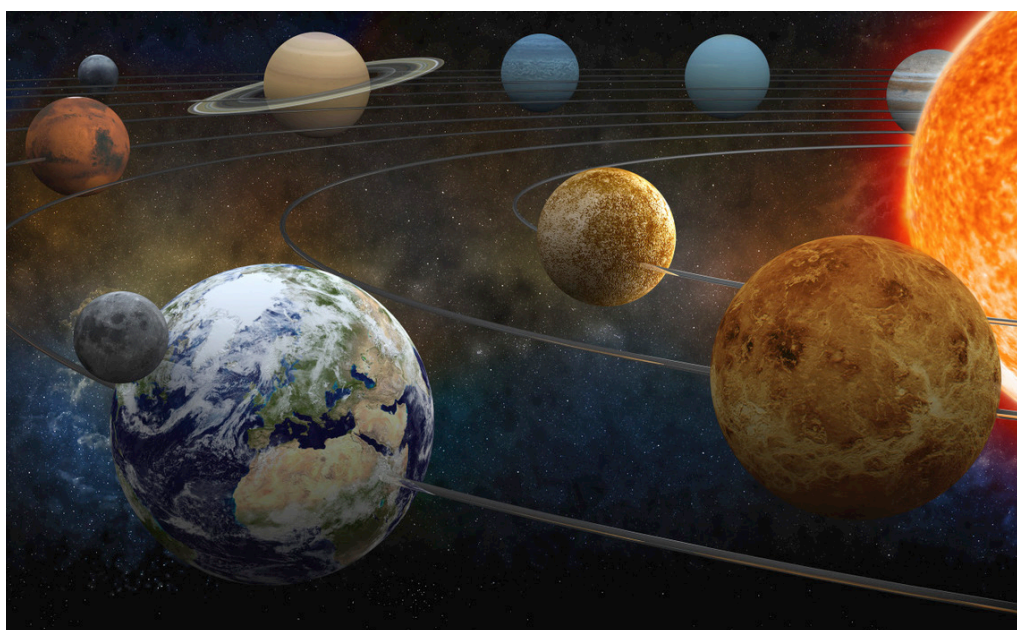
Szerkesztőség



FORRÁS

Shunpei Abe, et al., *ACS Earth and Space Chemistry* 8(9), 1737 (2024)

Yoko Kebukawa, et al., *ACS Cent. Sci.*, 8, 12, 1664 (2022)





Arany nanorészecskék és nanoklaszterek orvosbiológiai alkalmazásai

A nemesfémalapú anyagok olyan szerkezeti és optikai tulajdonságokkal rendelkeznek, amelyek révén az orvostudományi kutatások és a gyógyítás szolgálatába állíthatók.

A nanotechnológia rohamos fejlődésével a nanoszerkezetű anyagok alkalmazása kiemelkedő szereppel bír ma már számos tudományterületen. Méretük 1 és 100 nanométer közötti tartományba esik, ami egyedi fizikai, kémiai és biológiai tulajdonságokkal ruhazza fel ezen anyagokat, mely sajátosságokkal a nagyobb, tömbi fázisú anyag nem rendelkezik. Nagy felület/térfogat arányuk katalitikus aktivitásuk növekedéséhez is vezet, lehetővé téve hatékonyabb kémiai reakciók kivitelezését. Az elektronikai iparban kisebb, gyorsabb és energiahatékonyabb eszközök létrehozását teszik lehetővé, míg a textiliparban vízálló, UV-álló és antibakteriális anyagok előállítására használhatóak. A környezetvédelemben szennyeződések hatékonyabb eltávolítására és megújuló energiaforrások fejlesztésére is megoldásokat kínálnak. Az építőiparban erősebb és tartósabb anyagok kifejlesztéséhez járulhatnak hozzá. A mezőgazdaságban precíziós növényvédelemre és tápanyag-utánpótlásra alkalmazhatóak. Mindezen területek mellett egyre nagyobb figyelem fordul ezen 1–100 nm közötti mérettel rendelkező anyagok – kiemelten a biokompatibilis sajátossággal rendelkező származékaik – orvosbiológiai területen történő felhasználásra, mint pl.: célzott gyógyszeradagolás, diagnosztika, képalkotás, és (rák)terápia. A nanoszerkezetű anyagok tehát interdiszciplináris területet képviselnek, amelyek a jövő technológiájának alapját

képezhetik. Kutatásuk és fejlesztésük kulcsfontosságú a globális kihívások kezelésében és az életminőség javításában.

Ezen összefoglalóban a változatos összetételű, morfológiájú és anyagi minőségű nanoszerkezetű anyagok hatalmas családján belül a nemesfém, főként aranyalapú anyagok főbb szerkezeti és optikai sajátosságait, illetve ezen anyagok kiemelten orvosbiológiai területen történő felhasználási lehetőségeinek főbb aspektusait is bemutatjuk.

ARANY KOLLOIDOK TÖRTÉNETE

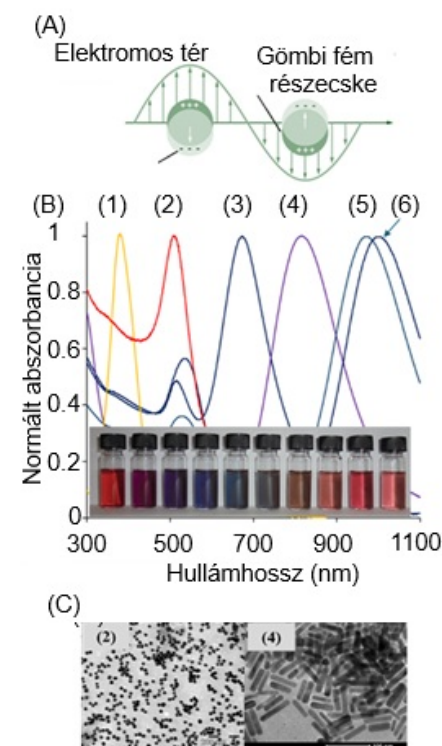
Az arany atomokból felépülő kolloid részecskék története – melyek mérete az 1–500 nm mérettartományba sorolható – évszázadokra nyúlik vissza, jóval a nanotechnológia modern fogalmainak megjelenése elé. Már az ókorban is ismerték az arany „finom” eloszlásából származó élénk színeket, bár tudományos magyarázatuk nem volt. Ilyen pl. a IV.



1. ábra: A Lükurgusz kehely természetes fényben (balra) ill. belülről megvilágítva (jobbra).

századból származó Lükurgusz kehely (1. ábra), mely természetes fényben zöld színűnek, belülről megvilágítva vörös színűnek látszik.

Ezen eltérő szín abból ered, hogy az üveg anyagában arany nanorészecskék (Au NPs) vannak, s a részecskékre jellemző lokalizált felületi plazmon rezonancia (LSPR) jelenség miatt



2. ábra: A LSPR jelenség sematikus megjelenítése (A) és gömb alakú Au (2), Ag (1) valamint rúd alakú Au kolloidok (3-6) vizes diszperzióinak látható (normált) spektrumai (B) a minták fotóival valamint eltérő morfológiájú Au részecskék elektronmikroszkópos felvételei (C). [1]

mutatnak változatos színt, eltérő szögben megvilágítva őket (a jelenség eredete később kifejtésre kerül). A középkorban az alkimisták „aurum potabile” néven arany kolloidokat készítettek, gyógyító hatást tulajdonítva nekik. A XVII. században Andreas Cassius fedezte fel a „Cassius bíborát», egy vörös-lila pigmentet, mely valójában Au NPs-et tartalmazott. Michael Faraday a XIX. század közepén végzett úttörő munkát megértve az arany kolloidális természetét és egyedi optikai tulajdonságait. A XX. században a kolloidkémia fejlődésével egyre jobban megértették a kutatók az Au NPs stabilitását és előállítási módszereit.

OPTIKAI SAJÁTSÁGOK

A nemesfémalapú kolloid részecskék egyik legmeghatározóbb tulajdonsága egyedi optikai sajátságuk, mely a lokalizált felületi plazmon rezonancia (localized surface plasmon resonance, LSPR) jelenségből származik.

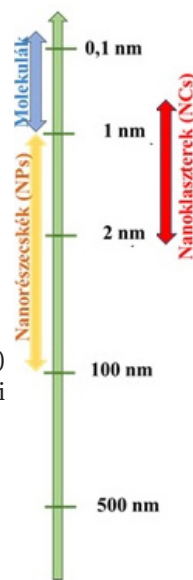
A jelenség során (2. ábra (A)) a nemesfém kolloidokat, melyek mérete legalább 2–3 nm, alkotó atomok vezetési sávjában lévő elektronok kollektív oszcillációja következik be, ha a részecskék a látható fény fotonjaival intenzív kölcsönhatásba lépnek, mely oszcilláció rezonánssá válik, ha az a besugárzó fény elektromágneses terének frekvenciájával megegyezik. Az így detektálható LSPR sávok, amelyek egy abszorpciós és egy szórási tagra bonthatók, értékes információval szolgálnak nemcsak a nemesfém NPs összetételéről, de méretéről és alakjáról is. A gömb alakú Au és Ag kolloidok karakterisztikus LSPR sávja $\lambda_{\text{max,Au}} = 500\text{--}550\text{ nm}$ és $\lambda_{\text{max,Ag}} = 380\text{--}410\text{ nm}$ tartományban detektálható (2. ábra (B)). Az egyfémes részecskék esetén a gömbtől eltérő, ún. anizometrikus alak esetén, mint az arany nanorudak (2. ábra (C)), a szerkezetből adódó transzverzális és longitudinális oszcillációk is fellépnek, mely révén az abszorbanca spektrumban két jól definiált LSPR sáv megjelenése azonosítható. A 2. sáv, melyeket a 2. ábra (B) is szemléltet, hullámhossza és

sávszélessége a rudak hossz/szélesség arányával szisztematikusan hangolható a látható és a közeli infravörös (NIR) tartományban, ezáltal a rúd alakú arany részecskéket tartalmazó szolok változatos színnel rendelkezhetnek, amit a 2. ábra fotósorozata is jól mutat[1].

LÉTEZNEK-E EXTRÉM KIS ARANY NANORÉSZECSKÉK?

A szakirodalomban a nemesfém nanoklaszterekkel (NCs) kapcsolatos kutatási eredmények megjelenése meghatározóan a 2000-es évektől indulóan kezdett intenzív növekedést mutatni. A kezdeti években (1996 – 1999) főként a ~ 10 nm alatti mérettel rendelkező tiolcsoportot-tartalmazó ligandumokkal funkcionizált NPs-et tekintették NCs-nek, de ezek nem teljesen azonosíthatóak NCs-nek, a ma elfogadott definíció alapján. Az első meghatározó összefoglaló közlemény 2011-ben jelent meg Nienhaus és mtsai.

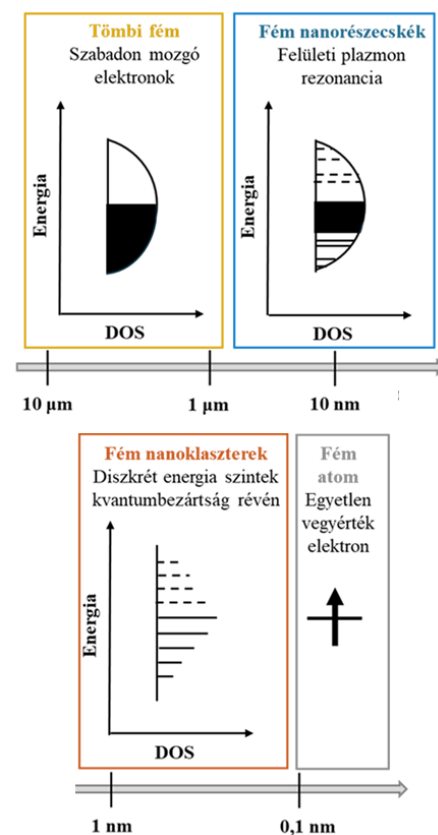
munkája révén, ahol már a NCs méretbeli és szerkezeti jellemzőik mellett, azok karakterisztikus fluoreszcencia (PL) sajátságainak aspektusait is említik [2]. Mára a nemesfém NCs általánosan elfogadott definíciója olyan nanoszerkezeteket takar, amelyek átlagos átmérője nem haladja meg a $d \sim 2\text{ nm}$ -t, és optikai tulajdonságuk teljes mértékben eltér a klasszikus nemesfém kolloidok sajátságaitól. Ennek megfelelően a LSPR sáv nem detektálható az abszorbanca spektrum látható tartományában, így ezek a diszperziók nem színesek.



3. ábra: A nanoklaszterek átmenetet jelentenek a nanorészecskék és a molekulák között.

Szerkezetüket, ezáltal méretüket tekintve az Au NCs néhánytól néhány tíz db arany atomból épülnek fel, így tulajdonságaik alapján átmenetet képeznek a molekulák és a NPs között (3. ábra).

A NCs esetén a plazmonikus tulajdonság helyett a PL lesz a meghatározó optikai sajátság. Az Au-tartalmú NCs PL-ájának eredete sokáig vitatott kérdés volt az irodalomban, de talán mára ez a kérdés már részben tisztázott. Az Au NCs karakterisztikus fluoreszcenciájának alapja az egyik értelmezés szerint az ún. „pure metal (quantum) confinement effect”, mely úgy értelmezhető, hogy ha a NCs mérete elegendően kicsi ($d \sim 0,5\text{--}1,0\text{ nm}$), és összemérhetővé válik az arany atom elektronjainak Fermi-energiaszintjéből számolható

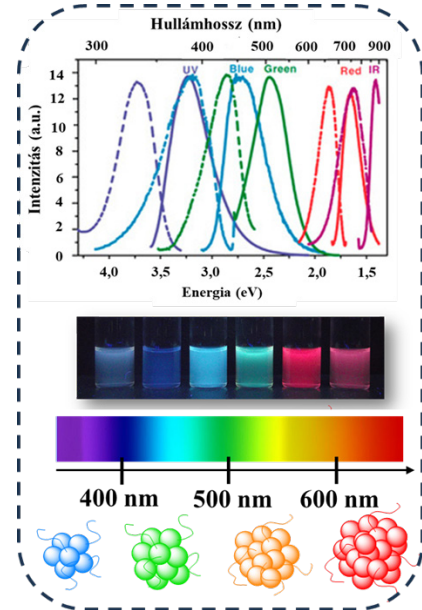


4. ábra: A tömbi fém, a fém nanorészecskék ill. a fém nanoklaszterek energiaszintjeinek sematikus megjelenítése [1].



hullámhosszal (< 1 nm), akkor a folytonos vezetési sáv(ok) diszkrét energiaszintekre hasad(nak) fel és így a NCs inkább mutatnak molekuláris viselkedést, mintsem plazmonikus tulajdonságot (4. ábra).

