

Kémiai Panoráma

2026. évfolyam 31. szám

KÉMIAI NOBEL-DÍJ

Fémorganikus vázszerkezetek

ORVOSI ÉS ÉLETTANI NOBEL-DÍJ

Perifériás immuntolerancia

A KEZDET MODELLJE

A Monte Carlo szimulációs módszer és az élet keletkezése

EGYKRISTÁLY RÖNTGENDIFFRAKCIÓ

Molekulák szerkezetének meghatározása

FÉM-ION AKKUMULÁTOROK

Az energiatárolás perspektívái

GYÓGYÍTÓ MOLEKULÁK NÖVÉNYEKBEN

A mandula

CUKORMOLEKULÁK AZ ŰRBŐL

A Bennu aszteroida

FÉMORGANIKUS VÁZSZERKEZETEK

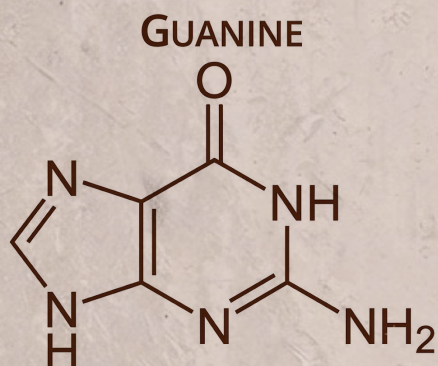
MOF-5

ÖRÖK VEGYI ANYAGOK

PFA és a környezetszennyezés

KROMOSZÓMA ELMÉLET

Thomas Hunt Morgan

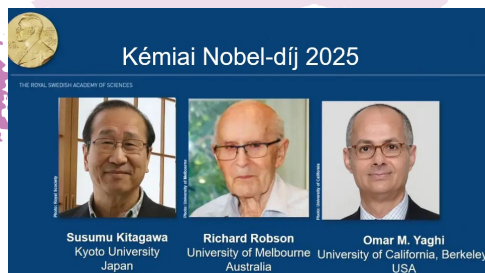


4

Szerkesztőség:
Tisztelt Olvasó!
Kémia a kétszáz éves
Magyar Tudományos
Akadémián

5

**Nobel-Bizottság –
Szerkesztőség:**
Nobel-díj 2025
Kémiai elismerés



6

Nobel-Bizottság:
Nobel-díj 2025
Orvosi és élettani
díjazottak

7-11

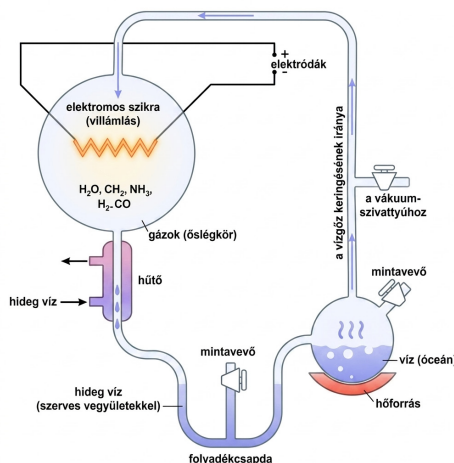
Bella József
**Az energiatárolás
perspektívái**
Fém-ion akkumulátorok



Li-ion akkumulátorok



Na-ion akkumulátorok

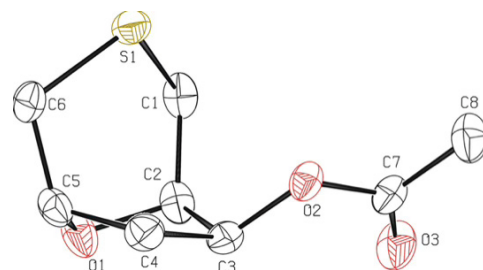


12-17

Jedlovsky Pál
A Kezdet modellje
A Monte Carlo
szimulációs módszer és
az élet keletkezése

18-23

Párkányi László:
**Molekulák szerkezetének
meghatározása**
Egykristály röntgendiffrakció



A szerkesztőség köszönetet mond a Magyar Tudományos Akadémia Folyóirat-pályázatának, a HUN-REN Természettudományi Kutatóközpontnak, továbbá az MTA Kémiai Osztályának a támogatásáért. A Kémiai Panoráma magazin az ÚMFT TÁMOP 4.2.3 KMR/1/2008-0006 pályázat keretében, az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társ finanszírozásával (3-6. számok),

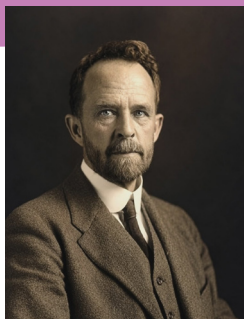


továbbá az HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont Kémiai Osztálya (4-6. számok) és a Servier Gyógyszerkutató Intézet (5-6. szám) támogatásával valósult meg.



24-25

Ménés András:
Kromoszóma elmélet
Thomas Hunt Morgan
(1866–1945)



26-30

Kőszegi Lídia: Gyógyító
molekulák
növényekben
A mandula

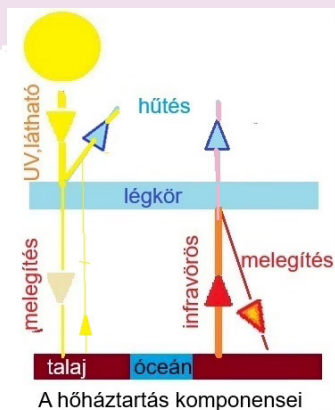
31-32

Pálinkás Gábor:
Asztrokémiai hírek
Cukormolekulák a Bennu
aszteroidán



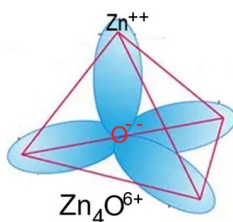
33-34

Szerkesztőségi hírösszeállítás:
Hűtési és melegítési hatások
a légkörben
Az aeroszolok és a klíma



35-37

Pálinkás Gábor:
MOF5
Fémorganikus
vázszerkezetek



38

Folyóiratajánló
Magyar
Kémikusok
Lapja



42-43

Szerkesztőség - G.Á.
Az Élet és Tudományban
olvastuk
Szemtől szemben az örök
vegyi anyagokkal



39-40

AKI Kíváncsi kutató
2026
Tudományos
kutatótábor a
Természettudományi
Kutatóközpontban



41

Simonyi Miklós
Recenzió
A tudásvágy útjai - Inzelt
György könyvéről



44

Content

Kémia a kétszáz éves Magyar Tudományos Akadémián

A Magyar Tudományos Akadémia ebben az évben ünnepli kétszáz éves fennállását. Az Akadémia Széchenyi István alapítói szándékával összhangban 200 éve folyamatosan megújulva szolgálja a tudást, a nemzetet és az egyetemes tudományt. Megjeleníti a magyar tudomány egységét: összefogja és képviseli a hazai és határon túli magyar tudományt; a bölcsészet-, a társadalom-, az élet- és a természettudományokat; a kutatóintézeteket, az egyetemeket és a vállalati kutatóhelyeket; valamint a kutatók nemzedékeit. Tizenhétezer tagot számláló köztestülete nyitva áll minden tudományos fokozattal rendelkező magyar kutató előtt.

A Magyar Tudós Társaság (későbbi MTA) 1825-ös alapításakor még nem voltak szakterületi osztályok, csak tudományos szakbizottságok és szakosztályok. A kémia ekkor még nem önálló akadémiai struktúrában, hanem a természettudományi közösség részeként működött.

A 20. század első felére a kémia oktatása és kutatása stabil egyetemi tanszékekre épült (Budapest, Szeged, Debrecen). A két világháború között a magyar kémia nemzetközi beágyazottsága erősödött (pl. Hevesy György Nobel-díja 1943-ban). Bár az MTA szervezete ekkor még nem tagolódott modern értelemben vett osztályokra, de a kémiai kutatások súlya folyamatosan nőtt.

Az 1949–1950-es akadémiai reform volt, amely szigorúan szakterületi osztályokra tagolta az Akadémiát és létrehozta a kutatóintézeti hálózatát, a tudományos életet központilag szervezetté tette. Ennek keretében jött létre: 1951-ben a Kémiai Tudományok Osztálya (VII. osztály) és az MTA intézményei: a Központi Kémiai Kutatóintézet (KKKI), a Szerves Kémiai Intézet, a Fizikai Kémiai Kutatócsoportok és a Kémiai Szerkezetkutató Laboratórium is.

A Kémiai Tudományok Osztálya koordinálja a kémiai tudományok akadémiai ügyeit, értékeli a kutatási teljesítményeket, részt vesz a tudománypolitikai döntések előkészítésében, gondozza a kémiai díjakat, bizottságokat, doktori eljárásokat.

A Magyar Tudományos Akadémia az évforduló alkalmából számos rendezvényen és kiállításon mutatja be 200 éves



működésének munkáját és eredményeit. A rendezvényekről rendszeresen tájékoztatást nyújt az MTA 200 ünnepi honlapján <https://mta200.hu>.

Kedves Olvasóink figyelmébe ajánlunk a rendezvények közül két kiállítást:

Az egyik a Magyar Tudományos Akadémia 200 éves fennállását bemutató „Varázshatalom – Tudás-Közösség-Akadémia” nagyszabású kiállítás, amely 2026. október 26-ig tekinthető meg a Magyar Nemzeti Múzeumban. A kiállítás bemutatja, az Akadémia történetét, közösségteremtő szerepét, valamint a tudomány és a mindennapi élet kapcsolatát.

A tárlat öt tematikus egységben vezeti végig a látogatóit Mátyás király korától egészen a modern tudományos eredményekig, például Krausz Ferenc és Karikó Katalin Nobel-díjáig. A kiállítás célja, hogy bemutassa a tudomány – köztük a természettudományok – szerepét a társadalomban. Ez magában foglalja a kémiai kutatások társadalmi hatásait is (gyógyszerkutatás, anyagtudomány, környezetkémia).

A kiállításon több mint nyolcszáz műtárgy és dokumentum szerepel, amelyek között az Akadémia természettudományos gyűjteményeinek darabjai is megtalálhatók. Például kémiai eszközök, laboratóriumi műszerek, tudománytörténeti dokumentumok a magyar kémia fejlődéséről.

A másik a központi, nagyszabású MTA 200 kiállítás, amely az Akadémia székházában látogatható 2026. december 13-ig. Ez a kiállítás minden tudományterületet érint, így a kémia történetét és akadémiai szerepét is. A kiállítás a kémiai tudományokhoz közvetlenül kapcsolódó, anyagvizsgálati, szerkezetkutatási, természettudományos gyűjteményi anyagokat is bemutat.

Szerkesztőség

Az MTA Kémiai Osztályának szeptemberi programterve

szeptember 2. MTA200 – Kémiai Tudományok Osztályának kiállításmegnyitója az MTA Székház aulájában	
szeptember 3. 10.00 óra: A jövő kenyeré: tudomány a gabonaszem mögött	szeptember 17. 10.00 óra: A fájdalomszippantás molekulái 14.00 óra: Természet és technológia a gyógyszerészetben – növényi hatóanyagoktól az innovatív gyógyszerhordozókig
szeptember 9. 10.00 óra: A szépség kémiaja – Kosmetikumok tudománya az anyagoktól a molekulákig 14.00 óra: Műanyagok: barát vagy ellenség?	szeptember 21. 10.00 óra: Kémiai környezeti kockázati tényezők és hatásai 14.00 óra: Tiszta Energia a molekulákban – Hogyan segíti a kémia a fenntarthatóságot?
szeptember 14. 10.00 óra: Molekulák a menüben – a gasztronómia kémiaja 14.00 óra: Mézbe zárt idő	szeptember 29. 10.00 óra: Molekuláktól a gyógyításig: a 3D nyomtatás tudományformáló ereje 14.00 óra: Kémia a képzőművészet mögött
szeptember 15. 14.00 óra: A mutáns mumus titka – könyvbemutató az általános iskolai kémiatanításhoz	



Kémiai elismerés

A 2025-ös kémiai Nobel-díjat a Svéd Királyi Tudományos Akadémia három kutatónak megosztva – a japán Kitagava Susumunak, az ausztrál Richard Robsonnak és az amerikai Omar M. Yaghinak ítélte oda a fémorganikus vázszerkezetek (metal-organic frameworks, MOF) kifejlesztéséért.

A fémorganikus vázszerkezetek egy porózus anyagostályt képviselnek, amely fémionokból vagy többmagvú fémkomplexeiből és szerves ligandumokból épülnek fel.

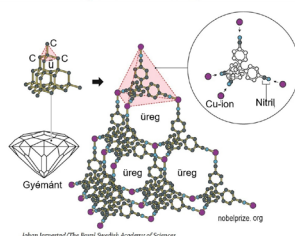
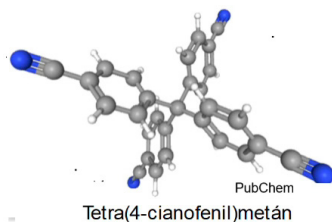
A MOF-ok nagy porozitást, nagy fajlagos felületet és magas hőstabilitást mutatnak a koordinációs kötések jelenléte miatt. A pórusok anionokat és kationokat is tárolhatnak, de semleges molekulákat például gázokat vagy oldószermolekulákat is befogadhatnak. Hasonlóan a szilícium-dioxidból felépülő, szintén porózus zeolitokhoz, melyek szintén képesek adszorbeálni gázokat. Az egydimenziós, a kétdimenziós, és a háromdimenziós vázszerkezetek a koordinációs polimerek alosztályainak tekinthetők. A pórusok méretétől függően a MOF-okat nanoporózus, mezoporózus és makroporózus csoportokba sorolják. Az utóbbi kettő általában amorf.

A kutatók nem egy új molekulát fedeztek fel, hanem egy teljesen új módszert adtak a vegyészek kezébe, amellyel tetszőlegesen tervezhetnek anyagokat a környezetvédelem és az energiaipar számára. A MOF-ok olyan új típusú kristályos anyagok, amelyeket „molekuláris szivacsoknak” is nevezhetünk. Rendkívüli tulajdonságuk a hatalmas belső felületük és porozitásuk. Egyetlen gramm ilyen por belső felülete akár egy futballpálya méretét is elérheti.

A DÍJAZOTTAK HOZZÁJÁRULÁSA

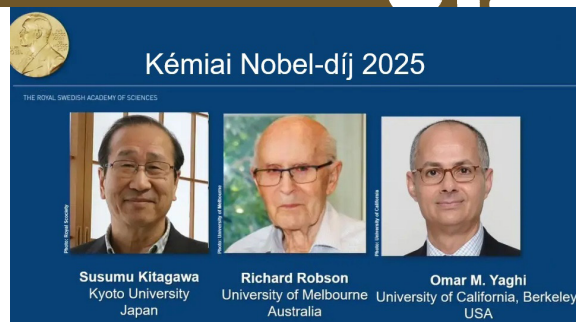
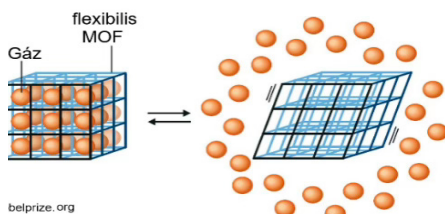
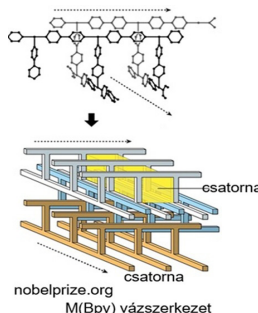
A három tudós egymást kiegészítve fektette le a technológia alapjait:

RICHARD ROBSON: Ő volt az úttörő, aki elsőként ismerte fel, hogy fémionok és szerves molekulák összekapcsolásával rácsos, üreges szerkezeteket lehet építeni. Richard Robson a gyémánt szerkezete ihlette, amelyben a szénatomok piramis



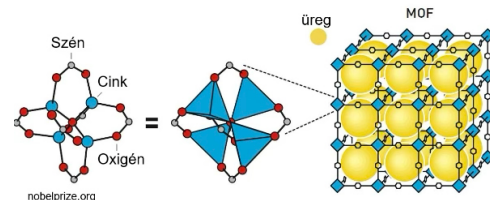
alakban kapcsolódnak egymáshoz. A szén helyett rézionokat és egy négykarú tetra(4-cianofenil)metán molekulát használt, amelyek mindegyikének végén egy nitril található. A vegyület csúcsaihoz könnyen kapcsolódnak rézionok és rendezett, üreges nagyon tágas kristályt alkotnak. Bár az első vázai még instabilak voltak, megnyitotta az utat az új anyagtudomány előtt.

KITAGAVA SZUSUMU: 1997-ben kobalt, nikkel- vagy cinkionokat, valamint egy 4,4'-bipiridil molekulát használva kutatócsoportja háromdimenziós fémorganikus vázszerkezeteket (M-BPy) hozott létre, amelyeket nyílt csatornák metszenek.



Elsőként bizonyította be, hogy ezek a vázak képesek gázokat (metánt, nitrogént, oxigént) befogadni és tárolni, miközben szerkezetük stabil marad. Felismerte azt is, hogy a fémorganikus vázak rugalmassá is tehetők. Képesek alakváltoztatásra, különböző anyagokkal történő megtöltésük során.

OMAR M. YAGHI: Módszert dolgozott ki a MOF anyagok előre megtervezett tulajdonságokkal történő előállítására. Megalkotta az első rendkívül stabil MOF-okat. Az 1999-ben előállított egy nagyon stabil, nagy fajlagos felületű köbös kristályos anyagot a MOF-5-t.



A MOF-OK GYAKORLATI ALKALMAZÁSAI

Szén-dioxid megkötés: Képesek szelektíven „kiszűrni” a CO₂-t a gyárak füstjéből vagy akár közvetlenül a levegőből, segítve a klímaváltozás elleni harcot.

Vízkinyerés a sivatagban: Léteznek olyan MOF-ok, amelyek éjszaka megkötik a levegő páratartalmát, majd nappal, a napfény hatására tiszta ivóvízként engedik ki magukból.

Hidrogéntárolás: Kulcsszerepet játszhatnak a zöld autózásban, mivel biztonságosan és nagy sűrűségben képesek tárolni a hidrogén üzemanyagot.

Gyógyszeradagolás: Segíthetnek a hatóanyagok lassú, célzott felszabadításában a szervezetben.

Kivonat a Nobel-bizottság anyagából
[nobelprize.org/ Popular information](https://nobelprize.org/Popular-information)

Orvosi és élettani díjazottak

A 2025-ben az orvosi és élettani Nobel-díjat Mary E. Brunkow, Frederick J. Ramsdell (mindketten az Egyesült Államokból) és Shimon Sakaguchi (Japánból) kapták megosztva „a perifériás immuntoleranciával kapcsolatos felfedezéseikért”.

A díjazottak azonosították az immunrendszer védősejtjeit, a szabályzó T-sejteket, amelyek folyamatosan figyelik az immuntoleranciát, azt, hogy az immunrendszer ne támadja meg testünk saját sejtjeit. „A díjazottak felfedezései döntő fontosságúak voltak az immunrendszer működésének a megértésében, és abban, hogy miért nem alakulnak ki bennünk súlyos autoimmun betegségek” – mondta Olle Kämpe, a Nobel-bizottság elnöke.

Az immunrendszerünk naponta több ezer különböző mikroba támadásától véd meg minket. Mindegyiknek más megjelenése van, és sokan álcázva magukat hasonlóságokat alakítottak ki az emberi sejtekkel. Hogyan ismeri fel az immunrendszerünk, hogy mit támadjon és tévedésből ne támadja meg saját sejtjeinket, szövetjeinket?

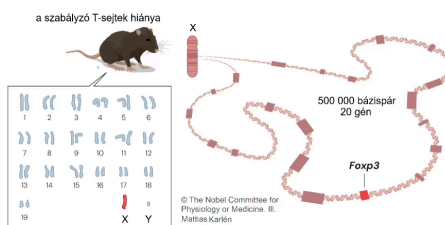
EGY MUTÁCIÓ LÁZADÁST OKOZ AZ IMMUNRENDSZERBEN

Shimon Sakaguchi 1995-ben az ár ellen úszott, amikor az első kulcsfontosságú

felfedezésére jutott. Akkoriban sok kutató meg volt győződve arról, hogy az immuntolerancia csak a potenciálisan káros immunsejtek eltávolítása miatt alakult ki a csecsemőmirigyben (timusz), az úgynevezett központi tolerancia által. Sakaguchi kimutatta, hogy az immunrendszer összetettebb, és felfedezett egy korábban ismeretlen immunsejt-osztályt, a szabályzó T-sejteket, amelyek megvédik a szervezetet az autoimmun betegségektől.

1. Sakaguchi eltávolította a timuszt egy három napos egerből, az egerben autoimmun betegség lépett fel.
2. Ha Sakaguchi beoltotta az egeret egy másik eger érett T-sejtjeivel, az védetté vált az autoimmun betegségtől.

AZ AUTOIMMUN



BETEGSÉGEK MAGYARÁZATA

Mary Brunkow és Fred Ramsdell 2001-ben kulcsfontosságú felfedezésre jutottak, amikor egy kísérletük alapján meg tudták magyarázni, egy adott egértörzs különös érzékenységet az autoimmun betegségekre. Felfedezték, hogy az egerekben az X-kromoszómán található Foxp3 génben előforduló pontmutáció van jelen. Azt is kimutatták, hogy az emberi gén megfelelőjében megjelenő mutációk a szabályzó T-sejtek hibájához vezető súlyos autoimmun betegséget, IPEX szindrómát okoznak.

A SZABÁLYZÓ T-SEJTEK – A TEST BIZTONSÁGI ŐREI

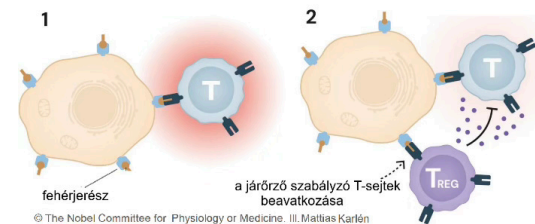
Két évvel később Shimon Sakaguchi – és hamarosan más kutatók is – meggyőzően bizonyítani tudták, hogy a FOXP3 gén irányítja a szabályzó T-sejtek (T_{REG}) működését. Ezek a sejtek



Mary E. Brunkow Frederick J. Ramsdell Shimon Sakaguchi
© Nobel Prize Outreach. Photo: Clément Morin

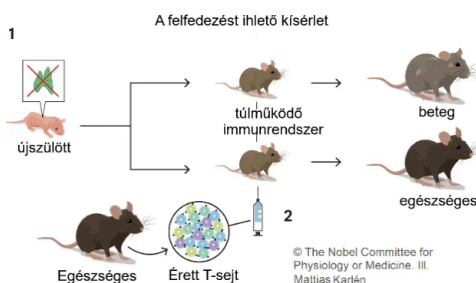
megakadályozzák, hogy más T-sejtek tévesen támadják meg a szervezet saját szöveteit, ami fontos a perifériás immuntolerancia folyamathoz. A szabályzó T-sejtek azt is biztosítják, hogy az immunrendszer megnyugszik, miután eltávolította a betolakodót, s így nem folytatja a működését.

1. Egy T-sejt, amely átesett a csecsemőmirigyben lévő teszten (hiba nélküli), kapcsolódik egy fehérjéhez,
2. A szabályzó T-sejt észleli, hogy a kapcsolódott T-sejt nem hibás, és megnyugtatja a fehérjét. Ez megelőzi az autoimmun betegségeket.



A díjazottak felfedezései megnyitották a perifériás tolerancia területét, amely olyan lehetséges orvosi kezelések kidolgozásához is vezetett, amelyeket jelenleg klinikai kísérletek vizsgálnak. A remény az, hogy képesek lesznek kezelni vagy gyógyítani az autoimmun betegségeket, hatékonyabb rákkezeléseket biztosítani, és megelőzni a súlyos szövődményeket az őssejt-transzplantációk után.

A Nobel-Bizottság sajtóközleménye
<https://www.nobelprize.org/prizes/medicine/2025/press-release/>





Fém-ion akkumulátorok

A fém-ion akkumulátorok első példáját a lítium-ion akkumulátorokat napjainkban széles körben használjuk energiatárolásra elektronikai eszközeinkben, laptopokban, kézi telefonokban és energiaforrásként a közlekedésben.

A lítium elérhetősége korlátozott, kitermelése költséges és bizonyos körülmények között használata nem biztonságos. Emiatt felmerült más kationokkal, mind mono- és multivalens fémeken alapuló akkumulátortechnológiák kifejlesztése is, amelyeknek olcsóbb az előállításuk, nagyobb az energiasűrűségük és biztonságosabb üzemeltetésük. Már hosszabb ideje jelentős kutatások folynak más fém-ion (alkálifém-, alkáliföldfém és átmeneti fém) akkumulátorok fejlesztésére. A kutatások fókuszában a Föld leggyakrabban előforduló elemei közé tartozó Na, K, Mg, Ca, Al, Zn fémek állnak. A felsorolt fémeken alapuló fém-ion akkumulátorok felépítése hasonlít a lítium-ion akkumulátorokhoz, kivéve, hogy a lítiumot a többi fém helyettesíti. A hasonlóság azt jelenti, hogy a lítium-ion akkumulátorok alapvető ismereteit és gyártási tapasztalatait kihasználhatják a többi fémion-akkumulátorok ipari adaptációjához. A multivalens fém-ion akkumulátorok fejlesztése attól is függ, hogy ezek a fémek elegendő előnyt nyújtanak-e a lítiumhoz képest ahhoz, hogy használhatóak legyenek alternatívaként. Bár előny a két vagy akár

A költség- és biztonsági előnyökön túl a cellák energiasűrűsége megnőhet a tároláshoz alapvetően aktívan nem hozzájáruló anyag mennyiségének csökkenése miatt.



Li-ion akkumulátorok



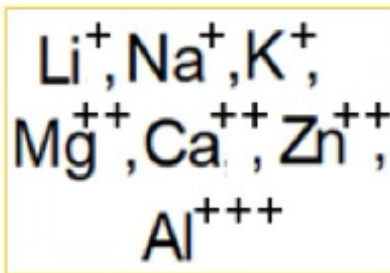
Na-ion akkumulátorok

három elektron felszabadulása egyetlen kation redukciója során – mivel a vizsgált többvegyértékű fémek közül több elektródpotenciálja kevésbé negatív, mint az alkáli elemeké – az ezek felhasználásával nyert akkumulátorok kisebb energiasűrűségűek lehetnek.

Jelenleg a kiterjedt alkalmazást nyert Li-ion akkumulátorok mellett egyedül a Na-ion akkumulátorok kerültek kereskedelmi forgalomba, a többi előállítási technológiájának szintje még nem érte el a kereskedelmi forgalomra alkalmas szintet.

A KÜLÖNBSÉG A HAGYOMÁNYOS ÉS A FÉM-ION AKKUMULÁTOROK KÖZÖTT

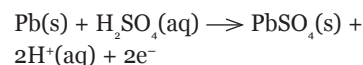
Az energiatárolásra általában használt ólom-savas, nikkel-kadmium, nikkel-fémhidrid akkumulátorokban az elektróda reakciók hatására több különböző ion mozog az anód és a katód elektróda közötti elektrolitban kisütés és töltés közben is. Az elektrolit ionjai is



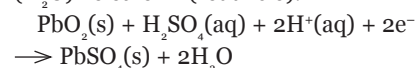
hozzájárulnak az energiát termelő redoxireakciókhoz.

Például a savas ólomakkumulátorban, amelynek anódja Pb, katódja PbO₂ és az elektrolitja vizes H₂SO₄ oldat, az elektromos energia-termelés (kisütés) közben a következő reakciók játszódnak le az elektródákon:

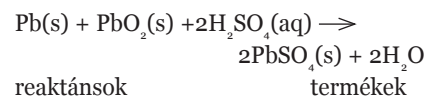
A negatív anód anyaga az ólom reagál a kénsavval, ólom-szulfát (PbSO₄) keletkezik és elektronok (e⁻) szabadulnak fel (oxidáció).



