

# A MIKROKOZMOSZ KÉMIÁJA – A KÉMIA MIKROKOZMOSZA<sup>1</sup>

Perczel András<sup>2</sup>

az MTA levelező tagja, egyetemi tanár,  
ELTE TTK Kémiai Intézet Fehérjemodellező Kutatócsoport  
perczel@chem.elte.hu

## *Prologus helyett*

Az UNESCO (United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization) és az IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) döntésének köszönhetően 2011 a kémia éve (IYC 2011 – International Year of Chemistry). Több nemzetközi és hazai kerek évforduló (például 100 éves az atommodell, 150 éves Madách Imre *Az ember tragédiája* első kiadása, 200 éve született Liszt Ferenc és Perczel Mór stb.) mellett ebben az évben több szó is esik a kémia diszciplínáiról. Mert a kémiára is igaz a mondás: *Ignoti nulla cupido*, mely szerint, *amit nem ismerünk, arra nem vágyakozunk*, s ezt bátran kiegészíthetjük még azzal, hogy *nem is szerethetjük*. A kémia évének rendezvényei javíthatnak a hiányos, felületes és gyakran negatív közmegítélésen. Noha az elmúlt évtizedek során a vegyipar, a gyógyszeripar, a műanyagipar termékei átalakították és jelentősen megkönnyítették hétköznapi életünket, a kémia nem lett népsze-

rűbb. A világ molekuláris szintjének megismerése a közgondolkodásban csak dögöghalad. Ráadásul hibás gazdasági döntések s a profitmaximalizálás szűklátókörűsége miatt a kémia elsősorban akkor kerül az újságok címlapjára, mikor elhanyagolt ipari létesítményekben bekövetkező balesetek, környezet-szennyezések és katasztrófák emberéleteket követelnek. A kémia „erejének” ilyenén meg tapasztalása nem szívderítő, sőt egyenesen tragikus! Érdemes tehát feltennünk a kérdést: *lényegét tekintve mi is a kémia?*

## *Történeti aktualitás*

2011 azért lett a kémia éve, mert Marie Curie (született Maria Skłodowska) száz évvel ezelőtt, 1911-ben kapta meg a kémiai Nobel-díjat az alkáliföldfém rádium (<sup>88</sup>Ra) és a hazájáról elnevezett fém polónium (<sup>84</sup>Po) felfedezéséért, tulajdonságaik tanulmányozásáért. A lengyel származású asszony azon ritka tudósok közé tartozik, akik kétszer is kiérdemelték Stockholm kitüntető figyelmét; ugyanis 1903-ban már Henri Becquerel és férje – Pierre Curie – társaságában megkapta a fizikai Nobel-díjat is. (1902-ben Pierre Curie-vel az urán és a tórium után a még mindig sugárzó uranit ércből is izolálták, majd tisztán előállították a rádiumot.) Élete és viszonylag korai halála

<sup>1</sup> Az MTA 2011. májusi, 181. rendes közgyűlésén elhangzott előadás szerkesztett változata. A szerző köszönetét fejezi ki az MTA Elnökségének és a VII. Osztálynak a plenáris előadás megtartására vonatkozó megítéltelő felkérésért.

<sup>2</sup> A Bolyai-díj 2011-es kitüntetettje.

szorosan összekapcsolódik a spontán radioaktív sugárzás felfedezésével, a jelenség beható tanulmányozásával, az uránszurokérc kémiai analízisével. Még a Nobel-díjasok között is kiemelkedő személyiség a hallgatag, szerény, ám büszke asszony. Páratlan tehetségét jól mutatja, hogy férje, Pierre Curie 1906-os tragikus hirtelenségű halálát követően ő lesz a Sorbonne Természettudományi Karának első fizikaprofesszor asszonya, valamint ez idáig *ő az egyetlen olyan tudós, aki két eltérő tudományágban*, a fizikában és a kémiában is kivívta a Nobel-bizottság elismerését. Egy generációval később, 1935-ben lányuk, Irene Joliot-Curie és férje, Frédéric Joliot-Curie számára ítélik oda a kémiai Nobel-díjat a mesterséges radioaktivitás felfedezéséért, s ezzel a Curie-család tudhatja magáénak a történelem legtöbb – összesen öt Nobel-kitüntetését. (1911 további érdekessége, hogy ekkor született Melvin Ellis Calvin amerikai kutató, ki a Berkeley-n dolgozva éppen ötven évvel később [1961] kapja meg a Nobel-díjat a róla elnevezett Calvin-ciklus felfedezéséért. Szintén 1911-ben született Feodor Felix Konrad Lynen német orvos, aki a koleszterin és a zsírsavak metabolizmusának felfedezéséért kap 1964-ben orvosi Nobel-díjat.)

### *A kémia a molekulák tudománya*

A *Magyar Nagylexikon* szerint a *kémia* szó valószínűleg az egyiptomi *kemi* (fekete föld) esetleg a görög *khüma* (folyadék vagy öntvény) kifejezésből származik. A legtöbb értelmező szótár megegyezik abban, hogy a kémia az anyagot annak atomi-molekuláris szintjén vizsgálja, ezt a szemléletmódot jól summázza az angolszász *molecular science* kifejezés. Ez utóbbi jelzős szerkezet hitelesen tükrözi azt a szándékot, amely szerint a kémikus a feltett kérdésekre és tudományos megfigyelésekre a

választ és magyarázatot az atomok, ionok vagy molekulák szintjén kívánja megtalálni.

