

Az atomok „illúziója”
és a molekulák realitása között
félúton: változatok négy elemre
in memoriam Kajtár Márton¹

Vajon mi jelent nagyobb mentális kihívást: elképzelni azt, hogy egy tárgy akár végtelenszer is kettéosztható – a hangsúly a végtelenen van –, vagy az, hogy van egy olyan mérettartomány, amely után az osztott rész(ek) már minőségileg eltérnek az eredetitől? Nehéz elgondolni és mélységében felfogni azt, hogy az üres tér és az idő folytonos (nem diszkrét), és végtelenszer osztható anélkül, hogy bármely osztást követően minőségi változás jönne létre. Egyanakkor ebben a téridő-kontinuumban^{2,3} a tárgyak egyike sem folytonos. Vegyünk például egy doboz kockacukrot, amely előbb kockákra, azután kristályszemcsékre, majd mikro-, azt követően pedig nanométeres darabokra osztható szét. Bár az osztással keletkező darabok egyre kisebbek, ezért egyre „élesebb” eszközökkel tudunk csak aprítani, a munkához pedig egyre nagyobb felbontású mikroszkópok szükségesek, az ideig mégsem történik lényeges átalakulás. Az eredeti kristálycukrot oszthatjuk akár 25 egymást követő lépésben, ám számottevő minőségi változás csak akkor következik be, amikor eljutunk a kristályt felépítő molekula szintjéhez, a nanométer (10^{-9} m) méretű szacharózmolekulához. Ha viszont már elkülönítettünk egyetlen szacharózmolekulát, akkor azt nem tudjuk tovább osztani anélkül, hogy minőségi változás be ne következne. A szacharózt kettévágni ugyan nem lehet, de könnyen ketté-hidrolizálhatjuk, és így a molekulát felépítő két egységét, a D-glükóz- és a D-fruktóz-molekulákat kapjuk, amelyek már eltérnek nemcsak a kiindulási szacharózkristálytól, de egymástól is. A talán legismertebb D-glükóz (szőlőcukor) 6 szén-, 6 oxigén- és 12 hidrogénatomból épül fel, azaz eljutunk a periódusos rendszer elemeihez, azon belül is a címben szereplő négy elemből háromhoz (Kajtár Márton: *Változatok négy*

elemre, Gondolat Kiadó, 1988). Az atomról – az *atomosz* görög szó jelentése oszthatatlan – ma már tudjuk, hogy osztható, hogy nem a legkisebb kvantumegység, hiszen szubatomi részecskékből épül fel. A protonok, neutronok és elektronok közül csak az elektron elemi részecske, a proton és a neutron oszthatók.

A periódusos rendszer elemei tehát mind tovább oszthatók, így nem képezik az anyag fundamentumát még akkor sem, ha a kémikus sokrétűen és kreatívan tud az atomok szintjén gondolkodni a molekulákról, belőlük molekuláris, sőt akár makroszkopikus tulajdonságok tucatjaira következtetni. A kémia, a biokémia, a nano- és polimerkémia mint diszciplínák tehát valahol az atomfizika (kvantummechanika) és az asztrofizika között helyezkednek el. Az előbbi a mindent felépítő, mindenben jelen lévő mikrokozmosz alkotóira fókuszál, míg az utóbbi a „felettünk” elhelyezkedő csillagos égen át a Tér, az Univerzum mibenlétét kutatja. Weöres Sándor híres sora – *„Alattad a föld, fölötted az ég, benned a létra”* – jól érzékelteti ezt az inspiráló vertikumot, az emberi kíváncsiságban rejlő lehetőséget, azt, hogy a tapasztalás és a gondolkodás (kogníció) eszközével megismerjük a föld és az ég titkait, az asztrofizika és az atomfizika rejtélyeit.

Legjobb tudásunk szerint az Univerzumot (mások szerint a Multiverzumot) 96%-ban a sötét anyag és a sötét energia tölti ki, amelyek közül egyik sem azonosítható a 150 éve lefektetett és azóta kiegészített periódusos rendszer elemeinek egyikével sem. A kémikus otthonosabban érzi magát a megmaradt 4%-kal, amely lényegében a periódusos rendszer első periódusának (sorának) 2 eleme, a hidrogén (H) és a hélium (He). Az űr üressége, a csak két elem jelenléte előbb csalódottsággal és hiányérzettel, utóbb szorongással tölthet el minket. Mintha megállt vagy talán el sem indult volna az abiogenezis? Mintha csak a magfúzió háttérét adó H-atom (75%) megalkotására szorítkozott volna a természet? Csak a csillagok tüzelőanyaga, a H és „égéstermék”, a He (24%), valamint e fúziót kísérő „kellékek” lennének csupán jelen a világban? A „legeterjedtebb” oxigén- (0,06%) és szénatomok (0,03%) mellett az összes többi elem együttesen ~0,11%-ot ha kitev. *Fö-löttünk az ég* sötét, üres és általában hideg, néhol viszont fényes és nagyon meleg, de összességében elég unalmas hely lenne tehát?