A másik értelmezés a „charge transfer” (töltésátviteli folyamat) a fém klaszterek felületén kötődő (bio)ligandumok és a fémmag közötti kölcsönhatás (e^- -átmenet) következtében, ami lehet ún. ligand-to-metal charge transfer (LMCT, ligandum-fém töltéstranszfer) ill. ligand-to-metal charge transfer (LMMCT, ligandum-fém-fém töltéstranszfer). Mára ezt a kétféle értelmezést együtt kezelik, hiszen mindkettőnek meghatározó hozzájárulása van a karakterisztikus fluoreszcenciához. A PL-át számos egyéb tényező is befolyásolja, úgy, mint a klasztert alkotó atomok száma, az elektronban gazdag donorcsoportok (S, N, P) jelenléte a fémmag felületén, a fém oxidációs állapota (Au^0 , Au^+), de az oldószer, a pH és a hőmérséklet is. Számos publikáció igazolja, hogy a néhány atomot tartalmazó klaszterek (pl.: Au^3 - Au^8) esetén intenzív kék emisszió



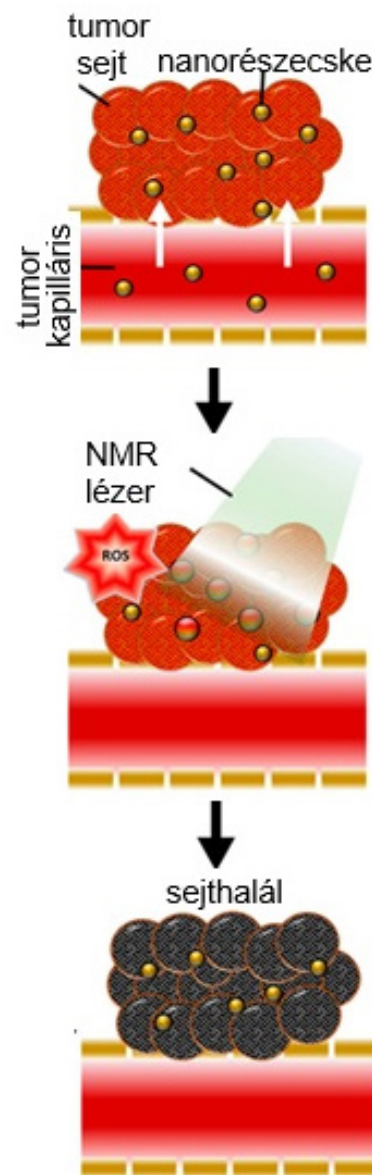
5. ábra: A nanoklaszterek mérettel, összetétellel hangolható fluoreszcens sajátossága [1].

($\lambda_{em} = 450-480$ nm) figyelhető meg, míg, ha a klasztert már több atom alkotja (pl. 10–13 db) akkor az emisszió a zöld hullámhossz tartományban ($\lambda_{em} = 490-510$) jelentkezik. Ahogyan az 5. ábra is mutatja, növelve a klasztert alkotó atomok számát (> 25 db) vörös emisszióval rendelkező NCs is előállíthatóak.

A PL élettartam vonatkozásában általános megállapítások nem tehetőek, de az Au NCs esetén kijelenthető, hogy a néhány atomos NCs nanoszekundumos átlagos élettartalommal rendelkeznek, míg a nagyobb, vörös emisszióval rendelkező NCs mikroszekundumos élettartama a jellemző érték, mely átlagos élettartam értékek több komponensre bonthatóak a fentebb említett LCMT és LMMCT átmenetek alapján. Az élettartalom mellett a kvantumhatásfok (QY(%)) is meghatározó paraméter; Au NCs vonatkozásában a 8 – 10 % már kiemelkedő értéknek számít.

ÍGÉRETES LEHETŐSÉGEK

Egyedi szerkezeti és főként hangolható optikai sajátosságainak köszönhetően orvosi biológiai területen is egyre inkább előtérbe kerülnek ezen nemesfémalapú NPs és NCs. Az Au NPs hatékony hordozóként szolgálhatnak gyógyszerek, DNS vagy RNS molekulák célzott daganatsejtekhez történő szállításában, növelve a terápiás hatékonyságot és csökkentve a mellékhatásokat, emellett képesek fokozni a sugárterápia hatékonyságát a tumorban történő energiaelnyelés növelésével is. Az Au NPs javíthatják a képalkotó eljárások (pl.: komputertomográfia, optikai képalkotás) érzékenységét és felbontását. Az Au NPs felületi plazmon rezonancia jelenségének eredményeképpen érzékeny és szelektív biológiai szenzorok kifejlesztését teszi lehetővé különböző biomolekulák (pl.: DNS, fehérjék, antigének) kimutatására. A terápiás felhasználások vonatkozásában a fototerápiás rákterápiában a leginkább ígéretes a plazmonikus NPs felhasználása. A fototerápiás terápia esetén közeli infravörös fénnel (gyakorta lézerrésszel)



6. ábra: A fototerápiás rákterápia (PTT) szemléltetése [3].

világítják meg a plazmonikus NPs-vel jelölt sejteket/szöveti részt. A lézerrésszel hullámhossza meghatározó. Döntően olyan hullámhosszt kell alkalmazni, ahol a NPs éppen elnyelnek, tehát könnyen gerjeszthetők. Ezen gerjesztés a sejt környezetében kisebb mértékű hőmérsékletemelkedést (hő fejlődést) eredményez, valamint a részecskék „mozgása” is megindul, mely révén a rákos sejtek sejtmembránja termikus és

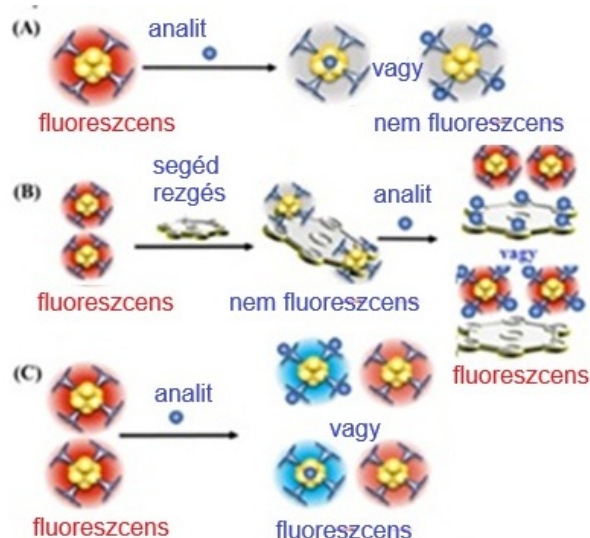
mechanikai úton is sérüléshez vezet, ami aztán a sejt pusztulását eredményezi (6. ábra) [3].

Az arany nanorudak alkalmazási lehetőségét ezen területen széles körben kutatják, hiszen a 2. ábrán is látható optikai sajátosságának köszönhetően, a második LSPR sáv hullámhosszát a közeli infravörös hullámhossz tartományba, azaz a lézerek működési tartományába, hangolható.

A NPs mellett a fluoreszcens NCs is ígéretes alapanyagok orvosi biológiai területen ultrakicsi méretük, könnyű funkcionálizálhatóságuk, kiemelkedő biokompatibilitásuk és kiváló fotostabilitásuk eredményeképpen. Az extrém kis méret azért is előnyös, mert méretük már összemérhető a vese átvezető képességével (2–4 nm), így lényegesen könnyebben eltávolíthatóak az emberi szervezetből, szemben a nagyobb részecskékkal, melyek sok esetben bizonyos szervekben felhalmozódhatnak (7. ábra) [4].

A nemesfém NCs egyre fontosabb szerepet játszanak a biokatalízis területén, a fluoreszcens képalkotás, ill. jelölés, valamint a diagnosztika, terápia (gén-, immun-, fotodinamikus- és rákterápia

területeken), de talán az egyik leginkább kutatott terület potenciális felhasználásuk szenzorikai alkalmazásokban. Ahhoz, hogy egy fém nanoklaszter optikai érzékelőként kiválóan működjék, legalább három fontos kritériumnak kell megfelelnie: nagy érzékenység, szelektivitás és gyors válasz. A szelektivitást egyrészt a fémmag különböző ligandumokkal történő célzott felületi módosítása(i) biztosítja. Másrészt kiemelten fontos, hogy az optikai jel megváltoztatása egyszerűen detektálható legyen. A fém NCs szenzorikai alkalmazhatósága azon alapszik, hogy rendkívül érzékenyek a külső kémiai környezet megváltozására, ezáltal karakterisztikus PL tulajdonságuk is változik: jellegzetes fluoreszcenciájuk vagy kioltódik (PL quenching), vagy erősödik (PL enhancement) vagy akár szisztematikusan eltolódik a detektálandó analittal való közvetlen vagy közvetett kölcsönhatás eredményeképpen, ahogyan azt a 8. ábra



8. ábra: A nemesfém NCs lehetséges működésének alapesetei szenzorikai alkalmazásokban [5].

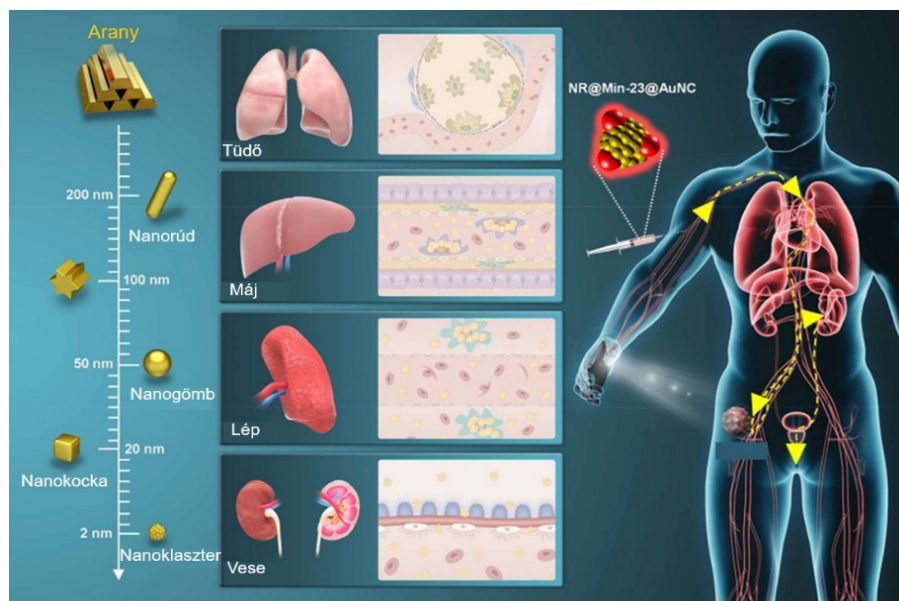
is szemlélteti. Rövid összefoglalásként tehát elmondható, hogy az Au NCs számos előnnyel rendelkeznek az Au NPs-ek szemben orvosi alkalmazásokban. Egyrészt kisebb méretüknek köszönhetően a NCs könnyebben behatolhatnak a biológiai szövetekbe és sejtekbe, ami javítja a gyógyszer célba juttatását és a képalkotási eljárások hatékonyságát. A nanoklaszterek kis mérete tovább csökkentheti a nem kívánt kölcsönhatásokat a biológiai rendszerekkel. Fluoreszcens sajátosságuk lehetővé teszi, hogy optikai képalkotási eljárásokban, például fluoreszcens mikroszkópiában és in vivo képalkotásban használják őket, ami pontosabb diagnózist és a terápiás hatások nyomon követését teszi lehetővé.

Juhászné Csapó Edit



IRODALOM

- [1] Juhászné Csapó Edit, Akadémiai Doktori értekezés (2023)
- [2] L. Shang, et al., 6 401 (2011)
- [3] S. K. et al., *Polymers*, 10(9) 961 (2018)
- [4] Y. Kong, D. et al., *Materials Today*, 51 96–107 (2021)
- [5] S. Qian, Z. et al. *Coord. Chem. Rev.* 451 214268 (2022)



7. ábra: A nanoklaszterek képesek akár a vesén keresztül is kiürülni az emberi szervezetből [4].



Sötét oxigén – természetes battériák?

A közelmúltban felmerült – a szó szoros értelmében – annak a lehetősége, hogy az óceánok mélyén, abiotikus úton oxigén keletkezik. Erről lesz részletesen szó az alábbiakban. De előbb foglalkozunk röviden az oxigén keletkezésével földi környezetünkben.

A földi élet kialakulása során az első két-három milliárd évben már megjelent az oxigén a légkörben és egybeült, hála a cianobaktériumok fotoszintetikus életfolyamatainak.

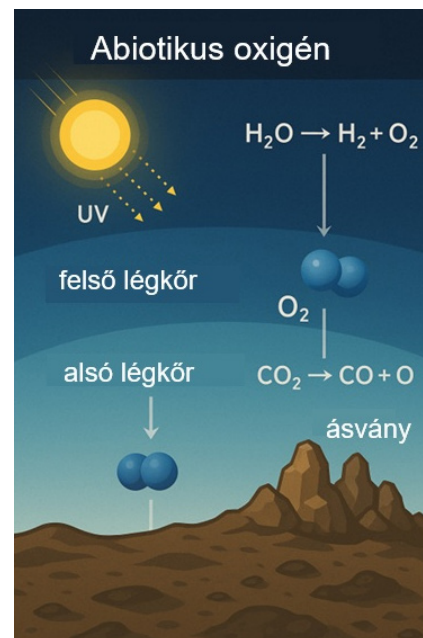
Az alábbi képen látunk úgynevezett sztromatolit képződményeket, amelyek legősibb formái mintegy 3,4 milliárd évesek. Ezek tömörszerű képződmények, úgy jöttek létre, hogy a cianobaktériumok, más néven kék algák, fotoszintézisük során elbontották a vízben levő széndioxidot és a folyamatban képződő karbonátos részecskék megtapadtak a baktériumtelepeket környező nyálkás anyagban. Ezek megszilárdulásával jöttek létre a réteges tömörszerkezetek.

Egy ilyen tömbmezőt látunk a lenti



képen a nyugat-ausztráliai Shark Bay öbölben. A cianobaktériumok mind a mai napig folytatják fotoszintetikus működésüket, így módon oxigént termelve.