Pozitív elektróda (PbO₂) reagál a kénsavval (H₂SO₄) és a kénsavból származó hidrogénionokkal (H⁺), valamint a külső áramkörből érkező elektronokkal ólom-szulfát (PbSO₄) és víz (H₂O) keletkezik (redukció).



Az akkumulátor egy cellájának bruttó reakciója:



Mint minden kémiai reakciónál, az elektrokémiai folyamatok esetén a mozgatóerő állandó T és P mellett, a termékek és reaktánsok Gibbs szabadenergiáinak különbsége (ΔG). A szabadenergia változás a fenti bruttó reakció esetén (standard körülmények között):

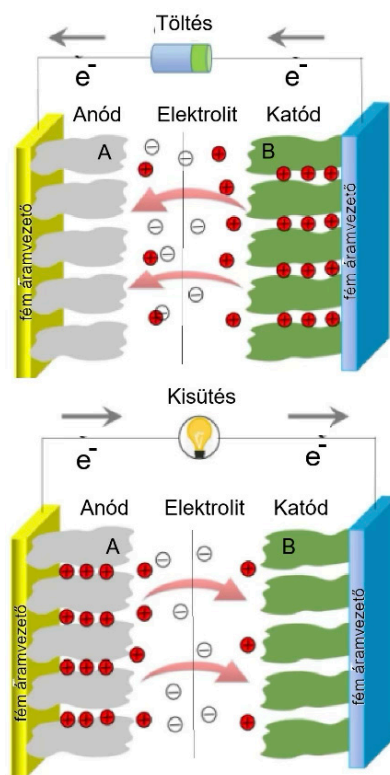
$$\Delta G_{\text{cell}}^0 = -396 \text{ kJ/mol}, E_{\text{cell}}^0 = \frac{\Delta G_{\text{cell}}^0}{nF} = 2.05 \text{ V}$$

ahol $F = 96485 \text{ C/mol}$ a Faraday állandó és n a leadott elektronok száma 2

A fém-ion akkumulátorok esetében a kation az anódról a katódra vándorol az elektrolitban kisütéskor, illetve a katódról az anódra a töltés közben, feltételezve, hogy az elektródák anyagai képesek befogadni az M^{n+} kationt. Ezt a mechanizmust „hintaszék” mechanizmusnak is nevezik. Az elektrolit közvetlenül nem vesz részt a redoxireakciókban. (Bár közvetlenül nem vesz részt, azonban folyékony elektrolitok esetén a kationok kilépve az anódból szolvatálódnak, majd a katódhoz diffundálva deszolvatálódnak és ez a két folyamat is hozzájárul az energiamérleghez.) Az elektrolit feladata, hogy ionvezető, elektronszigetelő közeg legyen. Emiatt, csak minimális mennyiségű elektrolitra van szükség, éppen annyira, hogy lehetővé tegye a kationok szállítását. Az elektrolit összetételében nincsenek nettó változások; az ezzel járó összes negatív hatás hiányzik. A költség- és biztonsági előnyökön túl a cellák energiasűrűsége megnőhet a tároláshoz alapvetően aktívan nem hozzájáruló anyag mennyiségének csökkenése miatt.

A fém-ion akkumulátorokban a gazdaanyagok (A, B) azok az elektródaanyagok, amelyek visszafordíthatóan befogadják a fémionokat vagy a reakciótermékeket a töltés- és kisülési ciklusok során. Ezek porózus vagy réteges szerkezetű kristályokat alkotó, jellemzően szervesetlen szénelapú interkalációs és ötvözetképző anyagok vagy vegyes fémoxid, fém-foszfát vagy más fémalapú vegyületekből például

fémorganikus vázszerkezetekből állnak. Ezek az anyagok kulcsfontosságúak az akkumulátor kapacitásának, feszültségének és az újratöltés számának meghatározásában.



Batteries & Supercaps, 4, 1201 (2021)

Fém-ion akkumulátor

Leggyakoribb alkálifém anódtípusok: szénelapú interkalációs anyagok (grafit, kemény szén), fémoxidok litium-titánium-oxid, fémötvözetek / fém-szilárdoldatok (SiC, SnC kompozitok).

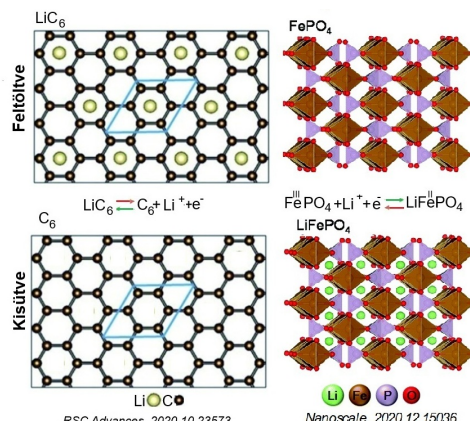
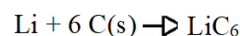
Több vegyértékű fémek esetében általában maga a fém (M) az anód kationgazda. A katódok többnyire réteges átmenetifém-oxidok (LiCoO_2 , LiNiO_2 , LiMnO_2), fém-szulfidok, polianionos

KEMÉNY SZÉN

A kemény szén rendezetlen grafén rétegeket tartalmazó porózus amorf szénfajta. 2500 fok feletti hőmérsékleten is nehéz grafitizálni. Nevét nagy mechanikai keménységéről kapta. Kókuszdióhéjból, biomaszból nyerhető.

foszfátok (LiFePO_4 , NaFePO_4), fémorganikus vázszerkezet (MOF eredetű) anyagok, vagy polimerek.

A litium fémből a grafitba történő interkalációja:



Interkalációs LiC_6 és réteges FePO_4 gazdaanyagok reverzibilis kationcseréje

A fémion akkumulátorok elektrolitjai többnyire szerves oldószerben oldott fém sók. A legelterjedtebbek folyékony szerves elektrolitok, ionos folyadékok, gélpolymer elektrolitok, szilárd elektrolitok – szulfidok, oxidok, polimerek (szilárdtest akkumulátorok).

A vizes elektrolit oldatok a felsorolt kationok esetében, kivéve a cinket, nem használhatóak elektrolitként.

A víz elméletileg már 1.23 V felett oxigénre és hidrogénre bomlik. Mivel a cinket kivéve a felsorolt fémek standard elektródpotenciálja (SHE) nagyobb ennél az értéknél a vizes elektrolit egyszerűen elpárologna és a keletkező gázok robbanásveszélyessé tennék az akkumulátorokat.

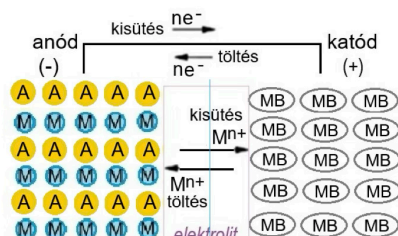
INTERKALÁCIÓ

Az interkaláció az a folyamat, amelyben egy réteges szerkezetű kristályos gazdaanyag ionokat vagy vendégmolekulákat fogad be üregei vagy rétegei közé. A beilleszkedés reverzibilis, és jelentősen nem módosítja a gazdaanyag szerkezetét. A vendég-gazda kölcsönhatás gyakran gyenge van der Waals erő vagy ionos kölcsönhatások hatására jön létre. Bizonyos fémorganikus-vázak (MOF-ok) is képesek ionok vagy molekulák reverzibilis interkalációjára.



Az anód/katód teret elválasztó rétegek (szeparátorok) mikropórusos polimer membránok, amelyek mechanikailag elválasztják az anódot és a katódot, de átengedik az ionokat.

A fém-ion akkumulátorokban lejátszódó redoxreakciók az elektródákon kisütéskor:

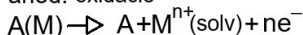


A, B gázdaanyagok

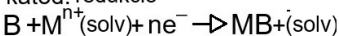
Encyclopedia 2022, 2(3), 1611

Elektródreakciók fém-ion akkumulátorokban kisütéskor

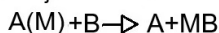
anód: oxidáció



katód: redukció



a teljes reakció:



Az akkumulátor töltésekor a fordított reakciók játszódnak le.

A kationok és elektronok negatív elektródától a pozitívig történő mozgása során felszabaduló energiát a cella Gibbs szabadenergiájának csökkenése ΔG_{cella} fedezi.

ahol ΔG_{cella} a cella Gibbs-szabadenergiájának (kJ/mol) csökkenése, azaz a termékek és reaktánsok Gibbs-szabadenergiájának különbsége ($\Delta G < 0$),

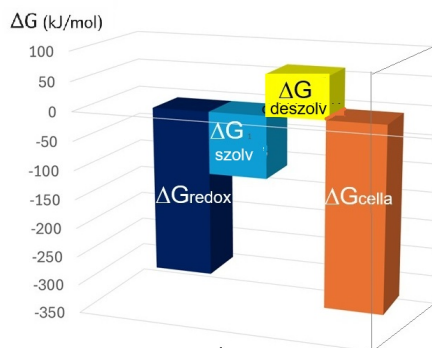
(Ld.: Kémiai Panoráma 23.szám (2020), Fémek reaktivitása)

$$\Delta G_{\text{cella}} = G_{\text{termékek}} - G_{\text{reaktánsok}}$$

A folyékony elektrolitos rendszerekben az ionok szolvatációja és deszolvatációja részfolyamatként hozzájárul az energiamérleghez,

- $\Delta G_{\text{szolvatáció}} < 0$
(az ion stabilizálódik az oldószerben)
- $\Delta G_{\text{deszolvatáció}} > 0$
(le kell bontani a szolvátburkot)

$$\Delta G_{\text{cella}} = \Delta G_{\text{redox}} + \Delta G_{\text{szolvatáció}} + \Delta G_{\text{deszolvatáció}}$$



azonban ezek a hatások implicit módon szerepelnek az ΔG_{cella} értékében.

Az elektrokémiai cella által kisütéskor leadott elektromos energia:

$$W_{\text{ele}} = \Delta G_{\text{cella}} - q_{\text{diss}}$$

a q_{diss} a disszipatív ohmos hővesztés az akkumulátorban. Ha az áram kicsi, és az akkumulátorban keletkező ohmos hővesztés q_{diss} minimális, akkor egyszerűen ΔG (kJ/mol) fedezi a leadott elektromos energiát.

A cella feszültsége E_c (V):

$$E_c = - \frac{\Delta G_c}{nF}$$

ahol F a Faraday állandó 96,5 kC/mol, n a reakcióban átvitt elektronok móljainak száma.

A lítium bázisú fém-ion akkumulátorok többféle kémiai összetétellel is kereskedelmi forgalomba kerülnek. A leggyakoribbak a lítium-kobalt-dioxid akkumulátorok (LCO), a lítium-mangán-dioxid (LMO), litium-nikkel-mangán-

Anyaga	Átlagos feszültség (V)	~Energia sűrűség (Wh/kg)
LiCoO ₂	3,7	140
LiMnO ₂	4,0	100
LiFePO ₄	3,3	170
Li ₂ FePO ₄ F	3,6	115

kobalt-oxid (NMC) és a lítium-foszfát-akkumulátorok (LFP). Az anódot és a katódot elválasztó elektrolit lítium-hexafluorofoszfát (LiPF₆), vagy újabban a kevésbé korrodáló lítium-tetrafluoroborát (LiBF₄), általában folyékony, szerves oldat (pld. etilén-karbonát, etil-metil-karbonát)) formájában.

GRAVIMETRIKUS ÉS TÉRFOGATI ENERGIASŰRŰSÉG

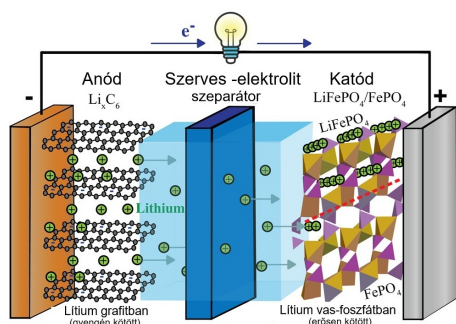
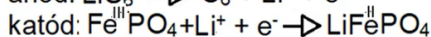
A gravimetrikus energiasűrűség (watt-óránban kilogrammonként (Wh/kg) mérik) azt jelzi, hogy az akkumulátor mennyi energiát képes tárolni a tömegéhez viszonyítva. A térfogati energiasűrűség (Wh/lit) a tárolható energiát az akkumulátor térfogatához viszonyítja. A nagy gravimetrikus energiasűrűség elengedhetetlen olyan alkalmazásokhoz, ahol a súly kritikus tényező, például elektromos járművek és drónok esetében. A nagy térfogati energiaszükséglet pedig olyan alkalmazásokban fontos, ahol a térfogat kritikus. Jellemzi az akkumulátorokat a milliampéróránban (mAh) kifejezett maximális töltéskapacitásuk mértéke is. (Például egy 1000 mAh kapacitású akkumulátor 1000 mA (1 A) áram mellett 1 órán át működik). Fontos paraméter a fentiekén kívül még a ciklusélettartam is, amely megadja, hogy hányszor tölthető újra egy akkumulátor.

A LiFePO₄ LÍTÍUM-ION AKKUMULÁTOR

Tekintsük példaként a LiFePO₄ lítium-ion akkumulátor működést. Az anód grafitban interkalált lítium, a katód vegyes oxid képzésre alkalmas Fe^{II}PO₄. Mivel a lítium gyengébben kötődik a negatív, mint a pozitív elektródában, a lítiumionok a negatívból a pozitív elektródába áramlanak az elektroliton keresztül (leggyakrabban egy organikus, karbonát-alapú oldószerben oldott LiPF₆). A pozitív elektródnál a katódon a lítium az a Fe^{II}PO₄ üres csatornáiba, alagutakba jut be. Az elektronok a külső áramkörön haladva, elektromos munkát végeznek; a pozitív elektródban a vas-foszfát

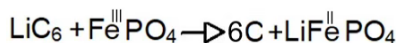
kétvegyértékű Fe^{II} eleme fogadja el azokat ($\text{Fe}^{\text{III}} \rightarrow \text{Fe}^{\text{II}}$ redukció), lehetővé téve a Li^+ felvételét.

A kisütéskor lejátszódó redoxireakciók:



Phys. Chem. Chem. Phys. 2024, 26, 24157
Lítium-ion akkumulátor kisütéskor

Az elektródákon kisütéskor fellépő bruttó reakció:



A cella Gibbs szabadenergia változása kisütéskor standard körülmények között (1 bar nyomás, 25 °C):

$$\Delta G_{\text{cella}} = G_{\text{LiFePO}_4} + G_{\text{6C}} - G_{\text{FePO}_4} - G_{\text{LiC}_6}$$

	G° (kJ/mol)	$\Delta G_{\text{termékek}}$ (kJ/mol)	$\Delta G_{\text{reaktánsok}}$ (kJ/mol)
LiFePO_4	-3206.5		
6C	-4027.8	-7234	
FePO_4	-2749.2		
LiC_6	-4169		-6918

Phys. Chem. Chem. Phys. 2024, 26, 24157 (Suppl)

ΔG_{cella} (kJ/mol)	E_{cella} (V)
-316.1	3.28

Más mono- és multivalens fémeken alapuló akkumulátortechnológiák működése hasonlít a lítium-ion akkumulátorok „hintaszék” mechanizmusához, kivéve, hogy a lítiumot más fémion és az adott fémionhoz alkalmazkodó gazdaanyag és elektrolit helyettesíti. A két és három vegyértékű fémek esetében az anód a legtöbb esetben maga a fém.

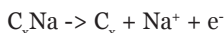
A jelenleg kereskedelmi forgalomban kapható nátriumion (Naion)

	Anód	Katód	Elektrolit
Li^+	Grafit, Si-kompozit, Li-fém	LiCoO_2 , LiNiMnCoO_2 , LiFePO_4 , LiMn_2O_4	LiPF_6 karbonátokban; szilárd elektrolitok
Na^+	Amorf carbon, $\text{NaTi}_2(\text{PO}_4)_3$	Na_xMO_2 , PBA, $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$	NaPF_6 EC/PC/DEC; NASICON
K^+	Grafit, amorf carbon, Sn/Sb/Bi	K_xMO_2 , PBA, KVPO_4F	KPF_6 karbonátokban; $\text{K}^+(\text{FSO}_2)_2\text{N}^-$ éterben
Mg^{++}	Mg-fém	V_2O_5 , MoO_3 , Mo_6S_8	$\text{PhMgCl-AlCl}_3/\text{THF}$; ionos folyadékok
Ca^{++}	Ca-fém, Ca-ötvözetek	V_2O_5 , MoO_3 , PBA	$\text{Ca}(\text{TFSI})_2$ éteres oldószerek
Al^{+++}	Al-fém	Grafit, grafén, V_2O_5 , MoO_2	$\text{AlCl}_3-\text{C}_6\text{H}_{11}\text{ClN}_2$ ionos folyadék
Zn^{++}	Zn-fém, Zn-ötvözetek	MnO_2 , V_2O_5 , PBA, szerves katódok	ZnSO_4 , $\text{Zn}(\text{CF}_3\text{SO}_3)_2$, gél-elektrolitok

Fém-ion akkumulátorok elektródái és elektrolitjai

akkumulátorok tipikusan keményszén (szilárd szén) anódot, réteges oxid vagy polianionos katódot és szerves karbonát alapú elektrolitot használnak; az elektródreakciók pedig a lítiumion rendszerekhez hasonló „hintaszék” mechanizmust követik.

REAKCIÓ KISÜTÉSKOR:



Töltéskor: fordított folyamat.

A legelterjedtebb katódanyagok a réteges oxidok (P_2/O_3 típusú Na_xMeO_2) és a polianionos anyagok (pl. $\text{Na}_3\text{V}_2(\text{PO}_4)_3$). Általános katódreakció kisütéskor: $\text{Na}_{1-y}\text{MeO}_2 + y\text{Na}^+ + y\text{e}^- \rightarrow \text{NaMeO}_2$

Töltéskor: fordított folyamat.

Elektrolit:

Szerves karbonát alapú oldószerek (EC/PC, DEC, EMC) NaPF_6 vagy NaFSI sóval, valamint stabilizáló adalékokkal.

Míg a grafit anódokban a lítium alkotja a stabil LiC_6 fázist, a nátrium nem interkalálódik stabilan grafitba, a porózus kemény szén az alkalmas anódanyag. A kálium interkalál grafitba és KC_8 -t képez.

MIÉRT NINCSENEK MÉG FORGALOMBAN?

Évtizedek kutatása és fejlesztése után a monovalens és multivalens fémánódok

A LI-ION AKKUMULÁTOROK TÖRTÉNETE.

Az első fém-ion akkumulátort Stanley Whittingham amerikai kutató készítette el 1970-ben. Anódja fémes lítium volt, katódja az üreges titán-dioxid (TiO_2). A kisütés során ez LiTiO_2 vegyes oxiddá alakult. Az akkumulátor feszültsége alig több mint 2V volt. A fém lítium azonban reaktív és az akkumulátor túl robbanásveszélyes volt ahhoz, hogy biztonságosan használni lehessen. A következő évtizedben kimutatta, hogy nagyobb cellafeszültség érhető el, ha a katód anyagát fém-szulfid helyett fém-oxidból, például kobalt-oxidból készítik. Majd 1980-ban kimutatta, hogy fémlítium helyett anódként interkalált lítium is használható, mellyel akár 4V cellafeszültség is elérhető. A Goodenough katódja alapján Akira Yoshino japán kutató 1985-ben készítette el az első kereskedelmileg életképes lítium-ion akkumulátort, lecserélve a reaktív lítium fémánódot is, ásványolajkokszba ágyazott fémes lítiummal, amely a katód kobalt-oxidjához hasonlóan képes interkalálni a lítium ionokat. Ez egy könnyű, tartós és több százszor feltölthető akkumulátort eredményezett, mielőtt a teljesítménye romlott volna. 2019-ben a Svéd Királyi Tudományos Akadémia, a lítiumion-akkumulátor kifejlesztéséért, mindhármat kémiai Nobel-díjjal ismerte el.



gyakorlati alkalmazását nem vizes akkumulátorokban továbbra is problémák kísérik.

Ezek közül néhány: a több vegyértékű ionok erősen kölcsönhatnak a gazdaanyagokkal és erősen szolvatálódnak, ebből ered a lassú

iondiffúzió és nehéz a deszolvatáció az elektródákon. A fémek ionjainak anódként használatát különböző morfológiájú passzivációs réteg, dendritképződés kíséri. Kevés anyag képes visszafordíthatóan interkalálni a multivalens ionokat, szerkezeti összeomlás nélkül és nehéz adott fémhez

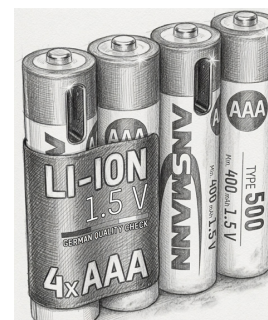
A fém-ion akkumulátorok fejlettségi szintjei

Rendszer	Cella-feszültség (V)	Anód fajlagos kapacitás (Ah/kg)	Energia sűrűség (Wh/kg)
Li-ion (grafit)	3.2–4.2 V	372	100–280
Na-ion (kemény C)	2.5–3.6 V	250–350	100–160
K-ion (grafit)	2.5–4.0 V	250–350	80–140
Mg-ion (fém)	1.0–2.8 V	2205	60–150
Ca-ion (fém)	1.5–3.0 V	1337	80–200
Al-ion (fém)	0.5–2.0 V	2980	akár 1060
Zn-ion (fém)	1.0–1.8 V	820	60–160

megfelelő elektrolit választása.

Kálium-ion akkumulátorok:

Hasonló elven működnek, mint a lítium-ion rendszerek. A kihívás a nagyobb ionméret és a stabilitás.



Magnézium-ion akkumulátorok:

Elméletileg nagyobb energiasűrűséget kínálnak, de az elektrolitfejlesztés még akadályozza a gyakorlati alkalmazást.

Kalcium-ion akkumulátorok:

A Ca^{2+} kétértékű, ezért nagy kapacitást ígér, probléma az anód passziváció és nehezen lehet megfelelő elektrolitot találni. Korai kutatási fázisban van.

Cink-ion akkumulátorok:

Már léteznek korlátozottan elérhető formában. Előnyük az olcsóság és a biztonság, de a ciklusélettartam még fejlesztés alatt áll.

Alumínium-ion akkumulátorok:

Nagy elméleti kapacitással rendelkeznek, de a megfelelő elektrolit és katódanyag megtalálása még kihívás. Az Al^{3+} korrozív kloroaluminát ionos elektrolitot igényel, ami vizes oldatban dendritképződéshez és hidrogénfejlődésre vezet. Gyorsan fejlődő.

Bella József



IRODALOM

Maryam Sadat Kiai et al., *Crystals* 2023, 13(7), 1002
Yi Liu, Rudolf Holze, *Encyclopedia* 2022, 2(3), 1611
Yuanjian Li, et al., *Science* 2025 Vol 389, Issue 6766
S.H. Finkelstein et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2024, 26, 24157
X. Yu, et al., *Batteries & Supercaps* 2021, 4, 1201.

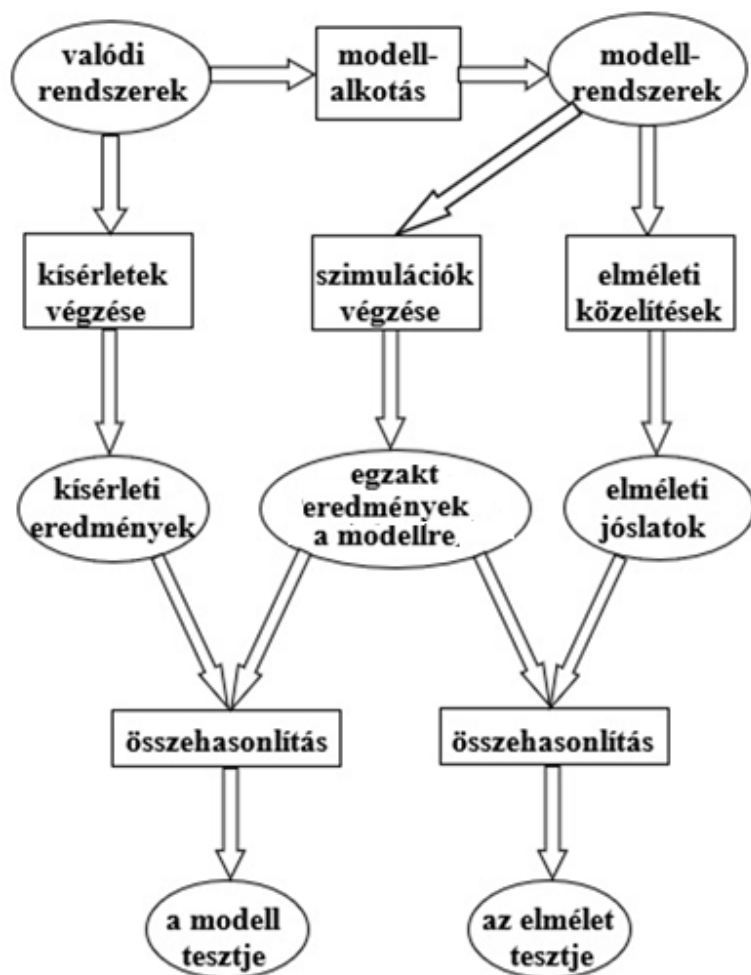
A Monte Carlo szimulációs módszer és az élet keletkezése

A természet megismerésének és megértésének együttes igénye egyidős az emberiséggel. Az előbbi igény, azaz a körülöttünk levő világ minél jobb, pontosabb megismerése iránti vágy vezetett a kísérleti tudományok megszületéséhez és fejlődéséhez, hiszen egy kísérlet során szigorúan véve a környező világ egy aspektusát figyeljük meg és rögzítjük. Ezzel párhuzamosan a másik, a világ megértésére vonatkozó alapvető igény az elméleti tudományok bölcsője volt, hiszen az elméletek célja éppen az előbb említett megfigyelések rendszerezése és értelmezése.

Egy-egy elmélet „jó”-ságát azáltal vizsgálhatjuk, hogy képes-e még meg nem figyelt jelenségekre olyan jóslatokat tenni, melyeket a későbbi mérések igazolni tudnak. Fontos megjegyezni, hogy míg egyetlen sikertelen jóslat is cáfolhat egy elméletet, a sikeres jóslatok nem tudják a szó szigorúan vett értelmében igazolni annak helyességét. Newton törvényei például több mint 200 évig utólag is helyesnek bizonyuló jóslatokhoz vezettek, és csak a XX. század hajnalán, a nagyon kicsi, illetve nagyon nagy mérettartományok fokozatos megismerésével kezdtek pontatlan jóslatokat adni. E felismerés vezetett el azután az elmélet többféle továbbfejlesztéséhez, és így a kvantummechanika, illetve a relativitáselmélet megszületéséhez.

A TERMÉSZET MEGISMERÉSÉNEK LEHETSÉGES MÓDJAI

Az elméleti vizsgálatok mindig egy modellalkotási lépéssel kezdődnek, melynek során a vizsgálni kívánt rendszert egy olyan modellel helyettesítjük, mely az eredeti rendszer releváns tulajdonságait megtartja, a nem relevánsakat viszont elhagyja. Az elméletet magát ezután már erre a modellelre alkalmazzuk. Így a newtoni II. mozgásegyenlet a nevezetes alma helyett egy tömegponttal dolgozik, más szóval az alma tömegét megtartva a modell nem foglalkozik annak színével, ízével, vagy azzal, hogy éppen kukacos volt-e. Mindezek alapján az elmélet jóslatainak esetleges kudarca nem feltétlenül az elmélet hibáját jelzi, az lehet a nem megfelelő modell megválasztásának a következménye is.