Látszólag nem jobb a helyzet „lent” sem. Ernest Rutherford atommodellje szerint az atom elektronfelhője „üres” (>99%), a

¹ A cikk tisztelgés a 90 éve született Kajtár Márton (1929–1991) sztereokémikus szellemi és emberi nagysága, valamint *Változatok négy elemre* című könyvének originális világlátása előtt.

² A folytonos téridő összekapcsolt fogalmából, nevezetesen abból, hogy nincs külön tér és idő, csak ezek csatolt létezése, kiolvasható (vagy legalábbis erre rimél) a „*creatio ex nihilo*” tanítása, mely szerint a szabadon és a semmiből teremtettt anyag értelmezhetetlen az időn kívül. Más szóval Isten a térrel egyszerre idő(ke)t is teremtettt.

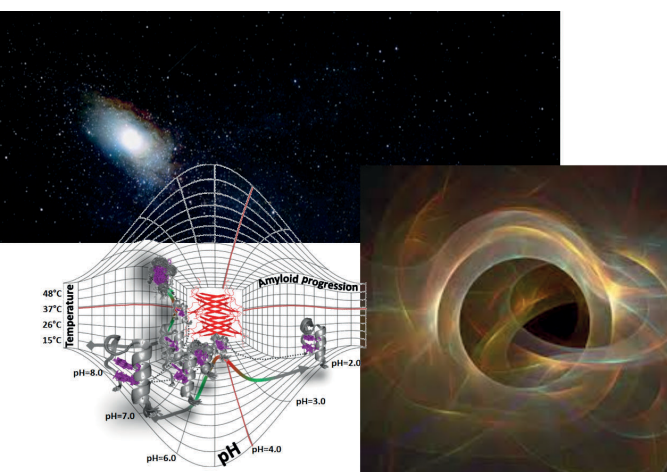
3 Fizikusok egy csoportja meggyőző érvelésszerzt fejlesztett ki a (szuper)húr elmélet(ek) létezése kapcsán, amelyet *M*-elméletnek neveznek – egy 11 dimenziós térben írják le azt –, és magát a „teret” is kvantáltan fogják fel. Céljuk, hogy egyetlen kongruens keretrendszerben írják le mind az általános relativitáselméletet, mind a kvantummechanikát, s így az összes erőhatást egyetlen elméletbe sűrítsek.

Uup	Pb	Bi	Po	At	R
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm
Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er
Tm	Yb	Lu			

pozitív atommagban lévő protonok és neutronok átmérője csekély ($d \sim 10^{-15}$ m), az elektron „mérete” pedig szintén a $\sim 10^{-15}$ m mérettartományba esik. A kémikus nem érzi magát otthonosabban akkor sem, ha a periódusos rendszer elemeinek alkotóira tekint, ha a proton és a neutron belsejébe „néző” részecskefizikusra figyel. Hiszen az az érzésünk támad, hogy a femtométer ($\sim 10^{-15}$ m) és az attométer ($\sim 10^{-18}$ m) mérettartományba zsugorodó szubsztancia ott egyszerűen „elenyészik”, megszűnik a szó klasszikus értelmében anyagnak lenni. Ugyanis a proton és neutron tömegét az azt felépítő 3-3 kvark össztömege csak $\sim 1\%$ -ban teszi ki. A „hiányzó” tömeg 99%-át tehát a kvarkok kinetikus energiájának és az azokat összetartó gluonmező (gluontér) energiájának összegében, az $m = E/c^2$ összefüggés értelmében kell keresnünk. Az energiába kódolt, abban manifesztálódó tömeg fogalma hétköznapi értelemben véve felettébb kontraintuitív, még akkor is, ha sem a femto- és attométer, sem az ilyen méretű proton és neutron belsejébe „látó” (azaz: már ilyen *de Broglie*-hullámhosszú) elektron ~ 50 GeV-nyi energiája nem a hétköznapiakban megszokott és használt energia- és távolságegységünk. Mégis hátborzongató az üres fent és lent megsejtése.

