

# GONDOLATOK A „MOLEKULÁK TÉRBEN ÉS IDŐBEN” MOTTÓ KAPCSÁN

Perczel András

az MTA doktora,

ELTE TTK Kémiai Intézet Szerkezeti Kémiai és Biológiai Laboratórium  
perczel@chem.elte.hu

A megállapítás, miszerint a molekulák térben és időben létező objektumok, egyszerre triviális és elgondolkoztató! Triviális azért, mert a molekulák, makroszkopikus világunk objektumaihoz hasonlóan szintén szerves részét képezik a háromdimenziós térnek, és időbeliségük, ha másért nem, hát véges voltuk miatt teljesen kézenfekvő. Ennek ellenére valóban olyan evidens megállapítás, hogy háromdimenziós világunkat háromdimenziós parányok töltik ki? Aligha gondoltuk ezt mindig érvényes tételnek. Százötven év sem telt el azóta, hogy két kémikus, a holland Jacobus Henricus van 't Hoff és a francia Joseph Achille Le Bel szinte egyidőben, ám egymástól teljesen függetlenül, elkezdte boncolgatni a molekulák térbeli jellegét. Ahogy azt Le Bel maga írja a felfedezését megelőző tényekről, ma már szinte kézenfekvőnek látszik, hogy azok értelmezése, mintegy explicit módon feltételezi a térbeliséget: „Pasteur és mások munkája teljes mértékben feltárta a molekuláris szimmetria és a forgatóképesség közötti kapcsolatot. Ha az aszimmetria csak a kristályos molekula sajátja, csupán a kristály lesz aktív; ellenben ha a kémiai molekula aszimmetrikus, az oldat mutat forgatóképességet

és gyakran a kristály is, ha a kristály szerkezete megengedi, mint például a sztrichninszulfát és az amil-amin timsójának esetében” írja Le Bel (Le Bel, 1874; Leicester – Klickstein, 1963). E leírásból világosan kitűnhet bárki számára, hogy az oldatokat képező molekulák szimmetriatulajdonságai miatt szükség-szerű a feltételezés, hogy háromdimenziós objektumok! Ma ezt evidenciának, a molekuláris szintű kémia egyik princípiumának fogadjuk el, de azért ne feledjük, hogy ez a felismerés történelmi jelentőségű volt, és azt sem érdemes elvitatni, hogy az ebből és hasonló tényekből levezetett későbbi megfogalmazás igazi virtuóz elmékre utal. Mert – bár sokan láthatták és ismerhették a pasteuri megfigyelést – mégis csak nekik jutott eszükbe ezekből a tényekből kiindulva letenni a molekuláris szintű sztereokémia alapjait. Milyen igaz Szent-Györgyi Albert frappáns megfogalmazása: „A tudós az az ember, aki miközben mászkál a világban, ugyanazt látja, olyan dolgok jutnak eszébe, mint előtte soha senkinek.” (Kassai, 1997)

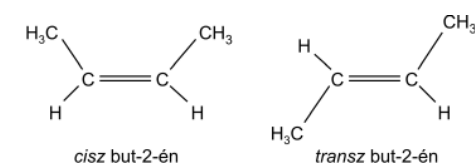
De vajon nekünk, kémikusoknak, a világban körülnézve eszünkbe jut-e annak mole-

kuláris felépítettsége? Amikor legutoljára teánkba mézet kanalaztunk, gondoltunk-e arra, hogy az abban jelenlévő monoszacharidok közül a fruktóz (38,2%), a glükóz (31%) vagy a diszacharidok közül (-9%) a szacharóz, a maltóz, az izomaltóz, a maltulóz, a turanóz és a kojibióz szerkezeti képlete hogy is néz ki pontosan? Valószínűleg nem! És akkor az sem olyan meglepő, hogy nem ötlük szemünkbe a  $\beta$ -D fruktofuranoz kapcsán a molekula elektronsűrűségének térbeli eloszlása vagy az arra könnyedén rátérképezhető elektrosztatikus potenciálerterek nagysága. Miért van ez így? Talán azért, mert a primer tapasztalás szintjén a méz még számunkra is csak egy sűrűn folyó, édes, aranyárga folyadék, nem pedig egy kolloid, így elsősorban az ízére, nem pedig kémiai alkotórészeinek térszerkezetére gondolunk. Mindez persze a tapasztalatainkból levezethető *imprinting*, más néven a tanulási folyamat során kialakított „bevéődés” eredménye. Ugyanis a molekulákkal való személyes kapcsolataink száma a szó hétköznapi értelmében kevés! Miközben minden, ami körülvesz, vagy ami bennünket is felépít, molekulák – valamilyen szinten rendezett – halmaza; aközben erről a mikrovilágról, a parányok „életéről” közvetlen tapasztalataink nincsenek. Egyszerűen azt is mondhatnánk, hogy a molekuláris megtapasztalás szintjén ingerszegény környezetben élünk. Ennek a közvetlen tapasztalatnak a hiánya teszi nehéz-zé a megismerést és megértést, és ennek következtében a kémia atomi vagy molekuláris szintű tanítását is.