1. ábra. A természet megismerésének lehetséges módjai.¹



A XX. század közepétől, a számítógépek megjelenésével és robbanásszerű térnyerésével párhuzamosan megjelent a természet megismerésének egy harmadik fontos megismerési módja, a számítógépes szimulációk módszere is. Számítógépes szimulációk során – az elméletekhez hasonlóan – a vizsgálni kívánt rendszert először annak egy alkalmasan választott modelljével helyettesítjük. Azonban a szimulációk, melyeket gyakran numerikus kísérleteknek is neveznek, ezekre a modellekre a valódi kísérletekhez hasonlóan pontosnak tekinthető eredményeket szolgáltatnak, melyeket – a kísérletekhez hasonlóan – csak Gauss eloszlású véletlen hiba terhel. Ilyen módon a modellek és az elméletek jósága egymástól függetlenül tesztelhető, előbbi a szimulációs eredményeknek kísérleti adatokkal, utóbbi pedig elméleti jöslatokkal való összevetésével történhet. A természet három nagy megismerési módjának egymáshoz való viszonyát az 1. ábra¹ szemlélteti. A fentiekből következik a számítógépes szimulációs vizsgálatok egyik fontos előnye, nevezetesen, hogy erősen mérgező, veszélyes, korrozív, vagy éppen extrém körülmények között (például nagy nyomáson, magas vagy éppen nagyon alacsony hőmérsékleten) lévő rendszerek különösebb probléma nélkül vizsgálhatók ilyen módon, és e vizsgálatok pénzügyi, környezeti, egészségügyi terhei elenyészőek a valódi kísérletekéhez képest. Fontos azonban szem előtt tartani azt a tényt, hogy a szimulációk mindig a modellalkotási

lépéssel kezdődnek, és e modellek érvényességét a valódi kísérleti adatokkal való összevetéssel mindig igazolni kell¹.

ANYAGI RENDSZEREK SZIMULÁCIÓJA, A MONTE CARLO MÓDSZER

Anyagi rendszerek számítógépes szimulációjának két alapvető módszere ismert, a molekuláris dinamika és a Monte Carlo. A molekuláris dinamika módszere koncepcionálisan roppant egyszerű: kiszámítjuk a részecskék közötti kölcsönhatásokat (a kölcsönhatások matematikai alakjának megválasztása maga a fentiekben részletesen emlegetett modellalkotási lépés), ez alapján felírjuk a részecskékre ható erőket, majd a megfelelő mozgásegyenleteket megoldva kiszámítjuk a részecskék helyzetét és sebességét (kvantummechanikai szimulációnál hullámfüggvényüket) Δt időlépés múlva. A részecskék új helyzetében ezután a kölcsönhatások újbóli kiszámításától kezdve az egész eljárást újra és újra megismételjük. Meg kell jegyezni, hogy a molekuláris mozgások karakterisztikus idejét és a kondenzált fázisok sűrűségét figyelembe véve ez az időlépés legfeljebb 1-2 fs, azaz nagyjából 10^{-15} s hosszúságú lehet. A napjainkban rutinszerűen elérhető számítási kapacitások mellett 10-100 ezer részecskével 10^7 - 10^9 időlépés végezhető, azaz a szimulált folyamat időskálája tipikusan 10 ns - 1 μ s nagyságrendű lehet.

Monte Carlo szimulációk során ezzel szemben a rendszerünknek nem az időbeli fejlődését követjük, hanem egymástól függetlenül pillanatfelvételeket készítünk annak atomi felbontású szerkezetéről. Ilyen módon a rendszer egészét jellemző makroszkopikus tulajdonságokat (sűrűség, párolgáshő, hőkapacitás, szórási kép...) a részecskék tulajdonságai által meghatározott úgynevezett mikroállapotok alapján számítjuk ki. A szimuláció során statisztikus mintavételezést végzünk, vagyis a lehetséges mikroállapotok közül csak néhányat válogatunk be a mintánkba, és e mintán számoljuk ki a makroszkopikus

tulajdonságok értékét. Az eljárás hasonló ahhoz, ahogy a közvéleménykutatók ezerfős minták alapján becsülik a társadalom véleményét adott kérdésekről. Ha a mintánkba kerülő mikroállapotokat egyenletes valószínűséggel választjuk ki az összes lehetséges mikroállapot közül, akkor Boltzmann törvénye értelmében állandó hőmérsékleten (T), térfogaton (V) és részecskeszám (N) mellett egy adott M mennyiség makroszkopikus értékét az egyes mikroállapotokon számított érték Boltzmann-faktorral súlyozott átlagával becsülhetjük:

$$(1.) \langle M \rangle = \frac{\sum M_i \exp(-U_i / k_B T)}{\sum \exp(-U_i / k_B T)}$$

ahol U_i a mintában szereplő i -dik mikroállapot energiája, k_B pedig a Boltzmann-faktor. Ez az eljárás azonban a gyakorlatban nem kivitelezhető, hiszen a lehetséges mikroállapotok száma nagyon sok nagyságrenddel haladja meg a kezelhető nagyságú minta méretét. Ezért, kihasználva azt a tényt, hogy a Boltzmann törvény értelmében az egyes mikroállapotok Boltzmann-faktorukkal, azaz $\exp(-U_i / k_B T)$ -vel arányos mértékben járulnak hozzá a makroszkopikus értékhez, Monte Carlo szimulációkban az egyenletes valószínűségű mintavételezést és Boltzmann-faktorral súlyozott átlagolást helyettesítjük Boltzmann-faktorral súlyozott mintavételezéssel és súlyozatlan átlagolással.

A Boltzmann-faktorral súlyozott mintavételezést Metropolis és munkatársai javaslatára az alábbi módon végezzük². A szimuláció minden egyes lépésében egy véletlenszerűen választott részecskét véletlenszerűen elmozdítunk (innen a módszer neve), majd a mozdítást kísérő ΔU energiaváltozás alapján a mozdítást a

$$(2.) P_{acc} = \min(1, \exp(-\Delta U / k_B T))$$

valószínűséggel (azaz energiacsökkenés esetén mindig, energianövekedés esetén $\exp(-\Delta U / k_B T)$ valószínűséggel) fogadjuk el. A lépés elfogadása esetén a szimuláció

Monte Carlo szimulációk során a rendszerünknek nem az időbeli fejlődését követjük, hanem egymástól függetlenül pillanatfelvételeket készítünk annak atomi felbontású szerkezetéről.

a véletlen mozdítás utáni, elvetése esetén pedig a mozdítás előtti helyzetből folytatódik tovább.

Mindezek alapján adódik, hogy a Monte Carlo módszer, a molekuláris dinamikával ellentétben nem alkalmas sem időfüggő mennyiségek (pl. diffúzióállandó, rezgési spektrumok...), sem pedig nemegyensúlyi folyamatok vizsgálatára, hiszen az idő, mint fizikai mennyiség egyszerűen hiányzik a modellünkben. Így viszont felmerül a kérdés, hogy miért érdemes a Monte Carlo módszert használni, ha a molekuláris dinamika egyszerűen szólva többet tud nála. A kérdést azonban kicsit másképpen érdemes feltenni: nem „miért”, hanem „mikor” célszerű a Monte Carlo módszert használni? Érdekes módon a módszer előnye éppen abban áll, hogy nem időben követ folyamatokat, és így a mintavételezés a lehetséges állapotok olyan sorozatán keresztül is történhet, melyek időben nem követhetnék egymást.

A NAGYKANONIKUS MONTE CARLO MÓDSZER

Egy ilyen lehetőséget valósít meg az úgynevezett „nagykanonikus” Monte Carlo szimuláció. Ilyenkor a részecskék száma nem rögzített, egyes lépésekben részecskéket adhatunk a rendszerhez vagy vehetünk el belőle. Helyette a részecskeszámhoz tartozó intenzív állapotjelzőnek, a kémiai potenciálnak (μ) az értékét rögzítjük. Egyszerű belátni, hogy míg egy adott rendszer időbeni fejlődése nem tartalmazhat részecskék „keletkezését” vagy „megszűnését”, egy állandó kémiai potenciálú rendszer mintavételezése során minden további nélkül kerülhetnek a mintába más-más számú részecskét tartalmazó mikroállapotok. Ilyenkor természetesen a Boltzmann törvény eredeti formájában nem érvényes, az egyes mikroállapotok a Boltzmann-faktor helyett a

$$(3.) \quad w_i = \exp \left(N_i \ln \frac{V}{A^3} - \ln(N_i!) - (U_i - N_i \mu) / k_B T \right)$$

súllyal járulnak hozzá az egyes fizikai mennyiségek makroszkopikus értékéhez.

Ebben az egyenletben $\Lambda = (h^2/2\pi m k_B T)^{1/2}$, ahol h a Planck állandó, m pedig az egyes részecskék tömege. A Boltzmann-faktorról való analógia miatt a 3. egyenlettel megadott súlyfaktort pszeudo Boltzmann-faktornak is nevezik. A szimuláció során most a részecskék véletlen elmozdítása mellett időnként véletlenszerűen megpróbálunk egy-egy részecskét beszúrni a rendszerbe vagy elvenni onnan, és ezeket a véletlen változtatásokat a 2. egyenlet analógiájára a

$$(4.) \quad P_{acc} = \min(1, \Delta w_i)$$

valószínűséggel fogadjuk el.

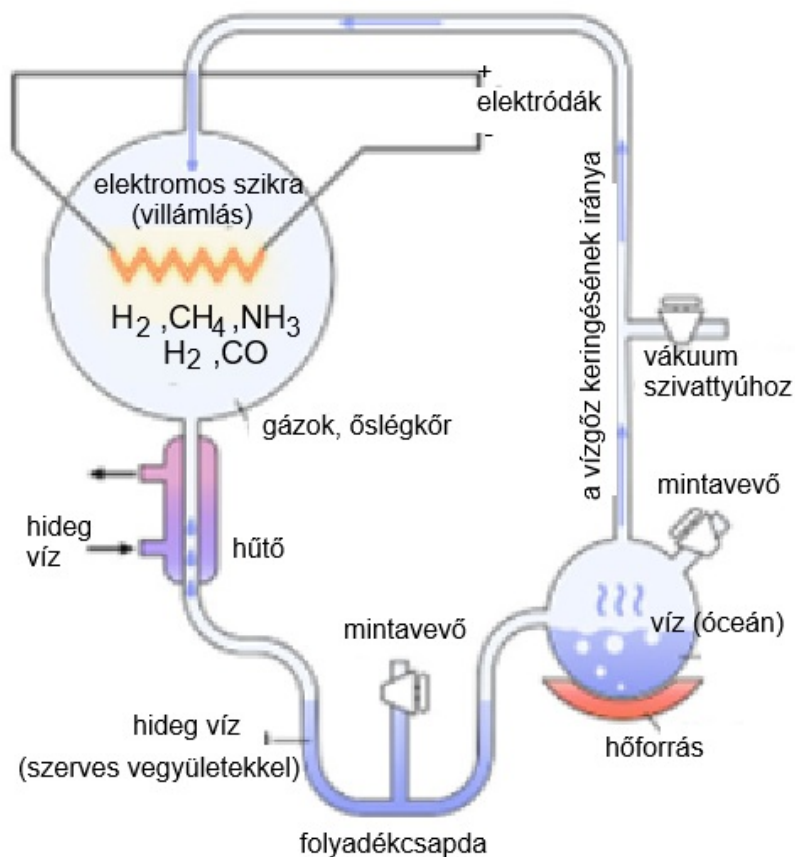
A nagykanonikus Monte Carlo módszer nagyon alkalmas lehet inhomogén rendszerek, például felületi megkötődés (adszorpció) vizsgálatára. Ilyenkor a kémiai potenciált úgy kell megválasztani,

hogy a szimuláció reprodukálja a vizsgált anyag tömbfázisbeli sűrűségét, ekkor az ezen sűrűséghez tartozó, az adott felületen megkötődött anyagmennyiség a szimulációból közvetlenül adódik. Ha pedig különböző tömbfázisbeli sűrűségekkel megismételjük a szimulációt, akkor ez a szimuláció sorozat az adszorpciós izotermát szolgáltatja.

AZ ÉLET KELETKEZÉSÉNEK EGY LEHETSÉGES FORGATÓKÖNYVE – A HCN VILÁG ELMÉLET

A nagykanonikus Monte Carlo szimuláció alkalmazását egy, a földi élet keletkezésének lehetőségeit vizsgáló saját kutatás eredményein keresztül illusztráljuk.

Az élet keletkezésének megértése kétségtől egyike az emberiséget



2. ábra. A Miller kísérlet elrendezése.



legrégebb óta izgató tudományos problémáknak. Nem véletlen, hogy ezt a kérdést minden nagyobb vallás és mitológia is feldolgozta. Darwin munkássága óta tudjuk, hogy az önreprodukcióra képes egységek, fehérje-nukleinsav együttesek megjelenésétől kezdve hogyan vezetett az út a mai élővilág bonyolultságához és roppant változatosságához. Az élet keletkezésének dilemmáját köznapin nyelven a tyúk-tojás probléma (azaz, hogy mi volt előbb, a tyúk vagy a tojás) fogalmazza meg. A tojást a tyúk „készíti”, de az a tyúk egy másik tojásból kelt ki, amit egy másik tyúk tojt, és így tovább. Ha ezen a tyúk-tojás láncban gondolatban végigmegyünk, akkor tulajdonképpen az evolúció folyamatát pörgetjük végig visszafelé. A lánc végén találunk néhány fehérjét, melyek, mint „ős-tyúkok”, nukleinsav láncokat tudnak szintetizálni, ezek a nukleinsavak, az „ős-tojások” pedig tartalmazzák a fehérjék kódjait. Az a kérdés azonban továbbra is nyitott, hogy hogyan keletkeztek az első fehérjék és nukleinsav molekulák, megteremtve ezzel az élet kialakulásának kémiai feltételeit. Ezt a folyamatot, vagyis a fehérjék és nukleinsavak megjelenését az élet előtti Földön kémiai evolúciónak nevezzük.

A kémiai evolúció vizsgálatában talán az első komoly áttörést Stanley Miller 1953-ban elvégzett kísérlete jelentette³. A kísérlet során víz, ammónia, metán és hidrogén elegyét zárt rendszerben keringették, az elegyet a rendszer adott pontján forralták, másutt a gőzöket lecsapatták, illetve a gőztér adott pontján elektromos kisüléseket keltettek, modellezve ezzel az óslégkör összetételét, a víz körforgását, valamint a villámlásokat. A Miller-kísérlet elrendezését a 2. ábra mutatja.

Miller egy hét eltelte után elemezte a kapott elegyet, és azt tapasztalta, hogy az ősi Föld légkörében uralkodó körülményeket imitáló kísérlet során már ilyen rövid idő alatt is megjelentek összetett szerves molekulák, köztük egyes aminosavak (pl. glicin, alanin) is. A kísérleti berendezést tudományos

emlékként megőrizték, ám fél évszázad múltán Jeffrey Bada és munkatársai lehetőséget kaptak az elegy ismételt analizisére. Részben az analitikai módszerek időközben lezajlott komoly fejlődése, részben pedig a lassabb reakciók időközbeni lejátszódása eredményeképpen a megismételt analizis során Bada és munkatársai sokkal többféle molekulát találtak a rendszerben, mint annak idején Millerék⁴. Az újonnan detektált molekulák közt, 18 új aminosav mellett szerepelt a hidrogén cianid (HCN) is.

A múlt század '70-es éveit óta ismeretes, hogy a hidrogén cianid kulcsfontosságú szerepet tölthet be a biomolekulák spontán keletkezésében. A HCN vizes közegű polimerizációja polipeptid láncok, oligomerizációja pedig a nukleinsavakban előforduló nukleotid bázisok keletkezéséhez vezet (az adenin például formálisan a HCN pentamerje). Ilyen módon a HCN molekula központi szerepet játszhatott a kémiai evolúció során az önreprodukcióra képes biomolekulák keletkezésében. Az élet kialakulásának ezt a lehetőségét „HCN világ” elméletnek nevezik.

Noha a HCN világ elmélet igen tetszetős magyarázatot kínál az élet keletkezésére, van egy gyenge pontja. Nevezetesen az említett polimerizációs, illetve oligomerizációs reakciók nagy, 1-10 M közötti HCN koncentrációt igényelnek, ami a korabeli Földön globálisan semmiképpen sem állt rendelkezésre. Ennél kisebb koncentrációban viszont a HCN formamiddá történő hidrolízise a kedvezményezett reakció, ami a biomolekulák keletkezése szempontjából zsákutcának tekinthető.

A kérdés ezek után nyilvánvalóan az, hogy elképzelhető-e a HCN lokális feldúsulása a biomolekulák keletkezéséhez szükséges szintre. Az egyik ilyen lehetőség kétségtávol a vizes oldatok (azaz a korabeli ósóceán) felületén való adszorpció volna, míg egy másik forgatókönyv a világűrben található kisebb objektumok (kozmikus por, meteoritok...) amorf jéggel borított

felületén való megkötődés lehet. Ismert, hogy a világűrben nagy mennyiségű amorf (üveges szerkezetű) jég található, elsősorban az említett kisebb objektumok felszínén, illetve hogy a HCN kozmikus értelemben viszonylag nagy koncentrációban

$(2 \times 10^{10} - 2 \times 10^{12} \text{ molekula/m}^3)$ ⁵ van jelen a csillagközi tér egyes tartományaiban.

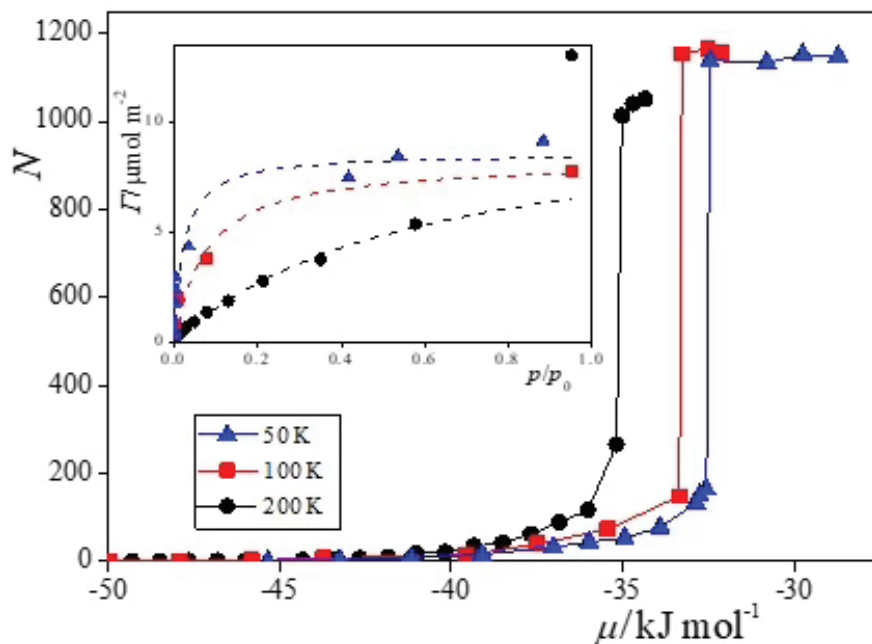
Tudjuk azt is, hogy meteoritok felületén különféle, a csillagközi térben képződött kisebb molekulák érkehetnek a Földre. A kérdés tehát az, hogy fel tud-e dúlni a meteoritok amorf jéggel borított felszínén a csillagközi térben található HCN kellő mértékben ahhoz, hogy akár a világűrben, akár a Földre érkeve beinduljon a polimerizációjuk, illetve oligomerizációjuk, és elkezdődjön az önreprodukcióra képes biomolekulák képződése. A cikk további részében az ezzel a kérdéssel kapcsolatos, nagykanonikus Monte Carlo szimulációval kapott saját kutatási eredményeinket ismertetjük.⁶

HCN ADSZORPCIÓJA AMORF JÉGEN

A HCN amorf jégen történő adszorpcióját nagykanonikus Monte Carlo szimulációval vizsgáltuk a csillagközi tér egyes tartományaira jellemző hőmérsékleteken, 50, 100, illetve 200 K-en. Az adszorpciós izoterma meghatározásához a korábban leírt módon szimuláció sorozatot végeztünk, melyben a HCN kémiai potenciálját szisztematikusan változtattuk. A kapott izotermákat a 3. ábra mutatja.

Az egyes izotermák fokozatosan emelkedő szakaszait -35 – -32 kJ/mol között egy hirtelen ugrás követi – ez megfelel a HCN kondenzációjának: az adott hőmérsékleten a gőz-folyadék egyensúlynak megfelelő kémiai potenciálon a szimulációs doboz hirtelen megtelik HCN molekulákkal, és innentől már folyékony HCN van jelen a jég mellett a rendszerben.

A kapott izotermák gőzfázisú szakaszait átkonvertálhatjuk a hagyományos és lényegesen informatívabb alakba, amikor



3. ábra. A HCN számított adszorpciós izotermája (a felületen megkötött molekulák száma a HCN kémiai potenciáljának függvényében) a három szimulált hőmérsékleten. A pontokat összekötő folytonos vonalak csak az ábra jobb áttekinthetőségét szolgálják. Az ábra betétje ugyanezen izotermák gőzfázisú tartományát mutatja a megkötött anyag felületi sűrűségét a relatív nyomás függvényében ábrázolva. Itt a szaggatott vonalak az adatsorokhoz illesztett Langmuir izotermákat mutatják.

az adszorbeált anyagmennyiség felületi sűrűségét (γ) a HCN relatív gőznyomásának (p_{rel}) függvényében adjuk meg. A relatív gőznyomás, azaz a kondenzációs ponthoz tartozó nyomásértékkel (p_0) normált nyomás a kondenzációhoz tartozó kémiai potenciál (μ_0) ismeretében az alábbi módon számolható:

$$(5.) \quad p_{\text{rel}} = \frac{p}{p_0} = \frac{\exp(\mu/k_B T)}{\exp(\mu_0/k_B T)}$$

A kapott izotermák $\Gamma(p_{\text{rel}})$ alakját a 3. ábra betétje mutatja. A számított pontokhoz az egyrétegű adszorpciót feltételező Langmuir izoterma egyenletét illesztettük:

$$\Gamma = \Gamma_{\text{max}} \frac{p_{\text{rel}} K}{1 + p_{\text{rel}} K} \quad (6.)$$

ahol Γ_{max} és K a telített adszorpciós réteg felületi sűrűségét illetve a felület és a gőzfázis közötti megoszlást leíró illesztett paraméterek. Látható azonban,

hogy az illesztés nem tökéletes, viszonylag nagy nyomáson (különösen 200 K-en) a számított értékek nagyobbak a Langmuir izoterma által jósoltnál. Mindez arra utal, hogy nagy relatív nyomásokon az adszorpció nem egy, hanem több molekuláris réteget hoz létre a jég felületén. Ezt illusztrálja a 4. ábrán látható szimulációs pillanatfelvétel.

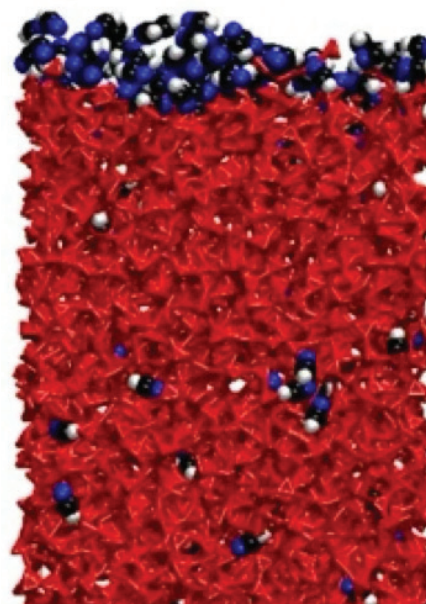
A szimulációs eredmények azt is mutatják, hogy a felületi megkötődés mellett HCN molekulák jelennek meg az amorf jég tömbfázisában is. E beoldódás mértékét – az adszorpcióhoz hasonlóan – a beoldódási izotermával, azaz a tömbfázisú jég belsejében megjelenő HCN molekulák koncentrációjának (c) a kémiai potenciáltól való függésével jellemezhetjük. Az 5. ábrán bemutatott beoldódási izotermák szerint a HCN koncentrációja az amorf jég belsejében a kondenzációs nyomás közelében a 0,1-1 M tartományba esik, azaz éppen el is érheti a biomolekulák szintéziséhez minimálisan szükséges értéket. Meg kell említeni

azonban, hogy a kémiai potenciált a

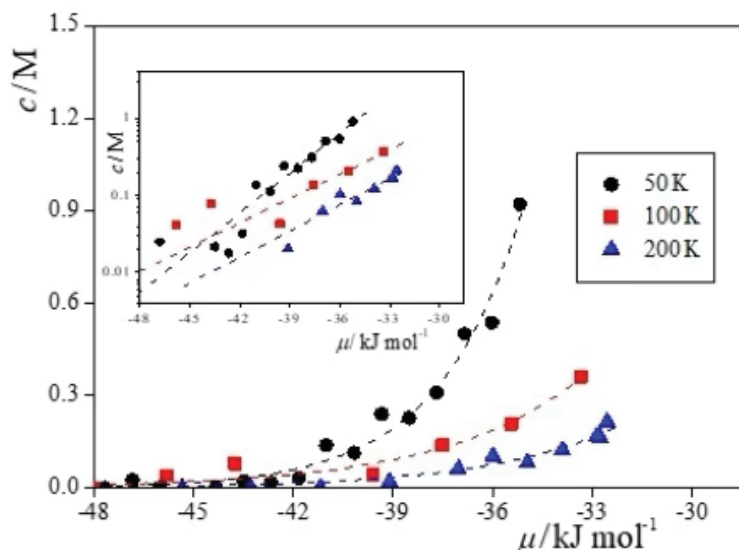
$$\mu = \mu^* + RT \ln a \quad (7.)$$

alakban lehet felírni, ahol μ^* egy konstans referencia érték, a pedig a HCN molekulák aktivitása.

Ideális oldódás esetén, azaz, ha az oldott HCN molekulák egymással való kölcsönhatása elhanyagolható, az aktivitás értéke megegyezik a koncentrációval, azaz ekkor a 7. egyenlet alapján a koncentráció a kémiai potenciál exponenciális függvénye lesz. Mivel a kapott adatpontokra jól illeszkedik az exponenciális függvény, a HCN amorf jégben való oldódása ideálisnak tekinthető, azaz a beoldódott HCN molekulák közötti kölcsönhatás a viszonylag nagy koncentráció ellenére is elhanyagolható, ami ellentmond az oligomerizációs vagy polimerizációs reakciójuk ilyen körülmények közötti lehetőségének.



4. ábra. Szimulációs pillanatfelvétel az amorf jégen adszorbeálódott HCN-ről 200 K-en, a kondenzációs ponthoz közeli kémiai potenciálon. A HCN molekula N, C és H atomjait kék, fekete és fehér golyók, a vízmolekulákat pedig a jobb áttekinthetőség kedvéért piros pácikák mutatják.



5. ábra. A HCN számított beoldódási izotermája (a tömbfázisban lévő HCN molekulák koncentrációja a kémiai potenciáljuk függvényében) a három szimulált hőmérsékleten

(50 K: fekete körök, 100 K: piros négyzetek, 200 K: kék háromszögek). A szimulációval nyert adatpontokra illesztett exponenciális függvényeket a megfelelő színű szaggatott vonalak jelzik. Az ábra betétje ugyanezeket az adatokat és illesztett exponenciális függvényeket logaritmikus skálán mutatja.