„Ádám: Örjögő röptünk, mondd, hová vezet?

Lucifer: Hát nem vágytál-e menten a salaktól, magasb körökbe, honnan, hogyha jól értettelek, rokon szellem beszédét, hallottad? Ádám: Az igaz, de ily ridegnek, nem képzelém feljőik útamat. E tér oly puszta, olyan idegen, mint hogyha szentségsértő járna benne...” (Madách Imre: Az Ember tragédiája, 13. szín)



1. ábra. A molekulák realitása az Univerzum üressége és az atomok „illuziorikus” volta közé szorulva található

Niels Bohr, Erwin Schrödinger és mások munkájának köszönhetően a kémia kvantitatív elmélete, a kvantumkémia jegyében az atommagokat és az elektronokat **szétválaszthatjuk**. Az **atommagokat** a **klasszikus** mechanika törvényei szerint, míg az **elektronokat** a **kvantummechanika** diszciplínájával összhangban kezeljük. A „rögzített” atommag-koordinátáknak köszönhetően a kémikus így sokkal kényelmesebb helyzetbe kerül, hiszen úgy rajzolhat molekulaszervezetet, úgy beszélhet molekulakonformációról és -konfigurációról, hogy közben az elektronok hullámtermészetének figyelembevétele mellett relatíve helyes és a mérésekkel összevethető pontosságú számolásokat és megfigyeléseket végezve hasznos információkat gyűjthet a molekulákról. Ha nem is olyan lankás és otthonos ez a „kémiai tér”, mint Micimackó százholdas pagonya, de megjelenik benne a **potenciálisenergia-felszín**, **PEF**, a modern kémikus centrális magyarázó

eszköze. A 21. század második évtizedének végén – megállva félúton az atomok „illúziójának”⁴ és a molekulák realitásának határánál – a kémikus minden pillanatban ott billeg a newtoni mechanika klasszikus világa és a kvantummechanika „ingoványos” területe között.

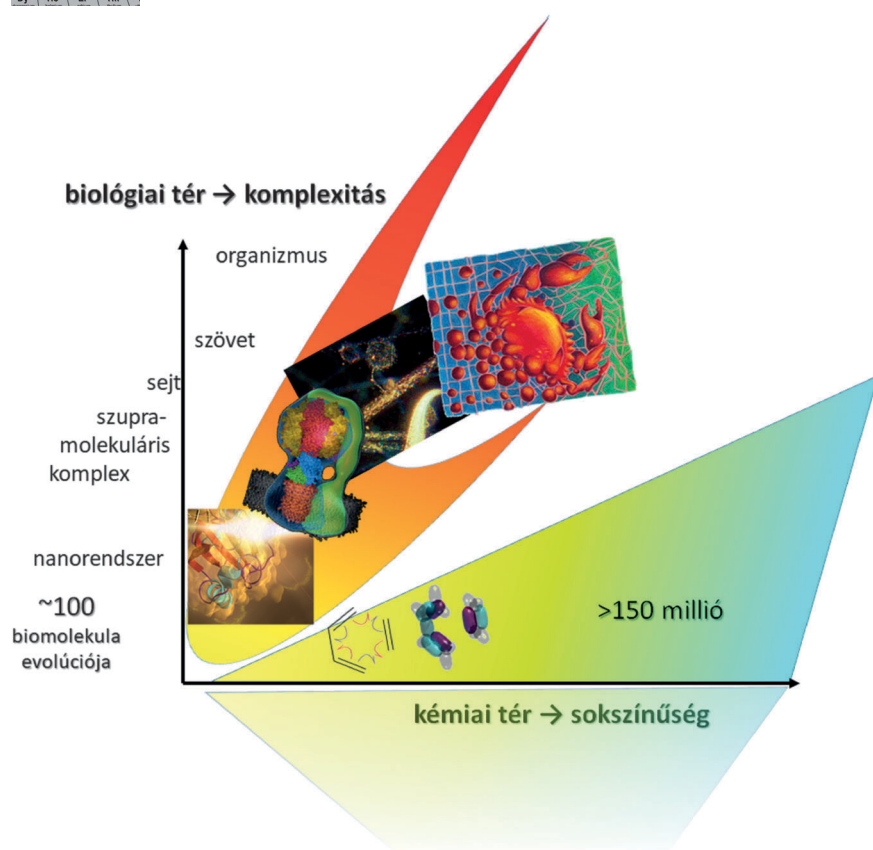
Mi csodásabb az embernél? – kérdezhetnénk, és valóban. Bár az elemek közül az oxigén- és a szénatomok csak tízezrelék nagyságrendben vannak jelen az Univerzum egészében, ez az arány jelentősen megváltozik akkor, ha előfordulásukat akár a Földön általában, akár az emberi test egészében nézzük. Durva becslésként megállapíthatjuk, hogy a mintegy 37 billió (10^{12}) sejtünk 99%-ban csak a címadó négy elemből épül föl. Mintegy 63% (10 tömeg%) hidrogénatom, 24% (65 tömeg%) oxigénatom, 12% (18 tömeg%) szénatom és 1%-nyi (3 tömeg%-nyi) nitrogénatom teszi ki a mintegy 7 kvadrilliárdnyi (10^{27}) atomot egy átlagos emberi test esetében. Ahogy a korábban említett GeV és a femto- és attométer egységek is távol esnek a hétköznapi mértékegységeinktől, úgy a 37 billiónyi sejt vagy az ezeket felépítő 7×10^{27} darab atom számával is érdemes barátkozni. Ha például ezt a sejtmennyiséget láncfűzerbe rendeznénk, akkor az mintegy tizenhatszáz érné körbe a Földünket. S ha gondolatban a sejteket felépítő atomokat raknánk sorba egymás mellé, akkor az így kijelölt táv a Föld-Nap távolság közel egymilliószorosa lenne, vagyis mintegy négyszer lenne hosszabb a mi Napunkhoz legközelebb eső Proxima Kentauri csillag távolságánál.