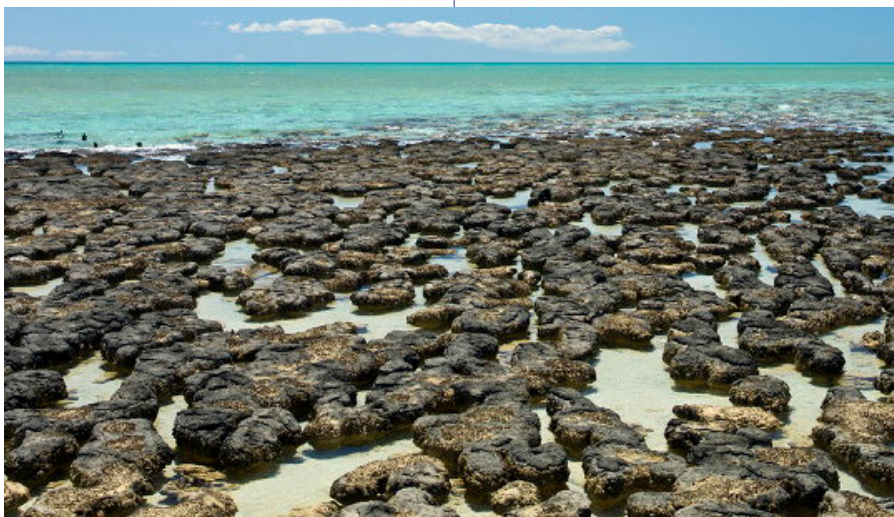
A később kialakuló egysejtű fotoszintetizáló algák és planktonok váltak a légköri oxigén termelőivé. A szárazföldi növényzet létrejötté és fotoszintézise tette lehetővé azután a bonyolult többsejtű életformákat, amelyek életműködéséhez alapvető szükség volt és máig is szükséges az oxigén. A földi élethez hasonló földönkívüli élet létrejöttéhez is nyilván szükséges a légköri oxigén. Itt nem gondolunk nem-szénelapú életformákra, bár ilyenekre vonatkozó elgondolások is megjelentek, pl. szilícium alapú élőlények feltételezésével, ha másutt nem is, mint tudományos-fantasztikus regényekben és filmekben. Vannak azonban oxigéntermelő folyamatok, amelyekhez

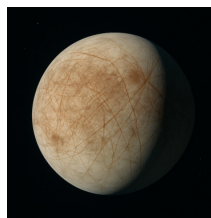


nem szükséges valamilyen biológiai folyamat, ezt neveik abiotikus oxigéntermelésnek. Alapvetően a légkör felső rétegeiben a napból jövő ultrabolya sugárzás termel a vízgőz fotolízisével molekuláris hidrogént és oxigént. Az alsóbb atmoszférában a sugárzás a széndioxid bontásával képez szénmonoxidot és atomi oxigént.

Vannak olyan ásványok, kőzetek is (pl. peroxidok vagy fénoxidok), amelyekből a

Vannak olyan oxigéntermelő folyamatok, amelyekhez nem szükséges valamilyen biológiai folyamat, ezt neveik abiotikus oxigéntermelésnek.





napfény oxigént termel, illetőleg amelyekből víz, savak vagy vulkáni gázok hatására keletkezik oxigén. Ezenkívül radioaktív

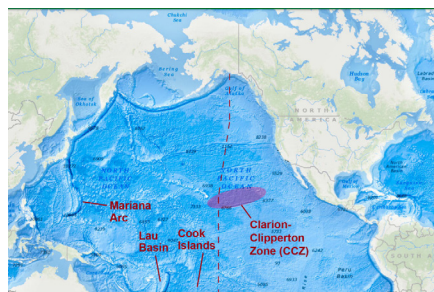
sugárzás is termelhet oxigént. Így elképzelhető, hogy a Naprendszer egyéb bolygóinak a felszínén ilyen abiotikus folyamatok oxigén tartalmú légkört hoznak létre. Különösen érdekes példa erre a Jupiter egyik holdja, az Európa, amelynek felületét vízjég borítja (lásd az alábbi ábrát), és igen vékony atmoszférája oxigénben gazdag.

Az oxigén a légkörből oldódik a tengervízben, de koncentrációja változó. A felszíni vizek általában magasabb oxigénszinttel rendelkeznek a levegővel való közvetlen csere és a fitoplanktonok fotoszintézise miatt. Az oxigéndús felszíni víz tengerszinten körülbelül **8 mg O₂/l-t** tartalmaz, (a levegő **210 mg O₂/l-t**).

200-1.500 m mélység között az oxigénszint az óceánokban jelentősen csökken. Ez azért fordul elő, mert a szerves anyagok lesüllyednek a felszínről, és a baktériumok oxigént fogyasztanak, miközben lebontják. Az oxigénkoncentráció **2 mg/l alá csökkenhet**, ami megnehezíti a legtöbb tengeri élőlény túlélését. A mélyebb vizekben ismét emelkedik az oxigénszint. Eddig úgy gondolták, hogy növekedés egyedül a sarki régiókból származó hideg, oxigénben gazdag víz lassú keveredése miatt jön létre, a mély vizeket feltöltő, felszíni oxigént szállító süllyedő áramlatok okozzák.

A kutatók nemrégiben meglepő oxigénforrást fedeztek fel az óceán mélyén, ahol a napfény nem tud behatolni. A kutatók szerint ezt a „sötét oxigént” a tengerfenéken lévő fémcsoomók termelik, amelyek természetes akkumulátorként működnek, és a tengervíz hidrogénre és oxigénre bontják.

2024. július 22-én megjelent egy közlemény a Nature Geoscience tudományos folyóiratban a Skóciai



Tengertudományi Egyesület (Scottish Association for Marine Science) kutatóitól, Andrew K.

Sweetman professzor első szerzőségével Bizonyíték sötét oxigén keletkezésére mélytengeri tengerfenéken (Evidence of dark oxygen production at the abyssal seafloor) címmel. A kutatók úgy gondolják, az oxigént elektromosan töltött ásványi képződmények, olyan többféle fém tartalmú mangánrögök termelik, napfény nélkül, amelyek mérete kis szemcséktől kb. egy burgonya nagyságáig terjed. Az alábbi kép mutatja be ezeket a rögöket, amelyeken éppen egy mélytengeri rák mászkál.

Ezek a rögök pl. a Csendes-óceán középső területének aljzatán 4,5 - 5 km mélyen Hawaii és Mexikó között található. Az a rész, ahol ezeket találták, a Clarion Clipperton (CCZ) geológiai törési zóna, amit a következő kép mutat be. Mérete óriási, kb. több millió négyzetkilométer, kb. Európa méretével vethető össze.

Mielőtt rátérnénk az oxigén lehetséges keletkezésének problémájára és az ezzel kapcsolatos vitákra, érdemes e változatos



Egy itt talált mangánrögöt mutat be az alábbi kép.

fém tartalmú rögök kémiai összetételét megtekinteni és pár szót ejteni keletkezési módjukról.

Ezek képződése részben a tengervízben oldott fémvegyületekből, részben pedig a tengerfenék alapzatából, az alatta fekvő bazalt rétegből való kiszivárgásból történik, de különösen a vulkánikus területeken található hidrotermális források kiömlési anyagából keletkeznek. Noha adott fenékrészen csak kisebb rétegekben fordulnak elő, egy négyzetméteren 45-75 kg is lehet. Teljes becsült mennyiségük megdöbbentő, a teljes CCZ területen állítólag 21 milliárd tonna ilyen rög mennyiség található, a CCZ területen kívül pedig előfordulnak még a Peru medencében, a Penhryn bázisban (a déli Csendes-óceánon a Cook szigetek területén) és az Indiai-óceánban is. A rögök növekedése rendkívül lassú, centiméterenként egy millió év, tehát egy 15 cm nagyságú rög létrejöttéhez akár 15 millió év is szükséges lehet.

A rögök tipikus kémiai elem tartalma: mangán: 29%, vas: 6% szilícium: 5%, alumínium: 3%, nikkel: 1.4%, réz: 1.3%, kobalt: 0.25%, oxigén: 5%, hidrogén: 1.5%, nátrium: 1.5%, kalcium: 5%, magnézium: 0.5%, kálium: 0.5%, titán: 0.2% továbbá kisebb mennyiségben ritkaföldfémek.

A következőkben igen röviden áttekintjük az eredeti Sweetman cikk érvelését a sötét oxigénnel kapcsolatban. Majd rátérünk a hipotézis igen elterjedt kritikájára is.

A mélytengeri élő szervezetek oxigént fogyasztanak. Az oxigénszint mértékét a mangánrögökkel borított csendes-óceáni mélytengeri tengerfenéken Sweetman és kollegái különböző helyekre telepített mérőkamrák segítségével tanulmányozták. Méréseik szerint az oxigéntartalom két nap alatt a háttérszint több mint háromszorosára növekedett. Ezt laboratóriumi kísérleteik alapján a mangánrögöknek tulajdonították. Figyelembe véve a rögök felszínén mért feszültség értéket (ami szerintük elérte a 0.95 Volt értéket), arra a hipotézisre jutottak, hogy a sötét oxigén



létrehozásának forrása a tengervíz elektrolízise.

Az elektrokémiai kísérleteket Franz Geiger végezte, ezekre alapozták méréseik magyarázatát. Az alábbi kép mutatja a feszültségmérésre használt egyszerű elrendezést.

A sötét oxigén hipotézist nagy kétkedés és kritika fogadta. Néhányat ezek közül megemlítünk.

A kritikusok elsősorban azt kifogásolták, hogy a közleményben közölt feszültségértékek nem érték el a 1.5 V értéket, amely (plusz némi túlfeszültség) szükséges a víz elektrolíziséhez. Erre Sweetmanék is rámutattak, azonban szerintük az egymáshoz érő rögök sorba kapcsolt rúd elemekhez hasonlóan szolgáltatják az elektrolízishez szükséges feszültséget. A kritika hangsúlyozza, hogy bakteriális eredete is lehet az oxigén fejlődésének. A szerzők higanyvegyületekkel pusztítottak el a baktériumokat, bár beismerték, hogy talán nem 100%-os eredménnyel. További kifogás az is, hogy a tengervíz elektrolízise során, klórnak is kell fejlődnie, és természetesen hidrogén is keletkezik. Sweetmanék nem vizsgálták sem a klór, sem pedig a hidrogén keletkezését. Azt sem részletezték, hogy miként maradnak ezek a mangánrögök a fenék felszínén, holott az álladó szerves üledék befedi a tengerfeneket. Szerzők ezt azzal magyarázzák, hogy a tengeri állatok mozgása távolítja el a rögöket elfedő üledéket. Az üledék képződés igen lassú, 1000 évenként 1 mm, tehát egy 5 cm magas mangánrög befedéséhez 50000 év kell.

Sweetmanék rámutattak arra is, hogy a tengerfenéki elektrolízis kb. 400 atmoszféra hidraulikus nyomáson és fagyáspont körüli hőmérsékleten jelentősen különbözhet a laboratóriumi mérésektől. Ezért szükség lesz az elektrolízis nyomásfüggésének vizsgálatára az oxigén, hidrogén és klór elektrolitikus hatásának tisztázására is. Az is valószínű, hogy oxigéntermelő baktériumok is hozzájárulnak a fejlődő oxigénhez, ezt a sterilizálásra alkalmazott



HgCl₂ talán nem tudta kiküszöbölni, a baktériumok egy része még aktív maradhatott.

Mindenesetre feltűnő a „sötét” oxigén, mangánrögök által történő termelését feltételező közlemény igen kritikus visszhangja, aminek a tudományos kételyeken kívül oka lehet a tengerfenék mangánrög bányászatában érdekelt cégek aggodalma is. Ha ugyanis a mangánrögök oxigént termelnek, több kisebb, de elterjedt mélytengeri élőlény, esetleg a teljes biom elpusztulásához vezethet a rögbányászat.

Tekintettel a jelenleg növekvő nyersanyagárakra és a növekvő igényre a mangánrögökben található fémekre, a tengerfenék bányászatát több ország is

beindítaná. Azonban ezt egyelőre még nem engedélyezték nemzetközi szervek, és a szükséges bányászati technológiát még nem dolgozták ki teljes mértékben. Pillanatnyilag még nem tudjuk, hogy a széleskörű mélytengeri nyersanyagbányászatnak milyen hosszútávú káros hatásai lennének.

Nemes László



OLVASNIVALÓ

[eartharxiv/repository/Sweetman](https://eartharxiv.org/repository/Sweetman)

A. K. Sweetman et al., *Nature Geoscience* 17 737 (2024)

Dark oxygen Wikipedia és Web keresés a sötét oxigén témára.

Magyar Kémikusok Lapja

2024 DECEMBER

**Szalay Péter,
Szabó János**

Zoltán: Nobel-díj és cellulóz közelnézetből: interjú Björn Lindmannal
Hargittai István, Hargittai Magdolna: Csillagok között

Lente Gábor: A mesterséges intelligencia természetes következményei

Hargittai István, Hargittai Magdolna: Sokoldalú Dalton

Lente Gábor rovata: Molekula orgia az űrben, Víz és cement a klímaváltozás ellen, Sötét oxigén a tengerfenéken



2025 JANUÁR

Lente Gábor: Porfirin- és katalíziskutatás a Coimbra–Barcelona–Orleans–Pécs–Liverpool ötszögben: interjú Mariette Pereira professzor asszonnyal

Kutasi Csaba: „Vigyázat, veszélyes vegyületek vannak egyes bugyikban Magyarországon is” – de mi az igazság?