Végezetül ahhoz, hogy a kapott eredmények fényében érdemben tárgyalhassuk a biomolekulák HCN alapú, világűrben történő esetleges képződésének lehetőségét, kapcsolatot kell találnunk az izotermáink független változói (azaz a kémiai potenciál, illetve relatív gőznyomás) és a HCN világűrben ismert koncentrációja (2×10^{-10} – 2×10^{-12} molekula/m³) között. Mivel a koncentráció az ideális gáz állapotegyenletének alapján közvetlenül nyomássá konvertálható ($c = p/RT$), e kapcsolathoz csak a HCN telített gőznyomására van szükségünk a vizsgált hőmérsékleteken. Mivel ehhez kísérleti adatok csak 200 K-en és fölülte állnak rendelkezésre⁷ az alacsonyabb hőmérsékletek esetén csak extrapolációval kaphatunk meglehetősen pontatlan becsléseket. E becslés pontatlansága 50 K-en nagyjából 50 nagyságrendet fog át, így ezen a hőmérsékleten gyakorlatilag semmit nem tudunk mondani e tekintetben. 100 K-en ennél lényegesen pontosabb becslés adható, itt a HCN telített gőznyomása vélhetőleg a 10^{-9} – 10^{-6} Pa

tartományba esik, míg 200 K-en p_0 már extrapoláció nélkül becsülhető, értéke itt 0.6 Pa-nak adódik. Ezek alapján 200 K-en a HCN világűrbeli koncentrációja a $10^{-8} > p_{\text{rel}}$ relatív nyomás tartománynak felel meg, ami nagyságrendekkel kisebb az adszorpció megjelenéséhez szükségesnél. 100 K-en azonban a relatív nyomás releváns tartománya $1 > p_{\text{rel}} > 3 \times 10^{-5}$ -nek adódik, ami a kémiai potenciál $-41 \text{ kJ/mol} < \mu < -33.3 \text{ kJ/mol}$ tartományának felel meg – itt érdemi adszorpciót és beoldódást is tapasztaltunk.

Eredményeink szerint tehát a csillagközi térnek legalábbis bizonyos, alacsonyabb hőmérsékletű tartományában várható a HCN viszonylag jelentős adszorpciója, illetve beoldódása az ott jelen lévő amorf jeges fázisba. A beoldódott HCN koncentrációja ugyan elég lehetne az oligomerizáció vagy polimerizáció beindulásához, azonban, mint láttuk, az egyes HCN molekulák egymástól való elszigeteltsége ezt nem teszi lehetővé, a fázis felületén pedig vélhetőleg nincs meg az ilyen reakciók beindulásához szükséges koncentráció. Azonban amikor egy HCN-t

tartalmazó amorf jéggel borított meteorit megközelíti a Földet, a hőmérséklet folyamatos emelkedése várható. Mivel az amorf jég fázisa metastabil a kristályos jéghez képest, és e metastabil állapot fennmaradását a kellően alacsony hőmérséklet teszi lehetővé, az amorf fázis átalakulása kristályos jéggé a hőmérséklet emelkedésével egyre nagyobb valószínűséggel és egyre gyorsabban történik meg. Kristályos jégben azonban nem oldódik a HCN⁸, így az eredetileg beoldódott molekulák az átalakulás során kilökődnek a jég felületére, ahol jelentősen (a jeges fázis méretétől is függő mértékben) megnövelik a már eleve ott levő HCN felületi koncentrációját. Ez az állapot korlátozott ideig tart, hiszen a hőmérséklet további növekedése a jég megolvadásához, és a felületén lévő HCN újbóli beoldódásához vezet. Azonban az amorf jég – kristályos jég és a kristályos jég – víz fázisátalakulások közötti elteltő idő megfelelő időablakot biztosíthat a HCN biomolekulák szintéziséhez vezető oligomerizációjának, illetve polimerizációjának lejátszódásához.

Jedlovsky Pál



HIVATKOZÁSOK

¹M. P. Allen, D. J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon Press, Oxford) 1987.

²N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, *J. Chem. Phys.* 21, 1087 (1953).

³S. L. Miller, *Science* 528, 117, 1953.

⁴A. P. Johnson, H. J. Cleaves, J. P. Dworkin, D. P. Glavin, A. Lazcano, J. L. Bada, *Science* 404, 322, 2008.

⁵D. M. Graninger, E. Herbst, K. I. Öberg, A. I. Vasyunin, *Astrophys. J.* 787, 74 (2014).

⁶H. Tóth Ugyonka, Gy. Hantal, M. Szőri, P. Jedlovsky, *ACS Earth & Space Chem.* 8, 520 (2024).

⁷CRC Handbook of Chemistry and Physics, 80. kiadás, szerk.: D. R. Lide (CRC Press, Boca Raton) 1999.

⁸M. Szőri, P. Jedlovsky, *J. Phys. Chem. C* 118, 3599 (2014).

EGYKRISTÁLY

„Nehéz elképzelni, hogy milyen lenne ma a kémia, ha a röntgen-diffrakciót nem fedezték volna fel. Spektroszkópiai módszerekkel (Raman, infravörös, különösen pedig mikrohullámú) precíz információink lenne néhány száz nagyszimmetriájú molekula alakjáról és méreteiről. Gázelektrondiffrakcióval (amelyet a kristály-diffrakciótól függetlenül is felfedezhettek volna) hasonló információink lennének további néhány, relative egyszerű, illékony molekuláról. Az atomok elrendeződésének feltárása összetettebb molekulákban továbbra is a vegyészek leleményességén és képzelőerején múlna, akik készek lennének hősiessé extrapolációkat nyerni kis molekulák adataiból. Semmit sem tudnánk az ion-kristályok, ásványok, fémek és ötvözetek szerkezetéről és jóformán semmit az összetett szerves molekulák, beleértve a biológiailag fontos polimereket – fehérjéket, poliszaharidokat és polinukleotidokat.”

(Jack Dunitz)

Az idézet abból az korból származik, amikor a komplex atomi rendszerek legbiztosabb, legpontosabb és leggyorsabb szerkezeti információit a röntgendiffrakció adta.

Az egykristály röntgendiffrakciós kísérlet célja:

- a kristály elemi celláját alkotó atomok koordinátáinak, valamint
- az atomok kapcsolódási sorrendjének (konnektivitásának) meghatározása,
- a koordinátákból számítható geometriai paraméterek (kötéstávolságok és szögek, torziós szögek, síkok, stb.) számítása,
- a konformáció leírása,
- királis molekulák esetében az abszolút konfiguráció meghatározása,
- annak megismerése, hogyan épül fel a kristály az azt alkotó atomokból, molekulákból.

A továbbiakban a "kismolekulás krisztallográfiával" foglalkozunk, amely a krisztallográfiának az a területe, amelyben a kísérlet meghaladja az atomi felbontást (ez kevesebb mint ~1000 nem-hidrogén atomot jelent). Elsősorban szerves és

fémorganikus molekulák, kisebb fehérjék, tartoznak ide. A szerves kristályok szerkezetének leírása általában sokkal kevesebb atomból álló egységekkel lehetséges, ugyanakkor szerkezetük felderítése sokszor igen nagy nehézséggel jár a gyakran megjelenő magas szimmetria miatt. A biológiailag fontos makromolekulák (fehérjék) diffrakciós kísérleteiben a felbontás több Å is lehet ($1 \text{ Å} = 10^{-8} \text{ cm} = 10^{-10} \text{ m} = 0,1 \text{ nm}$) ezért szerkezetük meghatározása más technikát igényel. Az alkalmazott röntgensugárzás monokromatikus, hullámhossza összemérhető az atomi dimenziókkal: leggyakrabban $\text{CuK}\alpha$, $\lambda = 1,5418 \text{ Å}$, vagy $\text{MoK}\alpha$, $\lambda = 0,7107 \text{ Å}$.

Röntgensugárzás gerjesztéséhez három dolog szükséges: elektronforrás (fűtött katód), valamely eszköz, amely nagy sebességre gyorsítja az elektronokat és a target (fém), amellyel az elektronok ütköznek és kölcsönhatásba lépnek. A kölcsönhatásban a sugárzás veszít energiájából ("lefékeződik"). Az energia túl nagy ahhoz, hogy a target elnyelje, így az energia többlet elektromágneses sugárzás formájában távozik. Két különböző folyamat által nyerünk röntgen

A szilárd fázisú anyagok különleges képviselői a kristályok, amelyek homogén szilárd testek, rendezett atomi eloszlással és határozott kémiai összetétellel.

fotonokat, az egyik a fékezési sugárzás (ez a gyógyászatban és ipari alkalmazásokban fontos) a másik a K-héj emisszió, amely úgy jön létre, hogy az ütköző elektron képes kimozdítani a K-héj elektronját, amely helyére magasabb energiájú elektron lép. A K-sugárzás nagyobb intenzitású, mint a fékezési és a röntgen foton, meghatározott hullámhosszú (monokromatikus), fénysebességgel egyenes vonalban terjed (ezt alkalmazzuk a diffrakciós kísérletben). A karakterisztikus sugárzás dublett: a nagyobb intenzitású sugárzás (α) mellett mindig megjelenik a kisebb intenzitású β .

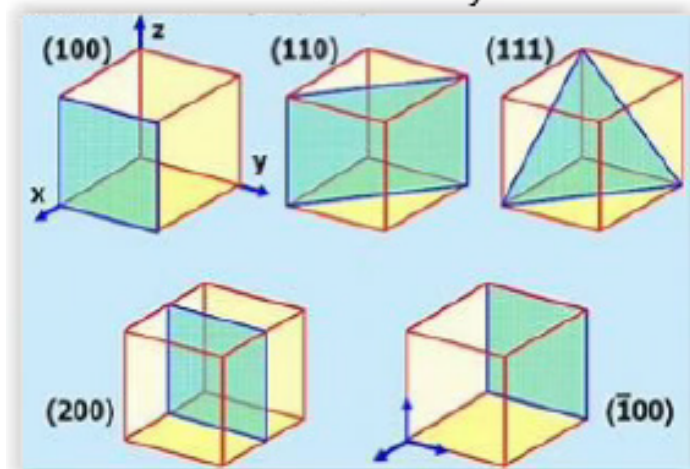
DIFFRAKCIÓ

A "diffrakció" szó Francesco Maria Grimaldi XVII. századi jezsuita szerzetes nevéhez fűződik, aki a szűk résen át vetített fény elhajlását és interferenciáját tanulmányozta. Az első röntgendiffrakciós kísérletet 7 évvel a röntgensugár felfedezése után Friedrich, Kipping és Laue végezte (1912). Kollimált (fehér) röntgensugárzást bocsájtottak át rézsulfát kristályon. A kristály mögé helyezett fényképező lemezen különböző intenzitású foltok jelentek meg komplikált mintázatban. Ezzel igazolták Laue feltevését, amely szerint a röntgensugárzás hullámhossza összemérhető az atomi dimenziókkal, ezért a kristály diffrakciós rácsként viselkedik.



RÖNTGENDIFFRAKCIÓ

Köbös kristály



Különböző síkok h,k,l Miller indexei

A szilárd fázisú anyagok különleges képviselői a kristályok, amelyek homogén szilárd testek, rendezett atomi eloszlással és határozott (bár nem feltétlenül sztöchiometrikus) kémiai összetétellel. A kristályos és amorf anyagok között az átmenet gyakorlatilag folytonos. Például a celofánban, vagy a rostos szerkezetű azbesztben a rendezettség számos atomra, az üvegekben csak néhány atomra terjed ki. A kristály klasszikus definíciója szerint olyan anyag, amelyet hosszútávú rendezettség jellemez és három dimenzióban síklapokkal határolhatunk. A kristályok azonos belső egységekből épülnek fel (elemi cellák, parallel-epipedonok) amelyek három tengellyel, a,b,c illetve az α, β, γ tengelyek közti szöggel jellemezhetők. A kristályok külső leírására a koordináta geometria alkalmazható. Tekintsük a sík tengelymetszetes egyenletét: ha a sík az X tengelyt a-ban, az Y tengelyt b-ben és a Z tengelyt c-ben metszi, akkor $(X/a) + (Y/b) +$

$(Z/c) = 1$. Ha a krisztallográfiai tengelyeket kiválasztottuk, akkor bármely sík jellemezhető három egész számmal (h,k,l). A sík az a/h, b/k, c/l pontokban metszi az X, Y, Z tengelyeket: $(hX/a) + (kY/b) + (lZ/c) = 1$. A kristályt határoló síkoknak ilyenformán való leírását Miller (1839) vezette be (h, k, l = Miller indexek).

SZIMMETRIA

A kristályok külső megjelenésében és belső szerkezetében fontos szerepe van a szimmetriának. A szimmetria egy testnek, vagy mintázatnak az a tulajdonsága, amellyel a test vagy mintázat egy kiinduló állapotból egy másik, a kiindulási állapottól megkülönböztethetetlen, állapotba vihetünk át (szimmetria művelet). A szimmetria elem geometriai entitás (pont, vonal, tengely, sík), amelyet adott szimmetria művelettel hozhatunk összefüggésbe. A szimmetria elem szigorúan konceptuális, amelyet a

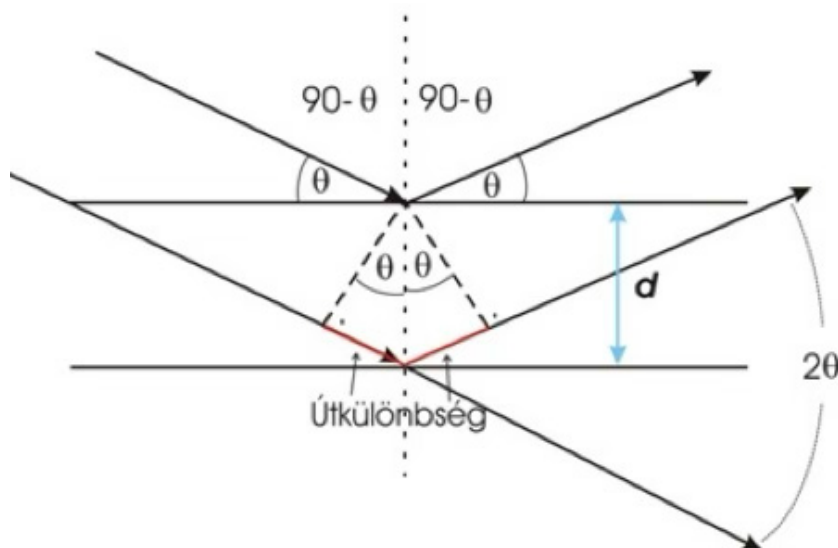
valósággal összhangban állónak fogadunk el. A szimmetria elem köti össze a test összes szimmetria kapcsolatban lévő részeit. A szimmetria elem a testben megjelenhet egyedül, vagy számos más szimmetria elem kombinációjaként. A kristályoknak felismerhető szimmetria két okból is alapvető fontosságú: egyrészt befolyásolja a szórási képet (a mintázatot), másrészt lehetővé teszi azt, hogy a szerkezetnek csak azt a részét határozzuk meg ("aszimmetrikus egység"), amelyből szimmetria műveletekkel az egész elemi cella felépíthető. Ez lehet egy vagy több molekula, de lehet töredék molekula is, ha a molekulának valamely krisztallográfiai szimmetriával egybeeső szimmetriája van.

Ha a kristályokat forgástengelyekkel és inverziós tengelyekkel (forgatás és a tengelyen lévő ponton inverzió) jellemezzük, akkor hét kristályrendszer (triklin, $a \neq b \neq c$, $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$) nem tartalmaz karakterisztikus tengelyt. A karakterisztikus tengelyek csak annak minimumát jelentik, amellyel egy kristály a hét osztály valamelyikébe besorolható. Egy-egy osztályon belül azonban a szimmetria elemek számos kombinációja lehetséges. Ezen lehetséges kombinációk (tércsoportok) száma már 230. A szerves molekulák jelentős része azonban kisszámú, gyakran előforduló tércsoportban kristályosodik.

RÖNTGENSUGARAK SZÓRÓDÁSA KRISTÁLYOKON. A BRAGG EGYENLET

A röntgen (és neutron) szórás alapvető törvényszerűségét a Bragg egyenlet fogalmazza meg:

$$(1.) \quad n\lambda = 2d \sin(\theta)$$



1. ábra. Két hullámnyaláb szórása párhuzamos kristály síkokról.

ahol λ a hullámhossz, d a síkok közötti távolság, θ a Bragg-szög (1. ábra). A sugárzás behatol a kristályba. Párhuzamos kristály síkokról való szórás esetén akkor észlelünk maximumot, ha az útkülönbség a hullámhossz egész-számú többszörösével egyenlő. Ilyenkor a párhuzamos síkokról diffraktált sugár fázisa megegyezik: hullám-hegy hullám-heggyel találkozik, erősítés következik be. A röntgendiffrakciós kísérletben a diffrakciós kép (különböző intenzitású foltok a képerzékelőn, pl. film) határozott rendezettséget mutat. A kristályrács és annak diffrakciós képe különleges viszonyban állnak egymással. A szórás a kristály-, másképpen direkt tér síkjairól történik és a diffrakciós térben ezek pontokként jelennek meg. Tehát ami az egyik térben sík, a másik térben pont lesz, és megfordítva. A direkt tér elemi cellájának $(a, b, c, \alpha, \beta, \gamma)$ a diffrakciós térben egy másik, $a^*, b^*, c^*, \alpha^*, \beta^*, \gamma^*$, ún. reciprok cella felel meg (a diffrakciós tér másik neve reciprok tér). A két cella egymással reciprok viszonyban áll. Ortogonális kristályrácsokra $(\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ)$ $a^* = 1/a$, $b^* = 1/b$, $c^* = 1/c$. A V térfogat mindenkor $V = 1/V^*$ ($V^* = 1/V$). Ennek az a következménye, hogy nagy elemi cellák alkotta kristály diffrakciós képe igen zsúfolt. A kristály modern definíciója a

reciprok térrel kapcsolatos: a kristálynak háromdimenziós, diszkrét Bragg reflexiókat mutató diffrakciós képe van. Atomi méretekkel összevethető hullámhosszú sugárzás áll tehát a rendelkezésünkre ahhoz, hogy megfelelő nagyításban vizsgáljunk molekuláris rendszereket. Minden képalkotás két lépésben történik: a sugárzás szórása az objektumról és a szórt sugárzás rekombinációja (fókuszálás). Az optikai mikroszkópban a lencserendszer a rekombináció eszköze. A röntgensugárzás azonban sem optikai eszközökkel, sem pedig elektromágneses terekkel nem fókuszálható, ezért atomi felbontású mikroszkópunkban a fókuszálás a krisztallográfus és számítógépének feladata.

A röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározás lépései leegyszerűsítve a következők: 1. diffrakciós kísérlet (az intenzitásadatok összegyűjtése), 2. a szerkezet-meghatározása (kiindulási koordináta adatok), 3. a szerkezet finomítása, 4. értékelés.

AZ INTENZITÁSADATOK ÖSSZEGYŰJTÉSE

A diffrakciós kép a különböző (d_{hkl}) rácstávolságok által meghatározott θ_{hkl} szórásszögeknél megjelenő különböző

$I(\theta_{hkl})$ intenzitású foltokból áll. A Bragg törvény adja meg, hogy milyen szórásszögnél θ_{hkl} jelenik meg a (hkl) reflexió a diffraktogramon. A (hkl) rácsparaméterek és a θ_{hkl} szórásszög közti összefüggés:

$$2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = \lambda.$$

A d_{hkl} rácstávolságok és a (hkl) rácsparaméterek közti összefüggés kristályosztályonként különböző. Például köbös rendszerben:

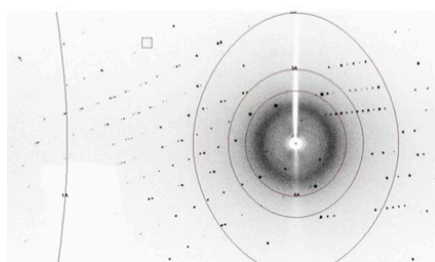
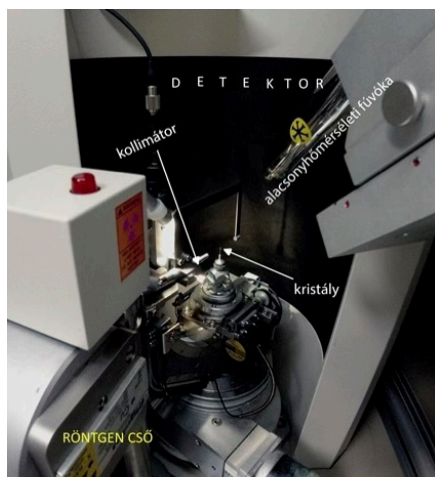
$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}.$$

Az intenzitás az amplitúdó négyzete

$$I(\theta_{hkl}) = |F(\theta_{hkl})|^2 \quad |F(\theta_{hkl})| = \sqrt{I}$$

ahol $|F(\theta_{hkl})|$ a szerkezeti-amplitúdó. (A továbbiakban a Miller-indexekre, ahol lehet $hkl=H$, jelölést alkalmazzuk).

A röntgensugárzás az atomi elektronfelhőn szóródik. A kristályokban az elektronsűrűség az elemi translációk irányában folytonos és periodikus. Periodikus függvények egyszerű trigonometrikus függvények ($\sin$ és $\cos$) összegeként számíthatók ki (Fourier-sorok). Az amplitúdók az elektronsűrűség függvény Fourier-sorának koefficiensei. A röntgendiffrakciós adatgyűjtést napjainkban már nagymértékben automatizált, magas műszaki színvonalú berendezések (diffraktométerek) támogatják. A térdetektorok egyszerre nagyszámú intenzitást rögzítenek. A mérésekhez 0,1-0,6 mm-es nagyságú egykristály szükséges. Ha a kristály jól szór, akkor gyors pásztázással, hagyományos sugárforrással, rövid idő alatt elegendő adat gyűjthető ahhoz, hogy 20-30 perc alatt a szerkezeti képlet felírható legyen (az így nyert szerkezet még pontatlan, de tükrözi az atomi konnektivitást. A kémikus megtakaríthatja a hosszadalmas,



2. ábra. A Rigaku Rapid diffraktométer és egy, a képérzékelő által rögzített, felvétel. Ez utóbbi közepén látható a direkt sugár kitakart része. A vörös körök különböző felbontásokat jeleznek. A legbelső kör 4 Å, a legszélső ív 1 Å-nek felel meg. Látható, hogy az 1 Å-os íven jóval túl is vannak reflexiók.

szerkezetbizonyító szintézisre szánt munkát és időt.

A 2. ábrán a Rigaku Raxis Rapid diffraktométer goniométer része és egy diffrakciós felvétel látható. Az adatgyűjtés során számos ilyen felvételt kell feldolgozni (a foltokhoz rendelni a hkl síkot és integrálással meghatározni az intenzitást).

A felvételekből kiszámítható az elemi cella és meghatározható a kristály tércsoportja. A röntgen intenzitások mérése meglehetősen pontatlan (~10%), ezért minél több, akár a szimmetria miatt egymással ekvivalens, reflexiót mérünk. A nagyszámú mérési pont átlagolása nagymértékben növeli a pontosságot.

2. A SZERKEZET MEGHATÁROZÁSA

A röntgensugarak a kristályrács atomjainak elektronfelhőiről szóródnak; A (h,k,l) szórási síkokról diffraktált hullámokat szerkezeti tényezők írják le. Az elektronsűrűség az x, y, z pozíció függvényében a szerkezeti tényezők Fourier-transzformáltja. (A Fourier-transzformáció egy függvényt vagy jelet alkotó frekvenciáira [komponenseire] bont).

A röntgenszórási amplitúdó F (a diffrakciós reflexiók intenzitásának gyöke) a kristály elektronsűrűségének Fourier transzformáltja.

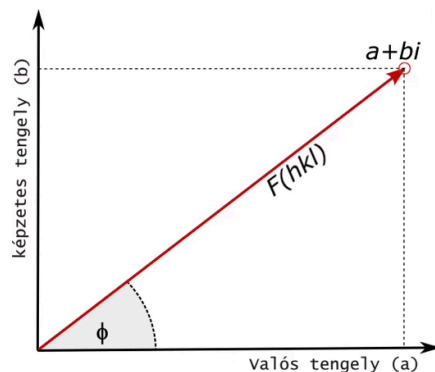
(2.)

$$F(hkl) = \int_0^V \rho(xyz) e^{i2\pi(hx+ky+lz)} dx dy dz$$

Az elektronsűrűség a mért amplitúdók inverz Fourier transzformáltjából állítható elő.

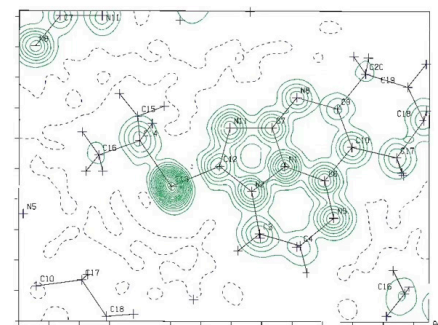
$$\rho(xyz) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| e^{-i2\pi(hx+ky+lz)}$$

ahol $\rho(xyz)$ az elektronsűrűség az x,y,z pontban, V az elemi cella térfogata, $|F(hkl)|$ az amplitúdó, h,k,l a Miller indexek, i képzetes egység, $i^2 = -1$, amely szerint az F(hkl) vektor, amely a komplex számsíkon értelmezhető (3. ábra). A $\rho(xyz)$ elektronsűrűség és F(hkl) amplitúdó egymás Fourier-transzformáltjai, formailag nagyon hasonlóak csak a kitevő előjelében különböznek:



3. ábra. Argand diagram

Egyebet sem kell tennünk tehát, mint megfelelő felbontással kiszámítani a (2) függvényt. Az elektronsűrűségi maximumok atomi pozícióknak felelnek meg (3. ábra). A maximumok távolsága az atomok távolsága.



4. ábra. Elektronsűrűségi térkép. A vonalak azonos elektronsűrűség értékeknek felelnek meg.

Az elektronsűrűség másképpen

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V} \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| \cos 2\pi(hx + ky + lz - \phi_{hkl})$$

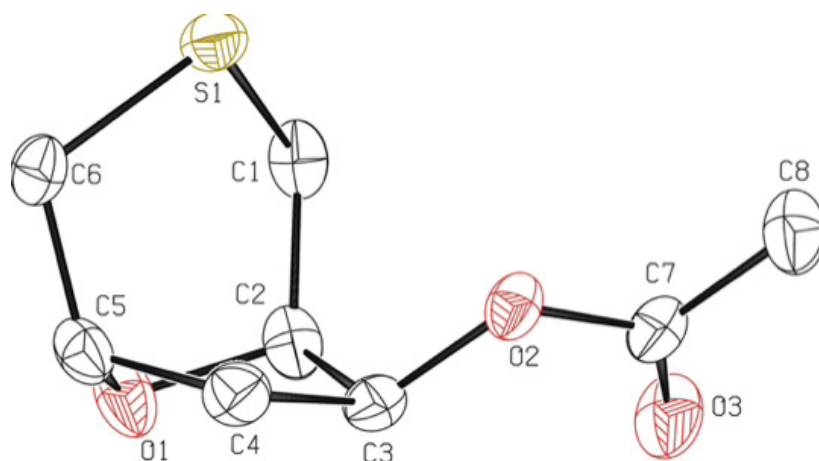
formában is felírható. A ϕ_{hkl} fázis szög ismeretlen és kísérletileg nem határozható meg („krisztallográfiai fázis probléma”). Kimutatható, hogy a fázisok között, Miller indexeik révén, fázisösszefüggések vannak. Statisztikai módszerekkel a fázisok bizonyos valószínűséggel meghatározhatók. Ezen módszerek összefoglaló neve „Direkt módszerek”. A röntgendiffrakciós szerkezet-meghatározás abszolút módszer: semmilyen, a szerkezetre vonatkozó előzetes ismeretet, vagy feltételezést nem igényel.