A kozmosz anyagának összetétele egyszerű: 90% hidrogén és 10% hélium. A földi élet szempontjából fontos szén, oxigén, nitrogén stb. elemek mindösszesen alig teszik ki a teljes univerzum anyagának 0,1%-át. Az arányok ilyen szokatlan eltolódása ellenére is a csillagászok százánál több különböző, a földi körülmények között jól ismert szeretlen (grafit, gyémánt, fullerén stb.) és szerves molekulát (pl.: acetilén, etilén, ciánsav, metanol, éter) azonosítottak már az Univerzum különböző pontjaiban. Az üstökösök fagyott gáz- és porfelhőiben (például Halley-üstökös) további és még összetettebb szerves molekulákra leltek, olyanokra, mint például az egyszerűbb  $\alpha$ - és  $\beta$ -aminosavak. Földünk megszilárdult kérge közelében a helyzet alapvetően más, itt a szerves molekulák legfontosabb összetevőjét képező szénatomok egymáshoz is kapcsolódva elképesztő számú variációban fordulnak elő. A legegyszerűbb szén-monoxidtól és szén-dioxidtól kezdve a lenyűgözően bonyolult szerves vegyületeken át az élet jelenlegi formája szempontjából nélkülözhetetlen lineáris biopolimerekig; ilyenek például a fehérjék, az RNS és a DNS. Ma még mindig nem tudjuk pontosan megmagyarázni sem azt, hogyan dúsult fel a Földön a szerves molekulákat felépítő elemek száma és mennyisége, sem azt, hogy ebből hogyan alakultak ki a ma ismert komplex molekuláris és szupramolekuláris rendszerek.

Míg az atomfizika elsősorban az anyag szubatomi szintjét kutatja (éppen idén száz éves Ernest Rutherford módosított atommodell-leírása), a biológia és a biokémia pedig a szupramolekuláris rendszereket befogadó sejtes szerveződéseket vizsgálja, addig a kémia e két terület között elhelyezkedő molekuláris

világ titkait firtatja, költőibben a mikrokozmosz-titkokat. Kérdés azonban: ha mind a környezetünket, mind pedig az önmagunkat felépítő anyag a molekulák sokaságának hierarchikus együttése, miért olyan nehéz mégis feltérképezni, befogadni és megérteni e molekuláris szintet? Ha a kémia szűkebb tárgyát képező molekulák mindenütt jelen vannak – ami vitathatatlan tény –, akkor miért esik a molekuláris szemlélet oly távol a legtöbb embertől? Miért nehéz a kondenzált anyagban annak molekuláris szintjére bukkanni?

A molekulák komplexitását megérteni önmagában is kellően bonyolult feladat, ezért érdemes előbb azokat a területeket megvizsgálni, ahol egyedi molekulákba ütközünk. Érzékszerveink közül például orrunkra és molekuláris „emlékeinkre” hagyatkozva próbáljuk felidézni egy frissen sült cipó ropogós héjának, vagy egy csokor tavaszi ibolyának a bódító illatát.<sup>3</sup> Ez az „illat emlék” csupán egynéhány, ám jellegzetes molekulával való korábbi találkozásunk eredménye; néhány gyűrűs amin, telített és telítetlen egyszerű aldehid vagy monoterpén váltotta ki, és indította el az orrunk hátsó részén elhelyezkedő receptormolekulák segítségével a jellegzetes és specifikus ingert. (A szaglás és az ízlelés a tipikusan unimolekuláris epitóp-receptor típusú kölcsönhatás megtapasztalható példája.)

Az illatok mellett egyes ízekért vagy színekért felelős molekulákat is könnyen azonosíthatunk. Jól ismert például a szegedi pirospaprika rubinvörös színét adó két, negyven szénatomból felépülő molekula, a kapszantin és kapszarubin, illetve a paprika „férfias” erejéért felelős és az előbbiektől alaposan különböző kapszaicin. Váratlan fordulatnak tűnhet

<sup>3</sup> A kenyér illatáért elsősorban a 2-acetil-pirrolin, a 3-metilbutánál és a 2-transz-non-2-én, míg az ibolya illatáért az  $\alpha$ - és  $\beta$ -jononok felelősek.

a fiziológusok azon megállapítása, mely szerint a „csípős” kapszaicin az ún. I-típusú vaniloid receptorhoz kötve fejti ki hatását. A vaniloid receptor névadója ugyanis a kellemes és édeskés ízért felelős vanillin, a közismert vanília fő komponense. A látszólagos ellentmondás feloldását a két molekula (kapszaicin és vanillin) szerkezeti képletének összehasonlítása adja, ugyanis a kapszaicinmolekula metoxi-szubsztituált fenol része hasonlít a vanillinmolekulára. Ha tehát meg tudjuk határozni, és le tudjuk írni egy-egy molekula szerkezeti képletét, akkor az összehasonlító vizsgálat magában hordozza a „rokonsági fokok” feltérképezhetőségét is. Tehát nagyon is érdemes röviden átgondolni a molekulák azonosítására és leírására elterjedten használt kémiai eszköztár, a *kvalitatív és kvantitatív molekulaképlet* fogalmát.