Hargittai István, Hargittai Magdolna: Két híres vegyészmérnök sírhelye

Próder István: Magyar vonatkozású kémia- és vegyipartörténeti évfordulók
Lente Gábor rovata: Szagló szenzor, Út a 120-as elemhez, Tengervízi izotópok, Földrengés és aranyrögök



2025 FEBRUÁR

Gáspári Zoltán: Fehérjeszerkezetek a számítógépből: a 2024-es kémiai Nobel-díj

Kégl Tamás: Fizikai Nobel-díj: főhajtás a gépi tanulás és a mesterséges intelligencia úttörői előtt

Boldogkői Zsolt: A mikro-RNS-ek világa

Inzelt György: Kiről nevezték el? A Polányi-szabály. Első rész

Lente Gábor rovata: Kolumbiai kakaó- és kadmiumtérkép; A tintahalak meleg fénye; Az egysejtű RNS-szekvenálás egyedisége



2025 MÁRCIUS

Inzelt György: Kiről nevezték el? A Polányi-szabály. Második rész

Hargittai István: Kis budai séta a tudomány körül

Lente Gábor rovata:

Fluorvegyületek az okosóraszíjakban; Római ólom a levegőben; Gyomnövekedés-gátlás nyolctagú gyűrűvel; Vezeték nélküli elektroszintézis



2025 ÁPRILIS

Bélafiné Bakó Katalin: Szén nanopöttyök

Róka András: A Grignard-reagensről, Kajtár Márton-osan

Lente Gábor: Mít mond

Umberto Eco a torinói lepelről, ha nem arról ír?
Kutasi Csaba: A torinói lepel és az arkendők – textiles szemmel is
Lente Gábor rovata: Életre való Benu; Metánkibocsátás-csökkentő rizs; Fehérjecement



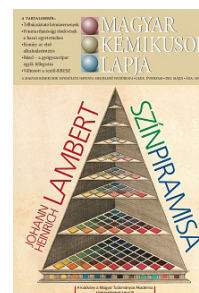
2025 MÁJUS

Hosztafi Sándor: Koniin: az első alkaloidszintézis

Inzelt György: Kiről nevezték el? A Bouguer–Lambert–Beer-törvény

Lente Gábor rovata:

Vas-hélium vegyületek a Föld magjában; Telítetlenségek a kozmoszban; Szénmentes elméleti DNS; UV-gátolt evolúció



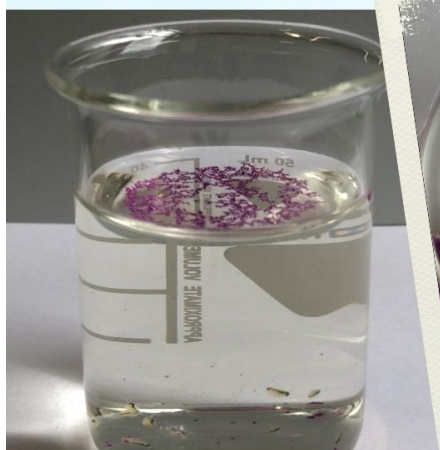


Kozmetikumok és környezet

Minden egyes alkalommal, amikor zuhanyozunk, az előzetesen bőrünkre felvitt vegyi anyagok százait mossuk le magunkról, a szintén különféle vegyi anyagokat tartalmazó samponjainkkal és tusfürdőinkkel. Ezek a vegyi anyagok a szennyvízhálózaton keresztül a szennyvíztisztító telepekre kerülnek, ahol a jelenleg alkalmazott szennyvízkezelési eljárások csak egy bizonyos hányadát képesek eltávolítani ezeknek az anyagoknak és vagy változatlan, vagy akár módosult formában a környezetbe kerülnek a tisztított vízzel.

Természetesen a nagyüzemileg alkalmazott szennyvízkezelési technológiák hatékonyságával alapvetően nincs baj, hiszen ezek első sorban a szén, nitrogén és foszfortartalom csökkentését célozzák egy mikrobiális biomasza segítségével, azonban nem csoda, ha a szennyvízben előforduló mikro-szennyezőanyagokat maradéktalanul nem képesek eltávolítani, hiszen egészen egyszerűen, nem erre lettek kitalálva. Gondoljunk csak bele, ha általánosságban a több száz vagy ezerféle mikro-szennyező anyagnak mindig csak pár százaléka jut át a szennyvíztelepeken és kerül ki a vízi ökoszisztémába, az hosszú távon felhalmozódáshoz vezethet, különösen, hogy gyártásuk és felhasználásuk is egyre intenzívebb.

Vegyük mindjárt számba, hogy mely vegyület-családok a leginkább problémásak élővizeink védelme szempontjából! A legtöbb kozmetikai termék tartalmaz valamilyen tartósítószerrel, vagy ún. antimikrobiális hatóanyagot a baktériumok, gombák



www.szepsegkornyezet.hu



Kerüljük a kozmetikai csillámok használatát a vízpartokon fürdőzés közben, hiszen ezek is lehetnek mikroműanyag alapúak! Ezek a részecskék bekerülve a vízi szervezetekbe felhalmozódhatnak a táplálékláncban.

elszaporodását megelőzendő. Ezek az anyagok felhalmozódhatnak a felszíni vizekben, ahol károsíthatják a vízi mikroorganizmusokat, gátolhatják az algák növekedését, vagy rezisztens baktériumtörzsek kialakulásához

vezethetnek. A triklozánt például gyakran használják antibakteriális szappanokban, dezodorokban és fogkrémekben, míg a benzalkónium-klorid kézfertőtlenítőkben és arclemosókban is előfordul. Ezek a vegyületek ökotoxikus hatásokat

fejthetnek ki, és felboríthatják a vízi ökoszisztémák természetes egyensúlyát.

A nyár közeledtével a napvédelem alapvető fontosságú, hiszen az UV-sugárzás károsíthatja bőrünket, idő előtti öregedést okozhat és növelheti a bőrrák kialakulásának kockázatát. Éppen ezért használunk fényvédő termékeket, amelyekben kétféle UV-szűrőt alkalmaznak: kémiai és fizikai. A kémiai szűrők elnyelik az UV-sugarakat, míg a fizikai szűrők visszaverik vagy szétszórják azokat a bőrfelületen. A fizikai szűrők leggyakoribb típusai a titán-dioxid és a cink-oxid, amelyek természetes ásványi eredetű anyagok. A hagyományos formájukban azonban fehér réteget hagynak a bőrön, ami sokak számára zavaró lehet. Ezért egyre gyakoribb a nanoformák alkalmazása, hiszen ezek a részecskék nagyságrendekkel kisebbek, így esztétikusabb és kényelmesebb napvédelmet biztosítanak. Emellett a nanorészecskék jobban eloszlanak a bőrön, így egyenletesebb védelmet nyújtanak és stabilabbak is, vagyis kevésbé bomlanak le az UV-sugárzás hatására. A probléma ott kezdődik, hogy ezek a nanorészecskék strandolás közben lemosódhatnak a bőrünkről és közvetlenül a vízbe kerülhetnek. De nemcsak a tengerben vagy a tavakban okoznak problémát, hiszen a zuhanyzás vagy kézmosás során a csatornahálózatba is bejutnak, onnan pedig a szennyvíztisztítókön keresztül visszakerülhetnek a természetes vizekbe. A vízi ökoszisztémában a nanoanyagok viselkedése összetett, egyes részecskék lebegve maradnak, mások leülepednek vagy reakcióba lépnek különböző vegyületekkel. A kutatások szerint bizonyos élőlényekre, például algákra, vízi makrogerinctelenekre és halakra káros hatást gyakorolhatnak, mert oxidatív stresszt idézhetnek elő bennük. Éppen ezért fontos, hogy tudatosan csökkentsük ezeknek az anyagoknak a környezetbe jutását.

A műanyagok környezeti hatásainak kapcsán elsőre talán nem a szépségápolási szerek jutnak az eszünkbe, pedig ezekből

is kerülhetnek mikroműanyag szemcsék a környezetünkbe. A mikroműanyagok 5 milliméter alatti műanyag szemcsék, melyeket vagy eleve ilyen kicsire gyártanak, vagy nagyobb méretű műanyag darabok felaprózódásával keletkeznek. Ha a szépségápolási szereket tekintjük, akkor a mikroműanyagok szemcséket eleve tartalmaznak bizonyos termékek, vagy a csomagolás helytelen kezelése és a környezetbe kerülése során keletkezhetnek. Így nem csak a termékválasztással, hanem azok csomagolóanyagának megválasztásával is befolyásolhatjuk a mikroműanyagok környezetbe kerülésének mértékét.

Milyen termékekbe teszik bele eleve ezeket a kisméretű szemcséket? Alapvetően olyanokra kell gondolnunk, ahol a cél a bőr vagy a fogak dörzsölése, súrolása. Ezért megtalálhatjuk a mikroműanyagokat bőrradírokban, tusfürdőkben és fogkrémekben is. Amint lemosunk ezeket a termékeket magunkról, a szemcsék azonnal bekerülnek a vízbe és hosszú utazásuk során végül a felszíni és felszín alatti vizeinkben köthetnek ki. A műanyag csomagolóanyagokkal hasonló a helyzet: ha a környezetbe kerülnek, ott pl. aprózó, dörzsölő hatások, hőhatás, az ultraviola sugárzás vagy akár mikrobiológiai bontás következtében egészen apró szemcsékké töredezhetsz és ismét a mikroműanyag szemcsékhez jutunk.

A mikroműanyagok a vízi élőlények szervezetébe kerülve felhalmozódnak, fizikai sérüléseket okozhatnak és gyulladásos folyamatokat indíthatnak el. A szemcsék a szervezetben megzavarhatják a biológiai folyamatokat, irritációt okozhatnak a bélrendszerben, befolyásolhatják a bélben élő mikrobák működését, a zsírok lebontását és oxidatív stresszt okozhatnak. Felvételük során más szennyezőanyagok is bekerülhetnek szervezetbe növelve ezek potenciális toxikus hatását.

De mit tehetünk mi, akik nap mint nap használjuk a kozmetikai termékeket? Először is, legfontosabb a tájékozottság! Ismerjük meg a kozmetikai termékekből származó mikro-szennyezőanyagokkal

(nanoanyagok, mikroműanyagok, antimikrobiális szerek, ipari segédanyagok, felületaktív anyagok, tartósítószer, mesterséges pigmentek) kapcsolatos környezeti aggályokat és törekedjünk a környezetbarát alternatívák használatára, a káros hatások minimalizálása érdekében! Az ilyen termékek ugyanis természetes, lebomló összetevőket tartalmaznak, amelyek nem terhelik a környezetet, és az emberi egészségre sem jelentenek veszélyt. A témában való tájékozódáshoz hasznos támpontot nyújthat a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Környezeti Mikrobiológia és Biotechnológia Kutatócsoportjának Szépség és Környezet című tudományos ismeretterjesztő projektje, melynek keretein belül kifejezetten a kozmetikai termékekben megtalálható mikro-szennyezőanyagok környezeti hatásaival kapcsolatos problémák és azok lehetséges megoldásainak témakörében születnek közösségi média tartalmak. A Szépség és Környezet nevű TikTok, Instagram, FaceBook és YouTube csatornákon, tudományosan megalapozott tényeket és tippeket érhetőek el a témában!

A projekt keretein belül indult egy közösségi tudomány kampány, amelynek során lehetősége lesz bárkinek Magyarországon élővizeiből - különösen strandok, fürdőhelyek területéről - vízminztát venni és egy rövid online kérdéssor kitöltése után azt beküldeni környezettoxikológiai és analitikai-kémiai elemzésre! A mintákat környezettoxikológiai és analitikai kémiai módszerekkel elemezzük, az eredményeket pedig a kampány végén nyilvánosságra hozzuk. A kampány fő célja, hogy felmérjük a kozmetikai termékekből származó mikro-szennyező anyagok jelenlétét és hatását hazai fürdővizeinkben, amely csak közös összefogással sikerülhet!

Fekete-Kertész Ildikó
Márton Rita
Molnár Mónika
Feigl Viktória
(BME)



AKI kíváncsi Kutató a Természettudományi Kutatóközpontban

A HUN-REN természettudományi Kutatóközpont július 13-19 között 15. alkalommal rendezi meg „AKI Kíváncsi Kutató” nyári kutatótáborát középiskolás diákok részvételével. A tábor célja elsősorban a tudománynépszerűsítés, illetve segítséget nyújtani a természettudományos érdeklődésű diákok pályaválasztásához.

A táborba a választható témákra az ország különböző középiskoláiból pályázatukkal bejutott résztvevő diákok egy héten át párosával dolgozhatnak kutató témavezetők irányításával, különböző modern kémiai, biológiai és pszichológiai kutatási témákon a Természettudományi Kutatóközpont laboratóriumaiiban. A pályázatok határideje 2025. május 31.volt. A diákok a hét során betekintést nyerhetnek egy-egy tudományterületre, és a gyakorlatban is kipróbálhatják az ott alkalmazott módszereket.

A diákok megismerhetik a dolgozó kutatók munkáját, nemcsak bemutatókon, hanem laza, kötetlen beszélgetések során is. A Kutatóközpont a programokat úgy alakítja, hogy legyen idő beszélgetni, közös élményeket szerezni. A korábbi táborok sok résztvevője még évek múlva is tartja a kapcsolatot a táborban megismert barátaival. A szervezők ebben az évben is visszahívnak néhány korábbi táborozót, akik ma már egyetemisták. Ők első kézből mesélnek arról, milyen volt bejutni a vágyott szakra, milyen az egyetemi élet, és mire érdemes figyelni, ha valaki hasonló pályára készül. A tábor utolsó napján egy 10 perces előadásban mutatják be szerzett új ismereteiket. A tábor idejére a résztvevők kollégiumban nyernek elhelyezést.

A tábor megrendezését a Richter Gedeon Nyrt. támogatja, így a résztvevő diákoknak lehetőségük lesz betekintést

nyerni a Richter Gedeon gyógyszergyár laborjaiban folyó munkába is. Egy kerekasztal-beszélgetés keretében találkozhattok a Richter szakembereivel, akik szintén megosztják tapasztalataikat, inspiráló pályatörténeteiket, és hasznos tanácsokat adnak azoknak, akiket érdekel a tudományos vagy ipari kutatói pálya.

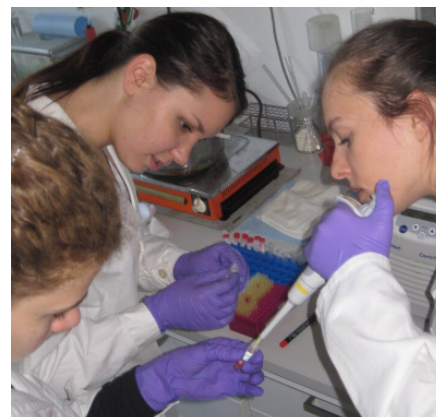
A választható témák kivonatai a következők:

1. Fémfák növesztése elektrokémiai úton

Kutatócsoport: Funkcionális Határfelületek Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet
Bizonyos fém sók vizes oldatából elektromos áram hatására az elektródokon fémbevonatok képződnek. Ezen a jelenségen számos – kis- és nagyipari, gyújtónevelőkön – galvanizálásnak nevezett eljárás alapul. A laboratóriumi program néhány, kapilláris- illetve vékonyréteg-cellában, különböző fém só oldatában végrehajtott fémleválasztási kísérletből áll. Ezek során megvizsgálják, hogy a leválasztott fém szerkezete hogyan függ a kísérletek körülményeitől.

2. Humán bélrák eredetű sejtek vizsgálata TIMIDILÁT- szintáz gátló kemoterápiás gyógyszerkezelések során

Kutatócsoport: Molekuláris



Élettudományi Intézet, Genom metabolizmus kutatócsoport
A négyféle DNS-t alkotó nukleotidon (dGTP, dATP, dCTP és dTTP) kívül előfordulhatnak más bázisok is a DNS-ben, amik gyakran hibát jelentenek. Az uracil bázis egy ilyen gyakran előforduló hiba, ami két forrásból is származhat. A táborban a jelentkező diákokkal különböző kezelési idejű (várhatóan 12 h, 24 h, 36 h és 48 h) humán rákos sejtvonalból származó mintákon végeznek méréseket, amikből a minta DNS-beli uraciltartalmára, vagy a kezelés során indukálódott fehérjék mennyiségére vagy lokalizációjára következtethetnek majd.