A θ -szögnél várható átlagos intenzitás:

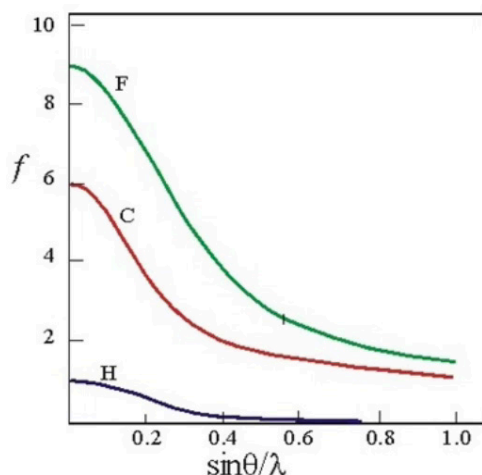
$$(3.) \quad \langle |F|^2 \rangle_0 = \sum_{j=1}^N f_j^2(\theta)$$

Az f_j atomi szórástényezőket gömbszimmetrikus, nyugalmi állapotú atomokra, kvantummechanikai úton számították ki (5. ábra).

Zérus θ -nál a szórástényező a rendszámmal egyenlő: a direkt sugár irányában minden atom fázisban szór és a



6. ábra. Molekula diagram az elmozdulás elipszoidokkal (50%-os valószínűségi szint)



5. ábra.

Néhány atomfajta atomi szórástényezője

röntgen-felvétel közepén nagy sötét folt keletkezik (hipotetikus F_{000} amplitúdó amely az össz-elektron számmal egyenlő). A szórás θ növekedésével rohamosan csökken. Az atomok a kristályokban sincsenek nyugalmi állapotban és a termikus mozgás következtében a szórás még nagyobb mértékben esik. A röntgensugár frekvenciája ($\sim 10^{18}$ Hz) nagyságrendekkel nagyobb a molekuláris vibrációs mozgásnál ($\sim 10^{11}$ - 10^{13} Hz) ezért a röntgenfelvétel a kristályszerkezet pillanatképe. A pillanatképben a minta $\sim 10^{18}$ számú elemi cellájában az atomok egyensúlyi helyzetük körül más-más

(elmozdult) pozícióban vannak, ezért az atomi mozgás része a felvételnek.

A mért intenzitás relatív érték, amely függ a kristály nagyságától, a röntgensugár intenzitásától, az atomok rezgésétől. A szerkezetmeghatározás első lépése az, hogy az $|F_H|$ értékeket abszolút skálára hozzuk, amely a fenti, várható intenzitás értékek kiszámításán alapul, de az átlagos termikus mozgást is figyelembe veszi. A különböző θ szögeknél mért reflexiók intenzitásai közvetlenül nem vehetők össze. Képezzük ezért a normalizált szerkezeti amplitúdókat:

$$|E_H|^2 = \frac{|F_H|^2}{\sum_{j=1}^N f_j^2} \quad (4.)$$

(ahol F abszolút skálán van, f a termikus rezgésre korrigált érték

$$f_\theta = f e^{-B(\sin^2 \theta / \lambda^2)}$$

, ahol B a közepes négyzetes rezgési amplitúdót tartalmazza). E_H pontszerű, nyugalmi állapotú atomokból felépülő szerkezet szerkezeti amplitúdója. A direkt módszerek alkalmazásakor a legnagyobb E-értékű reflexiókat használjuk.

A mért (F_o) és számított (F_c) szerkezeti amplitúdók a mértékei annak, hogy a modell kielégítően adja-e vissza a diffrakciós képet (5-ös egyenlet). Ha $R < 0,2$ akkor a szerkezet valószínűleg sikeresen finomítható. $0,2 < R < 0,3$ értéknél, a modellnek komoly hiányosságai vannak.

$$R = \frac{\sum |F_o| - |F_c|}{\sum |F_o|} \quad (5.)$$

A hidrogénatomok szórása gyenge (4. ábra), ezért a szokványos Fourier-szintézissel nem lokalizálhatók, mert a hidrogén elektronsűrűségi csúcsok a zaj tartományába esnek. A hidrogénatomok koordinátáit különbségi Fourier-szintézissel lehet meghatározni, amelyben a koefficiensek $|F_{H,0}|$ helyett $\Delta F = |F_{H,0}| - |F_{H,c}|$, vagyis az elektronsűrűségből kivonjuk az ismert atomok hozzájárulását. Ami megmarad az a hidrogének elektronsűrűsége (és a zaj). Szerves molekulákban lévő hidrogénatomok koordinátáinak nagy része geometriai úton is generálható, de -NH-, -OH-, stb. csoportok hidrogénjeit kötelező különbségi elektronsűrűségi térképekből meghatározni. A röntgendiffrakcióval komplementer módszer a neutrondiffrakció, amelyben a neutron sugárzás az atommagon szóródik.



Neutrontdiffrakcióban a hidrogénatom „szórási hossza” nagy, a hidrogénatomok koordinátái pontosan meghatározhatók. A röntgendiffrakcióban az elektronsűrűségi maximumokat tekintjük atomi pozícióknak, ami a hidrogén esetében komoly kötéshossz rövidülésben nyilvánul meg: egyetlen elektronja polarizált kémiai kötésben van. A neutrontdiffrakciós C-H kötés a kémiai környezet függvényében, 1,05-1,10 Å hosszú, a röntgendiffrakcióban ez az érték ~0,96 Å. A röntgendiffrakciós modellben ez utóbbi értéket rögzítjük és többnyire nem finomítjuk.

3. A SZERKEZET FINOMÍTÁSA

Az elektronsűrűségi eloszlás maximumaiból nyert atomi koordináták pontatlanok ezért a szerkezetet a legkisebb négyzetek módszerével finomítani kell. A finomítás ciklusokban történik (a szerkezeti tényezőket nem-lineáris egyenletek írják le), a minimalizálandó mennyiség

$$D = \sum_{hkl} w_{hkl} (|F_o|^2 - |kF_c|^2)^2$$

(w_{hkl} súlyfüggvény, F_o a mért, F_c a számított amplitúdó, k a skálafaktor), Mivel a kristályrács anizotróp közeg, az átlagos atomi mozgás (B) helyett minden atomhoz anizotróp atomi elmozdulást is kell számolni 3x3-as szimmetrikus U tenzor formájában, amely ellipszoidot ír le, (6. ábra). Így minden nem-hidrogén atomnak általában 9 finomítandó paramétere van: $x, y, z, U_{11}, U_{22}, U_{33}, U_{12}, U_{13}, U_{23}$, nem számítva az atomi rendezetlenség esetén a betöltöttséget, vagy amikor az atom valamely szimmetria elemen (speciális pozícióban) van, vagyis kötött koordinátá(i) van(nak). N atomra tehát 9N paraméter jut és minden paraméterre legalább 10 olyan reflexió kell, amelynek intenzitása nagyobb annak kétszeres hibájánál ($I_H \geq 2\sigma(I_H)$). A diffrakciós intenzitás mérése meglehetősen pontatlan, azonban olyan nagyszámú

adatot mérünk, hogy a rengeteg mérési pont precíz szerkezetet produkál (a kötéstávolságok hibája ezred Å, a kötésszögek század fok nagyságrendű). A kristályszerkezeti eredmények jellemzésére az R jósági tényezőt használják (5. egyenlet). Az R értéke rutin kísérletben 0,05-0,03 körül van, alacsony hőmérsékleten végzett gondos kísérletben elérheti 0,01-et.

4. ÉRTÉKELÉS

Az atomi koordináták az elemi cella koordináta rendszerében vannak értelmezve. Ezek relatív koordináták. Az elemi cella tengelyek kezdő- és végpontja 0 és 1 közé esik. Az atomi koordináták lehetnek negatívak és 1-nél nagyobbak is (a molekula túllép a cella határokon). Geometriai számításához az atomi koordinátákat ortogonalizálni kell, hogy derékszögű (Descartes) koordinátákat kapjunk. Ortogonális kristályrendszerekben (rombos, tetragonális, köbös) ez roppant egyszerű $x_o = ax, y_o = by, z_o = cz$. A legtöbb fontos geometriai adatot (kötéstávolság, kötésszög, torziós szög) közvetlenül a finomításból nyerjük. A szerkezet értékelési része nagyon sokrétű, igen sok szempontot átfogó kutatás lehet, álljon itt most csak egyetlen példa. A röntgendiffrakció jelensége a sugárzás és az elektronfelhő kölcsönhatása révén keletkezik, így felmerül az a kérdés, hogy tanulmányozható-e vele a kémia szempontjából alapvető fontosságú vegyértékelektron-eloszlás. Ehhez az atommagok pontos koordinátái szükségesek, amelyek két módon nyerhetők: röntgen- és neutron-diffrakciós mérések kombinációjával (X-N), vagy olyan röntgendiffrakciós finomítással, amelyben csak $\sin(\theta) \geq 0,6$ reflexiókat alkalmazunk ($X-X_{ho}$), mert ezek a lezárt elektronhéjakkal való kölcsönhatásból erednek. Ha a lezárt héjak hozzájárulását kivonjuk a teljes elektronsűrűségből, akkor marad a kötések, magános elektronpárok stb. elektron-eloszlása (a ‘deformációs’ elektronsűrűség). Ehhez

nagypontosságú, a cseppfolyós He hőmérsékletén (~25K) történő mérések és általában centroszimmetrikus tércsoportban kristályosodó molekulák szükségesek, mert a fázisoknak ekkor csak kétféle értéke lehet (π , vagy 2π). Elméleti számítások igazolják az így kapott kísérleti eredményeket. Az értékelés elengedhetetlen eszköze a krisztallográfiai adatbázis (Cambridge Structural Database), amely jelenleg ~1,4 millió ellenőrzött röntgen-, neutron- és elektrondiffrakciós módszerekkel meghatározott kismolekulás szerves- és fémorganikus kristályszerkezet adatait tartalmazza. Ezek mind kísérleti munka eredményei. Az adatbázishoz fejlett szoftver csomag tartozik. Jelentősége igen nagy a gyógyszer-kutatásban, vagy az ipar egyéb területein. Az adatbázis önmagában is olyan kutatási platform, amely képes tudományos eredményeket szolgáltatni.

Párkányi László



IRODALOM

A bevezető idézet forrása:

Jack Dunitz: “X-RAY ANALYSIS AND THE STRUCTURE OF ORGANIC MOLECULES”, Cornell University Press, Ithaca and London, 1979, 301. oldal.



JAVASOLT TOVÁBBI OLVASNIVALÓK:

Párkányi L: Röntgendiffrakciós molekulaserkezet-kutatás: lehetőségek és korlátok, MKL. 56. 209-213. 2001.
Kálmán A: Kémiai krisztallográfia I. ELTE jegyzet. Budapest. 1981.
Faigel G: Mire jó a röntgenvonalzó? Mindentudás Egyeteme 6. 2006.41-56.
Kristályosítástól a tablettázásig, Universitas (2007):
Kálmán A: Kristálytani alapfogalmak pp. 15-42.
Bombicz P: Egykristályok előállítása és röntgendiffrakciós vizsgálata. pp. 42-58.
Bényei, A., Harmat, V.; Röntgendiffrakciós szerkezetvizsgálat.
Bombicz P, Fábíán L., Kálmán A: Egykristály röntgendiffrakció.



Thomas Hunt

A biológia forradalma a tizenkilencedik század vége felé kezdődött, amikor a Charles Darwint követő nemzedék kutatni kezdte az öröklődés testi alapjait. A kémiában és a mikroszkópos kutatásokban elért fejlődés világossá tette a sejt fogalmát, amelyet ezentúl az élő szervezetek alapegységeként értelmeztek. Észrevették, hogy az osztódásnál kis fonalszerűségeket lehet megfigyelni a sejtekben, ezek megduplázódnak, majd szétvándorolnak a két leánysejtbe. Ezeket a kromoszómákat 1880 körül fedezték fel és nevezték el, de a szerepük ismeretlen maradt, amíg vagy húsz évvel később fel nem tételezték, hogy ezek tartalmazzák a genetikai információt. Hogy csakugyan ez a helyzet, és hogy ezeken lehet megtalálni a géneket, azt a huszadik század első évtizedének a végén mutatta ki Thomas Hunt Morgan. Ő volt a legfőbb megalapítója annak, amit manapság az öröklődés kromoszómás elméletének neveznek.

Thomas Hunt Morgan előkelő kentucky-i családban született 1866.szeptember 25-én Lexingtonban. Apja, Charlton Hunt Morgan, az Egyesült Államok egykori szicíliai konzulja kenderfonót igazgatott, rokonai közé számította J. Pierpont Morgant, a bankárt. Anyja, Ellen Key, Francis Scott Keynek, az amerikai himnusz komponistájának volt az unokája. Thomas természettudományos érdeklődésű gyerek volt, madártojásokat és kővételeket gyűjtött. Tizenhat éves korában iratkozott be a Kentucky-i Állami Főiskolára (ma Kentucky Egyetem), ahol zoológiát tanult, majd 1886-ban megkapta a diplomáját. Ezután alaktant tanult – azaz az állatok és növények felépítését – a Johns Hopkins Egyetemen, ahol 1890-ben doktorált, a tenger fenékén élő piknogonidákról, a tengeri pókokról szóló disszertációjával. Miután egy éve posztgraduális képzésen vett részt Nápolyban, 1891-ben a Bryn Mawrban kezdett tanítani. 1904-ben, miután kiemelkedő hírnévre tett szert kísérleti kutatásaival, átment a Columbia Egyetemre, ahol a legfontosabb felfedezései születtek. A tudományos legendáriumban fogalom a zsúfolt „légyszoba”, amelynek a közepén ott áll Morgan, és óriási nagytóval vizsgálódik.

Akkoriban, amikor Morgan elkezdte tanulmányozni az öröklődés mechanizmusát, a biológia különböző ágai gyors változáson mentek át. Az evolúció elmélete nagy vonzerőt fejtett ki a biometrikusokra és a citológusokra, miközben zűrzavar uralkodott az alaktan régi tudományában, ahol az állatok felépítésük szerinti osztályozása sok esetben csak spekulációra épült. Ernst Haeckel biogenetikai törvényének hatására például úgy gondolták, hogy a halak az emberek ősei. Morgan kételkedett az ilyesfajta megközelítések hasznosságában, amelyeknek nagy volt a befolyásuk az összehasonlító anatómiához és az őslénytanhoz hasonló területeken. Bosszantották az átfogó, de nem igazán ellenőrizhető elméletek. Azt írta: „Köztudomású, hogy az emberi elme fegyvermezés híján hajlamos a csapongásra.” Kezdetben kritikával fogadta Gregor Mendel 1900-ban újra felfedezett öröklési törvényeit is, és kételkedett benne, hogy a változások lassú felgyülemése a felelős az evolúcióért. Amikor azonban Hollandiában meglátogatta Hugo de Vriest, nagy hatást tett rá a lehetőség, hogy a mutáció lehet az evolúciós változások előmozdítója. Ennek eredményeként 1907-ben

kísérletezni kezdett a közönséges gyümölcsléggel, a *Drosophila melanogaster*rel, hogy bizonyítékokat találjon a nemzedékek közti hirtelen változásra. Ha egy darab banánt vagy egyéb táplálékot talál, a gyümölcslégy gyorsan kezd szaporodni, és pár év alatt annyi leszármazottja lesz, amennyit férfiak és nők kétezer év alatt hoznak létre. A gyümölcslégyeknek csupán négy kromoszómájuk van, viszont ezek szokatlanul nagyok, ami elég könnyen tanulmányozhatóvá teszi őket. Morgan ezekkel a legyekkel dolgozott két éven át minden eredmény nélkül, mielőtt 1910-ben észrevette volna, hogy az egyik példánynak fehér szeme van a szokásos vörös helyett. A következő hónapokban egyre fokozódó izgalommal keresztezte a legyeket, és várta az eredményt. Egy

*Morgan
kifejlesztette az
öröklődés kromoszómás
elméletét, és megteremtette
a genetika nyelvzetét.*

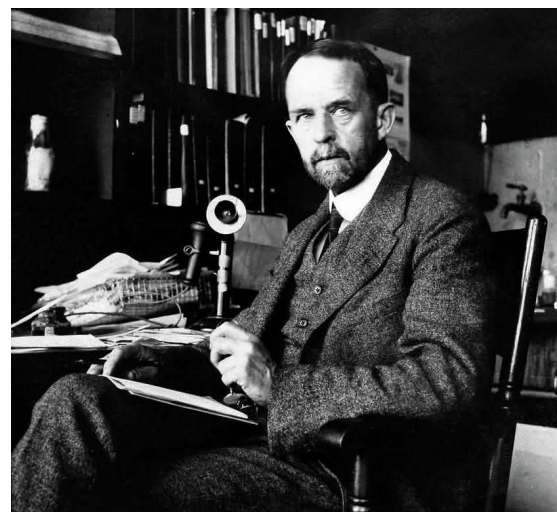


Morgan (1866–1945)

anekdota szerint, amikor meglátogatta a feleségét, aki kislányuknak adott életet, Morgan ellelkendezte, mi újság a fehér szemű gyümölcsleggyel, csak utána kérdezte meg: „És hogy van a kicsi?” A mutáns keresztezésével nyert első nemzedék normális volt, azaz vörös szemű. De a következő nemzedékben megjelentek a fehér szemű egyedek, méghozzá olyan arányban, ami – Morgan várakozása ellenére – megerősítette Mendel harmadik öröklődési törvényét, mivel a domináns és a recesszív vonások aránya 3:1 volt. Ezenfelül, ami legalább ilyen fontos, valamennyi fehér szemű légy hím volt. Morgan helyesen feltételezte, hogy a fehér szem nemhez kötődő vonás, felfedezte azt, amit génkötődésnek neveznek. Most, hogy nem voltak többé kétségei az öröklődéssel kapcsolatban, 1915-ben közzétette „A mendeli öröklődés mechanizmusa” című könyvet. Kimutatta azt, amit napjainkban „a század egyik legszebb kísérleti eredményének” neveznek, hogy a gének léteznek, és a kromoszómák mentén találhatók. Az első világháború után megjelentetett munkájában Morgan kifejlesztette az öröklődés kromoszómás elméletét, és megteremtette a genetika nyelvzetét. Számos genetikai könyvet tett közzé, 1919-ben Az öröklődés fizikai alapja, 1925-ben Az evolúció és genetika címűt. 1926-ban jelent meg A gén elmélete, 1933-ban az Embriológia és genetika. Morgan kísérletei során feltérképezte a gyümölcsleggy genetikai szerkezetét, tisztázva a különböző mechanizmusokat, köztük a rekombinációt, kiválasztódást és elkülönülést. Átértelmezte a mutáció fogalmát is, a különleges vonásokra alkalmazta, nem pedig új állatok megjelenésére. Az ő álláspontja szerint (amely később uralkodóvá vált) amikor a környezet alkalmazkodásra kényszerít, allélnak nevezett apró variációk kerülnek változó jelleggel a populációba. Ilyen



módon a fajok széles körű egyéni változatossággal bírnak, miközben egységesek maradnak. 1933-ban a genetikában végzett munkásságáért Morgan megkapta az orvostudományi Nobel-díjat. a kromoszóma öröklődésben betöltött szerepével kapcsolatos felfedezéseiért. 1928-ban, noha már csak néhány éve volt hátra a nyugdíjig a Columbián, Morgan átment a California Institute of Technology-ra, ahol felkérték, hogy szervezze át a biológiai tanszéket. Noha ekkora túl volt aktív kutatásainak korán, még mindig nagy hatással volt a tanszékre. Előmozdította az együttműködést a biológusok, fizikusok, vegyészek között, rávette Max Delbrück-öt és más tudósokat, hogy jöjjenek a Caltechre. 1945. december 4-én halt meg. Bonyolult jellem volt, úgy emlékeznek rá, mint aki a nyílt vitákkal rendkívül termékeny légkört teremtett a laboratóriumában. Egyik ragaszkodó tanítványa úgy írja le Morgant, hogy „lelkesedés keveredett benne az erőteljes kritikai érzéssel, nagylelkűséggel, nyitottsággal és figyelemre méltó humorérzéssel”. Hozzá kell tenni, hogy Morgan nem nagyon érdeklődött a gének



mint fizikai entitások iránt, és nem látta előre a DNS jelentőségét. Ráadásul nem volt otthon a matematikában, noha méltányolta a kvantitatív munkát, és nagy vonalakban követni is tudta. Mindazonáltal „erőteljes elkötelezettsége a materializmus és a kísérletezés mellett – írja Garland E. Allen – elősegítette, hogy a jövő olyan hullámát indítsa el, amely manapság a biológia minden területén érezhető”. **Ménész András**



IRODALOM

- Garland E. Allen (1978):
Thomas Hunt Morgan: The Man and His Science. Princeton University Press
- Ian B. Shine-Sylvia Wrobel (1976):
Thomas Hunt Morgan: Pioneer of Genetics. University Press of Kentucky
- Sylvia Mader (2007):
Biology Ninth Edition. New York, McGraw-Hill
- Curt Stern (1970):
The Continuity of Genetics. Daedalus, 1970/4, 899 p.
- John Simmons (1996):
The Scientific 100. Carol Publishing Group
- Új Magyar Lexikon. 1962, Akadémiai Kiadó, Budapest
- Vészits Ferencné (szerk.) (1974):
A Nobel-díjasok kislexikona. Gondolat Kiadó



A mandula

A mandula a mandulafa (*Prunus dulcis*, *Prunus communis*, *Prunus amygdalus*) csonthéjas gyümölcse. A teljes gyümölcs három részből áll. Mintegy (50%) a külső rostos héjből, 25 százaléká középső csonthéjből és 25 százaléká magból áll. Íze édes és keserű is lehet. Az édes mandula az ehető, a keserű nem ajánlott fogyasztásra (lásd később). A Rosaceae családba tartozó lombhullató mandulafa átlagosan 5-6 méter magasra nő. Legközelebbi rokona az őszibarack, távolabbi rokonai a szilva és a kajsziarack.

Az édes gyümölcsű mandulafa az egyik legrégebben termesztett fa. Őshazája Nyugat-, Közép- és Kelet-Ázsia. A magja táplálék és az egészség szimbóluma volt a korábbi kultúrákban. A mandula nagyra becsült volt az ókori egyiptomiak rómaiak és görögök étrendjében, felismerték tápértéküket és a termékenység szimbólumaként tekintették. A mandulát nemcsak ízeért fogyasztották, hanem gyógyító tulajdonságáért is. A mandulából kinyert olajat az ősi kínai és az

ayurvédikus gyakorlatok száraz bőrproblémák kezelésére és a haj egészségének javítására is használták. Termesztése ma már különböző éghajlatokhoz és régiókhoz alkalmazkodva széles körben elterjedt. Európában elsősorban a vastagabb héjú fajtákat termesztik, az Egyesült Államok déli részén elterjedtebbek a vékonyabb héjú fajtái. Magyarországon a mandula termesztése a 19. század végén kezdődött, amikor barackfélék mellett mandulát is



kezdték telepíteni. A Kárpát-medencében sokáig csak saját virágporával nem termékenyülő fákat (önmeddő) termesztettek ma már vannak önbeporzó fajták is. Magyarországon a mandulát csak mintegy 500 hektáron termesztik. A hazai éves termésmennyiség körülbelül 400 tonna. A világ legnagyobb mandula termesztoje az Egyesült Államok (~50%, Kaliforniai mandula). Napjainkban már in vitro tanulmányok és klinikai vizsgálatok is alátámasztják gyógyhatását, -például az anyagcsere javításában, a cukorbetegség és szív- és érrendszeri betegségek kezelésében is.

Érdemes megjegyezni, hogy a magas tápértékű, gazdag vitamin és ásványi anyag tartalmú gyógyhatású mandulamag mellett, az előállítása során keletkező rostos és csonthéjak is felhasználást nyernek. Magas rosttartalmuk és gazdag tápanyagtartalmuk miatt használják süteményekben, gabonapelyhekben és állati takarmányként is hasznosítják. A héjből biomasszát is lehet készíteni, amelyet villamos, hő vagy bioüzemanyag előállítására és természetes kártevőirtóként is használnak. Mivel a biomassa szuperabszorbens tulajdonságú, vizsgálják a héjak természetes szuperabszorbens polimerként (SAP) történő felhasználását a talajvíz környezetbarát megtartásának növelésére.

Szuperabszorbens polimerek (SAP) azok, amelyek a súlyukhoz képest nagy





menyiségű vizet képesek felszívni és megtartani még nyomás alatt is. Elsősorban nátrium-poliakriláttól vagy kálium-poliakriláttól állnak, és széleskörű alkalmazásokban használják, beleértve a higiéniai termékeket (babapelenka, inkontinencia termékek), a mezőgazdaságot, valamint az orvosi és ipari alkalmazásokat.

A MANDULA FITOKÉMIAI ÖSSZETEVŐI



A mandula fitokémiai összetétele kifejezetten gazdag, és több komponense bizonyítottan hozzájárul különféle élettani előnyökhöz. Kémiai összetételét vizsgáló tanulmányok kimutatták, hogy a magok gazdagok lipidekben, aminosavakban, fehérjékben, szénhidrátokban, vitaminokban (E-vitamin/tokoferol, B-vitamin stb.), különféle bioaktív vegyületekben fenolokban, fitoszterolokban, zsírsavakban, polifenolokban (flavonoidok, fenolos savak) és ásványi anyagokban (Ca, Mg, P, K), valamint másodlagos metabolitokban. A kutatók számos fenolvegyületet, flavanolokat, dihidroflavonolatokat és flavanonekat azonosítottak a mandulabőrben is (kvercetin, kempferol és katekin). A mandula fehérjei számos esszenciális és nem esszenciális aminosavból épülnek fel, amelyekben a glutaminsav, aszparaginsav és arginin dominál. Az esszenciális aminosavak közül a legtöbb megfelelő mennyiségben jelen van, kivéve a lizint, amelyből a mandula viszonylag kevésbé gazdag.

A komponensek mennyisége

átlagosan ~	g/100g
Víz	5.0
Fehérje	21.0
Lipid	45.0
Szénhidrát	9.0
Rost	15.0
Cukor	4.0

átlagosan ~	mg/100g
Riboflavin	1.2
Niacin	3.0
Vitamin E	25.0

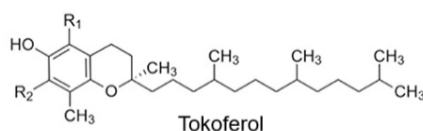
átlagosan ~	mg/100g
Ca	200
Mg	260
P	460
K	680
Fe, Zn, Cu, Mn	<30mg

természetesen függ a mandula genotípusától és a növekedést és a betakarítást követő feldolgozás környezeti tényezőitől is.

α -tokoferol

A mandula antioxidáns vegyületei közül jelentős az α -tokoferol tartalma (~25mg/100g).

A tokoferol, más néven E-vitamin néhány szerves, zsírban oldódó, metilált fenolvegyületet jelöl. A mandula az egyik leggazdagabb természetes E-vitamin forrás. Ezek a vegyületek nagyon hasonlóak és csak a metiláció mértékétől különböznek: Az alfa, béta, gamma és delta tokoferolokat nevezzük közösen E-vitaminoknak. A tokoferolokat



	R ₁	R ₂
α	CH ₃	CH ₃
β	CH ₃	H
γ	H	CH ₃
δ	H	H

E-Vitamin

antioxidánsként használják az élelmiszerekben (E306, E307, E308, E309).

A mandula tokoferolokat, főként α -tokoferolt, kisebb mennyiségben γ és δ -tokoferolt tartalmaz. Az α -tokoferol a szerkezetben legaktívabb és legjobban hasznosuló E-vitamin forma. Napi ajánlott bevétele ~ 45mg.

HATÁSOK:

- erős lipidoldékony antioxidáns,
- védi a sejtmembránokat az oxidatív károsodástól,
- csökkenti az LDL oxidációt,
- kedvező a szív-érrendszernek,
- támogatja az immunrendszer működését,
- gyulladáscsökkentő hatású.