A kémiai képletírás hasonlít az archaikus képirások azon módozataira, melyek során az alapszimbólumok kombinálásával állítjuk elő a bonyolultabb fogalmak képrendszerit. A kémiában elterjedt szubsztitúciós vagy csoportfunkciós nevezéktan jól mutatja a kémiában szokásos képletírás logikáját: a bonyolultabb molekulákat kémiailag értelmezhető alapegységekre (molekulavázra, szubsztituen-sekre stb.) bontjuk. A képletekben szereplő legegyszerűbb, atomokra vonatkozó szimbólumokat a Dmitrij Ivanovics Mengyelejev által 1869-ben közzétett periódusos rendszerből könnyen visszakereshetjük.<sup>4</sup>

A Friedrich Wöhler német kémikus által szeretlen kiindulási anyagból előállított oxálsav (1824), majd karbamid (1828), s az ezt

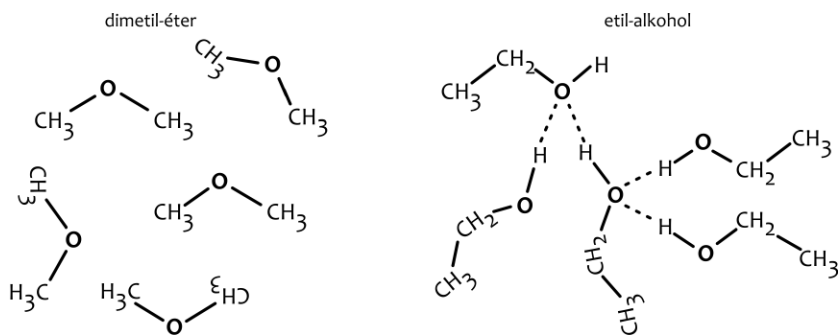
<sup>4</sup> A megalkotásakor még csak körülbelül 70 elemet tömörítő periódusos rendszer egy sor akkor még hiányzó és felfedezésre váró elem léteére hívta fel a figyelmet, és a 2010-ben azonosított *koperniciummal* (<sup>112</sup>Cn) ki egészülve ma már összesen 112 elemet tartalmaz.

követően izolált és szintetizált, egyre bonyolultabb molekulák megjelenése a XIX. század közepére elodázhatatlanná tette a molekulák egzaktabb leírásmódjának kidolgozását. A benzol Dewar-féle naivabb szerkezeti képletét követően August Kekulé, Archibald Couper és Alekszandr Butlerov lerakták a modern kémiai képletírás máig használatos alapjait. 1874-ben Jacobus van't Hoff és Joseph Le Bel kiterjesztették a képletírást a harmadik dimenzióra, ezzel is határozottan utalva a molekulák térbeli jellegére. Végül még nincs száz éve sem, hogy Gilbert Lewis és Albrecht Kossel 1916-ban, már a kvantummechanika megszületése előtt, kidolgozták a ma is használt klasszikus vagy Lewis-féle képletírás szabálytárát. Ezt a képet harmonizálta a kvantummechanika alapegyszerítésének felírásával Erwin Schrödinger, minek köszönhetően ma rendelkezésünkre áll a molekulák kvantitatív leírási módja is. A szemlélet sokat finomodott az évek során, ám az alapfeladat nem változott. A képletírás célja továbbra is az, hogy az atommagok térbeli elrendeződését (konnektivitását) ismervé felírjuk a molekula helyes elektron-szerkezetét. A Lewis-képletírás használ olyan segédfogalmakat, mint az atomtörzs és a vegyértékelektron, és olyan szabályokat, mint az „oktettszabály”, amelyek segítségével kvalitatív szinten jellemezhetjük akár bonyolult szerves molekulák elektronszerkezetét is. A cél ugyanez marad a molekulák egzaktabb kvantumkémiai jellemzése során is: a magok térbeli elrendeződésének ismeretében kvantitatív szinten meghatározni a molekula teljes elektronszerkezetét, s ebből levezethető tulajdonságait. A szerkezeti képlet a kémikus számára olyan, mint a kotta a zenész számára. Segítségével nemcsak rögzíteni, magyarázni és rendszerezni tudja molekuláris szintű megfigyeléseit, de mint a zenész számára a

kotta, a kémikus számára a képlet akár „meg is szólalhat”.