3. Igaz-hamis, válaszkérés pirolízissal!

Kutatócsoport: Megújuló Energia Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet
A pirolízis során oxigénmentes közegben hőt közlünk egy anyaggal, ami ennek hatására elbomlik. A hőbomlás során a mintából jellemzően mindhárom halmazállapotú termék keletkezik, tehát szilárd, folyadék és gáz is. Ezek közül a magas hőmérsékleten illó folyadék és a

gáz termékek azonosítására jól használható a pirolízis-gázkromatográfia-tömegspektrometria (Py-GC/MS) módszer

A tábor során a diákok különböző textílek, illetve műanyag tárgyak összetételét vizsgálhatják Py-GC/MS készülékkel.

4. Látási rendellenesség mérése virtuális valóság-EEG mérési környezetben

Kutatócsoport: Kognitív Idegtudományi és Pszichológiai Intézet, Látás Rendszerszintű Neurobiológiája Kutatócsoport

A téma során a diákok betekintheznek egy gyerekeken végzett, látás megértésére irányuló agyi kutatásba. A módszereket és eszközöket megismerve a diákok aktívan résztvesznek a vizsgálatokban. A vizsgálat elvégzésével megérthetik, hogy máshogy működik-e társaihoz képest annak a gyerekek az agya, akit korábban kancsalság okozta tompalátással kezeltek. Ennek a kutatási projektnek a részeként megvizsgálják, hogy szemtakarással hogyan tudunk hatni az agyunk működésére.

Műanyag hulladékok újrahasznosítási lehetőségeinek feltárása

Kutatócsoport: Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet.

A műanyag hulladék megfelelő kezelése és újrahasznosítása kulcsfontosságú lehet a fenntartható jövő érdekében. Ezért egyre nagyobb figyelmet kell fordítani olyan technológiákra és módszerekre, amelyek lehetővé teszik ezen anyagok újbóli felhasználását. A tábor során a diákok nemcsak betekintést nyerhetnek a műanyagok újrahasznosítási lehetőségeibe, hanem aktívan részt is vehetnek a csoportban zajló kutatásokban. Saját kezűleg végezhetnek kísérleteket (extrúzió, fröccsöntés, mechanikai vizsgálatok, stb.), így megtapasztalhatják a kutatómunka izgalmas és kreatív oldalát.

Nanométerek az élelmiszertechnológiában - felületaktív molekulák 2D és 3D szerveződése

Kutatócsoport: Funkcionális Határfelületek Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet.

Felületaktív anyagokat számos esetben használunk a mindennapokban, például amikor szappanos vízzel zsíros-olajos szennyeződést távolítunk el, de különféle élelmiszeripari, kozmetikai technológiák során is gyakori, hogy egy hidrofób, vízben nem oldódó komponenst szeretnénk a lehető legfinomabban szétoszlatni egy vizes közegben. A diákok az általános preparatív laboratóriumi minta-előkészítés után bepillantást nyernek a felületaktív molekulákból álló kétdimenziós Langmuir-film készítésének technikájába, amelynek segítségével meghatározhatják akár egyetlen molekula méretét is; valamint megismerkednek a nano mérettartomány egyik népszerű méretmeghatározási módszerével: a lézeres dinamikus fényszórásméréssel.

Ne habozz! – Ismerd meg a polimer habok világát!

Kutatócsoport: Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

A polimerek egyik legfontosabb és legszélesebb körben alkalmazott családja a habok. Ezek olyan kétfázisú rendszerek, amelyek esetén egy szilárd polimer mátrixban gázt diszpergálunk. A tábor során a diákok betekintést nyerhetnek a habok buborékokkal teli világába és megismerkedhetnek a fenntarthatóságot előtérbe helyező kutatási irányokkal is.

Pillanatfelvétel az őssejtkutatás állapotáról

Kutatócsoport: Molekuláris Élettudományi Intézet, Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport
A laboratóriumban mindentudó (pluripotens) őssejtekkel foglalkoznak, amelyek azért mindentudók, mert nagyon sokféle sejttypust lehet belőlük létrehozni. Dobogó szívizomzatot vagy kapcsolatokat

teremtő idegsejthálózatot nem probléma létrehozni. A diákok megismerkednek, hogy zajlik a kutatás és milyen egy sejttenyésztő laborban dolgozni.

Röntgensugár, mint nanomérő

Kutatócsoport: Biológiai Nanokémia Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet

A szórás módszerek (röntgen, neutron) különösen nagy jelentőséggel bírnak ott, ahol az optikai módszerek (mikroszkópia) felmondják a szolgálatot, valamint ahol fontos, hogy a mérési eredmények statisztikailag reprezentatívak legyenek, jól jellemzett megbízhatósággal. A kutatótáborban lehetőség nyílik egy ilyen mérési módszerrel, a kisszögű röntgenszórással (small-angle X-ray scattering, SAXS) való megismerkedésre. A kutatócsoportban működik hazánk egyetlen, saját tervezésű SAXS berendezése, amellyel lehetőség van bepillantani a mikroszkóppal is láthatatlanul kicsi mérettartományba. E különleges mérőeszköz segítségével a tábor résztvevői tapasztalatot szerezhetnek a szórás módszerek lehetőségeiről, előnyeiről és hátrányairól is, valamint beleláthatnak a modern számítógépes adatgyűjtési és -kiértékelési technikákba is.

Rákellenes hatóanyagot tartalmazó gangliozid nanomicellák: fiziko-kémiai és biológiai vizsgálatok

Kutatócsoport: Funkcionális Nanorészecskék Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet és Gyógyszerrehabilitáció Kutatócsoport, Molekuláris Élettudományi Intézet
A rák elleni küzdelem jelenkorunk egyik legnagyobb orvostudományi kihívása. A tumorok hatékony alkalmazkodó mechanizmusai miatt a rák kezelés gyakran kudarcot vall a fellépő gyógyszerrehabilitáció következményeképpen. A terápiás hatékonyság növelhető, amennyiben a jelenleg alkalmazott rákellenes szereket



új típusú gyógyszerhordozó rendszerekkel kombináljuk. A kutatócsoportokban a legalkalmasabb gyógyszerhordozó nanoterapeutikumokat in vitro ráksejt kultúrákon tesztelik. A diákok egy kiválasztott rákellenes szer mikrokapszulázását egy alkalmas gangliozid molekulával tanulmányozzák, és megvizsgálják a fizikai (méret, morfológia) és kémiai tulajdonságait (hatóanyagtartalom, hatóanyag felszabadulás).

Tömegspektrometria a rákkutatásban

Kutatócsoport: Glikán Biomarker Kutatócsoport, Szerves Kémiai Intézet
A tömegspektrometria (MS) egy rendkívül széleskörben elterjedt nagyműszeres technika, amelyet többek között az orvostudomány, élelmiszeripar, anyagtudomány és környezetvédelem területén is elterjedten alkalmaznak. Fehérjék nélkül szervezetünk nem tudna megfelelően működni, ezért ezen építőkövek tanulmányozása rendkívül fontos. A proteomika tudományága arra összpontosít, hogy egy szervezet teljes fehérjekészletét minél alaposabban jellemezze minőségi és mennyiségi szempontból, és megállapítsa, ezek hogyan változnak különböző körülmények, pl. daganatos megbetegedések során.
A témát választó diákok a tábor egy hete során megismerkednek az analitikai labormunka alapjaival, majd rákos szövetmetszeteket emésztenek és a képződött peptidmintákat só mentesítik. Az elkészült mintákat egy korszerű folyadékkromatográfiával kapcsolt tömegspektrométeren fogják megmérni, majd a kapott eredményeket számítógépes szoftverekkel értékelik ki és biológiai kontextusba helyezik.

Tüzelőanyag-cellák

Kutatócsoport: Megújuló Energia Kutatócsoport, Anyag- és Környezetkémiai Intézet
A megújuló energiaforrások felhasználásával kapcsolatos kutatások

HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont

HUN REN 

AKI KÍVÁNCSI KUTATÓ

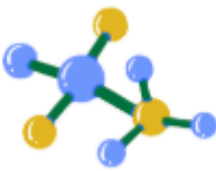
NYÁRI TÁBOR

2025. JÚLIUS 13 - 19

Ha szeretnéd felfedezni a kutatói élet izgalmas világát, akkor itt a helyed!

Témák és részletes információk:







Sikeres pályázat esetén a részvétel ingyenes, szállást és teljes ellátást biztosítunk!

RICHTER GEDEON NYRT

napjainkban egyre nagyobb hangsúlyt kapnak. Ezeknek egy fontos részterülete a tüzelőanyag-cellák fejlesztése, illetve, ennek előfeltételeként, az ehhez szükséges vizsgálatok elvégzése és az ebből nyert eredmények értelmezése és összehasonlítása. A tüzelőanyag-cellákkal kapcsolatos kutatásoknak számos iránya létezik, amelyek közül a

diákok a katalizátor és a membrán összetételének hatásával ismerkedhetnek meg. A tüzelőanyag-cellák általános felépítésén és működésén túl megismerhetik a membránelektrod-együttesek előállításának laboratóriumi léptékű módszereit és lépéseit.

Tompos András

Szerkezet, dinamika, molekuláris kölcsönhatások

Az anyagi rendszerek tulajdonságait, kölcsönhatásait nagymértékben meghatározza az őket alkotó vegyületek szerkezete. A molekulák és ionos rendszerek háromdimenziós szerkezetét többféle módszerrel tanulmányozhatjuk, melyek közül a legelterjedtebb az egykristály-diffrakció és az NMR (Mágneses Magrezonancia) spektroszkópia. Írásunkban az utóbbiba nyújtunk betekintést az Olvasó számára az alapjelenség bemutatását követően egy konkrét fehérjemolekula példáján.

Az NMR spektroszkópia a molekuláris rendszerek vizsgálatának hatékony eszköze. Előnye, hogy roncsolás nélkül, bizonyos atommagok mágneses tulajdonságait kihasználva nyújt nagy felbontású információt a molekulák szerkezeti és dinamikai sajátságairól. Segítségével igazolhatjuk, hogy egy kívánt kémiai reakció végbement, információt nyerhetünk a molekulákban levő funkciók csoportok egymáshoz viszonyított helyzetéről, meghatározhatjuk az atomok háromdimenziós koordinátáit egy akár több ezer atomos fehérjemolekulában. Feltárhathatjuk a molekulákban zajló belső mozgásokat, amelyeknek a szerkezethez hasonlóan gyakran meghatározó szerepe van a funkcióban. De megvizsgálhatjuk azt is, hogy egy másik molekula (kölcsönható partner) jelenléte vagy éppen a hőmérséklet, a pH változása hogyan befolyásolja a szerkezetet. Az atomi szintű információt kinetikai és termodinamikai paraméterekkel egészíthetjük ki összefüggést teremtve a mikrovilág és a makroszkopikusan megfigyelhető valóság között. Mindezek a vizsgálatok hozzájárulnak nemcsak az anyagi rendszerek működésének jobb megértéséhez, de új, kívánt fizikai, kémiai, vagy biológiai tulajdonsággal rendelkező molekulák (pl. gyógyszerhatóanyagok) fejlesztéséhez.

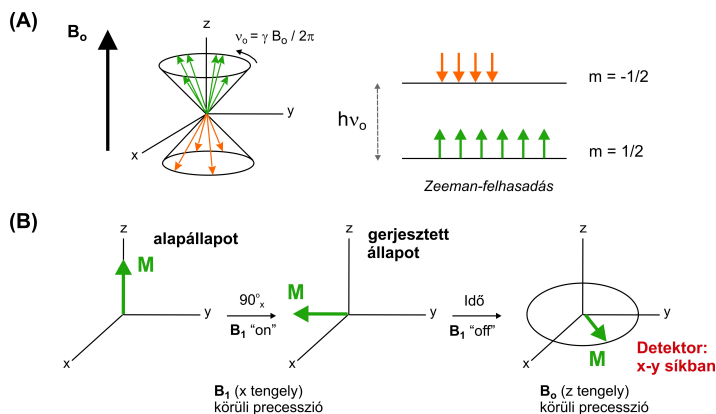
MÁGNESES MOMENTUMOK NYOMÁBAN

A mágneses momentummal, más néven spinnel rendelkező atommagok (pl. ^1H , ^{13}C , ^{15}N) külső mágneses térben (B_0) parányi iránytűhöz hasonlóan igyekeznek kitüntetett irányt felvenni. Az atomok világában uralkodó sajátos törvények miatt azonban az iránytűvel ellentétben a magspinek nem tudnak tökéletesen beállni az észak-déli irányba. Helyette az $I=1/2$ spinnel rendelkező atommagok, mint például az ^1H , egy a B_0 tér irányával (a mi tárgyalásunkban tipikusan $+z$ -irány) megegyező vagy azzal ellentétes tengelyű kúp palástján helyezkednek el, és



egyenletes sebességgel köröznek a kúp palástja mentén (1a. ábra). Ezt a mozgást Larmor-precesszióknak nevezzük, amelynek a frekvenciája $\nu = \gamma B_0 / 2\pi$, ahol γ az adott magra jellemző giromágneses hányados. Egy ^1H atommagra 14,1 Tesla külső mágneses tér esetén például $\nu = \sim 600$ MHz. Mivel $\gamma > 0$ magok esetén, mint a hidrogén atommagja is, a B_0 -val megegyező irányba mutató elrendeződés energetikailag kedvezőbb a mágneses momentumok számára, egyensúlyi állapotban a „felfelé” nyitott kúp palástján több ^1H mágneses momentum köröz, mint a „lefelé” nyitott kúpén. Ez azt jelenti, hogy egyensúlyi helyzetben az eredő – makroszkopikus – mágnesezettség a B_0 tér irányába mutat (1b. ábra).