POLIFENOLOK (FLAVONOIDOK, FENOLOS SAVAK)

A mandula héjában különösen magas a polifenoltartalom (kvercetin, katekin),

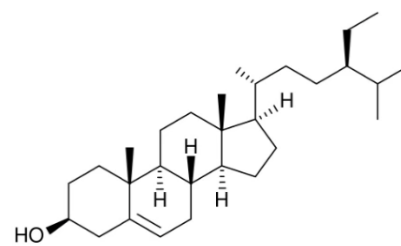
HATÁSOK:

- erős antioxidáns aktivitás,
- gyulladáscsökkentő.
- javítja az érfalműködést,
- hozzájárulhat a vércukorszint stabilizálásához az emésztés lassításával.

FITOSZTEROLOK (β -SZITOSZTEROL, KAMPESTEROL)

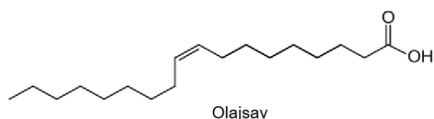
HATÁSOK:

- csökkentik a koleszterin felszívódását a bélben,



- mérséklék az LDLszintet.
- gyulladáscsökkentő és immunmoduláló tulajdonságok.

ZSÍRSAVAK (OLAJSAV, LINOLSAV)



A mandula zsírtartalmának ~65%-a olajsav

HATÁSOK:

- javítják a lipidprofilt (LDL(-),HDL(+)),
- csökkentik a gyulladást,
- stabilizálják a vércukorszintet étkezés után,
- támogatják a szívérrendszeri egészséget.

ROSTOK (OLDHATÓ ÉS OLDHATATLAN)

A mandula rostjai prebiotikus hatásúak.

HATÁSOK:

- táplálják a jótékony bélbaktériumokat,
- javítják a bélflóra összetételét,
- csökkentik az étkezés utáni vércukoremelkedést,
- hozzájárulnak a teltségérzethez □ testsúlykontroll.

ÁSVÁNYI ANYAGOK (MG, CA, K, ZN)

A mandula különösen gazdag magnéziumban.

HATÁSOK:

- javítják az inzulinérzékenységet,
- támogatják az idegrendszer és az izomműködést,
- hozzájárulnak a csontanyagcseréhez.

KÜLÖNBSÉG AZ ÉDES ÉS KESERŰ MANDULA KÖZÖTT

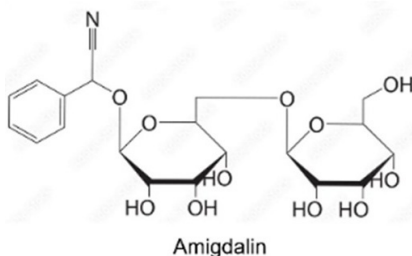
- Az amigdalín

Az egyetlen lényeges különbség az édes és keserű mandula között, hogy a keserű mandula nagyobb mennyiségben tartalmazza az ízéért felelős cianogén

glikozidot, amigdalint (2-8%) és bomlástermékeit. Az édes mandula csupán nyomokban tartalmaz amigdalint (<0.1%).

Amigdalín	mg/kg
Édes mandula	0.7-350
Keserű mandula	15*10 ³ -50*10 ³

Az amigdalín (B17-Vitamin, laetril), egy cianogén diglikozid, amigdalín glükózból, benzaldehidből és cianidból áll. A fenilalanin aminosavból szintetizálódik egy többlépcsős útvonalon keresztül, amely több enzimet is magában foglal.



Az amigdalín enzimatikusan hidrogencianiddá és benzaldehiddé bomlik. ezért nem ajánlott a fogyasztása. A keserű mandulában jelen van a β-glükozidáz is, amely az amigdalint benzaldehiddé + glükózzá + mérgező hidrogencianiddá bontja. A bomlás az emberi szervezetben is lejátszódhat. Édes mandulában ez az enzim is kis aktivitású vagy ez is hiányzik. Az édes mandula egy kulcsfontosságú genetikai mutáció eredménye. A keserű mandula genomja intenzíven expresszálja azokat az enzimeket, melyek a fenilalaninból kiindulva az amigdalint szintetizálnak. Az édes mandula genomja nem expresszálja azokat az enzimeket, amelyek szükségesek az amigdalín szintézis elindításához. Ez a mutáció volt az a esemény, amely lehetővé tette a mérgező vad mandula házasítását. Az amigdalín kismértékben előfordul a fogyasztható édes mandulában is, emiatt jelenléte potenciális rákellenes tulajdonságai miatt is felkeltette az érdeklődést, azonban hatékonysága és biztonsága továbbra is vitatott és jelenleg

további kutatások tárgya a rákellenes hatása.

Bár a keserű mandula önmagában nem ehető, kis mennyiségben a cukrászatban (marcipán ízesítésére) és a szesziparban (mandulalikőr) használják, valamint értékes olaját a kozmetikumok is hasznosítják.

A MANDULA MOLEKULÁINAK GYÓGYHATÁSA

Az ehető mandula magjait a népi gyógyászat nyugtató, antioxidáns gyulladáscsökkentő, daganatellenes és tulajdonságúnak tekinti. A mandula fitokémiai profiljához nagyon jól illeszkedő, számos randomizált klinikai vizsgálat (RCT Randomized Clinical Trial) és metaanalitikus vizsgálat igazolja, hogy a komponensek közül számos hozzájárul a mandula antioxidáns, gyulladáscsökkentő és kardioprotektív hatásához és összefüggésbe hozhatóak a krónikus betegségek, köztük a a kardiometabolikus szindróma, a szívbetegség és a cukorbetegség kockázatának csökkenésével.

A meta-analízis egy statisztikai módszer, amely különböző, azonos a témáról készült tanulmányok eredményeit foglalja össze és elemzi együtt.

A klinikai vizsgálatok során amikor mandulával egészítették ki hiperlipidemikus betegek étrendjét, az jelentősen csökkentette a koszorúér-betegség tényezőket. Jelentések szerint a nagy sűrűségű lipoprotein koleszterinszint (HDL, „jó koleszterin”) emelkedik, és a

A kardiometabolikus szindróma (CMS) olyan anyagcserezavarok csoportja, amelyek jelentősen növelik a szív- és érrendszeri betegségek és a 2-es típusú cukorbetegség kockázatát. A CMS olyan állapotok kombinációja, mint az inzulinrezisztencia, a csökkent glükóztolerancia, a kóros koleszterinszint, a magas vérnyomás és a zsírosodás.



plazma triacilglicerolok és az alacsony sűrűségű lipoprotein koleszterin (LDL, "rossz koleszterin") jelentősen csökken azoknál, akik mandula- és mandulaolajat fogyasztanak.

KLINIKAI VIZSGÁLATOK EREDMÉNYEI

15 randomizált klinikai vizsgálat (RCT, 534 résztvevő, ~40–60 g/nap mandula fogyasztás több hónapon keresztül) összefoglaló metaanalízisének eredményei a következők voltak:

Terület	Eredmény
Össz- és LDL-koleszterin	Szignifikáns csökkenés
Triglicerid	Kismértékű csökkenés
Testtömeg index	Kismértékű csökkenés,
ApoB	Szignifikáns csökkenés
Vérnyomás	Enyhe javulás, főleg magasabb dózisnál
Glükózanyagcsere	Prediabeteszben enyhe javulás, főleg nagyobb adagoknál
Éhomi vércukor és diasztolés vérnyomás	Szignifikáns csökkenés

RCT vizsgálatok

Az apolipoprotein B-100 (ApoB) egy olyan fehérje, amely segít a zsírt és koleszterint a szervezetben keresztül szállítani. A fehérje az erekben plakkfelhalmozódást okozó koleszterintípusokhoz kapcsolódik. Megnövekedett mennyisége a szívbetegség kockázatát jelzi.

Napi ~30 g mandula a napi E-Vitamin szükséglet fele miközben rostok, jó zsírok és mikro tápanyagok is jutnak a szervezetbe. Ez a mennyiség beilleszthető egy mediterránszerű étrendbe.

A HÉJAS-TERMESŰ GYÜMÖLCSÖK FITOKÉMIAJÁNAK ÖSSZEHASONLÍTÁSA

-mandula, dió, gesztenye, mogyoró



Mandula



Dió



Gesztenye



Mogyoró

A héjas-termesű gyümölcsök közül a legismertebbek a mandula, dió, gesztenye és a mogyoró. Fitokémiai profiljuk bioaktív vegyületei, amelyek antioxidáns és gyulladáscsökkentő hatást biztosítanak, jelentősen eltérnek egymástól. Míg a mandula tokoferol (E-vitamin) és fitoszterol tartalma jelentős, a dió például kiemelkedően gazdag polifenolokban és omega-3 zsírsavakban, míg a mogyoró flavonoidprofilja a domináns. A gesztenye ezzel szemben alacsony zsírtartalmú, viszont gazdag keményítőben és polifenolokban. A polifenolok, fitoszterolok, tokoferolok és telítetlen

AMIGDALIN-ESETEK

A sárgabarackmag, őszibarackmag, szilvamag és a cseresznyemag is tartalmaz amigdalint, ezért ezen magok fogyasztása sem ajánlott. A forgalmazott B17-vitamint, más néven amigdalint, amely bizonyos magokból köztük mandulából származik vagy a laetrilt az amigdalin szintetikus formáját, gyakran összefüggésbe hozzák a rákkezeléssel, azonban ciántoxikusságuk miatt jelentős egészségügyi kockázatokat jelentenek. A cianid mérgezés hányingert, lázat, fejfájást, álmatlanságot, szomjúságot, levertséget, idegességet, izom-, és ízületi fájdalmat, vérnyomásesést okozhat, szélsőséges esetben pedig halálhoz is vezethet. „Bár laboratóriumi kísérletek rákellenes tulajdonságokat sugallanak, klinikai bizonyítékok nem támasztják alá erre a célra történő használatát. Az (Laetrile®, B17) több esetben is összefüggésbe hozható volt cianidmérgezéssel rákos betegeknél”. (Memorial Sloan Kettering Cancer Center New York <https://www.mskcc.org/B17>) Az Egyesült Államok Élelmiszer- és Gyógyszerellenőrzési Hivatala (FDA) betiltotta a B17-vitamin forgalmazását. és Magyarországon az OGYI (Országos Gyógyszerészeti Intézet) és a Nébih sem hagyta jóvá a B17-vitamin használatát sem gyógyszerként, sem pedig gyógyhatású készítményként, bár ennek ellenére a piacon elérhető tabletták és injekciók formájában.

zsírsavak a gyulladáscsökkentéshez, a szív érrendszeri kockázat csökkentéséhez és az oxidatív stressz mérsékléséhez járulnak hozzá

Kőszegi Lídia



Fitokémiai jellemző	Mandula	Dió	Gesztenye Magyoró	
 Polifenol-tartalom	Közepes; flavonoidok, fenolsavak	Nagyon magas; dominánsak a polifenolok, tanninok, ellagsav-származékok	Közepes; főként fenolsavak, tanninok	Magas; flavonoidok, proantocianidinek
 Fitoszterolok	Magas (β-szitoszterol domináns)	Jelentős mennyiség	Mérsékelt	Magas
 Karotinoidok	Mérsékelt	Jelen vannak, de nem dominánsak	Alacsony	Mérsékelt
 Zsírsavprofil	MUFA-domináns	ω-3 (ALA) kiemelkedő; magas PUFA	Alacsony zsírtartalom	MUFA-domináns
 E-vitamin (tokoferol)	Nagyon magas (α-tokoferol)	Közepes	Alacsony	Magas
 Keményítő / szénhidrát	Alacsony	Alacsony	Nagyon magas	Alacsony
 Bioaktív hatások	Antioxidáns, lipidprofil-javító	Antioxidáns, gyulladáscsökkentő, kardioprotektív	Antioxidáns, metabolikus előnyök	Antioxidáns, érrendszeri előnyök

*MUFA egyszerűen, PUFA többszörösen telítetlen zsírsav, ALA alfa-linolénsav

IRODALOM

Iva Prigmet et al.,Molecules, 22(10),1774 (2017)
<https://doi.org/10.3390/molecules22101774>
Barreca, D.,et al.,. Nutrients 12, 672.(2020)
<https://doi.org/10.3390/nu12030672>
Anas Islam, Badruddeen et al.
J. Phytanotech. and Pharma. Sci., 4(1): 9, (2024)
<http://dx.doi.org/10.54085/jpps.2024.4.1.2>

Özcan, M.M. J Food Sci Technol. 60, 1493 (2023).
<https://doi.org/10.1007/s13197-022-05398-0>
AnaBeltrán Sanahuja, et al., Foods, 10, 15. (2021),
<https://doi.org/10.3390/foods10010153>
RCT1: Eur J Nutr. 2023 May 31;62(6):2661.
doi: 10.1007/s00394-023-03178-w

RCT2: Nutr Res. 2025 Jul: 139:50-65.
doi: 10.1016/j.nutres.2025.04.011

MIT TUDUNK A MANDULA FOGYASZTÁS RÁKOT MEGELŐZŐ VAGY GYÓGYÍTÓ HATÁSÁRÓL KLINIKAI KÍSÉRLETEK ALAPJÁN (AMIGDALIN, TOKOFEROL)?

Az irodalomban a mandula vagy fitokémiai komponenseinek (amigdalín, tokoferol) rákot megelőző vagy gyógyító hatásának vizsgálatáról több ellentmondó közlemény is megjelent.

Megkérdeztük a mesterséges intelligenciát. A Chat GPT válasza:
„Ma nincs olyan klinikai bizonyíték, ami alapján a mandulát vagy az abból kivont amigdalint/tokoferolt rákgyógyító szernek vagy célzott rákmegelőző terápiának lehetne tekinteni. Van azonban némi, gyenge-közepes szintű jel arra nézve, hogy a diófélék (köztük a mandula)

fogyasztása összefügghet alacsonyabb rákkockázattal és jobb túléléssel, de ez életmódszintű, nem gyógyszeres szintű hatás.

TOKOFEROL
A mandula tokoferolokat (E-vitamin), egyszerűen telítetlen zsírsavakat, polifenolokat, rostot tartalmaz; ezek mind befolyásolhatják az oxidatív stresszt, gyulladást, hormonális és metabolikus útvonalakat. De a humán rákprevenció hatás nem vezethető vissza egyetlen molekulára, hanem az étrendi mintázat és életmód részeként értelmezhető. A mandula rendszeres fogyasztása (pl. napi 20–30 g) jól illeszkedik egy kardiometabolikusan kedvező, potenciálisan rákkockázatot is mérséklő étrendbe, de nem helyettesít sem szűrést, sem onkológiai kezelést.

AMIGDALIN / LAETRILE (B17)
Bár számos tanulmány mutat citotoxikus, apoptózist fokozó hatást különböző tumorsejtvonalakon (pl. SCC9 orális carcinoma sejtek mandula/aprómageredetű amigdalín kivonattal), azonban a friss, 2025-ös átfogó áttekintés szerint humán klinikai szinten nincs meggyőző bizonyíték arra, hogy laetrile/amigdalín javítaná a daganatos betegek túlélését vagy tumorvázását. A szer cianid felszabadulása miatt toxikus, ezért az FDA és más hatóságok betiltották/korlátozták; a publikált esetek között súlyos mérgezések is szerepelnek. Amigdalín/laetrile nem tekinthető bizonyított rákgyógyszernek, és a kockázat-haszon arány jelenleg kedvezőtlen. A „B17terápiák” marketingje erősen meghaladja a bizonyítékszintet”.
Szerkesztőség





Cukormolekulák a Benu aszteroidán

Korábban beszámoltunk arról, hogy a kutatók számos nitrogén-tartalmú vegyületet és a Földi élet által a fehérjékhez használt több mint 20 aminosavat, valamint DNS-t és RNS-t felépítő öt nukleobázist, továbbá foszfátokat is kimutattak a Benu aszteroida talajmintáiban.

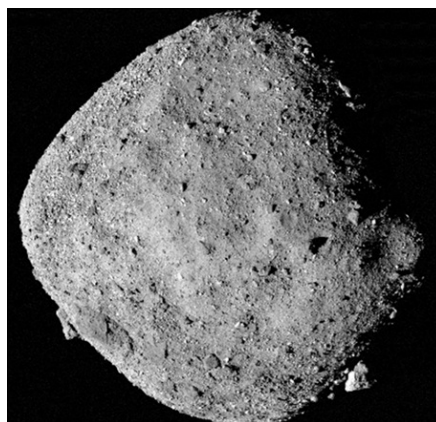
2025 végén japán és amerikai kutatók csoportja az Osiris-Rex űrszonda által a Benu aszteroidáról gyűjtött 0.6 gramm anyagmintában gázkromatográfiás-tömegspektrometriával (GCMS) hat különböző cukormolekulát és egy titokzatos «űrgumit», egy korábban soha nem látott nitrogénben és oxigénben gazdag polimert, is kimutatott.

Az élő szervezetekben gyorsan felszívódó egyszerű szénhidrátokat (monoszacharidok és diszacharidok) nevezzük cukroknak. Ezek gyorsan felszívódnak, pl. glükóz (szőlőcukor), fruktóz (gyümölcscukor), szacharóz (asztali cukor).

Ezek a cukrok kiegészítik az élethez elengedhetetlen szükséges összetevők listáját. Mivel a Benu tartalmaz ősi szülőaszteroidából származó formaldehidet, a kutatók feltételezik, hogy a kimutatott cukrok formaldehidet tartalmazó sóból keletkeztek magán az aszteroidán.

Mind a négy aldopentózt – ribózt, lixozot, xilózt és arabinózt – valamint két aldohexózt, glükózt és galaktózt is kimutattak. (A Hayabusa2 japán űrszonda korábban ribózt, arabinózt és xilózt detektált a Ryugu aszteroidán.)

A szénhidrátok egy különösen érdekes és biológiailag létfontosságú csoportja az aldopentózok, azaz az öt szénatomos cukrok, amelyek molekulájában egy

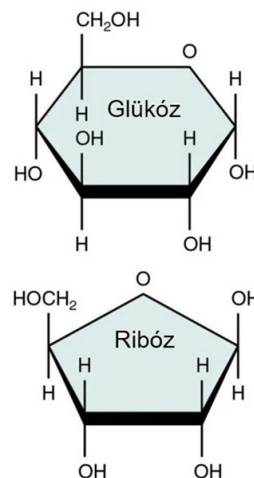


aldehidcsoport található. Ezek a viszonylag egyszerű vegyületek az élet alapvető folyamatainak mozgatórugói, hiszen belőlük épülnek fel a genetikai információt hordozó nukleinsavak, és ők alkotják az energiaátvitel kulcsfontosságú molekuláinak gerincét is.

A hat szénatomos aldohexózok szerkezete és sokfélesége kulcsfontosságú az élő rendszerek működéséhez. Gondoljunk csak a glükózra, amely az emberi test elsődleges energiaforrása, vagy a galaktózra, amely az anyatej egyik fő összetevője. Ezen cukrok apró szerkezeti különbségei óriási biológiai funkcionális eltérésekhez vezetnek, befolyásolva a molekulák felismerését, metabolizmusát és kölcsönhatásait más biomolekulákkal. A hat cukormolekula közé tartozik a genetikai információt hordozó RNS egyik összetevője a ribóz és az élet energiaforrása a glükóz is. Nem találtak azonban a mintákban dezoxiribózt. A dezoxiribóz (DNS-cukor) hiánya megerősíti azt az elképzelést, hogy a korai élet talán kizárólag RNS-re támaszkodhatott.

A CUKROK KELETKEZÉSE

Benu nagy D és ¹⁵N dúsulásai arra utalnak, hogy a jegeket és szerves



Több mint 50 éve találtak glükózt és arabinózt meteoritokban is, de akkor még nem tudták egyértelműen bizonyítani, hogy azok nem földi eredetűek. Szenes kondrit meteoritokban (pl. Murchison, Ausztrália) 2019-ben kimutatták, hogy jelen van ribóz és más biológiailag fontos cukrok. Izotópos vizsgálatok igazolták, hogy ezek valóban Földön kívüli eredetűek, nem földi szennyeződés. Számos egyszerűbb szerves molekulát (formaldehid, metanol, glikolaldehid) észleltek más üstökösökön is, amelyek előfutárai lehetnek a cukroknak. Például a 67P/Churyumov–Gerasimenko) a Rosetta küldetés során több szerves vegyületet találtak, amelyekből cukormolekulák is keletkezhetnek.

anyagokat a korai külső naprendszerben halmozhatta fel. A metanolból és vízből készült csillagközi jéganalóg ultraibolya és kozmikus sugárzásának laboratóriumi szimulációi arra utalnak, hogy cukrok, köztük a ribóz kialakulhattak a hideg

külső Naprendszerben, az aszteroida akkrécióját megelőzően vagy a csillagközi térben is például kisebb cukrok és gliceraldehid reakciója során.

A formóz-reakció forrásanyagait, az aldehideket megtalálták az intersztelláris térben, üstökösökben, sok meteoritban és a Bennu-aszteroida mintáiban is. A formóz reakciók során az aldehidek (pld. formaldehid) és a kis cukrok képesek egymással reagálni, és változatos, nagyobb cukrokat képezhetnek, gyengén savas vagy lúgos környezetben, ahogy azt a laboratóriumi szimulációk is bizonyítják. A Bennu-mintákban található nátrium-, magnézium- és kalcium-karbonátok gazdag lúgos folyadékokra utalnak. A formóz reakciókat a kalcium- és magnéziumionok hatékonyan katalizálják.

A CUKROK KIRALITÁSA A BENNU MINTÁKBAN

Bár több biológiailag releváns cukrot azonosítottak a Bennu mintákban, azok sztereokémiai összetételét még nem közölték. A kimutatott cukrok D/L aránya jelenleg ismeretlen. A Bennu mintái egyenlő arányban tartalmaznak balkezes és jobbkezes aminosavakat. Ez jelentős megállapítás, mivel a földi élet határozottan a balkezes aminosavakat és a jobbkezes cukrokat preferálja. Mivel az eddig tanulmányozott földönkívüli anyagok nem mutattak királis aszimmetriát egyelőre továbbra is úgy tűnik, hogy az aminosavak és cukrok földi homokiralitása, kizárólag későbbi kémiai vagy biológiai szelekciós folyamatok során keletkeztek.

A biológiai rendszerekben szinte kizárólag a D-sztereoizomerek fordulnak elő, melyek közül négy az aldopentózok csoportjába tartozik: a D-ribóz, D-arabinóz, D-xilóz és D-lükszóz.

AZ ŰRGUMI

Egy kaliforniai kutatócsoport megvizsgálta a Bennu mintákban talált gumyszerű anyagot is, amelyet korábban soha nem észleltek űrközetekben. Ez a

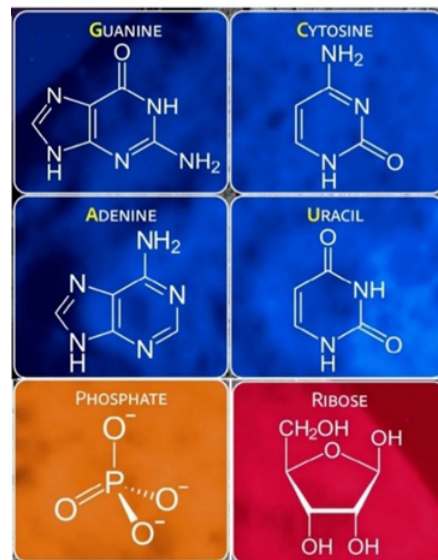
furcsa rugalmas, nitrogénben és oxigénben gazdag polimerszerű anyag, amelyet a NASA „űrguminak” nevezett el – és szerinte nem különbözik a használt rágógumitól vagy puha műanyagtól – valószínűleg akkor keletkezett, amikor a Naprendszerünk még kialakulóban volt és a forgó gáz- és porfelhő anyagaiból alakult ki a Bennu szülőaszteroidáján. Az emberi hajnál ezerszer vékonyabb anyag összetételét a kutatók elektronmikroszkóppal és röntgenspektroszkóppal elemezték a Berkeley Laboratóriumban. A nagy térbeli felbontás és érzékeny röntgensugarak példátlan kémiai elemzést tettek lehetővé. A kutatók arra a következtetésre jutottak, hogy a furcsa áttetsző, rugalmas és hajlékony puha műanyaghoz hasonló anyag rétegekben rakódott le jég- és ásványi anyagokon az aszteroidán. A sugárzásnak való kitettséget követően törekény lett, hasonlóan, mint a „napsugárzásnak kitett kerti műanyag szék”.

A legfrissebb eredmények megerősítik azt az elméletet, hogy az élet összetevőit alkotó anyagok a Földön kívül is léteznek, és meteoritok juttathatták el őket a bolygónkra.

Hexózatok más földönkívüli anyagokban még nem figyelték meg. A Bennuban bőséges glükóz – az élet közös energiaforrásaként szolgáló hexóz molekula – és más hexózatok kimutatása arra utal, hogy ezek már a korai Naprendszerben is jelen voltak. Mivel a szenes aszteroidák töredékei széles körben elterjedtek a belső Naprendszerben, az ilyen aszteroidák vagy töredékeik (például szenes kondritok) glükózt és más bio-fontosságú cukrokat juttattak a belső Naprendszer széles területeire, beleértve a nukleobázisokat és fehérjeépítő aminosavakat. Így az élet mindhárom kulcsfontosságú építőköve elérhette a prebiotikus Földet és más potenciálisan lakható bolygókat.

Érdekes megjegyezni, hogy korábban a JAXA Hayabusa2 űrszonda által gyűjtött Ryugu aszteroidáról származó mintákban

Az RNS molekuláris összetevői a Bennu aszteroidán



Karen Fox, Molly Wasser, NASA, <https://phys.org/news/2025>

is találtak biológiailag releváns szerves molekulákat, mint például aminosavakat, niacint (B3 vitamin) karbonsavakat, aromás szénhidrogéneket, makromolekuláris szerves anyagokat és uracil nukleobázist is. A jelenlegi ismeretek szerint azonban a Bennu kémiaiilag gazdagabbnak tűnik a prebiotikus molekulákban, mint a Ryugu. A kutatók szerint – bár egyre biztosabb, hogy az élet összetevői az űrből származnak – folytatni kell a vizsgálatokat, mivel nem világos, hogy az élet az űrből érkező összetevőkből jött-e létre, vagy maguk az összetevők is a Földön keletkeztek kémiai reakciók következtében.

Pálkás Gábor

IRODALOM

Irodalom

Furukawa, Y., et al. Nature Geosci. (2025). <https://doi.org/10.1038/s41561-025-01838-6>
Sandford, S.A., et al., Nature Astron. (2025). <https://doi.org/10.1038/s41550-025-02694-5>
Pálkás Gábor, Osiris-Rex és a Bennu, Kémiai Panoráma 29.sz, (2024)

Pálkás Gábor, Aszteroida a laboratóriumban, Kémiai Panoráma 26.sz, (2022)



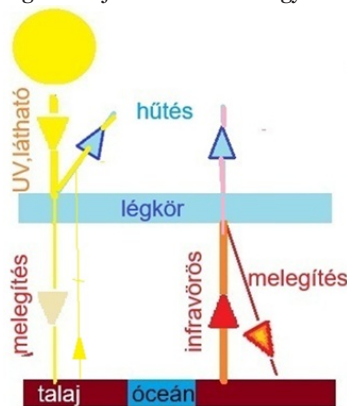
Az aeroszolok és a klíma

Hogyan változott bolygónk légkörének összetétele az utóbbi években? Milyen szerepet játszanak a folyamatokban az üvegházhatású gázok és az emberi tevékenység? Ezt tekintjük át írásunkban friss kutatási hírek, beszámolók alapján.