A molekulák szerkezeti vagy Lewis-formalizmusának segítségével tehát szakszerűen lehet „könyvelni” a mikrokozmosz alkotóit, de segítségével egy sor makroszkopikus tulajdonságot (oldhatóság, forráspont, olvadáspont, sav-bázis jelleg, szín, reaktivitás stb.) értelmezni, esetenként előre jelezni is lehet. A  $C_2H_6O$  összegképletű két szerkezeti (vagy *konstitúciós*) izomer esete – melyekben az atomok száma és jellege azonos, ám egymáshoz kapcsolódásuk eltérő – jó példa arra, hogy hogyan lehet csupán a szerkezeti képlet alapján az etanol (etil-alkohol) és a dimetil-éter forráspontjainak jelentős eltérését megmagyarázni. Bár mindkettő molekulatömege azonos (46 Dalton) mégis az etanol forráspontja az éterénél közel 100 fokkal magasabb.<sup>5</sup> E fizikokémiai paraméter eltérése a szerkezeti képletek különbözősége alapján jól indokolható: míg az alkoholban van egy olyan H-atom, amelyik az oxigénhez közvetlenül kapcsolódik, addig az éterben nincs ilyen. Az oxigén a szénatomhoz képest erősebben vonzza az elektronokat (nagyobb az elektronegativitása), ezért a hozzá kapcsolódó hidrogénatom gyengébben kötődik, „savanyúbb” lesz, könnyebben leszakad (disszociál). Ez a H-atom éppen emiatt képes további molekulák oxigénatomjához kapcsolódni. Az etanol tehát, hasonlóan a vízhez, erős hidrogénhidak létesítésére, s ezáltal nagyszámú molekula „összekapcsolására” képes. Nem így az étermolekulák, amelyek ilyen H-hidat képző atomok hiányában, az adott körülmények között nem alkotnak molekuláris hálózatot (*t. ábra*). Az erősebb belső kölcsönhatások felszakítása

<sup>5</sup> Forráspontjuk normál körülmények között  $-24,9$ , illetve  $+78,5^\circ\text{C}$ .



1. ábra • Míg az etanol hidrogén-hidakon keresztül (szaggatott vonalak) asszociátumok képzésére hajlamos, megemelve ezzel a folyadék forráspontját, addig a dimetil-éter ugyanilyen hálózatok kialakítására alkalmatlan.

nagyobb termikus energiát (élénkebb mozgást) igényel, tehát az alkohol – az azonos molekulatömegű éterhez képest – magasabb hőmérsékleten forr.

A Lewis-képlettel nemcsak egyszerű, de bonyolultabb szerves molekulák elektronszerkezete is leírható. A paprika egyik összetevőjét, a C-vitamint Szent-Györgyi Albert izolálta elsőként s nevezte el „ignose”-nak. Ennek kémiai szintézisét Albert Haworth oldotta meg, lehetővé téve ezzel a vitamin olcsóbb előállítását. A C-vitamin felfedezését 1937-ben az orvosi, míg szintézisét ugyanebben az évben a kémiai Nobel-díjjal honorálták.<sup>6</sup> A kémiai képlet jól használható nemcsak a molekulák jellemzésére, tulajdonságaik becslésére, hanem szintézisük lépésenkénti leírására is. A reagensek és reaktánsok kölcsönhatásának értelmezésére alkalmas Lewis-képleteken keresztül a reakciók menetére és mechanizmusára is utalásokat tehetünk. Ennek a közel százéves formalizmusnak hasznát és

sikerét mi sem bizonyítja jobban, mint hogy a kémikusok a mai napig is eredményesen használják.

Milyen viszonyban áll a molekulával mint létező entitással annak kémiai képlete? Nyolcvan évvel a kvantummechanika megalapozását követően nehezen védhető olyan formalizmus, melyben az elektronokat pontoknak képzeljük el. Ha a molekulákról ma már tudunk atomi felbontású képet alkotni, akkor miért nem ezekre alapozza a kémikus a molekula fogalmát? Mennyiben segíti ez a fogalom a makroszkopikus, mindenki által észlelhető anyagok, molekulahalmazok leírását? Az egyedi molekulák szemünkkel nem láthatók, csak műszerek és számítógépek segítségével jeleníthetjük meg, modellezhetjük őket. Mennyi e modellek valóságtartalma? Tudunk-e következtetni egy gramm kristályos C-vitaminból a C-vitamin molekula bármely tulajdonságára és fordítva: mennyiben határozzák meg az egyedi molekula tulajdonságai a makroszkopikus anyag tulajdonságait? Valójában hogyan néznek ki a molekulák, pontosabban fogalmazva: milyen makroszkopikus modell segítségével tudjuk a legkönnyebben megérteni sajátos viselkedésüket?

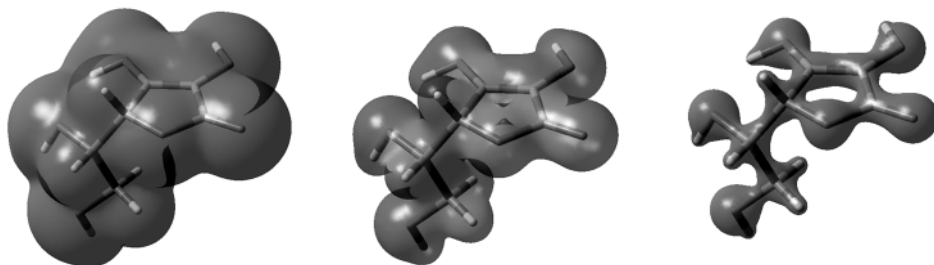
<sup>6</sup> Ez a vitális szerves molekula, amely egy sor növényből izolálható, elengedhetetlen a kollagén csont és izomfehérjeszintéziséhez. Hiánya skorbuthoz vezet, amit már Hippokratész is a Kr. e. IV. században mint súlyos táplálkozási rendellenességet írt le.