Az energiakülönbség a két állapot között felelő spinű magra $\Delta E = +1/2 \hbar \gamma B_0 - (-1/2 \hbar \gamma B_0) = \hbar \gamma B_0$, ami nem más, mint $h\nu$, a Larmor-frekvencia és a Planck-állandó ($h = 6,626\,070\,15 \cdot 10^{-34}$ Js) szorzata. A mágneses momentummal rendelkező atommagok energiaszintjeinek ily módon történő felhasadását külső mágneses térben Zeeman-effektusnak nevezzük. Ez a jelenség az NMR spektroszkópia alapja. Az izgalmak ezután kezdődnek! Helyezzünk



1. ábra (A) Spin-1/2 magok felhasadt energiaszintjei z-irányú külső statikus mágneses térben (B_0). A mágneses momentumok a +z és a -z tengelyű kúp palástja mentén precesszálnak a Larmor frekvenciájukkal (ν_0). Egyensúlyi állapotban a makroszkopikus mágneszettség a B_0 tér irányába mutat. (B) Energiakvantum elnyelése az oszcilláló rádiófrekvenciás B_1 térből átmeneteket idéz elő az energiaszintek között, melynek hatására a minta makroszkopikus mágneszettsége megváltozik. Egy 90°-os x-irányú B_1 impulzus (hüvelykujj) a kezdeti z-irányú mágneszettséget (mutatóujj) a „jobbkez szabálynak” megfelelően a -y-irányba (középső ujj) dönti. Az impulzust követően a magok újra a statikus B_0 teret érzékelik és a z-tengely körül precesszálnak kezdetben az x/y síkban, majd fokozatosan visszatérve az egyensúlyi állapotba. Az NMR kísérlet során ezt a mágneszettséget detektáljuk.

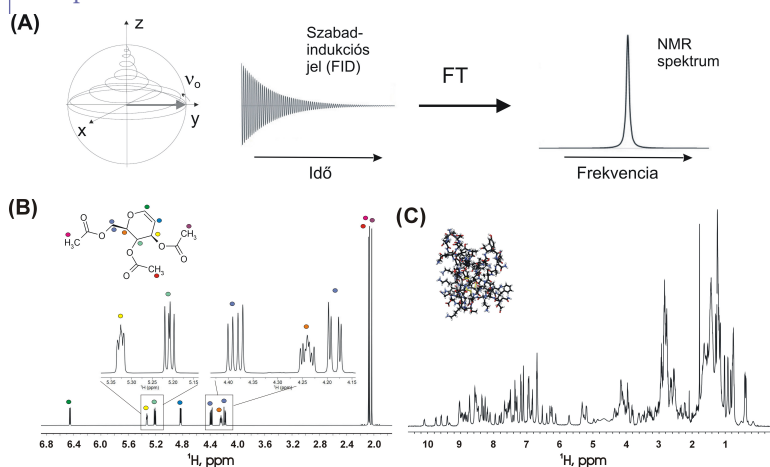
el a minta közelében egy dróttekerceset, amelynek a tengelye merőleges a B_0 tér irányára, azaz a z-tengelyre, és néhány mikroszekundumra ($1 \mu s = 10^{-6} s$) vezessünk a tekercsbe olyan szinuszosan változó áramot, amelynek a frekvenciája megegyezik a precesszáló magok Larmor-frekvenciájával. A váltakozó áram hatására oszcilláló mágneses tér alakul ki ($B_{1x} \cos(\nu \cdot t)$), amelyet megérezve a spinek, az alacsonyabb energiaállapotból a magasabb energiaállapotba kerülnek. Makroszkopikusan úgy kell elképzelni, mintha az eddig z-irányú mágneszettség az x-irányú oszcilláló B_1 tér hatására lebillenne a z-y síkban (1b. ábra).

Az NMR

spektroszkópia egyik előnye, hogy nagyon széles időskálán képes információt nyújtani a belső mozgásokról.

Hogy pontosan milyen szögben billen le, az az alkalmazott rádiófrekvenciás impulzus erősségétől és hosszától függ. A mágneszettséget a z-ből éppen az y-tengely irányába döntő impulzust 90°-os, a -z irányába döntő (invertáló) impulzust 180°-os pulzusnak nevezzük. Ezekből a meghatározott időpontokban generált, meghatározott erősségű és hosszúságú rádiófrekvenciás impulzusokból áll az NMR pulzus szekvencia, amely a mágneses momentumokat a mérés során manipulálja, például mágneszettséget visz át az 1H atomokról a velük kötésben lévő ^{13}C , ^{15}N , vagy más NMR-aktív atomokra. A rádiófrekvenciás impulzus-sorozat kikapcsolását követően a magspinek visszatérnek az alapállapotba (2a. ábra), melynek során a vevő tekercsben gyenge, Larmor-frekvenciával oszcilláló, időben csökkenő váltakozó feszültségű jel indukálódik. A mérés során ezt az exponenciális burkoló görbék között csökkenő jelet detektáljuk, amelyet a szakirodalom FID-nek (Free Induction Decay – szabad indukciós jel) nevez. Az időben csökkenő jel ún. Fourier-transzformációjával (FT) nyerjük a Hz-ben mért NMR spektrumot (2a. ábra).

„A Fourier-transzformáció egy matematikai művelet, amelynek segítségével egy összetett hullám különböző frekvenciájú komponenseire bontható.”



2. ábra (A) Az NMR kísérlet során a rádiófrekvenciás impulzus(oka)t követően az x/y-síkban időben – relaxációs folyamatok miatt – csökkenő, ún. szabad indukciós feszültségjelet detektálunk. Ez utóbbit Fourier-transzformálva kapjuk az NMR-spektrumot a frekvencia függvényében. (B) Egy egyszerű szerves molekula 1H NMR spektruma. A színes korongok az egyes 1H atomok hozzárendelését jelölik. A két kinagyított spektrum részlet mutatja a megfelelő rezonanciajelek J-csatolásból eredő multiplett szerkezetét. (C) Egy fehérje molekula 1H NMR spektruma. Míg a kisebb szerves molekulák jelhozzárendelése gyakran akár egydimenziós spektrumok felvételével is megoldható, a fehérjék több száz rezonanciajelének asszignációjához három- vagy akár négydimenziós NMR spektroszkópiai mérések kombinációja szükséges.

SZERKEZETI PARAMÉTEREK

A B_1 tér alkalmazásával tehát átmenetet idéztünk elő a két energiaállapot között miközben egy $\nu = \gamma B_0 / 2\pi$ frekvenciájú fotont az atommag elnyelt a rádiófrekvenciás térből. Mivel a mag körüli elektronfelhő nagymértékben befolyásolja a mag mágneses árnyékoltságát (és ezáltal a mag által érzékelt külső mágneses teret), attól függően, hogy az egyes ^1H (vagy más vizsgált) magok milyen elektronegativitású atommal vannak kémiai kötésben, illetve milyen funkciós csoportok (pl. aromás gyűrű) vannak a közelükben, egy adott molekulán belül is több (egy makromolekula esetén több száz vagy több ezer) rezonanciajelet kaphatunk a spektrumban. A rezonanciajelek frekvenciája (ún. kémiai eltolódás) minden egyes ^1H atomra a kémiai környezet függvénye, ami a vizsgált molekula szerkezetéről árulkodó egyik legfontosabb NMR paraméter. Értékét a vizsgált mag abszolút rezonanciafrekvenciájával normálva, ún. ppm (parts per million) skálán adjuk meg. Erre azért van szükség, mert a ΔE energiakülönbség és így a Hz-ben mért rezonanciafrekvencia függ a B_0 tértől, így normálás nélkül különböző terű készülékeken más és más értékeket kapnánk egy adott molekula rezonanciajeleire, ami nem lenne praktikus.

A kémiai eltolódáson kívül egy másik fontos NMR paraméter a csatolási állandó. A rezonanciajel ugyanis a legtöbb esetben nem egyetlen vonal (szingulett) a spektrumban, hanem az egymással kémiai kötésben lévő magok között az elektronok közvetítésével megvalósuló ún. skaláris (J)-csatolás eredményeképpen - a csatoló magok számától függően - dublett, triplett, kvartett, vagy összetettebb multipllett. A jelfelhasadás oka, hogy a csatoló spinek a B_0 térhez képesti orientációjuknak megfelelően csökkentik vagy növelik a kiszemelt spin számára érzékelhető mágneses teret. Egy feles spinkvantumszámmal ($I=1/2$) rendelkező, H_A spin energiáját például egy vele J-csatolásban levő H_B spin a külső mágneses térhez viszonyított két lehetséges térállásának megfelelően 50%-ban csökkenti, 50%-ban növeli, aminek következtében a ν_A rezonanciajel $\nu_A + 1/2 J_{AB}$ és $\nu_A - 1/2 J_{AB}$ frekvencia értékeknek megfelelő dublettre hasad, ahol J_{AB} a H_A és H_B magok közötti skaláris csatolási állandó. Hasonlóan a H_B spin rezonanciajele is dublettre hasad, hacsak nincs más csatoló partnere a H_A -n kívül. Amennyiben más magokkal is csatol, úgy a H_B jele bonyolultabb multipllett szerkezetet ölt a spektrumban (2b. ábra). A multipllett vonalainak távolságából meghatározhatjuk a csatolási állandókat. A kémiai eltolódás és a csatolási állandók ismeretében a vizsgált molekulában funkciós csoportokat, spinrendszereket azonosíthatunk. Ezt a folyamatot hívjuk jelhozzárendelésnek, idegen szóval asszignációnak. A J-csatolás másik fontos tulajdonsága, hogy információval szolgál az illető funkciós csoportok geometriájáról (pl. cisz-transz izoméria) valamint, hogy segítségével mágnesezettséget vihetünk át egyik spinről a másikra.

Az NMR kísérlet során a rádiófrekvenciás impulzusokkal gerjesztett magok relaxációs folyamatok révén „igyekeznek” visszatérni az alapállapotba. A relaxációs mechanizmusok egyike

egy a J-csatolástól eltérő spin kölcsönhatáson, az ún. dipoláris csatoláson alapszik. A J-csatolással ellentétben a dipoláris csatolás nem az elektronok közvetítésével, hanem téren át hat, és fordítottan arányos a kölcsönható magok távolságának a köbével ($\sim 1/r^3$). Ezt kihasználva atom-atom távolságok állapíthatók meg a molekula egyes szegmensei között. (Pontosabban fogalmazva felső becslést tudunk adni az atomtávolságokra, amelyek felhasználásával távolságkényszereket állíthatunk fel a molekula atomjai között.) Sőt, mivel a dipoláris kölcsönhatás nem kötések mentén hat, akár molekulák közötti (intermolekuláris) távolságkényszereket is megállapíthatunk, ami rendkívül fontos a molekuláris kölcsönhatások tanulmányozásánál. A távolság, ameddig „ellátunk” a csatoló magok giromágneses hányadosától függ. Oldatfázisban tipikusan a hidrogén atomok közötti dipoláris csatolást használjuk ki és állítunk fel 6 Å-nál rövidebb ^1H - ^1H távolság kényszerfeltételeket, amelyeket az effektus felfedezőjéről NOE (nukleáris Overhauser effektus) kontaktusoknak nevez a szakirodalom.

JELHOZZÁRENDELÉS ÉS SZERKEZETMEGHATÁROZÁS

Míg kismolekulák NMR spektroszkópia vizsgálata során gyakran egydimenziós spektrumokból is elegendő információhoz jutunk (2b. ábra), nagyobb molekulák vizsgálata esetén a felbontás növelése érdekében két- vagy többdimenziós mérésekhez kell folyamodnunk. Ezek lehetnek homo- (^1H - ^1H) vagy heterokorrelációs (pl. ^1H - ^{13}C , ^1H - ^{15}N) mérések. Jelentős részüik a skaláris (J)-csatolás segítségével teremt korrelációt az egyes atomok között, és a jelhozzárendelésben van szerepe. Erre látunk példát a 3a. ábrán két egymással kombinációban alkalmazott mérés segítségével a fehérjejerinc asszignációjára. Amint ez megvan, értelmezni tudjuk a fehérje ún. ujjlenyomat-spektrumát (3b. ábra), amelyen minden egyes keresztescsúcs egy-egy aminosav amid NH-csoportjának felel meg. Ilyen típusú spektrumok felvételével nyomon követhetjük a hőmérséklet, a pH, vagy éppen egy kölcsönható partner (ligandum, másik fehérje) okozta szerkezeti változásokat. A fehérjejerinc hozzárendelését követi az oldallánc atomok kémiai eltolódásainak meghatározása. Ezek esetében gyakran kihasználjuk, hogy az aminosavak ^1H atomjai jellegzetes korrelációs mintázatokat adnak (3c. ábra).

Amint azonosítottuk, hogy melyik rezonanciajel melyik atomhoz tartozik a vizsgált molekulában, a következő lépés a szerkezetmeghatározásban a távolságkényszerek felállítása. Egy fehérje molekulában például gyakran több ezer NOE-effektuson alapuló ^1H - ^1H távolságkényszer határozunk meg, majd ezek birtokában matematikai algoritmusok felhasználásával számítjuk ki az atomok háromdimenziós koordinátáit. A feladat ahhoz hasonló, mintha a települések közötti távolságok ismeretében szeretnénk felrajzolni egy ország térképét. Fontos megjegyezni, hogy a távolságkényszerek mellett más paraméterek is segítik a szerkezetmeghatározást. Ilyenek maguk a kémiai eltolódás



HÉT IZGALMAS TÉNY AZ NMR-RŐL

1. Az NMR vizsgálatokat a kórházakban használt MRI berendezésekhez hasonló nagyterű (kb. 5-20 Tesla) szupravezető mágnesekben végezzük. Összehasonlításképpen a Föld mágneses mezeje 50° szélességen 2·10⁻⁵ Tesla, egy nagy patkómágnes mágneses tere pedig 0.001 Tesla.

2. Az NMR mérések során alkalmazott rádiófrekvenciás impulzusok tipikusan 5-20 μs hosszúságúak. Minél rövidebb egy impulzus, annál szélesebb frekvenciatartományban képes gerjeszteni a vizsgált molekula magspinjeit. Néha azonban éppen arra van szükség, hogy egy adott magspint szelektíven gerjesszünk. Ehhez hosszabb, ms hosszúságú, gyakran ún. formázott rádiófrekvenciás impulzusokat alkalmazunk.

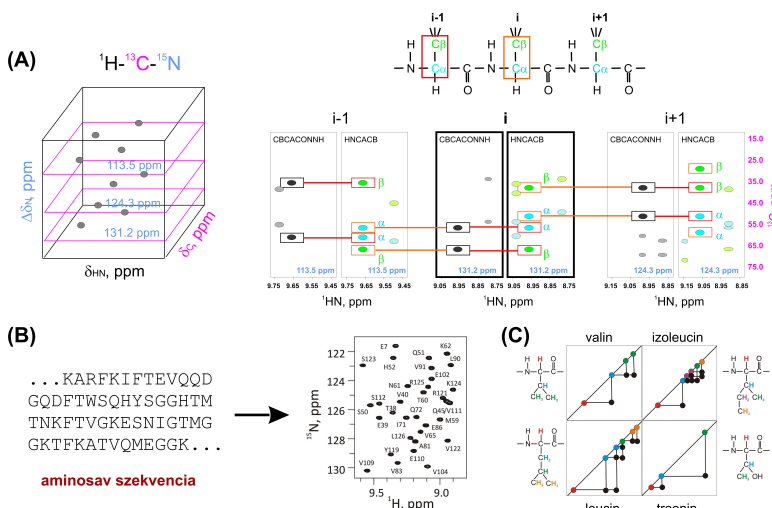
3. Minél nagyobb egy mag giromágneses hányadosa, annál nagyobb az energiakülönbség a Zeeman-energiaszintek között, és ennek megfelelően a betöltöttség-különbség, és az érzékenység. A másik fő befolyásoló tényező a külső mágneses tér erőssége, azaz a mágneses térereje. Emiatt fontos a nagyterű szupravezető mágnesek alkalmazása, amellyel nagymértékben csökken a mérési idő, lehetőség van kisebb koncentrációjú minták vizsgálatára, és nő a felbontás.