A szénből, oxigénből, nitrogénből és hidrogénekből felépülő molekulák sokaságának kialakulása – amit szokás a kémiai tér evolúciójának nevezni – az elmúlt 4 milliárd év alatt merőben másképpen alakult, mint ahogy a „biológiai tér” molekulái fejlődtek. A kémiai tér méretére a Földön ma még csak óvatos becsléseket tehetünk, noha mára több mint 150 millió molekulát katalogizáltak és írtak le. Azonban már e sokaság elemzése is rámutat arra, hogy a szerves molekulákra a szerkezeti sokszínűség és a nagymérvű szerkezeti változatosság a jellemző. Ezekről a tulajdonságoktól határozottan eltér a biológiai tér földi evolúciója során hangsúlyossá vált pár száz „alap” szerves molekula (cukrok, aminosavak, nukleinsavak stb.), amelyek (ön)szerveződése és komplex evolúciója tette lehetővé a poliszacharidok, polipeptidok, fehérjék és polinukleotidok megjelenését és diverzifikációját. A sejtepitő szerves és biomolekulák száma közel sem olyan nagy, mint ahogy azt elsőre gondolhatnánk. Kis túlzással leszögezhetjük, hogy csupán pár száz alapvegyület összetett nano- és mezorendszere képessé vált arra, hogy hordozza az élet amúgy nehezen definiálható csodáját. Jó példa erre a huszonhárom humán kromoszómáiban azonosítható, mintegy 20 000 génről leolvasott nagyjából százezer fehérje esete, amelyek mindegyike rendre ugyanabból a 20 fehérjeépítő aminosavból épül fel. Csupán csak 20! A sejteinket és szöveteinket alkotó szupramolekuláris fehérjék mindegyike tehát kivétel nélkül az evolúció során valahogy – még nem ismert módon – kiválasztott 20 építőelem-ből („Lego-kockafajtából”) rakódik össze.

Az információ születésének, fejlődésének, hordozásának, átadásának és lecsengésének megértése kulcsfontosságú kihívás. Az információhordozás mibenlétének tanulmányozása rávilágít

⁴ A világmindenséget összetartó erő és rendezőelv, a Logosz, amelyre jellemző, hogy „Mindén általa lett, és nála nélkül semmi sem lett, ami lett” (Jn 1,3), azaz Isten, a semmiből, szabadon, egy konkrét, de mégis ismeretlen időpillanatban teremtette meg az Univerzumot. Talán a keresztény teológia e tanítására („creatio ex nihilo”) – a semmiből való teremtésre – reflektál az atomok klasszikus értelemben vett anyagának üressége ugyanúgy, mint magának az Univerzum „ürességének” a ténye is. Ez a különös üresség az, amit a szerző **illúzió**ként aposztrofál.