A problémát jól érzékelteti Kajtár Márton frappáns mondata: „Egy csepp víz jobban hasonlít az óceánhoz, mint egyetlen vízmolekula a vízcsepphez.” A mikrokozmosz hosszegységét az angströmöt, amely tíz nagyságrenddel kisebb a hétköznapi világunk természetes egységénél, a méternél, úgy képzelhetjük el könnyebben, hogy elgondoljuk: amennyiben az etanol molekulája akkora lenne, mint egy teniszlabda, ez a labda körülbelül akkorára nőne, mint a Föld–Hold-távolság.

A mikrokozmoszban látni nem, de a molekulákat érzékelni képesek lehetünk például azok elektronsűrűsége, mágneses vagy más fizikai tulajdonsága alapján. A kvantummechanikával összehangolt, kvantitatív molekulaszerkezet és képlet központi fogalmi bázisa az elektronsűrűség, amely a molekulára jellemző hullámfüggvényből származtatható és kellő pontossággal kiszámítható vagy kísérleti úton, például röntgendiffrakcióval mérhető. Ahogy a Lewis-képletírás feladata az, hogy megadjuk a helyes elektronszerkezetet egy adott elhelyezkedésű és konnektivitású atommagcsoport környezetében, úgy a kvantummechanikai számítások során is egy igen hasonló feladattal kell megbirkóznunk. Az időtől független Schrödinger-egyenlet megoldását követően a molekula térszerkezetére

számolt teljes elektronsűrűséget szintvonalas modellben jelenítjük meg, vagyis összekötjük a térben azokat a pontokat, melyekben az elektronsűrűség azonos. A C-vitamin körül különböző elektronsűrűség-értékeket összekötő burkolófelületek a molekula különböző modelljeinek tekinthetők (2. ábra).

A klasszikus mechanika törvényei lehetővé teszik, hogy a rájuk ható erők ismeretében meghatározzuk a makroszkopikus testek mozgását. Az elektronok mozgását és eloszlását is meghatározhatjuk a kvantummechanika segítségével. A molekulák néhány alapvető tulajdonságát eleve figyelembe vevő kvantummechanikai módszert nevezzük kvantumkémianak. Az elektronok és a több mint kétezerszer nehezebb atommagok mozgását szétválasztva (Born–Oppenheimer-közelítés) a Schrödinger-egyenlet megoldása jelentősen leegyszerűsödik. Egy adott atommag-konfigurációra megoldva az egyenletet, meghatározhatjuk a molekula teljes belső energiáját, mely a magkonfiguráció függvénye. Meghatározhatjuk a potenciálisenergia-felületet, amelyből a molekula számos tulajdonsága és viselkedése viszonylag pontosan megállapítható. A potenciálisenergia-felület a modern kémia központi fogalma, mely a klasszikus szerkezeti képlet általánosításának tekinthető.



2. ábra • A C-vitamin molekulájának modellje az azonos elektronsűrűség-értékeket (bal oldalon: 0,004, középen: 0,04, jobb oldalon: 0,2) összekötő burkolófelület alapján. Feltüntettük az atommagokat összekötő vonalak alkotta molekulavázát is.

A potenciálisenergia-felület tanulmányozása fontos eszköz a kémiai tulajdonságok értelmezéséhez (izomerizáció, tautomerizáció, hajlékony molekulák fel- és letekeredése, konformációanalízis). Bár csak három szén-atomból és az ezekhez kapcsolódó nyolc hidrogénatomból épül fel a propán ( $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_3$ ), mégis elvben több lehetséges térszerkezete (atommag-konfigurációja) lehet. Ha mind az első (C1–C2), mind a második (C2–C3) szén-szén kovalens kötés mint tengely mentén a molekula egy-egy részletét egymáshoz képest elforgatjuk, akkor rendre meghatározhatjuk a teljes belső energia értékeit. Ezeket a két változó mentén ábrázolva meghatározhatjuk a propán összes szóba jövő térszerkezetét, ezek közül a legalacsonyabb energiával jellemzett az, amelyik leggyakrabban valósul meg. Hasonló módon határozhatjuk meg nagyobb molekulák, akár fehérjék vagy nukleinsavak legvalószínűbb térszerkezetét is.

A kvantitatív képletírás eredményeként megkapható potenciálisenergia-felület lehetővé teszi két vagy több molekula együttes tanulmányozását is, ami átvezet a reakciók kvantumkémiai szintű vizsgálatához. Ma már lehetőség nyílik az egyszerűbb elemi, sőt a bonyolultabb reakciók kvantitatív tárgyalására is. Meghatározhatjuk az átalakulások kinetikai és termodinamikai paramétereit, amelyek a kísérleti adatokkal összevetve elvezetik a kémiát a kvalitatív mechanizmusértelmezés korából a kvantitatív reakciótervezés időszakába. Szemléletes példa lehet erre a hidroxidion ( $\text{OH}^-$ ) és a metil-klorid ( $\text{CH}_3\text{-Cl}$ ) együttes átalakulása, az úgynevezett nukleofil szubsztitúciós ( $\text{S}_{\text{N}}2$ ) vagy hétköznapi nyelven „helyettesítési” reakció, amely metilalkohol és kloridion képződésével jár. A részt vevő két molekula kisebb méretükből adódó

egyszerűbb szerkezete hozzásegíti a kutatót a helyes reakciómechanizmus értelmezéséhez. Bár ma még egy sor kémiai átalakulás és összetettebb biokémiai reakció nem követhető kellő pontossággal, a számítógépek és a módszerek fejlődésével a kémiai reakciók elmélete is rohamosan fejlődik.