4. A mágnesesen aktív ¹H, ¹³C, és ¹⁵N magok természetes izotóp előfordulása rendre 99.9885 %, 1.07 %, és 0.4 %. A többdimenziós, ¹H-¹³C-¹⁵N korrelációs mérések kivitelezéséhez fehérjékben így a természetes ¹²C (98.93 %) izotópokat ¹³C-re, a ¹⁴N (~99.63 %) izotópokat ¹⁵N-re kell mesterségesen cserélni. Leggazdaságosabban ez ún. rekombináns DNS-technológiával oldható meg, melynek során a fehérjét erre alkalmas gazdasejtben (pl. E. coli baktérium) termeltetjük ¹³C, ¹⁵N-jelzett tápanyagokat (pl. ¹⁵N NH₄Cl, ¹³C α-D-glükóz) tartalmazó tápoldatban.

5. Egyes magok, pl. a ¹⁹F különösen széles ún. kémiai árnyékolási anizotrópiával rendelkeznek, és emiatt rendkívül érzékenyen reagálnak a kémiai környezetben bekövetkező változásokra. Segítségével egészen kis mennyiségben jelenlevő köztes (intermedier) állapotok is jól vizsgálhatók. Ráadásul a mágnesesen aktív ¹⁹F mag természetes izotópelőfordulása 100 %, így nincs szükség izotópjelzésre. Hasonlóan 100 %-os természetes izotópelőfordulású az NMR-aktív ³¹P-mag.

6. Az oldatfázisú fehérje NMR vizsgálatok legfőbb limitációja a molekulaméret. Több száz kilodaltonos fehérjék esetén ugyanis olyan lassú a rotációs diffúzió az oldatban, hogy az irányfüggő spin kölcsönhatások nem átlagolódnak megfelelően ki, és az NMR spektrumban túl széles jeleket kapunk, amelyek akár el is tűnhetnek az alapvonalban. Bár folyamatosan születnek új megoldások a probléma csökkentésére, ez napjainkban is jelentős kihívás.

7. NMR spektroszkópiai vizsgálatokat szilárd fázisú (por, gél) mintákon is végezhetünk. Ebben az esetben mérhető akár sincs! Így jól alkalmazhatók polimerek vagy nagy méretű membrán fehérjék tanulmányozására akár olyan módon is, hogy a fehérjét a fiziológiai körülményeket megközelítő membránba ágyazzuk. Az irányfüggő spin kölcsönhatások kiküszöbölésére a szilárd fázisú NMR vizsgálatok során a mintát egy a külső mágneses térrel 54.7°-ot (ún. mágikus szög) bezáró tengely mentén nagy sebességgel (10,000-60,000 Hz) pörgetjük.



3. ábra (A) Háromdimenziós NMR mérés szemléltetése, ahol az egyes dimenziók az ¹H, ¹³C, és ¹⁵N kémiai eltolódásoknak felelnek meg. A mérés során az egymással kémiai kötésben levő hidrogén, szén, és nitrogén atomok között állítunk fel korrelációkat. Az ábra jobb oldali részén két gyakran használt háromdimenziós mérés sematikus ábrája látható. Az ún. HNCACB mérés a fehérjében található i-dik aminosav amid N és H atomját korrelálja az i-dik és i-1-dik aminosav C_α és C_β atomjával. A másik, ún. CBCACONNH mérés az i-dik aminosav amid N és H atomját korrelálja az i-1-dik aminosav C_α és C_β atomjával. A két mérés összevetésével – az aminosav szekvencia ismeretében – a H, N, C_α, C_β atomok rezonanciajelei az egyes aminosav egységekben dominánszerűen meghatározhatók. A kiértékelést segíti, hogy az aminosavak C_α, C_β atomjainak rezonanciajelei karakterisztikus kémiai eltolódás értékeknél jelennek meg. (B) A fent említett és más hasonló háromdimenziós mérések kombinációjával a fehérje szinte minden egyes atomjának a rezonanciajele azonosítható. Az ábrán a fehérjék szerkezeti és dinamikai vizsgálata során egyik tipikusan alkalmazott kétdimenziós ¹H-¹⁵N korrelációs spektrum kinagyított részlete látható, amelyben minden keresztcsúcs egy-egy aminosav-egységnek felel meg, és emiatt a fehérjék „ujjlenyomat spektrumának” is szokás nevezni. (C) A fehérjegerinc asszignációját követően az aminosav oldalláncok hozzárendelését segíti, hogy jellegzetes ¹H-¹H korrelációs mintázatot adnak.

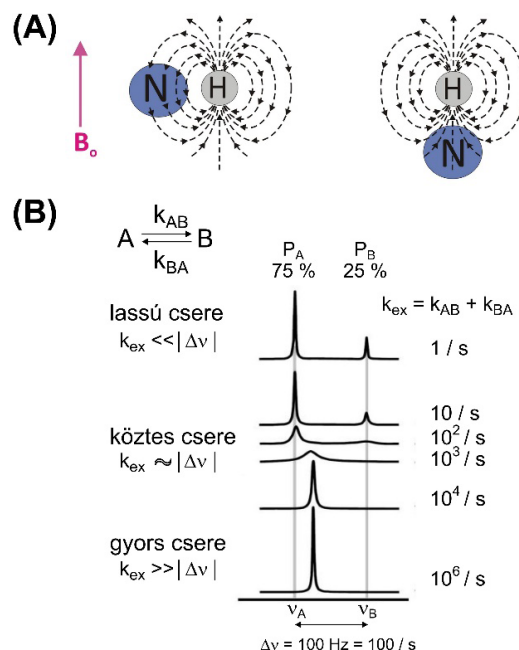
értékek, hiszen, mint említettük, ez függ az atomok kémiai környezetétől és emiatt gyakran a molekulaszegmens geometriájától (egy fehérje molekula esetén például függ a gerincatomok torziós szögétől, azaz más egy alfa-hélix és egy béta-lánc esetén). Nagyobb makromolekulák szerkezetvizsgálata során speciális módszerekkel lehetőség van a távolságkényszereket orientációs feltételekkel is kiegészíteni, melynek során meghatározható az egyes N-H kötésvektorok

egymáshoz viszonyított iránya, és ezáltal molekulaszegmensnek, alegységek relatív helyzete.

IZGÓ-MOZGÓ MOLEKULÁK

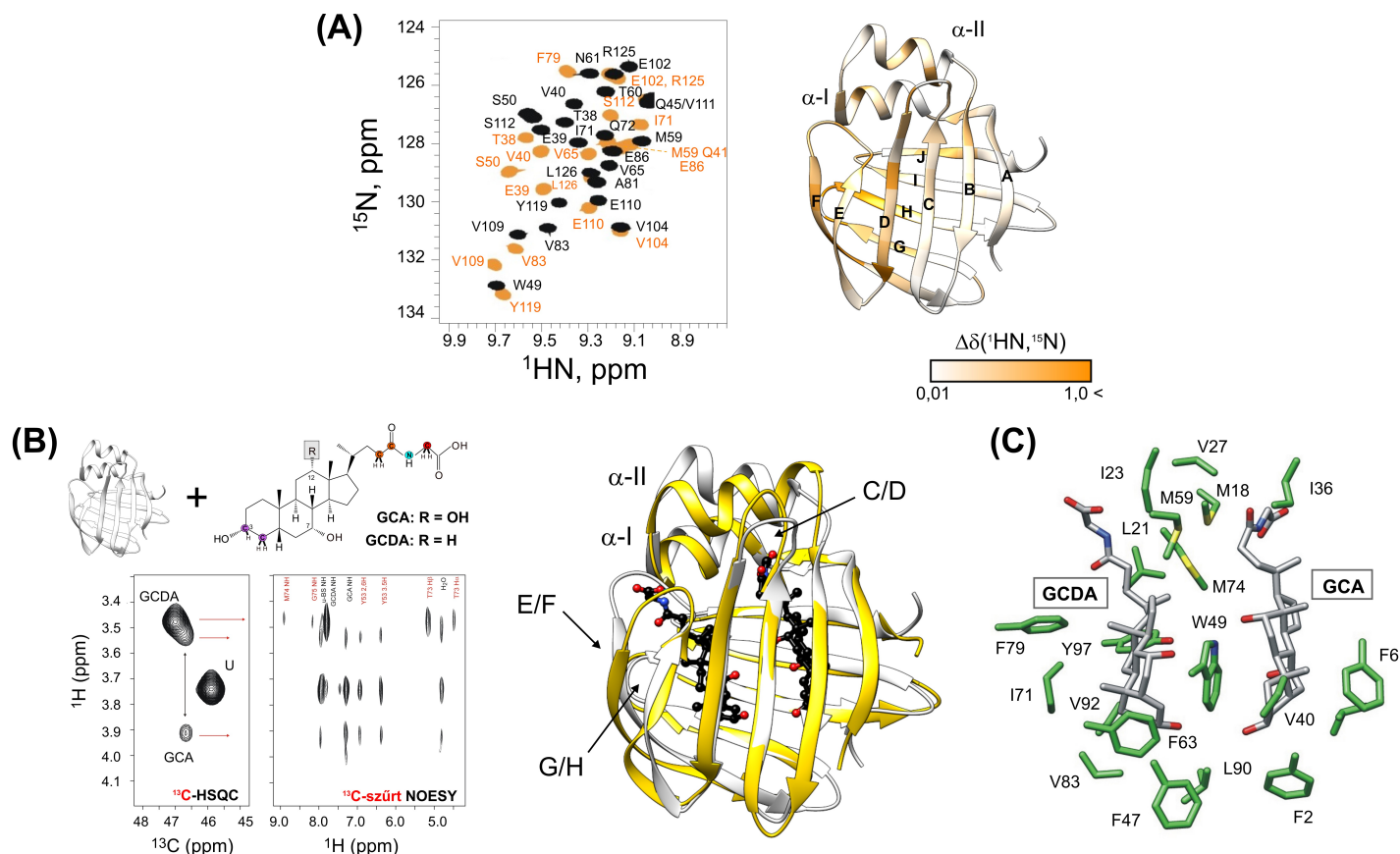
Bár sok esetben golyó- és pálcika modellel ábrázoljuk őket, a molekulák nem merev képződmények, hanem nagyon is mozgékony rendszerek, amelyekben különböző időskálán zajló, különböző amplitúdójú mozgások rakódnak egymásra. Az NMR spektroszkópia egyik előnye, hogy nagyon széles időskálán képes információt nyújtani a gyakran a molekulák funkcionális működésében is fontos szerepet játszó belső mozgásokról. Ilyen lehet például egy oldalláncforgás, egy gyűrűs molekula inverziója, vagy egy fehérjemolekulában zajló konformációs fluktuáció. A belső molekuláris mozgások NMR spektroszkópiai vizsgálata az esetek döntő többségében relaxációs mérések segítségével történik. Ennek során a vizsgálandó rendszert rádiófrekvenciás impulzusok alkalmazásával kibillentjük az egyensúlyi állapotból, majd követjük, amint az a magasabb energiájú (gerjesztett) állapotból az alapállapotba visszatér. A mérések általános alapja, hogy a molekulában zajló mozgások a mágneses tér modulálása révén befolyásolják a relaxációs viselkedést, ami azt jelenti, hogy a relaxációs paraméterek meghatározásával visszakövetkeztethetünk a belső dinamikai folyamatokra. A gyors szegmensmozgások hatásának szemléltetésére képzeljünk például el egy fehérje molekulában egy amid ^{15}N - ^1H kötést, amelyben mind a hidrogén-, mind a nitrogénmag külső mágneses térben parányi mágneses dipólusként viselkedik (4a. ábra). Ekkor a kötéstengely irányától függően az ^1H mag által generált mágneses erővonalak hol erősítik, hol gyengítik a ^{15}N mag által érzékelt lokális mágneses teret. Más szóval az N-H kötés forgása a ^{15}N mag által érzékelhető mágneses tér fluktuációjához vezet. Ez utóbbi pedig befolyásolja azt a sebességet, amellyel az egyensúlyi állapotból kibillentett ^{15}N mag visszatér az alapállapotba, azaz a relaxáció sebességét. A relaxációs paraméterekből rendparaméter számolható, amely az N-H kötés fluktuációjának amplitúdóját jelző mérőszám. A relaxációs sebesség meghatározását az NMR-impulzusszekvenciába iktatott késedelemi idő (t) változtatásával végezzük. A t idő függvényében a rezonanciajelek intenzitása az $\exp(-t/R_1)$ függvény szerint exponenciálisan csökken, ahol R_1 a ^{15}N mágneszettség relaxációjának sebessége a külső mágneses térrel párhuzamos (R_1) illetve arra merőleges (R_2) irányban. Ilyen típusú relaxációs mérések segítségével azonosítani lehet a molekulákban a flexibilis szegmenseket, valamint követni tudjuk a mozgékonyt érintő változásokat annak hatására, hogy a vizsgált molekula egy másik vegyülettel kölcsönhatásba lép.