Uu	Po	Bi	Po	At	Ra
Uu	Fl	Uu	Uu	Uu	Uu
Dy	Ho	Er	Tm		



2. ábra. A földi körülmények között a kémiai és a biológiai tér eltérő módon fejlődött az evolúció évmilliárdjai alatt: míg a szerves molekulákra általában a szerkezeti sokszínűség a jellemző, addig az evolúció során alig pár száz „alap” szerves vegyület (cukrok, aminosavak, nukleinsavak stb.) és polimerjei kaptak kiemelt hangsúlyt

arra, hogy az önmagában is mennyire kötődik a térhez és időhöz, más szóval arra, hogy mennyire lehetetlen az a téridőn kívül:

i) Időben lineáris egydimenziós (1D) információ például a hang- (rezgés) – jeladás, ének vagy beszéd –, amely időben véges, lecseng és elenyészik. Arra alkalmas módszerrel, linearizált formában kódolva rögzíthetjük analóg módon a hangzásban rejlő információt, például mechanikusan, „pöckök és barázdák” segítségével a gramfononon, hanglemezen, verkli vagy gépzongora forgó munkahengerén.

ii) A hang és a beszéd információjának kódolása elvezet az információ térbeni rögzítéséhez, melynek lineáris (1D) formája maga az írás, vagy zene esetében a kottakészítés. Agyagtáblára és papiruszra már sok ezer éve rögzítünk információt, ám az számított igazán forradalmi lépésnek, amikor ennek során megjelentek az absztrakt kódok. Nyomon követhető például a számok esetében, amikor a konkrét tárgyak (kancsó, madár, kunyhó stb.) lerajzolása mellett már betűjelekként is rögzítették a hangok absztrakt formáit. Az írás illetően fejlődése lehetővé tette a tömör és kevés elemű szimbólumkészlet – akár csak 18 betű – kialakulását, s ezáltal vált leírhatóvá bármely tárgy vagy fogalom információtartalma a megfelelő szavakon keresztül. Mindeközben az emberi beszéd, írás és végeredményben a gondolkodás absztrakt jellege hihetetlenül megerősödött.

iii) Kép (rajz vagy festmény) formájában 2D információt régóta rögzít az emberiség, gondoljunk csak Lascaux vagy Altamira csodálatos falfestményeire, melyeket az emberi agy és szellem közvetlenül és nem linearizált módon dolgoz fel. A 2D szintű információ direkt kódolása nem új jelenség tehát, sőt azt gépek vezérlésére – vezérlő utasításként – a 18. század óta bizonyosan hasz-

nálták, például a takácsok szövőszékeik automatizálása érdekében. E műszaki megoldás 20. századi analógiának tekinthetjük a lyukkártyás számítógépes információhordozást.

iv) Évezredek óta rögzítenek 3D formában is közvetlenül információt archaikus agyagplasztikák, kőszobrok és fémöntvények formájában, függetlenül attól, hogy olyan nagyok-e, mint Stonehenge kövei vagy a New York-i Szabadság-szobor, vagy éppen olyan parányiak, mint egy asszír fülbevaló vagy nyakék. A mikrokozmosz világában a molekulák rendre 3D információt hordoznak. Az atommagok jellege és elhelyezkedésük sztereokémiája határozza meg az elektronok térbeli eloszlását, kódolja a 3D információt. Ha egy izolált molekulát vagy egyetlen molekulafajta homogén rendszerét tekintjük, akkor konstans peremfeltételek mellett, gyakran időben állandó kóddal, 3D molekuláris információval van dolgunk. Ám ezen 3D objektumok további különös sajátosságokkal rendelkeznek, olyanokkal, amelyek a makroszkopikus „rökonaira” nem jellemzők. Hiszen az a 3D kód nemcsak dinamikus – az atommagok belső relatív mozgása még 0 K-en sem szűnik meg –, de gyakran tranziens is. Alkalmas heterogén molekuláris rendszerek és/vagy változó peremfeltételek esetén ugyanis ez a térbeli információ átalakul, és új 3D kód születik, amelynek háttérében a molekuláris reaktivitás vagy más szóval a komponensek kémiai re-

akciója rejlik. Az új atommag- és elektronszerkezet új térbeli 3D információt kódol, amely új molekuláris sajátosságok kifejlődéséhez vezethet. Ellentétben a makroszkopikus világ tárgyival, amelyek ütközése ritkán konstruktív, a molekulák esetében a termikus mozgás és reaktivitás nyújtotta lehetőségből merőben új entitás keletkezhet, megteremtve ezzel az evolúció molekuláris szintjét. A molekuláris evolúció manapság is szakadatlanul zajlik, ugyanúgy, mint jól ismert biológiai analógja a fajok esetében.