Könnyű volt Isaac Newtonnak, mert ő mint Ádám és Éva vagy Tell Vilmos, láthatta megfigyelése tárgyát; az almát! Ám ugyanebben az almában rejtve van mindaz, ami a kémikust érdekli. Az almát: színét, formáját, sőt ropogósan édes ízét közvetlenül megta-

pasztalhatjuk, ám az almát felépítő molekulák közvetlen megismerése nem lehetséges. A kutatói elme leleményes, és ott, ahol az evolúció során kialakult szerveink nem kellően alkalmasak a közvetlen megismerésre, készüléket tervez és épít, hogy az észlelés határait kitolja. Látásunk spektrális tartománya korlátozott, de infravörös vagy ultraibolya tartományban látó egyszerű készülékekkel pótolhatjuk ezt a hiányosságot. Az 1950-es évektől nagyszámú olyan eszköz és készülék kifejlesztése történt, amelynek köszönhetően ma a szerkezeti kémia és biológia területén jobban látunk, mint valaha. Az itt hamarosan szóba kerülő diffrakciós eljárásokkal le tudjuk tapogatni a molekulák elektronsűrűségét, meg tudjuk határozni térszerkezetüket az őket felépítő mágnesesen aktív magok viselkedése alapján. Mindez mára lehetővé tette nemcsak a kémia vagy a biokémia, de az immunológia, a virológia, a növénybiológia és más fontos szakterület számára is, hogy kutatásaik tárgyát, a számukra fontos rendszerek molekuláris komponenseit feltérképezzék. Összefoglalva tehát: mára megnyílt a lehetősége annak, hogy nemcsak a kisebb molekulatömegű vegyületek, de az azokból felépülő akár sok száz vagy ezer kilodalton össztömegű szupramolekuláris rendszereket is atomi szinten megismerjünk.

Míg a merev térszerkezetű kismolekulák esetében (például 2-butén) a cisz- és transzizomerek megnevezése (1. ábra) már a XIX. század végére tehető (Johannes Wislicenus),



1. ábra

addig a hajlékony bután analóg térszerkezetivel, az ún. szinperiplanáris és antiperiplanáris konformációkkal csak az 1930-as években foglalkozott Vladimir Prelog. Mindkét vegyületre jellemző egyébként, hogy egyazon konstitúció esetében is *egynél több* téralkatot kell meghatározunk és leírunk. Ma már tudjuk, hogy a különböző 3D-térszerkezeteket – azaz lokális energiaminimumokat – potenciálisenergia-gátak választják el egymástól, amelyek nagysága szabja meg, hogy adott fizikai-kémiai paraméterek mellett izomerekkel vagy konformerekkel van-e dolgunk. Ha a különböző szerkezeteket elválasztó gátak magassága alacsony, akkor konformerekről beszélünk. Ez utóbbi esetben csak a különböző szerkezetek egyensúlyi rendszerének megismerését követően alkothatunk a molekuláról hiteles szerkezeti képet. A megkülönböztethető konformerekhez tartozó energiaszintek betöltöttsége az energiaeloszlásnak megfelelő. Hajlékony molekulák jellemzése során, a Boltzman-féle *determinisztikus* leírás módjában minden egyes konformer térkoordinátái mellé, szerkezetenként egy-egy *valószínűségi változó* is be kell vezetnünk. Ha ugyanezt a molekulát egy *sztochasztikus* felfogás szerint jellemezzük, akkor a molekuláris rendszer egyfajta „bolyongását” képzeljük el a konformációs altéren. Ilyenkor a pontos leírás megköveteli a hagyományos térkoordináták mellett az úgynevezett *időkoordináták* bevezetését is. Mindkét leírás mód – determinisztikus vagy sztochasztikus – közös abban, hogy a szokásos háromdimenziós térkoordináták mellett egy a negyedik dimenziót is megtestesítő új koordináta bevezetését teszi szükségessé.

Vannak merevebb vázú szerves molekulák, mint például egyes szteroidok; míg más típusok esetében – ilyenek például a polipeptidok

és fehérjék, az oligo- és a poliszacharidok és még nagyon sok más természetes makromolekula – inherens flexibilitás figyelhető meg. Az utóbbi típusú vegyületek vizsgálatára érvényes az a már korábban tett megállapítás, amely szerint csak úgy alkothatunk hiteles képet a molekulák térszerkezetéről, ha azok konformációanalízise esetén a konformerek dinamikus egyensúlyi elegyében szereplő szerkezetek közül mind többet meg tudunk különböztetni.