Egy másik, NMR spektroszkópiával szintén vizsgálható fontos jelenség a kémiai vagy konformációs csere. Ez alatt azt értjük, amikor a molekula szerkezetének időbeli fluktuációja miatt a vizsgált mag árnyékolása változik. A csere sebességétől függően három eset különböztethető meg (4b. ábra). A legegyszerűbb



4. ábra Belső molekuláris mozgások tanulmányozása NMR-rel. (A) Az ^1H mag által keltett mágneses tér a kötéstengely irányától függően erősíti (jobbra) vagy gyengíti (balra) a külső (B_0) mágneses teret a ^{15}N mag helyén. A kötéstengely irányváltozása a mágneses tér fluktuációja révén befolyásolja a ^{15}N mag relaxációs viselkedését, ami azt jelenti, hogy a relaxációs paraméterek meghatározásával visszakövetkeztethetünk a belső dinamikai folyamatokra. (B) A kémiai csere három tipikus esete egy $A \rightleftharpoons B$ egyensúlyi folyamatra, ahol $k = k_{\text{AB}} + k_{\text{BA}}$ a cseresebességi állandó, ν_{AB} az A és B állapot Hz-ben mért kémiai eltolódás különbsége, p_A és p_B pedig az A és B állapot populációja.

eset az, amikor a Hz-ben mért kémiai eltolódás különbséghez képest a cseresebesség nagyon gyors - ekkor a detektált jel kémiai eltolódása az egyes állapotok eltolódásának populációkkal súlyozott átlaga. A másik véglet, a lassú csere határeset, amikor az egymással egyensúlyban levő két konformer jelét két jól elkülönülő kémiai eltolódás értéknél detektáljuk. Végül a harmadik eset, és egyben a legizgalmasabb, amikor a cserefolyamat a kémiai eltolódás időskáláján ($\sim 10^3 \text{ s}^{-1}$) zajlik – ebben az esetben a jel eltolódik és kiszélesedik. Gyakran tapasztaljuk ezt a jelenséget fehérjékben, mivel ez az időskála sokszor egybeesik a biológiai folyamatok (pl. enzimkatalízis) időskálájával, melyeknek a szabályozása sok esetben éppen az adott fehérjében zajló lassú konformációs mozgás révén történik. A konformációs cserepartner (magasabb energiájú állapot) gyakran csak kis koncentrációban (néhány %) van jelen, így hagyományos – nem relaxációs - módszerekkel nehezen kimutatható (ún. "láthatatlan állapot"). Fontos megjegyezni, hogy nemcsak a konformációs változások, de a kémiai kötések



5. ábra Az írásunkban példaként bemutatott humán epesav-kötő fehérje (hI-BABP) kölcsönhatása glikokólsavval (GCA) és glikokenodeoxykólsavval (GCDA) a két legnagyobb koncentrációban előforduló epesavval az emberi szervezetben. (A) A hI-BABP fehérje ^1H - ^{15}N korrelációs ujjlenyomat spektruma az apo (üres, fekete) és a holo (ligandummal komplexált, narancs) formában. Az amid NH kémiai eltolódás ligandumkötés hatására bekövetkező változása az apo hI-BABP fehérje szalagdiagramjára vetítve. A fehérből narancsba tartó színskála növekvő kémiai eltolódás változásnak felel meg. (B) Fehérje-ligandum távolságkényszerek meghatározása specifikusan izotópjelzett ligandumokkal. A GCA és GCDA molekulákban elhelyezett $^{13}\text{C}/^{15}\text{N}$ izotópokat színes korongok jelzik. Az alsó ábrán egy ^{13}C -szűrt kétdimenziós NOESY spektrum látható, amely a pirosan jelzett ^{13}C -izotóppal kötésben levő GCA/GCDA ^1H atomokat korrelálja a fehérjemolekula térközelségben ($< 6 \text{ \AA}$) levő ^1H atomjaival. Jobbra a hI-BABP fehérje apo (fehér) és GCA:GCDA ekvimoláris elegyével komplexált formájának (sárga) egymásra vetített szalagdiagramja látható. A ligandumkötés hatására bekövetkező fő szerkezeti változásokat kiemeltük. A termodinamikailag legstabilabb állapotban a GCDA epesav az 1-es (balra), a GCA epesav a 2-es (jobbra) kötőhelyet foglalja el. (C) Az epesav molekulákat stabilizáló hidrofób kölcsönhatások a hI-BABP:GCA:GCDA komplex kötőüregében. Az epesavak szürkén, a fehérje-oldalláncok zölden jelölve.

felszakadásával járó intermolekuláris csere folyamatok is tanulmányozhatók. A hőmérséklet függvényében mért kinetikai paraméterek ismeretében pedig az átalakulás termodinamikai paraméterei is meghatározhatók.

SZERKEZET, DINAMIKA, ÉS FUNKCIÓ

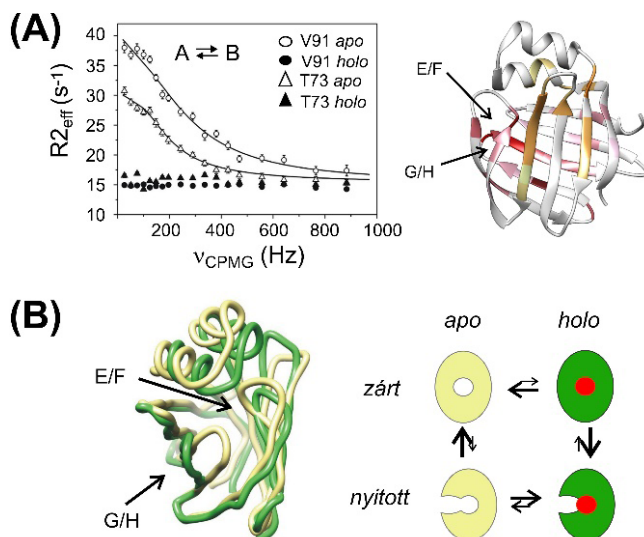
Miután megismerkedtünk az alapjelenséggel és az NMR spektroszkópiában használatos fogalmakkal, lássunk egy konkrét példát! Az intracelluláris lipid-kötő fehérjék olyan szállítófehérjék, amelyek a zsírsavakat, epesavakat a megfelelő időben a megfelelő helyre szállítják a sejtekben. Hibás működésük számos

anyagcsere-rendellenesség és betegség forrása. Hogy működésükről molekuláris szintű információt nyerjenek a kutatók, szükség volt a nagy felbontású háromdimenziós szerkezetre. Mivel ezek a fehérjék szeretnek aggregálódni, sokáig nem sikerült őket kristályosítani, és éppen az NMR spektroszkópia volt az, ami az oldatfázisú szerkezet meghatározásával segíteni tudott. Ebből a fehérje-családból látunk egy példát a 5b. ábrán, egymásra vetítve (szuperponálva) a humán epesav-kötő fehérje (hI-BABP) üres és a ligandummal kötött formáját. A ligandumok helyzetét a kötőüregben speciális izotópjelzési technikával sikerült meghatározni: bizonyos pozíciókban NMR-aktív ^{13}C és ^{15}N

izotópokat építve be az epesav molekulákba, majd ezeket mintegy szűrőként alkalmazva, távolságkényszerek meghatározásával a ligandum ^{13}C -nel/ ^{15}N -nel kötésben levő H-atomja(i) és a fehérje (korábban hozzárendelt) H-atomjai között. A ligandumok kötőüregbe való dokkolását segítette a gerincatomok kémiai eltolódás-változásainak feltérképezése az aminosav szekvencia mentén (5a. ábra). Ez tükrözi mind a ligandum okozta direkt változást az egyes aminosavak környezetében, mind pedig a kötődés hatására bekövetkező szerkezeti változást a fehérje egészében. Amint azt az 5b. ábrán látjuk, négy fő régióban találunk különbségeket az üres (apo, görögül “hiány”) és a kötött (holo, görögül “teljes”) forma között: a hélixek pozíciójában a “hordó” tetején, az EF-béta szálakban, valamint a C/D és a G/H β -szálakat összekötő kanyar régiókban. Az atomi szintű háromdimenziós szerkezet meghatározásával azonosíthatjuk a ligandumokat stabilizáló másodlagos kölcsönhatásokat a kötőüregben (5c. ábra).

Sokáig fejtörést okozott a kutatóknak, hogy a ligandumok hogyan jutnak be a fehérje belsejében található kötőüregbe. Más fehérjék esetében is gyakran előfordul, hogy a funkció beteljesítéséhez egy eltemetett belső régiónak valamilyen módon hozzáférhetővé kell válnia, fel kell – ha csak részlegesen is – nyílnia. A fehérje belső mozgásait vizsgáló NMR vizsgálatok a humán epesav-kötő fehérje esetében is ezt sejtették. Megfigyelték ugyanis is a kutatók, hogy az üres fehérjében jelen van egy lassú (ms) mozgás (6a. ábra), amely jó egyezést mutat a ligandumkötés – független mérésekből származó – sebességével. A konformációs csere folyamat az alap- és egy kis populációban jelenlevő (2-4 %) magasabb energiájú állapot között ligandumkötés hatására megszűnik, ami az egyensúly eltolódását jelzi a kötött fehérje számára termodinamikailag kedvezőbb konformáció irányába. A kutatók felfigyeltek arra is, hogy a fehérjének azokban a szegmenseiben a legintenzívebb a fluktuáció a két állapot között, ahol a ligandummal történő kölcsönhatás következtében legnagyobb mértékű a szerkezeti változás, azaz az E/F és a G/H régiókban (5b. és 6a. ábrák). Majd sikerült azt is kimutatni, hogy a magasabb energiájú állapot a komplexált fehérjére emlékeztető konformációval rendelkezik. Vagyis a ligandum távollétében az üres hI-BABP-fehérje konformációs sokasága kis százalékban eleve tartalmazza azt a geometriai elrendeződést, amely majd a ligandum jelenlétében lesz képes stabilizálódni! A szerkezeti és dinamikai vizsgálatok összevetése azt mutatja, hogy ez a kis százalékban jelenlevő forma egy az alapállapotú fehérjénél nyitottabb konformáció, amely az EFGH béta-szálakkal övezett régióban lehetővé teszi a ligandum bejutását a kötőüregbe (6b. ábra). A ligandumkötésnek ezt a mechanizmusát konformációs szelekciónak nevezzük, amely újabb kutatások szerint az egyik legelterjedtebb molekuláris felismerési mechanizmus a fehérjék működésében.

A fehérjék csak egy molekuláris rendszer a palettán, amely NMR spektroszkópiai módszerekkel jól tanulmányozható.



6. ábra (A) Konformációs fluktuáció hozzájárulása az ún. transzverzális relaxációhoz a humán epesav-kötő fehérjében a ligandum távollétében (apo, ○, △) a rádiófrekvenciás tér függvényében két reprezentatív aminosav pozícióban. A görbék illesztéséből meghatározható a cserefolyamat sebessége, a fehérje populációk aránya az alap „A” és a magasabb energiájú „B” állapotban, valamint a két állapot közötti kémiai eltolódás különbség. Ligandumkötés hatására (holo, ●, ▲) a fluktuáció megszűnik. A lassú konformációs fluktuációt érzékelő aminosav pozíciók az apo fehérjében két klasztert alkotnak (narancs és piros színnel a fehérje szalagdiagramjára vetítve). (B) A relaxációs vizsgálatokkal feltárt ms időskálán zajló konformációs egyensúly egy zárt és egy nyitottabb forma közötti átmenetnek felel meg, amely segíti a fehérjében a ligandumok bejutását a fehérje belsejében található kötőüregbe.

Összetettségük miatt ugyanis elengedhetetlen a szerkezet, dinamika, és funkció együttes szemlélete. De hasonlóan így van ez más molekulák és molekuláris kölcsönhatások vizsgálatánál is. Ily módon az NMR spektroszkópia – más fizikai és biológiai kísérleti módszerekkel kombinálva – elengedhetetlen eszköze az új, kívánt tulajdonsággal rendelkező molekulák fejlesztésének az ipar és az élettudományok számos területén. Bízunk benne, hogy írásunkkal betekintést nyújtottunk nem pusztán egy fontos és napjainkban elterjedten használt szerkezetvizsgálati módszer alapjaiba, de a molekulák és kölcsönhatásaik varázslatos világába is.

Tőke Orsolya



OLVASNIVALÓ

1. Rohonczi János: Az NMR spektroszkópia alapjai, <http://olimpia.chem.elte.hu/evek/2009/aktual/nmr1.pdf>
2. Malcolm Levitt: Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance, Wiley, 2008



Chemical Panorama Issue 30., Year 2025

page

4. **Introduction**
Dear Reader,
Editorial team
5. **Nobel prize in physics 2024**
Teaching Artificial Neural Networks
Nobel Committee
6. **Teaching, modelling, pattern recognition**
Artificial intelligence, artificial neural networks
11. **Example of a simple neural network**
Gábor Pálinkás
13. **The pioneering work of Jonas Salk**
Fight against poliovirus
András Ménes
15. **Healing molecules in plants**
Peppermint, the herb of the year 2024
Lídia Kőszegi
18. **Astrochemical News**
In the traces of Martian Samples
Amino acids, sugars and gamma radiation
Editorial team
21. **Healing noble metal**
Biomedical applications of gold nanoparticles and nanoclusters
Edit Csapó
28. **Recommendation**
Hungarian Chemical Journal
Editorial team
29. **Life and Science writes**
Cosmetics and Environment
Ildikó Fekete-Kertész, Rita Márton, Mónika Molnár, Viktória Feigl
31. **Summer Research Camp**
AKI Curious Researcher at the
Natural Science Research Centre
András Tómpos
34. **NMR spectroscopy**
Structure, dynamics, molecular interactions
Orsolya Tőke

The magazine is published by the HUN-REN Research Centre for Natural Sciences with the support of the Hungarian Academy of Sciences. It is archived by REAL and the Electronic Periodicals Database and Archive (EPA) of the National Széchényi Library (OSZK)

Kémiai Panoráma

Kiadja az HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

e-mail: panorama@kemiaipanorama.hu

ISSN 3058-101X (Online)

Honlap: www.kemiaipanorama.hu

Felelős kiadó és főszerkesztő: Pálinkás Gábor

Szerkesztők: Simonyi Miklós, Gózon Ákos



Tördelés, képszerkesztés: Szarka Bernadett

The image shows a large, tilted periodic table of elements. The elements are arranged in rows and columns, with their chemical symbols and atomic numbers visible. The table is tilted diagonally across the page, starting from the top left and extending towards the bottom right. The elements shown include hydrogen (H) at the top left, and various other elements like lithium (Li), beryllium (Be), sodium (Na), magnesium (Mg), calcium (Ca), potassium (K), rubidium (Rb), cesium (Cs), francium (Fr), barium (Ba), lanthanum (La), cerium (Ce), praseodymium (Pr), neodymium (Nd), promethium (Pm), samarium (Sm), europium (Eu), gadolinium (Gd), terbium (Tb), dysprosium (Dy), holmium (Ho), erbium (Er), thulium (Tm), ytterbium (Yb), lutetium (Lu), hafnium (Hf), tantalum (Ta), tungsten (W), rhenium (Re), osmium (Os), iridium (Ir), platinum (Pt), gold (Au), mercury (Hg), thallium (Tl), lead (Pb), bismuth (Bi), polonium (Po), astatine (At), and radon (Rn) at the bottom right. The table is tilted at an angle, making it difficult to read the full names of the elements, but the symbols and atomic numbers are clearly visible.