Ahol két molekula két reakcióra alkalmas része összekapcsolódott, ott alapvetően alakult át a molekula elektronszerkezete. Az új molekulát új kanonikus molekulapályák, új elektroneloszlás és elektronsűrűség fogja jellemezni, tehát a rész megváltozásával egyszerre az egész módosul. A polipeptid- vagy fehérjelánc kialakulásának szemléltetésére jó példa, ahogy a láncszemekből fűzér lesz: éppúgy kerülnek egymás mellé az aminosavak is, ahogy a láncszemek. Hasonló párhuzamot vonhatunk azzal is, ahogyan a Lego-elemek egymásmellettisége kiad egy összeépített új formát. De mert minden magyarázat sántít, a molekuláris építkezés kapcsán is hiányosak ezek az analógiák, mert a makromolekulában az építőelemek és láncszemek nem egyszerűen csak egymás mellé kerülnek a térben, hanem új molekulává olvadnak össze. Az aminosavak összekapcsolódása során tehát a rendre kialakuló amidkötések minőségileg új formát, új információszegmenst kódolnak, mert az elektronszerkezet alapvetően más lesz, mint a csupán egymás mellett lévő aminosavak összességéé. Érdemes megjegyezni, hogy a csak egymás mellé kerülő aminosavak N- és C-terminálisai között ($-NH_3^+$ és $-COO^-$) elektrosztatikus kapcsolat jön létre, amely segítheti az aminosavak térbeni orientációját ugyan, de biológiai körülmények között nem teszi lehetővé az

amidkötések kialakulását. Az új molekula tehát új információt hordoz, a megváltozott elektronszerkezet miatt megváltoznak annak térszerkezeti, konformációs és belső dinamikus jellemzői! A molekula egészének információtartalma tehát sajátos módon több, mint a részek együttese. Ezért egy molekula adott részének a befolyásolása vagy megváltoztatása elvben minden esetben a molekula egészét is befolyásolja, függetlenül a molekula méretétől. Makroszkopikus analógiáink ebben az esetben is sántíthatnak, hiszen azt gondoljuk, hogy például egy ház bővítése, egy szoba átalakítása vagy kifestése aligha befolyásolja a másik szoba méretét vagy kinézetét. Hasonló módon egy műszaki leírás utolsó bekezdésének megváltoztatása nem vonja maga után az első sorok tartalmának módosulását. Ám a molekulaszervezet és az elektroneloszlás olyan, mint a vers: sehol sem változtatható bűntetlenül, minden rím, minden versláb módosítása természetszerűen kihat a költemény egészére.

A molekulák további sajátása az, hogy a bennük kódolt információ nemcsak dinamikus és tranzienst, de adaptációra is képes a molekuláris környezet függvényében. A molekulák reflexív módon reagálnak a környezetüket alkotó további molekulákra akkor is, ha a kémiai reakció „elmarad”, ám egymás tér- és elektronszerkezetét gyenge kölcsönhatások révén befolyásolják, amely hatások ugyan reverzibilisek, ám mégis kihatnak a szupramolekuláris rendszer (és így a hordozott komplex információ) egészére. Jó példa erre a fehérje térszerkezete (konformációja), amely a környezete függvényében változik. A fehérjék bizonyos közegben globuláris föltekeredettséget mutatnak, míg más esetben rendezettnak nevezett térszerkezetüket elvesztik, és ezáltal a hordozott molekuláris információ (pl. bioaktivitás) megváltozik vagy elvész. A termodinamika törvényeinek segítségével ezt a rugalmas adaptivitást számszerűsíthetjük a szabadentalpia mennyiségének változásával, amelyen keresztül a különböző konformer állapotok jellemezhetők és osztályozhatók. Egy példa kedvéért tekintsünk úgy a környezetfüggő molekuláris adaptivitásra, mint az élővilágban ismert szín- és alak-kamuflázsra. Számos rovar és hüllő képes arra, hogy páncélja vagy bőre színét, sőt alakját is álcázza, noha az önmagát álcázó állat általában nem hat vissza a környezetére, nem változik a békához hasonlóan az azt hordozó levél vagy faág színe vagy alakja. A molekulák esetében viszont az adaptáció kölcsönös, mivel nemcsak a fehérje változtatja alakját a vízben, de a vízmolekulák elrendeződése is változik, éppen a változó alakú fehérjemolekula miatt, annak közvetlen és közvetett környezetében. Ezek az egyre komplexebbé váló, molekuláris információt hordozó nanorendszerek mint egészek „törek-szenek” a szabadentalpia optimumát jelentő konfigurációra vagy „elhelyezkedésre”. Mivel földi körülmények között a molekulák leggyakrabban heterogén formában, kis és nagy molekulák sokaságában találhatók, ezért az adaptív és kölcsönható elemek hatalmas – valóban beláthatatlan méretű – rendszeréről kell minden esetben beszélnünk. Ennek az egész nagy rendszernek az információtartalmát kell egyként felfogva értenünk, és alkalmasint egy adott célnak megfelelően módosítanunk. Ma még nem tudjuk *a priori* megmondani, hogy az adott aminosav-szekvencia hogyan és milyen módon befolyásolja a térszerkezet(ek) dinamikus rendszere által kódolt információt. Talán erre belátható időn belül képesek leszünk, mégis e fontos áttörés is csak csepp lesz a tengerben. Mennyivel összetettebb az előző feladatnál az, ha egy fehérjét sejtes környezetében, sok tízezer molekula egymásra és az egészre gyakorolt hatása közepette akarjuk megismerni, megérteni, egyes beavatkozások hatásait tudományosan előre jelezni. Ám ha ezt a feladatot is sikerrel abszolválnánk, akkor is ott tá-

