

## A krisztallográfia nemzetközi éve

A huszadik század elején a kémia majdnem teljes mértékben tapasztalati tudomány volt. Mengyelejev periódusos rendszere, a molekula és a kémiai kötés fogalma adott ugyan támpontot a rendkívül szerteágazó ismeretek rendezéséhez, de egy kísérlet tervezése inkább ösztönösen, mint tudatosan történt. Jelentősen változott a helyzet, amikor a kristályokon elhajló röntgensugár által egy fényérzékeny lemezen kirajzolt mintázat matematikai elemzésével meg lehetett ismerni a vizsgált rendszerek térszerkezetét. Először az egyszerű, kisebb-nagyobb gömbökből összeálló ionkristályok, majd kemény munka és a számítástechnika fejlődésének eredményeképpen a szerves molekulák térszerkezete is megismerhetővé vált. Ez tette lehetővé a molekulák valóságához közelebb álló modelljeinek megszerkesztését, a kémia alapjául szolgáló kvantummechanikai egyenletek megoldását, a folyamatok mélyebb megértését és tervezését. A biológia világában térbeli molekulamodellek nélkül nem lehet mélyre ásni, a térbeli szempontok vizsgálata a kémia meghatározó jelentőségű részévé vált. Ma a krisztallográfia aligha túlbecsülhető jelentőségű szerepet játszik a molekulák térszerkezetének felderítésében a szilárd anyagokban fennálló rend vizsgálatában. Művelői – kezdetben fizikusok, később kémikusok, ma már egyre több biológus is – a század folyamán sorra oldottak meg korábban megközelíthetetlennek ítélt problémákat. Ezt mutatja a Nobel-díjak sora, melyeket krisztallográfiai kutatások eredményeiért ítéltek oda. Nem meglepő tehát, hogy a Nemzetközi Krisztallográfiai Unió 2014-et a krisztallográfia nemzetközi évének nyilvánította. Ennek keretében a tagországok, így Magyarország is különböző rendezvényeket szenteltek a szakterületnek, melyeken felmérték a jelenlegi állapotot, a lehetőségeket és a kihívásokat. Hazánk nem áll rosszul a módszer alkalmazásában, mely nálunk viszonylag korán meghonosodott. A fejlődés a szilikátásványok szerkezetének meghatározásával kezdődött, a szerves kémiai alkalmazások után betört a hazai szerves és gyógyszerkémiaiba is, ahol mára szinte rutinná vált. A röntgen-diffrakciós szerkezet-meghatározás fontos része lett a biokémiai kutatásoknak, a fizikusok pedig több új vizsgálati és számítási módszert dolgoztak ki. A témának szentelt ankéton a téma jeles hazai művelői foglalták össze az elmúlt évek eredményeit. A fizikához közelebb álló vizsgálatokról szóló beszámolókat a *Fizikai Szemlében* olvashatjuk, míg az alábbi összeállításban két cikk a kis molekulákkal foglalkozik, további három témája pedig a fehérjék térszerkezetének vizsgálata. Íme, a magyar kémiai krisztallográfia egy lenyomata!

Náray-Szabó Gábor