Manapság képesek vagyunk mind kvalitatív, mind kvantitatív szinten az ionok és molekulák elektronszerkezeti sajátosságait értelmezni, sőt adott pontossággal azokat le is írni. Hasonlóan hétköznapi világunk legérdekeesebb részeihez, a mikrokozmosz parányai sem merevek és mozdulatlanok, hanem a makrovilág rugalmas tárgyaihoz hasonlóan a molekulákra is kellő plaszticitás, belső dinamizmus jellemző. A képet az teszi igazán árnyalttá, hogy a belső mozgások gyakran egymástól is igen eltérő időskálán valósulnak meg. Míg a C-vitamin rezgéseinek periódusa a femtoszekundum ( $10^{-15}$  s) tartományba esik, addig ugyanez a molekula egyes torziós szögei mentén elfordulva is mozog, ám lassabban, *nanoszekundum-pikoszekundum* ( $10^{-9}$ – $10^{-12}$  s) tartományban. E két eltérő időskálájú molekuláris mozgás ugyanúgy egymásba ágyazódik, mint például a másodperc időskálájú (tehát nagyobb frekvenciájú) szívdobogásunk ágyazódik a napszakokhoz köthető életciklusunk (például reggeli ébredés, ebédelés, lefekvés) hosszabb ( $10^1$  s) időskálájú tevékenységeibe. A molekulákat a méretnövekedéssel egyre szaporodó és bonyolultabbá váló belső mozgások és azok kombinációi ugyanúgy jellemzik, mint a geometriai paraméterek vagy a szerkezeti képlet.

#### *A szerkezetmeghatározás korszerű lehetőségei*

A tárgyak térbeli megjelenésének rögzítése viszonylag egyszerű fénykép alapján is megoldható a Gábor Dénes által felfedezett,

1971-ben fizikai Nobel-díjjal jutalmazott holográfia segítségével. A molekulák szerkezetének meghatározása esetében a leképezés felbontásának növelése a legfontosabb feladat. Az emberi szem a molekulák szerkezetkutatására nem alkalmas, felbontóképessége nem elég jó ( $\sim 0,1$  mm). Fénymikroszkóppal a  $\sim 0,2$   $\mu\text{m}$  felbontást is elérhetjük, aminek köszönhetően akár már baktérium méretű tárgyakat is eredményesen tanulmányozhatunk. A fáziskontraszt-mikroszkóp (*Phase Contrast Microscope*) a felbontás további javulását eredményezte, fejlesztőjét, Fritz Zerniket munkájáért 1953-ban Nobel-díjjal jutalmazták. A nanométer ( $10^{-9}$  m) szintű felbontás eléréséhez ma már több eszköz is a rendelkezésünkre áll. A pásztázó alagútmikroszkóp (*Scanning Tunneling Microscope – STM*) – kifejlesztéséért Gerd Binnig és Heinrich Rohrer kapott 1986-ban fizikai Nobel-díjat – vagy az atomierő-mikroszkóp (*Atomic Force Microscope – AFM*) – melynek felbontása akár ezerszer jobb lehet, mint az optikai felbontás elvi határa –, a szerkezetkutatók kedvelt eszköze. Az angstrom ( $10^{-10}$  m) szintű felbontásról álmodó kémikus eszköze a röntgen-diffraktométer, melynek segítségével kristályos anyagokról akár szubangstrom felbontású képet is alkothatunk. E módszer alapjainak kidolgozóit 1901-ben (Wilhelm Röntgen) és 1915-ben (William H. Bragg és fia, William L. Bragg) is egy-egy fizikai Nobel-díjjal honorálták. Nemcsak az első fehérjeterület-szerkezet-meghatározást (Max Perutz és Sir John Kendrew), de további eredményeket is jutalmaztak, összesen tíz Nobel-díjjal. Legutóbb 2009-ben Venkataraman Ramakrishnan, Thomas Steitz és Ada Yonath kapták meg ezt a legrangosabb nemzetközi elismerést a riboszóma szerkezetének és funkciójának atomi szintű feltérképezéséért, a működés jobb megértéséért.

Az atomi szintű szerkezetmeghatározás másik ígéretes eszköze a mágneses magrezonancia spektroszkópia (NMR), amelynek fizikai alapjelenségét Felix Bloch és Edward Purcell fogalmazták meg (fizikai Nobel-díj, 1952). Az NMR kimagasló műveléséért előbb Richard Ernst (1991-ben), majd Kurt Wüthrich (2002-ben), legújabban a mágneses rezonancia képalkotás (MRI) kifejlesztéséért Paul Lauterbur és Sir Peter Mansfield (2003) kaptak kémiai, illetve orvosi Nobel-díjat. Ellentétben az MRI-vel, az NMR nem képalkotó eljárás, ám mivel nagy pontosságú információt ad a mágnesesen aktív magok térbeli elhelyezkedéséről és belső mozgásáról, a mért kísérleti adatok alapján angstrom felbontású képet alkothatunk szerves újabban biomolekulák sokaságáról, akár szilárd állapotban, akár oldatfázisban.