tong a nagy kérdés, nevezetesen, hogy mit jelent az információ-hordozás bővülése szempontjából az, amikor nem egy, hanem 37 billió sejt molekulái kerülnek egymással kölcsönhatásba, együtt alkotva meg az emberi testet. Ha mindez nem volna kellően komplex és egyben csodálatos, akkor ne feledjük azt sem, hogy mindez elsősorban szinte kizárólag csupán négy elem, a szén-, az oxigén-, a nitrogén- és a hidrogénatomok kombinálásával valósul meg.



Kajtár Márton (és a szerző) 1988-ban

Egy 0,5 mg adrenalinat tartalmazó Epinefrin injekció életment, amikor a megállt szívet újraéledtíti, vagy lefékező egy életveszélyes allergiás rohamot. A patikákban ma kapható ~2–3000 hatóanyag többsége hasonló szerves kismolekula – amelyek szintetikus termékek – az elmúlt 100–130 év szerves és szintetikus kémikusainak munkáját dicséri. Ám a szintetikus kémia messze több és szerteágazóbb a fenti példánál, hiszen ruházatunk, okoseszközeink, járműveink, és ha tovább vesszük, akkor életünk szinte minden területének használati, dekorációs stb. tárgyai szintetikus anyagok okosan összerakott rendszeréből állnak. A polimer- és a nanokémia, valamint az anyagtudományok akár ipari volumenben gyártott termékei mind a molekuláris megfontolások és szaktudás eredményei. Napjainkban a szintetikus biológia látványos előretörésének lehetünk szemtanúi, remélve, hogy a fehérjekészítmények (pl. MAB-ok) segítségével korábban gyógyíthatatlannak diagnosztizált betegségeket lehet kezelni. De a létfontosságú környezetvédelem tartós és komoly megoldásainak jelentős része is a kémikusok leleményességétől, a molekuláris eljárások „zöldülésétől”, az új technológiák és molekuláris megoldások megjelenésétől függ. A 21. század elejére a molekuláris látásmód, tudás és technológia realitássá vált, ezer szállal szövi át életünket, gazdaságunkat és jövőnket.

A kémikus tehát látszólag ügyesen vezetett távolabbra az írás elején említett súlyos tudományfilozófiai dilemmák vizétől, az Univerzum úrjének riasztó csendjétől és az atomok illúziójának Szküllá és Kharübdiszétől. „*Fecseg a felszín, hallgat a mély*” – hiszen az előbb oly sikeresnek aposztrofált molekuláris tudományok tárgyát, a molekulákat felépítő atommagokat azok az elektronok tartják össze, melyek mint elemi részecskék kvantáltak, és hullámtermészetük révén klasszikus módon nem kezelhetők. De aggályos lehet az is, hogy az atommagokat „álló helyzetű” klasszikus részecskéként kezeljük, az ismert valóságot a sikeres Born–Oppenheimer-közelítésmód alapján leegyszerűsítjük pusztán azért, hogy a kvantumkémia eredményeit egyszerre érezzük sikeresnek



(azaz: relatíve pontosnak) és mégis látványosnak, illetve könyvebben értelmezhetőnek. Hiszen nemcsak kvantumfizika és kvantumkémia, de kvantumbiológia is létezik, mivel egyes (élet)-jelenségek megértése kvantumos magyarázatot igényel. A logika azt mondatja velünk, hogy a fenti diszciplínák egymásba ágyazottsága miatt kell ilyen jelenségeknek lenniük. Lehet, hogy nem akarjuk vagy nem tudjuk ezeket kellő mélységben kezelni ma még?