A Föld az élhető klímáját a napsugárzásnak, a naprendszerben elfoglalt helyének és a légkör összetételének köszönheti. A Föld légkörének összetétele, az oxigén és nitrogén mellett jelenlevő, természetes forrásokból vagy humán tevékenységből származó üvegházhatású gázok (ÜHG), a CO_2 , CH_4 , O_3 , N_2O , SO_2 , halogénezett szénhidrogének és a vízpára, SO_4 , NO_2 , szerves szén, fekete szénpor tartalmú aeroszolok, kulcsszerepet játszanak a felszíni hőmérséklet szabályozásában az üvegházhatáson keresztül, amely földfelszín közelében 15°C -on tartja az átlaghőmérsékletet. E hatás nélkül a Föld közvetlenül a világűrbe sugározná a hőt, ami sokkal hidegebb, -18°C -os átlaghőmérsékletet eredményezne a nappalok és az éjszakák között szélsőséges ingadozásokkal. A hőszabályozás nélkül a bolygó alkalmatlan lenne az általunk ismert élet számára. A Napból a Föld légkörének keresztmetszetére jutó fajlagos sugárzásis napenergia értéke 1368 Wm^{-2} (joule/s/m²). A Föld gömbalakját is figyelembe véve (forog és gömbfelülete 4-szer nagyobb, mint egyenlítőnél a keresztmetszete), a légkör külső határa globálisan, átlagosan a negyede 342 Wm^{-2} energia jut (melegítés). A napsugárzás látható fény frekvenciájú részének többsége áthalad a légkörön, kisebb hányadát ($\sim 1/3$) visszaveri a légkör aeroszol tartalma (hűtés).

Az áthaladó rész felmelegíti a földfelszínt, majd ezt a felszín alacsonyabb frekvenciájú infravörös hősugárzással kisugározza. A hősugárzást egy része eltávozik az űrbe (hűtés), másik részét elnyelik az üvegházhatást okozó gázok és visszasugározzák föld felszínére (üvegházhatás, melegítés).

A beérkező és az eltávozó sugárzás érzékeny mérlege alakítja ki a Föld klímaegyensúlyát.

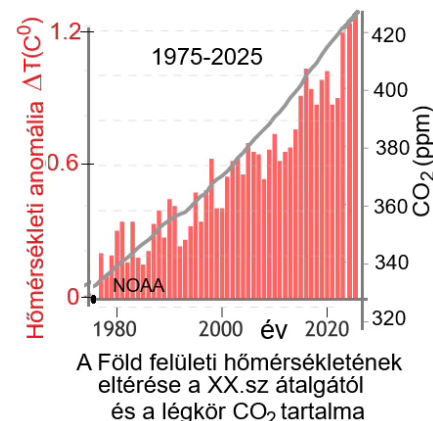


A hőháztartás komponensei

Ez az egyensúly kulcsfontosságú a bolygó stabil hőmérsékletének fenntartásához. Ha több energia lép be, mint amennyi kilép, a globális hőmérséklet emelkedik; ha több energia távozik, mint amennyi belép, a bolygó lehül.

Az energiamérleg nincs egyensúlyban. Az üvegházhatású gázok mennyiségének növekedése és az albedó csökkenése miatt (a felhők és jégtakaró mértékének csökkenése), vagyis a Föld éghajlati rendszere több energiát nyel el, mint amennyit visszaver, illetve kibocsát, vagyis melegszik.

A légkör összetételének a Föld energiaegyensúlyára gyakorolt hatását a „sugárzási kényszer” számszerűsíti, amely azt mutatja, hogy az összetevők milyen mértékben befolyásolják a felmelegedés/lehűlés egyensúlyát. A pozitív kényszer felmelegít, míg a negatív kényszer lehűt. Az üvegházhatású gázok és az aeroszolok nettó



A Föld felületi hőmérsékletének eltérése a XX.sz. átlagától és a légkör CO_2 tartalma

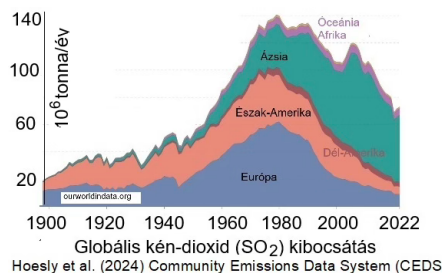
többlet sugárzási kényszere 2025-ben $\sim 2.1 \text{ W/m}^2$ volt. Az aeroszolok, elsősorban a szulfátrészecske magokat tartalmazók hűtő hatása elfedik a felmelegedési hatások egy részét, de az üvegházhatású gázok összességében már közel $1,5^\circ\text{C}$ -kal melegítették a bolygót.

ELŐREJELZÉSEK, VÁRHATÓ VÁLTOZÁSOK

A üvegházhatású gázok mennyisége tovább növekszik, a humán kén-dioxid kibocsátás viszont a levegőtisztasági szabályzások hatására csökkenő tendenciát mutat. Korábbi energiamérleg modelleken alapuló tanulmányok arra a következtetésre jutottak, hogy a tengervíz dimetil-szulfid koncentrációja és ezzel a légkör szulfát aeroszol tartalma is várhatóan globálisan csökkenni fog a következő évtizedekben. Ennek okát elsősorban a fitoplankton közösségek átalakulására és a melegedő felszíni vizek biogeokémiai változásaira vezették vissza. A tanulmányok azt jósolták, hogy a kénforrások csökkenő tendenciája miatti jövőbeli aeroszol csökkenés bizonyos esetekben nagyobb mértékben járulhat hozzá a felmelegedéshez, mint az üvegházhatású gázok növekedése. Sankirna D. Joge és munkatársai az elmúlt évben a Proceedings of the National Academy of Sciences folyóiratban megjelent munkájukban a fentiekkel ellenkező következtetésre jutottak. A kutatók a biológiai folyamatok globális megfigyelése

Sugárzási erőkörok

Komponens	Sugárzási kényszer W/m^2	Megjegyzés
ÜHG-k összesen	$\approx +3,2$	NOAA AGGI 2025
Aeroszolok összesen	$\approx -1,1$	IPCC AR6
Nettó sugárzási kényszer	$\approx +2,1$	melegítés



alapuló gépi tanulási algoritmusokat alkalmaztak a fitoplanktonok DMS kibocsátásának modellezésére. A számításaik során az óceánok 1850-óta elérhető adatai alapján nyolc különböző klíma modell felhasználásával 2100-ig szimulálták az óceánok várható DMS koncentrációit. A modellezéssel kimutatták, hogy bár a tengervízben mért DMS koncentrációk globálisan valóban várhatóan csökkenni fognak a következő évtizedekben, azonban a légkörbe jutó DMS mennyisége összességében növekedhet, mivel: emelkedik a tengervíz felszíni hőmérséklete, fokozódnak a szélsőségek, és emiatt hatékonyabbá válik a DMS kiáramlása a tengervízből a légkörbe. Ez azt jelenti, hogy bár az óceánok DMS készlete csökkenhet, a DMS továbbra is fontos természetes kénforrása marad a légkörnek, különösen akkor, amikor a humán eredetű kéndioxid kibocsátások a levegőminőségi szabályozások miatt csökkennek. A jövőben növekvő óceáni DMS kibocsátás fokozhatja a szulfát aeroszolok képződését, ami a felhők visszaverő képességének (albedó) növekedésén keresztül továbbra is hűtő hatással lehet az éghajlatra. Ez a folyamat részben ellensúlyozhatja az üvegházgázok melegítő hatását. A DMS az óceán–légkör rendszer egyik fontos visszacsatolási eleme maradhat a jövőben is. A DMS-hajtású hűtés várhatóan nem fog csökkenni.

AEROSZOLOK

Az aeroszolok természetes és antropogén forrásból származó, gázban szuszpendált szulfát, nitrát, korom és szerves szén tartalmú szilárd vagy folyékony részecskék. Mind hűtés, mind melegítés útján befolyásolják az éghajlatot, de a domináns globális hatásuk a hűtés (különösen a

szulfátok), részben csökkentve az üvegházhatású gázok okozta felmelegedést. Az aeroszolok közvetlen hűtési mechanizmusa a bejövő napsugárzás visszaverése az űrbe. Közvetett hatásuk a felhők fényességét növelő felhőkondenzációs magok számának növelése, növelve ezzel a felhőképződést, és ezzel a bolygó albedóját. Az aeroszolok kerülhetnek közvetlenül a légkörbe és keletkezhetnek a levegőben zajló kémiai reakciók során is.

Az albedó a felületre érkező elektromágneses sugarak visszaverődési hányada. A Föld átlagos albedója 0.39

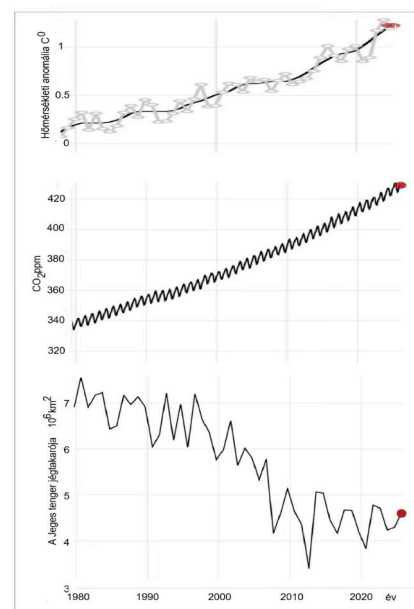
A szulfát aeroszolok világos színű részecskék, amelyek szétszórják és visszaverik a beérkező napsugárzást, így kevesebb energia jut el a felszínre. Ez közvetlen negatív sugárzási kényszeret eredményez. A szulfát-aeroszolok fő forrásai a fosszilis tüzelőanyagok (~72%), és a biomassa (~2%) elégetéséből származó SO₂-kibocsátás, természetes források a tengeri fitoplanktonok dimetilszulfid-kibocsátása (~19%) és a vulkánok, bozóttüzek SO₂-kibocsátása (~7%). A kéndioxid a légkörben többlépcsős kémiai folyamattal alakul kénsavvá. Első lépésben hidroxilgyökök oxidálják, majd oxigénnel vagy vízzel reagálva képződik kénsav. A dimetilszulfid elsődleges természetes forrásai az óceánok. A tengeri fitoplanktonok által termelt dimetilszulfonopropionát (DMSP) molekula lebomlásakor keletkezik.

A DMS kulcsszerepet játszik a globális kénkörforgásban, mivel a légkörbe jutva oxidációs folyamatokon keresztül szulfát aeroszolokká alakul, amelyek hozzájárulnak a felhőképződéshez és a Föld sugárzási mérlegének alakításához.

A DMS oxidációját a légkörben gyökök, hidroxilgyökök, halogéngyökök és a nitrátgyökök indítják el. Ezek hatására kéndioxid (SO₂) és metánszulfonsav (MSA) képződik, amelyek tovább oxidálódnak kénsavvá. A folyékony víz jelenléte a légkörben fokozza a DMS oxidációját.

KLÍMAVÁLTOZÁS 2025

A grafikonon a legfelső ábra a globális felszíni hőmérséklet változását mutatja 1980-2025 között a 30 éves 1951 és 1980 közötti alapátlaghoz képest (hőmérsékleti



anomália). A Föld globális felszíni hőmérséklete 2025-ben kissé melegebb volt, mint 2023-ban, de hibahatáron belül. 2025-ben hűvösebb volt, mint 2024-ben, és az átlaghőmérséklet 1,19 Celsius-fokkal haladta meg az 1951-től 1980-ig tartó átlagot. A nyilvántartás 1880-as megkezdése óta a legmelegebb év 2024 marad (forrás: NASA/GISS).

A középső ábra az atmoszféra szén-dioxid tartalmának lineáris növekedését mutatja ugyanebben az időszakban. A legelső ábrán, amelyen a sarkvidék jéges felülete nagyságának változása látható, úgy tűnik, hogy 1997-től kezdődő intenzívebb jéges területcsökkenés az utolsó 10 évben egy átlagérték körül ingadozik.

A változások mértékeit az utolsó 28 évben az alábbi tábla tünteti fel.

	CO ₂ ppm	ΔT C° anomália	ΔT C° anomália	Jéges-tenger jégterület 10 ⁶ km ²
	atmoszf	szföld felsz	óceán felsz	
1997	364.6	0.61	0.44	8.63
2025	427.4	1.23	1.19	4.61

anomália: eltérés az 1951 és 1980 közötti átlagtól (NASA)

Szerkesztőség

IRODALOM

Cameron-Smith, et al., Geophys. Res. Lett., 38, (2011)

Zhao, J., et al., Clim Atmos Sci 7, 18 (2024).

Sankirna D. Joge, et al., PNAS .122 No.23 (2025)



Fémorganikus vázszervezetek

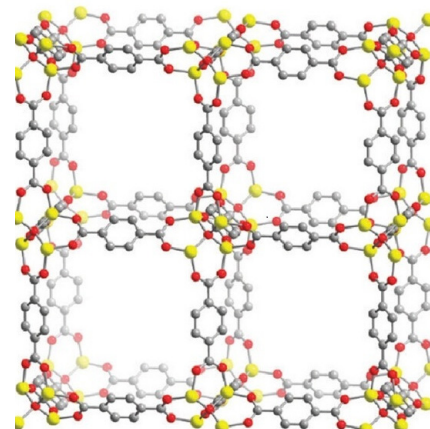
A fémorganikus-vázszervezetek (MOF=Metal Organic Frameworks) alapvetően két fő komponensből állnak: a szerkezet csomópontjaiként szolgáló fémionokból (pl. Zn^{2+} , Cu^{2+} , Fe^{3+} , Al^{3+} , Zr^{4+}), vagy különböző szimmetriájú fémklaszterekből és a csomópontokat összekötő szerves ligandumokból. A fémklaszterek több fématomot tartalmazó, oxigénnel vagy más nemfém atomokkal kötésben lévő egységek, pl. cink-karboxilát, vagy a réz-acetát.

A szerves ligandumok a fémcentrumokhoz kötődő legalább két, de gyakran több koordinációs ponttal rendelkező molekulák, (pld. karboxilát-, piridin-, imidazol- vagy foszfonátsoportok). A két komponens koordinációs kötések révén összekapcsolódva, vendégmolekulák tárolására alkalmas, kiterjedt nagyméretű pórusokból, üregekből álló hálózatot alakít ki. Az összekötő elemek, és tulajdonságaik rendkívül nagy mértékben befolyásolják a MOF-szerkezet pórusméretét, alakját és kémiai

tulajdonságait. A pórusokban szinte bármilyen molekula vagy ion tárolható, amennyiben: mérete megfelelő, hogy beférjen a pórusméretbe, nem reagál károsan a vázzal, és a MOF stabil marad az adott körülmények között. A MOF-ok pórusai nagyon nagy fajlagos felületűek (akár $>6000 \text{ m}^2/\text{g}$), hangolhatók (pórusméret, funkció csoportok), kémiai módon módosíthatók és szelektíven kötik meg a vendégmolekulákat. Az első stabil köbös kristályszerkezetű fémorganikus vázszervezetű anyagot, a

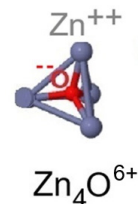
MOF5-t Omar M. Yaghi az elmúlt évben megosztott kémiai Nobel-díj egyik díjazottja 1999-ben állította elő. A következőkben jeles példaként a MOF5 szintézisét és szerkezetének tulajdonságait foglaljuk össze részletesebben.

MOF5 (más néven IRMOF1) egy rendkívül porózus, nagyon nagy fajlagos felületű ($2500\text{--}3500 \text{ m}^2/\text{g}$) köbös rácsként kristályosodó cinkorganikus vázszervezet. Pórusátmérő $1.1\text{--}1.5 \text{ nm}$, pórusnyílás 0.8 nm . Sűrűsége kicsi kb. 0.59 g/cm^3 a nagy porozitása miatt.

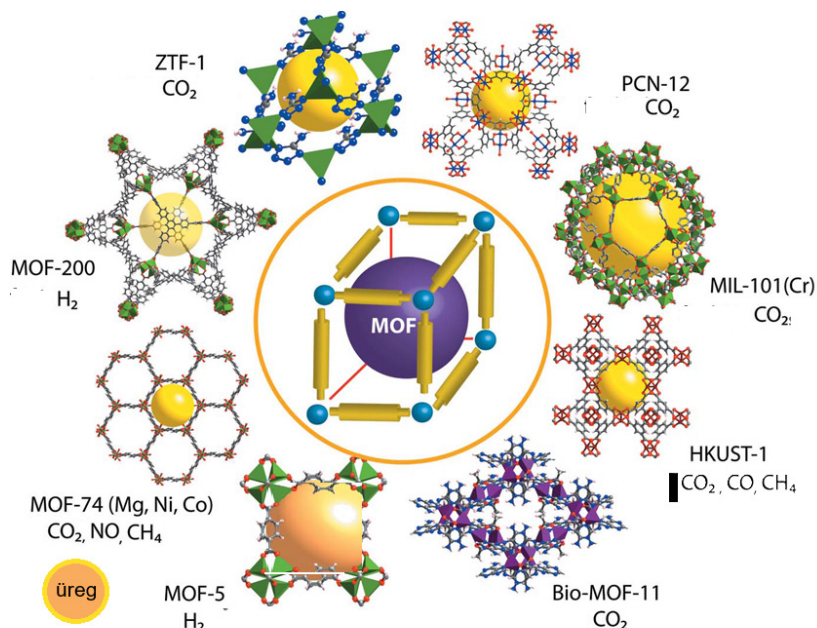
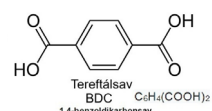


Xiao-Lang et al., Journal of Nanomaterials 07 May (2013)
A MOF-5, kristályszerkezetének részlete

A rács csomópontjai Zn_4O^{6+} tetraédres klaszterek,



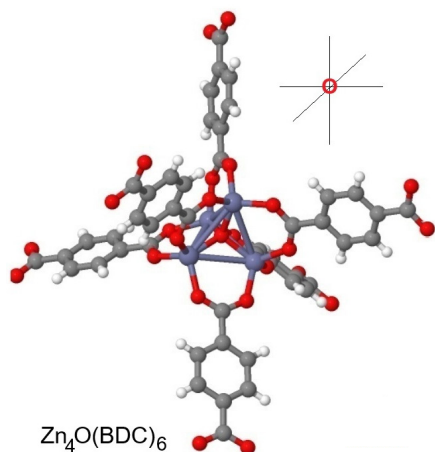
amelyekhez összekötőelemként hat irányból tereftálsav-molekulák



Ebelegi Newton Augustus et al., Am. Journal of Environmental Protection. 5(2), 61 (2017)

Fémorganikus vázszervezetek

(1,4-benzoldikarboxilát (BDC))
csatlakoznak, rögzítve a kocka alakú rács
sarkait.



$\text{Zn}_4\text{O}(\text{BDC})_6$

A csomópontok környezete

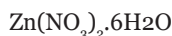
AZ MOF-5 SZINTÉZISE

Előállításához az egyik konvencionális
módszer a szolvotermikus szintézis.

*Szolvotermikus előállítás: A vegyületek
szintézisét oldószerrel, magas nyomás
és hőmérséklet mellett, autoklávban
végzik.*

AZ ÖSSZETEVŐK

Fémforrás: cink-nitrát-hexahidrát.



Szerves kötőelem: Tereftálsav,
1,4-Benzoldikarbonsav (BDC)
 $\text{C}_6\text{H}_4(\text{COOH})_2$
Oldószer: Dimetilformamid (DMF)

A REAKCIÓ

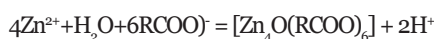
Oldás: A cinkisót és a BDC kötőelemet a
DMF oldószerben feloldják.

Melegítés: A keveréket autoklávban,
körülbelül 100–120°C-on melegítik
24–48 órán át.

Deprotonáció: Ahogy az oldószer
felmelegszik, lassan elbomlik és bázisként
működve, leválasztja a protonokat a
tereftálsavból.

Nukleáció: A dikarboxilát-ion ezután a
cinkionokhoz kötődik, és klasztereket
alkot.

Kristályosodás: Ezt követően a klaszterek
és kötőelemek (linkerek) önszerveződéssel
egy 3D köbös ráccsá rendeződnek.
Az egyszerűsített reakció a csomópont
létrehozásához



ahol R a tereftálsav deprotonált része.

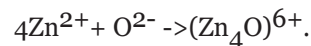
A reakciót gondosan kell kontrollálni. Ha
túl magas a hőmérséklet vagy a
koncentráció nem jól választott, akkor

(cink-oxid) csapadék jelenik meg a
porózus váz helyett.

Aktiválás: A MOF-5 szintetizálása után a
pórusok valójában nem üresek – a reakció
során használt DMF oldószer tölti meg
őket. Az aktiválás az a kritikus folyamat,
amely során ezeket az oldószermolekulákat
több lépésben eltávolítják anélkül, hogy a
porózus 3D szerkezet összeomlana.
Melegítéssel nem lehet eltávolítani az
oldószert, mivel a DMF magas forráspontú,
emiat először oldószercserét hajtanak
végre. Alacsonyabb forráspontú
oldószerben (kloroform vagy diklórmétán)
áztatják 3-5 napig, majd
vákuumszáritással, enyhe melegítéssel
eltávolítják a kloroformot is a pórusokból.

HOGY JÖN LÉTRE AZ IONKOMPLEX?

A MOF-5 szerkezetében a Zn_4O^{6+} egység
nem csupán egy kémiai összetevő, hanem
a hálózat strukturális alapkőve. Hő és kis
mennyiségű víz jelenlétében (a hidratált
cinksó lebomlása miatt), a cink ionok és a
víz reakcióba lépnek. Egy központi
oxidion jön létre, amely négy cink ionnal
tetraédes ion-klasztter hoz létre.

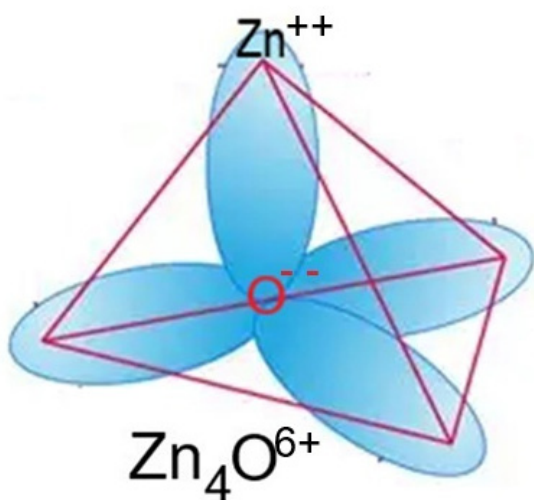


**Hogyan tud megkötni egy oxigén ion
négy cink iont?** Az oxigén ion és a cink
ionok közötti kötés természete datív
kovalens kötés.

*A datív vagy koordinációs kötés, egy
olyan speciális kovalens kötés, amelyben
a kötő elektront párt kizárólag az egyik a
donor atom biztosítja. Ilyen pld. a CO,
 NH_4^+ , H_3O^+ is. A gyakoribb kovalens
kötés elektront párhoz mindkét atom
hozzájárul 1-1 elektronnal. A donor atom
(Lewis bázis) rendelkezik legalább egy
nemkötő magányos elektront párral
(például nitrogén, oxigén, foszfor vagy
kén atomok), amivel hozzájárulhat a
kötés kialakításához. Az akceptor atom
(Lewis sav) rendelkezik legalább egy
betöltetlen vegyértékpályával, amely
alkalmas az elektront párhoz befogadására
(például bor, alumínium vagy
átmenetifémek).*

MOF-ok pórusaiban tárolt anyagcsoportok

Vendégmolekula-típus	Tipikus példák	Fő alkalmazások	Irodalom
Gázok és kis molekulák	H_2 , CH_4 , CO_2 , O_2 , N_2 , CO, NO, VOC-	Gáztárolás, szeparáció, katalízis	Furukawa et al., Science 2013 ; Li & Zhou, Chem. Soc. Rev. 2009
Oldószermolekulák	H_2O , alkoholok	Szintézis utáni aktiválás, pórusok tisztítása	Rowell & Yaghi, Microporous Mesoporous Mater. 2004
Fémionok és anionok	Li^+ , Na^+ , Mg^{2+} , Cu^{2+} , Cl^- , BF_4^- , PF_6^-	Ionvezetés, akkumulátorok, ioncsere	Zhang & Riduan, Chem. Soc. Rev. 2012 ; Horike et al., Acc. Chem. Res. 2013
Nagyobb szerves molekulák	Gyógyszerek (ibuprofen , doxorubicin), aromás festékek	Gyógyszerhordozás, szenzorika , fotokémia	Horcajada et al., Nat. Mater. 2010 ; Horcajada et al., Chem. Rev. 2012
Biomolekulák	Enzimek, peptidok , fehérjék	Enzimimmobilizáció, biokatalízis	Liu et al., Chem. Rev. 2020 ; Liu et al., Chem. Soc. Rev. 2014



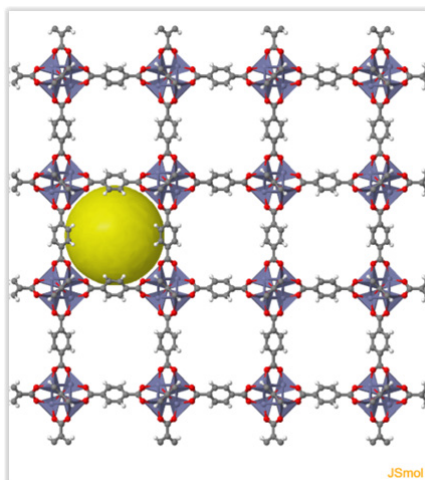
Alapállapotában az oxigén elektronkonfigurációja $2s^2 2p^4$. A központi oxigén azonban nem semleges atom. A reakció során két elektront nyerve a cinkionoktól, O^{2-} lesz, ($2s^2 2p^6$) elektronszerkezettel, négy magányos elektrópárral az sp^3 hibridizált pályáin. Az O^{2-} ion Lewis bázisként, elektron donorként viselkedik.

A cink elektronszerkezete $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$. A klaszterben minden cinkion +2 oxidációs állapotban van (Zn^{2+}), ami azt jelenti, hogy a 3d pályájuk teljesen be van töltve (d^{10}), a 4s pályájuk betöltetlen, és az oxigén ion 4 magányos elektrópárja kerül a Zn^{2+} ion (Lewis sav) üres 4s, 4p pályáira a datív kötés során.

Az sp^3 hibridizáció az oxigén elektronszerkezetében akkor következik be, amikor négy másik atomhoz kötődik.

Ebben a folyamatban egy 2s pálya és három 2p pálya egyesül, négy sp^3 hibrid pályát képez, amelyek tetraédes geometriával rendelkeznek. Ez lehetővé teszi, hogy az oxigén négy szigma kötést alakítson ki Zn ionokkal, ami szimmetrikus tetraédes klasztert eredményez. A szigma-kötés (σ -kötés) olyan kovalens kötés, amelyben a kémiai kötést létrehozó elektrópár (kötőelektrópár) a kötés tengelyére nézve forgásszimmetrikus molekulapályán helyezkedik el.

Nem elhanyagolható a komplex ionos jellege sem. Mivel jelentős különbség van az elektronegativitásban az oxigén és a cink között (3,44 ill. 1,65), erős elektrosztatikus vonzás is fellép a negatív töltésű O^{2-} és a pozitív töltésű Zn^{2+} ionok között.



MOF-5 Fémorganikus vázszerkezet

MIÉRT TETRAÉDERES A KLASZTER?

Az O^{2-} ion elektrópályáinak sp^3 hibridizációja miatt a négy magányos elektrópár pályáinak irányai 109.50° -ot zárnak be, így egy tetraéder 4 sarkai felé irányulnak. A Zn-O kötéshossz $0.19\text{--}0.20$ nm.

Ez a geometria tökéletesen alkalmas arra, hogy az O^{2-} egyszerre négy Zn^{2+} iont kössön meg.

AZ ÖSSZEKÖTŐ ELEM DEPROTONÁLÁSA

Mielőtt a kötőelem a fémhez kötődne, el kell veszítenie savas protonjait. Az oldószer (DMF) melegítéskor enyhe hőbomláson megy keresztül, és aminosavat termel, amelyek bázisként működnek. Az aminosav veszi fel az

1,4-benzoldikarbonsavból a hidrogéniont, miközben metilammonium-ion képződik.