#### *Kihívások napjaink kémiájában*

A XXI. század küszöbére érve a kémikus inkább hasonlít egy „molekuláris mérnökhez”, mint egy sötétben tapogatózó alkimistához. Nemcsak birtokolja az alkalmas elméletet, melyet kvalitatív és kvantitatív módon is meg tud fogalmazni, de most már a megfelelő műszerek is rendelkezésére állnak. Ezek segítségével mind a természetből izolált, mind az általa megtervezett, majd mesterséges úton előállított molekulákat vizsgálni, jellemezni és fejleszteni képes. Képet tud alkotni a mikrokozmosz alkotóiról, akár azok gáz, cseppfolyós vagy szilárd halmazállapotú rendszereiről, sőt a molekulák egy sor tulajdonságát *ab initio* meg tudja határozni, ezzel előre megjósolva egy-egy reakció kimenetelét. E fejlesztések közben a kémia tudománya nagykorúvá vált, átlépve a leíró korszakából a kísérleti eredményeket egyre pontosabban megbecsülni képes korszakába.



Mi lehet a XXI. században a kémia legfontosabb kihívása? Elsőként érdemes megemlíteni, hogy a kémia egyik izgalmas sajátága abban rejlik, hogy új anyagokat képes előállítani és tanulmányozni, olyanokat is, melyek korábban nem léteztek. Míg hagyományosan a fizika, a biológia, a geológia a létező dolgokat kutatja, addig a kémikus különleges ismereteinek köszönhetően új anyagokat állít elő, amelyeket a magyar nyelv találoán például műanyagként aposztrofál. Se szeri, se száma azoknak a szintetikus anyagoknak, amelyek meghatározzák hétköznapjainkat, biztosítják kényelmünket; gondoljunk csak a textilipar, a gyógyszeripar, a műanyagipar áldásos tevékenységére.

Az új anyagok előállítása tervezhető módon és szinte mérnöki pontossággal kivitelezhető akár sok ezer tonnás méretekben. Lehetővé vált olyan makromolekulák előállítása is, mint például egy bakteriális genom. Nem egészen alaptalan tehát Craig Venter (a mesterséges genom által működtetett sejt létrehozója) 2010-es, elhíresült, bár veszélyesen öntelt kijelentése: „életet teremtettem”. A szintetikus biológia hajnalán talán még jobban el kellene csodálkoznunk azon, hogy a természet törvényeinek megismerése mekkora érték és lehetőség, s hogy segítségével mi mindenre képes lehet az ember. Lenyűgöző, hogy mindent százötven éve milyen pontosan megérezte Madách Imre, s fogalmazta meg *Az ember tragédiájá*-ban:

*„Az ember ezt, ha egykor ellesi,  
Vegykonyhájában szintén megteszi.”*

Korunk kihívásaira, egyre újabb és specálisabb anyagszükségeire az anyagtudománytól, a nano-, mikro- és makromolekulák kémijától már most ígéretes válaszokat kapunk. A szerkezeti és kompozit-anyagok a jövő háziasított vagy még inkább betanított mole-

kularendszerei lehetnek. Érdemesnek látszik az anyag molekuláris szintjének feltérképezése során megtanulni, alkalmazni és továbbfejleszteni mindazt, amit a természet már részben „feltalált” és eredményesen használt a molekuláris evolúció során. Megfigyelve például a természetes, biológiai úton lebontható rostszálfajtákat, azt találjuk, hogy mind a növényi eredetű cellulózban, mind az állati eredetű pókselymet és gyapjút felépítő polipeptidekben és fehérjékben a hidrogénhidak különösen fontos szerephez jutnak. Hasznos volt ezekből a természetes nyersanyagokból megtanulni szőni vagy fonnai, ám ehhez nem kellett ismerni ezek szerkezetét molekuláris szinten. Akkor azonban, amikor ugyanezen rendszerek oldhatósági adatai, tömörsége, mechanikai és más tulajdonságai az őket alkotó makromolekulák térszerkezeti, hidrogénhid- és más paramétereivel párhuzamba állíthatók, megnyílik az út a tulajdonságok tervszerű javítására, a molekulák háziasítására és betanítására. A molekuláris szintű tulajdonságok feltérképezése mára már oda vezetett, hogy például bizonyos  $\beta$ -aminoalkoholokból felépülő poliészterszálak keménysége és tartóssága előre megtervezhető. Ennek köszönhetően készíthetünk belőlük akár gyémántkeménységű szívbillentyű-alapanyagot, akár könnyen felszívódó sebészeti cérnát. Ugyanaz az észter fiziológiás körülmények között lehet évekig, akár évtizedekig stabil, más esetben napok alatt hidrolizál, és felszívódik. Érdemes megemlíteni a Stephanie Kwolek által 1964-ben felfedezett poliamid rendszert, a kevlar-t. A DuPont cég igen nagy szakítószilárdságú anyagából ma golyóálló mellényt vagy nagy szilárdságú sporteszközöket készíthetnek, mindezt azért, mert az alternáló aromás és amid molekularészek között kialakuló hidrogénhidak és egyéb ked-

vező kölcsönhatások kiváló szerkezeti anyagot eredményeztek.