Jól érzékelhető tehát, hogy a legtöbb makromolekula jellegzetes téralkat-családokkal jellemezhető. Ez utóbbiak termodinamikai leírása mellett, azaz a konformer-családok megnevezésén túl, az egymásba alakulásuk kinetikai jellemzése is fontos rendszerparaméter. Ha például veszünk egy fehérjemolekulát, melynek feltekeredése jellegzetesen csak egynéhány másodpercig tart, ugyanennek a molekulának az aggregációja – nagy szerencsénkre – hosszú napokat vagy hónapokat is igénybe vehet. Tehát a fehérje „életére és mozgására” jellemző időskála egyik végén napok esetleg hónapok találhatók, olyan időtartamok, amelyek a mi életünkben is értelmes egységként kezelhetők. Ugyanakkor egy-egy fehérje harmadlagos szerkezetének kialakulását megelőzi a másodlagos szerkezetek feltekeredése, amely leggyakrabban már a másodperc milliomod részéig sem tart. Még ennél is gyorsabb a makromolekulák lazább részeinek, a hurkoknak és kanyaroknak billegő mozgása. Ezek a mi hétköznapi világunkhoz viszonyítottan igen gyors mozgások a parányok világában, ahol az elmozdulásokat nanométerben, azaz a méter egymilliárdod részében adjuk meg, nem is olyan gyorsak. Mindaz, ami a pillanat töredéke a számunkra, kelően hosszú idő ahhoz, hogy molekulák fel- és letekeredjenek, konformációs arányuk

és egyensúlyuk módosuljon. A makromolekulák forgó-haladó mozgása normális viszkozitási közegekben csak néhány nanoszekundumig tart, s ez idő alatt a molekula ugyanúgy megfordul saját tengelye körül, mint teszi azt a Föld 24 óra alatt. Ahogy a föld szögsebessége megmérhető, ugyanúgy egy-egy makromolekula szögsebessége is ma már meghatározható. A bukácsolva és forogva haladó molekulákat felépítő atomok sajátos belső mozgása az előbbinél száz vagy akár ezerszer is gyorsabb lehet, amely amúgy ultragyors mozgások még mindig közelébe sem érnek a kémiai kötések mentén megfigyelhető szakadatlan vibrációk sebességének. Jól érzékelhető tehát, hogy a parányok világa ugyanolyan dinamikus, mint a mi világunk, csak éppen ott azért minden egészen más. Így tehát a szerkezet és/vagy komponenseinek a különböző időskálán történő mozgásai nem mások, mint a molekulák életútjai térben és időben.

E rövid bevezető, áttekintő és ráhangoló gondolatok végén hadd emlékeztessem a tisztelt olvasókat Ludwig Wittgenstein egyik

híres mondására, miszerint „a nyelvem határai a világom határai.” (Wittgenstein, 2004) Ne feledjük, hogy ez utóbbi nem valami turisztikai tanácsadás, hanem egy igen fontos kijelentés, amelynek értelmében „amit nem tudunk mondani, azt gondolni sem tudjuk”. Vagy egy kicsit másként: „Én vagyok a világon; a világom határa a nyelv, amelyen értek.” Addig tudok elmenni gondolatban, elméletben, ameddig kifejezéseim vannak hozzá. Ebből adódik az is, hogy ezen – mármint a világomon – túl, amiről még tudok szavakban és kifejezésekben beszélni, nincsen semmi más. Onnan úr vesz körül minket. Így tehát, ha a molekulák térben és időbeni létéről meg tudunk fogalmazni fontos állításokat, akkor remélhetjük, hogy nyelvünk, s ezen keresztül világunk határa is kitolódik. Mi más lehetne a természettudós álma és munkájának motorja?

Kulcsszavak: *a molekulák láthatatlan világa, sztochasztikus bolyongás, determinisztikus leírás mód, a molekuláris mozgások időskálája*

#### IRODALOM

Le Bel, Joseph Achille (1874): Sur les relations qui existent entre les formules atomiques des corps organiques, et le pouvoir rotatoire de leurs dissolutions. Bulletin de la Société Chimique de France, 22, 337–347.

Leicester, Henry M. – Klickstein, Herbert S. (1963): *A Source Book in Chemistry 1400–1900*. Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts  
Kassai Tibor (1997): *Szemszedett bölcsességek*. Calibra, Budapest  
Wittgenstein, Ludwig (2004): *Logikai-filozófiai értekezés, Tractatus logico-philosophicus*. Atlantisz, Bp.