Hol és merre vannak fontos, az élet egyes jelenségeinek megértése során kvantumos közelítésmódot igénylő kérdések? Az élet ugyanis nem közel 0 K-re hűtve, nem majdnem tökéletes vákuumban, nem a fénysebesség 99%-án zajlik, ott, ahol a részecskefizikusok dolgozni szeretnek azért, hogy egy-egy kvantumjelenséget a lehető legkisebb zaj mellett figyelhessenek meg. A karikatúrák szintjén persze létezik a „kvantumsfelő”, aki képes trükkösen lába közé véve mégis kikerülni az útjában álló fát. Ez a kép vicces, de egyben nagyon is kontraintuitív! Bizonyosan nem ilyesmiről szól a kvantumbiológia problémafelvetése. Idevágó kérdésekről olvashatunk már Erwin Schrödinger „Kvantum (effektusok) az életben” (*What is Life?*/Cambridge Univ. Press) című, 1944-es könyvében, vagy a *Life on the Edge: The Coming of Age of Quantum Biology* című alkotásban (Jim Al-Khalili & Johnjoe McFadden/Bantam Press, 2014). A következő néhány példában különösen idekívánczok a megfigyelés komplexebb, kvantumbiológiai értelmezése:

i) A Napban zajló fúziós reakció magyarázata csak az alagúthatás (*quantum tunnelling*) figyelembevételével válik teljessé, de ugyanígy a hidrogénhidban lévő proton átadása a DNS két szálát összetartó, például adenin-timin bázispár esetében is csak az alagúthatással lesz teljes, amely esetben, ha rossz oldalra kerül a proton, akkor az mutációhoz vezethet. (*Nota bene* a mutáció az evolúció záloga.) De az alagúteffektus jelensége feltételezhető egyes enzimek elektron- vagy protonszállító képessége mögött is, azok sikeres átadása esetén, és segít értelmezni azt, hogy ho-

gyan tud egy katalizált reakció ilyen gyors, szelektív és hatékony lenni.

ii) Baktériumokban (*chlorophyl, reaction center*) a kvantumkoherencia jelensége figyelhető meg egyes fotonok befogása és továbbadása kapcsán. E jelenségnek köszönhetően valósulhat meg hatékonyan, párhuzamos reakcióutak segítségével egyszerre az a folyamat, amely során a foton energiája sikerrel konvertálódik „kémiai energiává”.

iii) A vörösbegy (*European Robin*) vándormadár a Föld mágneses terének segítségével tájékozódik úgy, hogy repülés közben valószínűleg kihasználja a kvantum-összefonódás jelenségében rejlő navigációs lehetőséget. Úgy tűnik ugyanis, hogy a Föld gyenge mágneses tere befolyásolja a madárban éppen azt a kémiai reakciót, amely segíti a vándormadár térbeli tájékozódását. A vörösbegy retinájában a FAD kofaktort tartalmazó kriptokrom fehérje (cryptochrome/Cry4) tartalmaz egy olyan elektronpárt, amelyről kimutatták, hogy kvantumosan csatolt (Ritz T.: *Quantum Effects in Biology: Bird Navigation. Proc. Chem. 2011; 3: 262–275*).

A periódusos rendszer megszületésének 150. évében bátran hivatkozhatunk D. Mengyelejev mondására: „Az idővel tévesnek bizonyuló hipotézis is jobb, mint a semmilyen.” Különösen igaz lehet ez akkor, amikor egy megérzés később kvantummechanikai szintű alátámasztást nyer. „*Nature isn't classical, dammit, and if you want to make a simulation of nature, you'd better make it quantum mechanical, and by golly it's a wonderful problem, because it doesn't look so easy*” – állítja Richard Feynman. Az atomok „illúzióját” megérteni kemény dió, ám a molekulák klasszikus realitása csak ideig-óráig tartható fent. Bizonyos, hogy a jövőben egyre messzebb lehet jutni azon az úton, ahol egyre komplexebb makromolekulák és egy nagyobb (élő) rendszerek ma még nehezen érthető jelenségeit kvantumos magyarázattal indokolhatunk meg. Hiszen „... a világ örök misztériuma a megérthetősége... csodás az a tény, hogy megérthető...” – mondta Albert Einstein.

Az ELTE Kémiai Intézet Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratóriuma és az MTA-ELTE Fehérje Modellező Kutatócsoport munkatársai (2019), a szerző munkatársai és barátai a molekulák megismerésének kalandos útjain