Végül, de nem utolsósorban: az élettudományok kémiája (*Chemistry of Life Sciences*) egyre sokrétűbben képes értelmezni és magyarázni a biológia és az orvostudomány klasszikus vagy új megfigyeléseit. E területek mélyebb megértése aligha lehetséges a jelenségek molekuláris szintjének pontosabb feltérképezése nélkül, a gyakorlatba átültetve Szent-Györgyi Albert mondását: „*az egészségmegőrzés nem más, mint testünk mintegy 20 g elektronjának rendben tartása.*” Valóban egy kb. 75 kg-os emberi test nagyjából ennyi elektront tartalmaz. S mivel az atommagok az elektronok közvetítésével alkotnak molekulákat, s azok összekapcsolódva, rendszerbe állva alkotnak sejteket, majd szöveteket, a megérzés helyesen sugallja, hogy a molekuláris medicina szükséges előfeltétele a molekulák elektronszerkezetének helyes és pontos ismerete.

### *Epilógus helyett*

Remélem, hogy a Kémia Éve kapcsán napvilágra kerül a kémia mindannyiunkat láthatóan, esetenként láthatatlanul gazdagító kincsestára. A kémikus igazi örömét a megfigyelésben, az analízisben, a szintézisben és a gondolatformálásban leli, ez motorja s éltető ereje. Akkor is, ha az élet kegyeltje és esetleg sikeres, de akkor is, ha mellőzött. A mi örömünk a világ molekuláris szintjének mélyebb megértése, amit szívesen osztunk meg másokkal, s próbáljuk azt a többség javára fordítani. Ám a mi örömünk marad mindez akkor is, ha erőfeszítésünk alkalmanként közönybe vagy érdektelenségbe torkollik.

*Hiszen az útfélen itt-ott*

*Egy kis virág nekem nyitott:*

*Azt leszedve,*

*Megvolt szívem minden kedve.*

(Arany János: *Epilógus*)

---

Kulcsszavak: *Kémia Nemzetközi Éve, molekula- és elektronszerkezet, élet kémiája, anyagtudomány, szintézis*



# A MODERNKORI KÖNYV- ÉS SAJTÓTÖRTÉNETI KUTATÁSOK ÁLLAPOTÁRÓL PARADIGMAVÁLTÁS – PROBLÉMAFELTÁRÁS – ALAPELVEK – PROGRAMOK – FELADATOK

Lipták Dorottya

tudományos főmunkatárs,  
MTA–OSZK Res Libraria Hungariae Kutatócsoport  
lipdo@freemail.hu

Mint az alcím is jelzi, az elhangzott előadás a közelmúlt és a jelen pillanatfelvételén túl, elsősorban a jövőre koncentrálnak.<sup>1</sup> Bármilyen aspektusból közelítünk is, ma már senki nem vitatja, hogy a könyv és a sajtó az új- és legújabb kori Európa 20. századig zajló történetének két fő médiuma, az európai kultúrtörténet integráns része. Múltjuk feltárása mindenekelőtt Franciaországban, illetve Németországban és Nagy-Britanniában mintegy száz, illetve hetven éve művelt, kiemelt prioritást élvező kutatási irányzat.

Ami a hazai kutatásokat illeti, melyek tárgya az előző évszázadok történéseinek feltárása, – itt elsősorban a közvetlen előzmények-

re, a 17–18. századra utalva – megállapítható, úgy a könyvtörténeti és a sajtótörténeti, mint az olvasástörténeti kutatásokkal meglehetősen jól állunk. Sorozatok születtek, több évszázad könyves kultúráját feldolgozó kézikönyvek jelentek meg, egyes részkérdések tanulmányokban kerültek elemzésre, a felvilágosodás korának sajtóját több aspektusból feldolgozó munkák láttak napvilágot.<sup>2</sup>

Ugyanakkor a 19. század egészének feltárásáról ez egyáltalán nem mondható el. Ennek számtalan oka említhető, itt azonban elegendő arra utalni, hogy egészen 2007-ig e diszciplína kutatásának önálló, intézményesített tudományos műhelye nem létezett. Paradox

---

<sup>1</sup> A tanulmány az MTA Res libraria Hungariae Kutatócsoport kutatási programjának keretében készült. Plenáris előadás formájában elhangzott a Hajnal István Társadalomtörténeti Kör 2009. augusztusi, miskolci konferenciáján. Idegen nyelvű változata megjelent a Lucien Febvre & Henri-Jean Martin *L'Apparition du livre* című művének 50. évfordulójára szentelt tanulmánykötetben (Lipták, 2009, 253–268.)

<sup>2</sup> Nem célunk, hogy az általunk felvetett hazai kutatási irányok és témák esetében kapcsolódó bibliográfiai

adatokkal szolgáljunk. Válogatásunkban kizárólag arra szorítkozunk, hogy egy-egy korszakot összegző vagy emblemikus alkotásokra hivatkozzunk, illetve az általunk megjelölt kutatási irányokhoz illeszkedő új tudományos eredményeket közlétevé néhány releváns tanulmányra irányítsuk a figyelmet. Ami a legújabb külföldi kutatási irányzatokat és azok eredményeit illeti, arról a szerző egy másik, sajtó alatt lévő tanulmánya szól (Madas – Monok, 2003; Monok, 2010, 141–157.; Kókay, 1983; Lipták, 2001, 10–24.).