AZ IONKLASZTER KOORDINÁCIÓJA

Neutralizálva a +6 töltést a Zn_4O csomóponton, a 6 BDC kötőelem karboxil csoportja a tetraédes cink klaszterhez kötődik. A BDC kötőelemek másik végén elhelyezkedő karboxil csoportok tudnak a szomszédos 6 csomópontokhoz kötődni felépítve a köbös kristályrácsot.



<https://www.chemtube3d.com/mof-mof5/>

Pálincás Gábor



IRODALOM

- O.M.Yaghi et al., Nature 402, 276 (1999)
 Kranthi Kumar Gangu et al., RSC Adv., 12, 14282 (2022)
 Vadia Foziya Yusuf, et al., ACS Omega 7, 49, 44507 (2022)
 T. Navaie Diva, J. Chem. Rev., 7(1), 63.(2025)
 Kémiai hibridizáció
 Fémorganikus vázszerkezetek és felhasználásuk - Elo.hu
 Ebelegi Newton Augustus, et al. Am. J. Env. Prot., 5(2), 61 (2017)

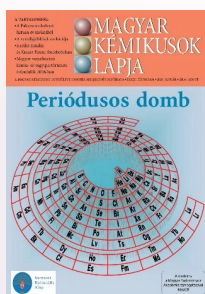
Magyar Kémikusok Lapja

2026 JANUÁR

**Hargittai Balázs,
Hargittai István**
Karikó Katalin és
Krausz Ferenc
Stockholmban

Silberer Vera
Amikor a kémia
házat kapott
Párizsban

Lente Gábor
Kristályos kalcium-hidrogénkarbonát
A hónap molekulája
Hidroxilamin problémája



2026 FEBRUÁR

**Nagyné László
Krisztina**
Kémiai Nobel-díj,
2025

Duda Ernő
Fiziológiai és
orvostudományi
Nobel díj, 2025

Hargittai István, Hargittai Magdolna
James D. Watson (1928–2025):
személyes búcsú

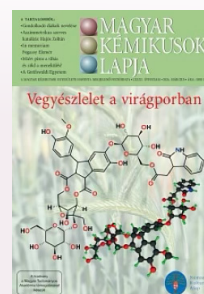
Lente Gábor
Az élesztő, mint divatdiktátor
Teflon újrahasznosítás
Inzulín túl nélkül



2026 MÁRCIUS

Kutasi Csaba
A textilkémia
fejlődése, főbb
részterületei
korunkban. Első
rész

Lente Gábor
Pestisjárvány és
vulkánkitörés
A hónap molekulája
Ősi nyílméreg



2026 ÁPRILIS

Inzelt György
Kémikusok vagy
vegyészek
vagyunk?

Silberer Vera
Akik „kitalálták” a
gyógyszerészetet

Kutasi Csaba
A textilkémia fejlődése, főbb részterületei
korunkban. Második rész

Lente Gábor
Teljes óegyiptomi genom
Pompeii vízkő
Paleometabolitok



2026 MÁJUS

**Kovács Mihály,
Murányi Zoltán**
Hogyan tegyük
élővé a kémiát?
Zöld és
fenntartható
kémiai
gyakorlatok a
középiskolai
oktatásban

Kutasi Csaba
A tűzoltó védőruházatok főbb jellemzői
Hargittai István
Textil-krisztallográfia
Lente Gábor
Reprodukciós egészség az űrben
Enzim számítástechnika
Szunnyadó gyógyszermolekulák



2026 JÚNIUS

**Lente Gábor, Ősz
Katalin**
Az 58. Irinyi János
Középiskolai
Kémiaverseny
döntője
**Magyarfalvi
Gábor, Szabados
Ágnes, Tarczay
György**

Innovatív kémiaoktatás a jövő vegyészeinek
ELTE Kémiai Okoslabor – SuperSmartLab
Lente Gábor
Légköri űrszemét
Mosási segítség bevonatképzéssel
Kutasi Csaba
A röntgensugárzás káros hatásaitól védő
öltözetek, árnyékolók





TUDOMÁNYOS KUTATÓTÁBOR

A TERMÉSZETTUDOMÁNYI KUTATÓKÖZPONTBAN

A Kutatóközpont 2009-óta minden évben nyári kutatótábort rendez érdeklődő középiskolai diákok számára. A tábor a Kutatóközpont laboratóriumaiban zajlik, és valódi kutatási projektekbe kapcsolja be a középiskolás diákokat. A résztvevők egy teljes héten át egy kutatócsoport tagjaiként dolgoznak, modern műszerekkel, valódi mintákkal, igazi kutatói feladatokon. Munkájuk eredményét konferencia előadás formájában mutatják be a hét végén.

A Kutatóközpont 2009-óta minden évben nyári kutatótábort rendez érdeklődő középiskolai diákok számára. A tábor a Kutatóközpont laboratóriumaiban zajlik, és valódi kutatási projektekbe kapcsolja be a középiskolás diákokat. A résztvevők egy teljes héten át egy kutatócsoport tagjaiként dolgoznak, modern műszerekkel, valódi mintákkal, igazi kutatói feladatokon. Munkájuk eredményét konferencia előadás formájában mutatják be a hét végén.

<https://www.ttk.hun-ren.hu/aktualis-hirek/aki-kivancsi-kutato-nyari-tabor-2026>

MIT KÍNÁL A „KÍVÁNCSI KUTATÓ” NYÁRI KUTATÓTÁBOR?

A tábor programja nem bemutató jellegű, hanem gyakorlati kutatótábor. A diákok tényleges kísérleteket végeznek: műszereket kezelnek, mintákat készítenek



AKI KÍVÁNCSI KUTATÓ

Nyári Tudományos Tábor 2026

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

2026. JÚLIUS 5-11.

Mi vár Rád?

- ✓ Kémia, biológia, pszichológia
- ✓ Laboratóriumi kísérletek
- ✓ Saját kutatási projekt
- ✓ Közösségi programok



INGYENES!

Érdeemes csatlakozni!

- Valódi kutatói élmény
- Pályaorientáció
- Új barátok, szuper hangulat!

10-11. évfolyamos középiskolás diákok

Jelentkezés és határidő: MÁJUS 31.

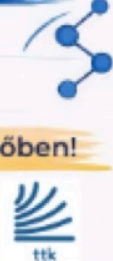
✉ Pályázat: feher.aniko@ttk.hu

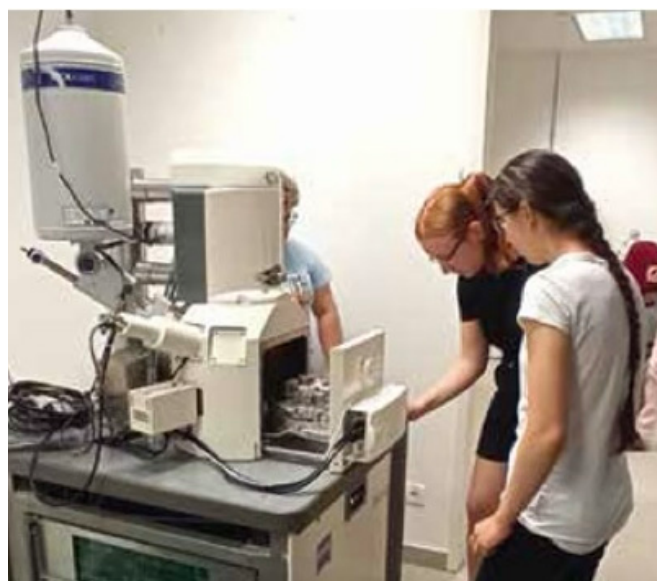
→ Motivációs levél + Kutatási téma leírása

A helyek száma korlátozott, jelentkezés időben!

tábort támogatja:







- **Hogyan kapcsolódik össze kémia, biológia, anyagtudomány és orvostudomány.**
- **Hogyan lesz egy tudományos kérdésből mérhető kísérlet és értelmezhető eredmény.**
- **Milyen a kutatói élet, és milyen készségek szükségesek hozzá**

2026-ban több tudományterületről 11 kutatási téma közül választhattak a diákok.

TEMAK_2026_AKI_Tabor.pdf

VÁLASZTHATÓ TÉMÁK 2026-BAN

A molekulák térbeli szerkezetének feltárása – a gyógyszerkutatás alapja
Kémiai Kristallográfia Kutató Laboratórium,

Betekintés a rákkutatásba fehérjék vizsgálatán keresztül
Glikán Biomarker Kutatócsoport,

Egy immunológiai fehérje előállításának rekombináns DNS technológia felhasználásával, továbbá jellemzése immunológiai módszerekkel
Szerkezeti Biofizika Kutatócsoport,

Építsünk tüzelőanyag-cellát!
Megújuló Energia Kutatócsoport,

Fenntartható kompozitfejlesztés technológiákkal műanyagok: korszerű újrahasznosítás és feldolgozás
Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport,

Hulladékból kincs: A poliuretán habok kémiai újra hasznosítása
Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport,

Kétdimenziós kémia: molekuláris rétegek a víz felszínén
Funkcionális Határfelületek Kutatócsoport,

Pillanatfelvétel az összejtudatás állapotáról
Molekuláris Sejtbiológiai Kutatócsoport,

Sejtmembrán transzporterek és a gyógyszerrezisztencia összefüggései
Génreguláció Kutatócsoport,

Szerkezetvizsgálat röntgensugarakkal
Biológiai Nanokémia Kutatócsoport,

Új, potenciálisan bioaktív molekulák előállítása és jellemzése
Gyógyszerkémiai Kutatócsoport,

Szerkesztőség

elő, mérnek, értékelnek, modern kutatólaboratóriumokban és megismerik milyen a kutatói gondolkodás, hogyan épül fel egy kutatási projekt és hogyan dolgozik együtt egy kutatócsoport.

A témavezetők aktív kutatók, akik bevezetik a diákokat a saját szakterületükbe, segítik a kísérleteket, megmutatják, hogyan zajlik a valódi tudományos munka.

MIT TANULHAT EGY DIÁK A TÁBORBAN?

- **Hogyan működnek a modern analitikai és biofizikai módszerek.**
- **Hogyan kell mintát előkészíteni, mérni, adatot értelmezni.**



A tudásvágy útjai

Minden olyan ismeretterjesztő munka üdvözlendő amelyik egy szaktudományt közel visz az általános olvasóhoz. Ez különösen igaz a kémiára, amit a mai iskolások jóformán nem ismernek, vagy nem szeretnek.

Ráadásul a fizikai kémia számítások, definíciók, egyenletek megértését kívánja meg. Inzelt könyve rendkívül sok ismeretet tartalmaz úgyszólván lexikonszerű felsorolásban, ezt azonban annyira olvasmányosan közli, hogy az olvasó a tekintélyes tudósokat mint hétköznapi embereket ismerheti meg, akiknek sorsa, barátságai, gondolatai, hétköznapi történetei bárkivel is megeshetnek. Legyen itt csak egy példa.

Faraday szegény családból származott, 14 éves korában könyvkötő inasnak állt, de érdekelték a tudományok és 7 éves segéd idejének leteltével eljárt Humphrey Davy előadásaira. Mikor Davy meglátta

Faraday jegyzeteit, felajánlotta neki, hogy legyen aszisztense a Royal Institution-ban. 1813 októberében egy kitüntetés átvételére Davy Párizsba utazott és Faraday-t magával vitte. Éppen ekkor zajlott le Lipcse közelében a „népek csatája” és Anglia a Napoleon-ellenes koalíció tagja volt. Eközben a tudósok nyugodtan tanácskozhattak és Davy – akinek ekkor nagy tekintélye volt – kitüntették. A diszünnpészen találkoztak francia tudósokkal (Ampère, Gay-Lussack), ami Faraday-nek, aki Davy tudományos munkatársaként volt jelen, nagyon sokat jelentett. Távoztukban, Bretagne-ban tévedésből rövid időre őrizetbe vették őket. Faraday naplójában feljegyezte: „Elég szokatlan kaland magunkat egy idegen és ellenséges országra bízni, ahol bármilyen gyanú elegendő, hogy megfosszanak bennünket a hazánkba való visszatéréstől és talán az életünkötől is.”

E sorokat olvasva szinte késztetést érzünk Faraday letegezésére, mert nemcsak a XIX. század elején érezzük otthon magunkat, hanem azt is könnyen figyelmen kívül hagyjuk, hogy Faraday mind a kémia, mind a fizika legnagyobbjai közé tartozik, ami természetesen kiderül a könyv további leírásaiból.

Egy hatalmas tudományos anyagot ismertető mű esetén

A TUDÁSVÁGY ÚTJAI

A FIZIKAI KÉMIA NAGYJAINAK
ÉLETE ÉS MUNKÁSSÁGA

Inzelt György



szükségszerűen felmerülnek szerkesztési problémák. Ebben a tekintetben – érzésem szerint – a könyv nem kedvez az általános olvasónak. A három nagyobb részből álló tartalmat értelem-szerűen kisebb fejezetek tagolják tovább. A fejezetcímek azonban inkább riasztóak, mint barátságosak, hiszen törvényekkel, egyenletekkel, állandókkal, vagy hányadosokkal jelzik a tartalmat. Ezek a fogalmak a fizikai kémiában természeteseek, de ez a könyv nem szakemberekhez szól, hiszen azok inkább szakmunkákat, vagy tankönyvet használnak. Elismerem, hogy az élvezetes tartalom szakembereket is csábíthat olvasásra, de nem hiszem, hogy ők az elsőrendű célszemélyek.

Egy másik probléma éppen az érdeklődőknek okozhat gondot. A könyv tudományos igényt szándékozik kielégíteni nagy számú eredeti közleményre történő hivatkozással.

Ezeket azonban egy zárófejezetben (Fontosabb felhasznált és ajánlott irodalom) ömlesztve találjuk, pontosabban fejezetcímek szerinti bontásban. A gond az, hogy ha az [1] hivatkozás cikkét keressük, minden fejezetben találunk egyet, és az igazít csak akkor, ha a felsorolásban megtaláljuk az érintett fejezetet is.

Végül egy kényesebb problémát érintek. A szerző – tanítványhoz illő – tisztelettel és elismeréssel ír professzoráról, Erdély-Grúz Tiborról 8 oldalon keresztül. Való igaz, hogy Max Volmerrel Berlinben 1930-ban írott közleménye az elektrokémia területén alapvető jelentőségű. Az ismertetés azonban kiterjed széleskörű közéleti szerepére is. Az MTA elnökeként, illetve főtitkáráként folytatott tevékenysége azonban nem volt mentes a politikai igazodás kényszerétől, ami jelentős károkat okozott.

Összefoglalva, Inzelt György könyve egészében élvezetes olvasmány, a fizikai kémia számos területére elkíséri az érdeklődő olvasót. Főként azoknak ajánlható, akik nem idegenkednek a fizikai kémiától és ismereteik ellenőrzését, vagy továbbiak megszerzését ambicionálják.

(Inzelt György: A Tudásvágy Útjai. A fizikai kémia nagyjainak élete és munkássága. Typotex, Budapest, 2026.)

Simonyi Miklós

Szemtől szemben az örök vegyi anyagokkal

A környezeti hatásoknak ellenálló, rendkívül nehezen bomló ún. örök vegyi anyagokat az ipar számos területén használják, bár a környezeti hatásaik jórészt ismeretlenek. Egy hazai vezetésű nemzetközi kutatás ezért a hatások elemzését és olyan innovatív analitikai és toxikológiai módszerrendszer kialakítását tűzte ki céljául, amely révén laboratóriumi körülmények között lehet tesztelni az ilyen vegyületek okozta szennyezés csökkentésére szolgáló vízkezelési módszereket. Céljuk ezen felül többet megtudni a magyarországi felszíni és ivóvizek, valamint a halak PFA szennyezettségéről – adta hírül az Élet és Tudomány hetilap.

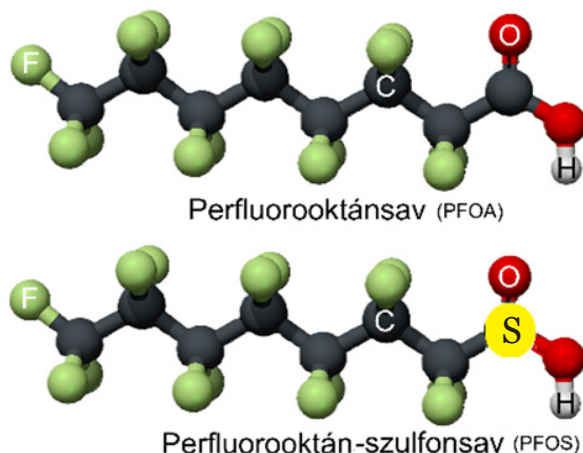
Az örök vegyi anyagok számtalan hasznos tulajdonsággal rendelkeznek: elsősorban víztaszító tulajdonságuk miatt nélkülözhetetlenek főként a vízhatlan ruházat, tűzoltó anyagok, műanyag adalékok, növényvédő- és gyógyszerek gyártásánál, illetve az elektronikai és autóiparban. Ezek a per- és polifluorozott-alkil (rövidítve: PFA) szennyezőanyagok annak ellenére népszerűek, hogy környezeti hatásaik ma még alig ismertek – vázolja fel a problémát Szabó István, a MATE Akvakultúra és Környezetbiztonsági Intézet, Környezettoxikológia Tanszékének a vezetője. Kémiai szempontból a vegyületek a szilárdságukat a szén és fluor közötti különlegesen erős kovalens kötéseknek köszönhetik, amelyek általában a természetben nem, vagyis leginkább mesterséges vegyipari előállítás során jönnek létre. A szén és a fluor között kialakuló egyszeres kovalens kötések a legerősebbek, amelyek így nagyon nehezen, vagy szinte egyáltalán nem bonthatók föl természetes kémiai, fizikai és biológiai módszerekkel. Ezek az anyagok emiatt rendkívül hosszú ideig, és jellemzően

változatlan formában maradnak meg a természetes környezetben (perzisztensek).

Az Európai Unió definíciója szerint minden szerves vegyületet, amelyikben vagy olyan láncvégi szénatom található, amelyiken három kovalens fluor kötés található, vagy legalább egy olyan láncközi szénatomot tartalmaz, amelyik polifluorozott, tehát két fluoratomot köt, azt a PFA vegyületek közé sorolják. Amennyiben a fenti definíciót alkalmazzuk, akkor a jelenlegi számítások szerint többmillió (!) olyan különböző vegyületet ismer a tudomány, amelyet PFA-ként kell azonosítanunk – mutatja be a kutatás kiindulási nehézségeit a gödöllői székhelyű egyetem docense. További lehetséges kockázatot jelent, hogy az iparban nagy mennyiségben alkalmazott PFA anyagok kettős, ún. amfifil tulajdonsággal rendelkeznek: egyfelől egy apoláros, fluorozott szénláncsal rendelkeznek a molekula egyik oldalán, a másik végükön viszont akár poláros csoportokat is tartalmazhatnak. Ezeket a molekulákat Janus-arcú molekulaként is jellemzik, hiszen egyszerre víztaszítók, ugyanakkor poláris molekularészeik miatt akár vízzoldhatóak is lehetnek. Ezek a tulajdonságok teszik őket ennyire különlegessé és ezt a használják ki az ipari alkalmazásokban, de környezetvédelmi szempontból éppen ez okozza a legfőbb problémát is velük kapcsolatban. Különleges tulajdonságuk miatt a környezetben szinte mindenhol fellelhetők: a felszíni és a felszín alatti vizekben, a talajban, a levegő aeroszolban, míg az élőlényeken belül jellemzően fehérjékhez kötötten találhatók meg. Olyan területek környezeti elemeiben is megtalálhatóak, ahol

soha korábban nem alkalmazták ezeket a vegyületeket. Az állati- és emberi szervezetben belül jellemzően a vérrel vándorolnak és így több szervbe is eljutnak, ahol aztán hosszú időn keresztül megmaradhatnak.

A korábban széles körben alkalmazott örök vegyi anyagok (pl. PFOA) egy részéről mára kiderült, hogy toxikológiai szempontból veszélyesek és betiltásra kerültek világszerte. A PFA anyagok kockázatainak megértését és az első amerikai bírósági perek történetét





PFAS anyagok

dolgozza fel a Sötét vizeken című film, amely bemutatja, hogy ezek a vegyületek a környezetbe kerülve jelentős, általában idegrendszeri elváltozásokat okozhatnak. A szennyező hatásukat nem egy környezeti katasztrófa, egy rendkívüli esemény alkalmával fejtették meg, hanem lassan értették meg az ipari szennyvizek (pl. teflongyártó üzemek) hatásainak tanulmányozásán keresztül. Mivel a szennyvíztisztítási technológiákat jellemzően nem ezen anyagok eltávolítására alakították ki, ezért a vízkezelés nem tudta csökkenteni mennyiségüket, így kerültek a természetes felszíni vizekbe (patakok, folyók), amelyek használatok ivóvizéül szolgáltak, s így a PFA-k végül elértek az emberi táplálkozásig is.

Az örök vegyi anyagok kockázatainak értékelésének az a nehézsége, hogy ezek a vegyületek hosszabb időtávon, vagy generációkon átívelve fejtik ki a hatásukat, amit természetszerűleg csak hasonlóan hosszabb távon távú (krónikus) toxikológiai vizsgálatokkal lehet elemezni, mert az akut gyorstesztetek általában nem szolgáltatnak megfelelő eredményt. Igen ám, de a krónikus tesztek sokkal bonyolultabbak: hosszabb ideig kell a vizsgált élő szervezeteket ezekkel az anyagokkal kapcsolatban tartani. A letális hatások mellett a nem halálos (szubletális) elváltozásokat, a sejtfunkció-zavarokat és a transzgenerációs változásokat is elemezni kell egy káros hatás igazolására, valamely PFA anyaggal kapcsolatban. A „PFAquatic” című pályázatban a hazai kutatók a lipcsei UFZ Helmholtz Intézet kutatóival és a Birminghami Egyetemmel közösen olyan vizsgálatokat végeznek, amelyek például képkötő diagnosztikával elemzik a hallárvak testi elváltozásait, valamint sejten belüli funkcióváltozásokat követnek, egyes gyakran alkalmazott PFA anyagok esetében.

A hatások mellett fontos a PFA anyagok környezeti koncentrációjának meghatározása is. Jelenleg még nagyon keveset tudunk a hazai vizek PFA érintettségéről – mutatja be a másik kutatási irányt Szabó István –, ezért a figyelmünket arra is összpontosítjuk, hogy mennyire érintik Magyarország felszíni vizeit, valamint az ivóvizeinket ezek a szennyezőanyagok. A kutatás eredményeként elsőként vizsgálták meg a PFA anyagok jelenlétét a Fővárosi Vízművek ivóvízrendszerében, jelenleg pedig a tihanyi

HUN-REN Balatoni Limnológiai Kutatóintézzel közösen elemzik legnagyobb tavunk PFA érintettségét. A Balaton vizének vizsgálata mellett a vízi ökoszisztémában is nyomon kívánják követni a szennyezők vándorlását.

A HU-rizont program által támogatott kutatás emellett kiemelt figyelmet fordít a hazai kisebb és nagyobb folyóink, horgásztavak és intenzív halastavak PFA-kitétségének vizsgálatára is, ugyanis a tisztított szennyvízzel kijuttatott kockázatos anyagok akár itt is hatással lehetnek az innen kikerülő minőségére, sőt a feldolgozás során, vagy akár csomagoláson keresztül is tovább szennyeződhetnek az élelmiszerek, emiatt a hazai tavakból származó haltermék nyomon követéséhez a szövetek, szervek PFA-tartalmát is elemzik. A pályázathoz kapcsolódva kialakításra került egy olyan analitikai kapacitás, az egyetem Élelmiszerkémia és Analitika Tanszékén, ahol a vízminták mellett tehát állati szövetekben – pl. (hal)húsban és szervekben – is végezhető PFA-elemzés, valamint a Pécsi Tudományegyetemmel együttműködve olyan vízkezelési módszeren is dolgoznak, ami segítheti a PFA szennyezők kivonását a halastavak vízrendszeréből, illetve később akár az ivó- és szennyvizekből is.

Vizsgálataink alapján a hazai vizeket jelenleg kevésbé félttem a PFA szennyezésektől, mint a nyugat-európaiakat – fogalmazza meg összefoglalóan Szabó István. A határérték rendszerek szigorodása miatt több ilyen technológiát alkalmazó vagy előállító cég vándorolt át Észak-Amerikából, főként Nyugat-Európába. Ezért, és a sokkal részletesebb ismeretek és szélesebb körű monitoring vizsgálatoknak köszönhetően, ott sajnos sok olyan területről tudunk, ahol a PFA-k jóval magasabb koncentrációban vannak jelen a felszíni vizekben, mint amit a magyarországi méréseink mutattak ki. Hazánkban ez a helyzeti előnye nagy érték, amit meg kell őriznünk, az örök vegyi anyagok felhasználásának korlátozásával, a PFA kibocsájtó ipari tevékenységek szigorú szabályozásával, illetve a lakosság tájékoztatásával – valamint a kutatásuk, laboratóriumi elemzésük és a hazai PFA monitoring folyamatos biztosításával.

Forrás: Élet és Tudomány



<https://www.youtube.com/watch?v=Q7ozFKNNFq4>

"A nagy nemzetközi konferenciákon látott villámelőadások (flash presentation) gondolatát meghonosítva, 10 kiemelkedő magyar kutató mutatja be 10-10 percben 10 különböző kutatási terület érdekes és fontos szakmai eredményeit. E közérthető előadások célja az, hogy a hazai kutatók világhírű eredményeit megismerve, ezeken keresztül jobban rálássunk a molekulák gazdag világára, hogy közérthető módon, de mégis a kémia igényességét megőrizve képet alkothassunk a kutatóról, az általa elért eredmények jelentőségéről, a modern kémia néhány vívmányáról. Felvillantva a kémiai tudományok korszerű eredményeit, az új megfigyeléseken és felfedezéseken keresztül megsejthessük a molekulák és a kémia varázsát."

0:05 | Köszöntő: Perczel András biokémikus,

2:31 | Biomimetikus szerkezeti és rendszerkémi örendeződés, Martinek Tamás szerves kémikus,

13:00 | Mechanizmusok kutatás oldat- és szilárd fázisban, Fábíán István szerves kémikus,

22:47 | A pórusos szén: adszorpción innen és túl, Nagyné László Krisztina vegyészmérnök, radiokémikus,

35:37 | A foszfor-heterociklusoktól a zöldkémiaig, Keglevich György szerves kémikus, 46:18 | Barangolás a módosított peptidek világában Tóth Gábor peptidkémikus,

58:08 | A légkör kémia szépségéről és fontosságáról, Salma Imre légkörkémikus,

13:56 | Pontos kvantumkémia a vízmolekulától a fehérjéig, Kállay Mihály kvantumkémikus,

25:18 | Nanoanyagok és nanotechnológia: a kémia új fejezete, Kónya Zoltán fizikokémikus,

39:55 | A deutériumtól a biológikumokig – a megértéstől az alkalmazásig, Kotschy András szerves kémikus,

51:15 | Lehet-e molekulákból áramköröket építeni? Értekezés az áramvezetés kémiai modelljéről, Szalay Péter elméleti kémikus.

Kémiai a csúcson

T cells

Nobel Prize in Medicine 2025

Metal-organic frameworks

Nobel prize in chemistry 2025

MOF-5 framework

Perspectives of energy storage

Metal-ion batteries

Chemical calculations

Monte Carlo simulations

Instrumental chemical measurements

Structure of molecules by X-ray Diffraction

Artificial Intelligence

Chemical Applications

Chromosome theory

Thomas Hunt Morgan

Healing molecules in plants

The almonds

Astrochemical News

Sugar molecules on the asteroid Bennu

Climate change

Climate 2024/2025

Ocean dimethyl sulfide emissions

Recommendation

Journal of Hungarian Chemists

Az Élet és Tudomány writes

Who is a curious researcher

Summer Research Camp

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 Szechenyi 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: Pálincás 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 at an angle, making it a prominent background element on the page.