

FIZKA

1999

1

2000



Fizika
Informatika
Kémia

EINT

FIJKA

Fizika
InfoRmatika
Kémia
Alapok

Az Erdélyi Magyar
Műszaki Tudományos
Társaság kiadványa

Megjelenik kéthavonta
(tanévenként
6 szám)

9. évfolyam
1. szám

Főszerkesztők
DR. ZSAKÓ JÁNOS
DR. PUSKÁS FERENC

Felelős szerkesztő
TIBÁD ZOLTÁN

Felelős kiadó
ÉGLY JÁNOS

Számítógépes tördelés
PROKOP ZOLTÁN

Szerkesztőbizottság

Biró Tibor, Farkas Anna,
dr. Gábos Zoltán, dr. Kará-
csony János, dr. Kása Zoltán,
dr. Kovács Zoltán, dr. Máthé
Enikő, dr. Néda Árpád,
dr. Vargha Jenő

Levélcím

3400 Cluj, P.O.B. 1/140

A számítógépes szedés és
tördelés az EMT
DTP rendszerén készült.

Megjelenik az
Illyés Közalapítvány
támogatásával.

Borítóterv: Vremir Márton

Grafika: Könczey Elemér

EMT

- Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság
- Kolozsvár, B-dul 21 Decembrie 1989, nr. 116
- Levélcím: RO - 3400 Cluj, P.O.B. 1 - 140
- Telefon: 40-64-190825, Tel./fax: 40-64-194042
- E-mail: emt@emt.org.sorosci.ro
- Web-oldal: <http://www.emt.ro>
- Bankszámlaszám: Societatea Maghiară Tehnico-
Științifică din Transilvania BCR-Cluj
2511.1-815.1. (ROL)



Aszimmetriás szénatomot tartalmazó vegyületek optikai izomériája

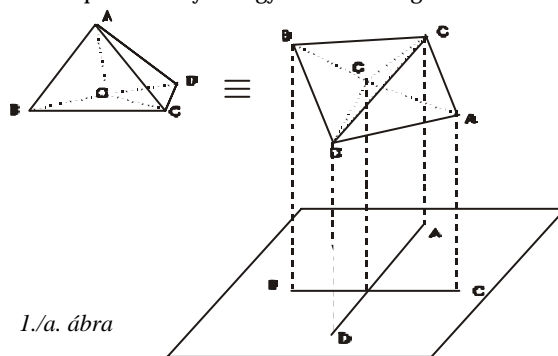
Ha valamely szerves vegyületben létezik egy aszimmetriacentrum, akkor a vegyületnek két különböző konfiguráció felelhet meg. E két konfiguráció egymásnak tükörképe, és egymással fedésbe nem hozható. A két konfiguráció tulajdonképpen két olyan izomernek felel meg, melyeknek minden tulajdonsága megegyezik, egyet, az optikai forgató képességet kivéve. A két izomer optikai forgatóképessége abszolút értékben megegyezik, de irányuk különböző: az egyik ugyanolyan mértékben forgatja a polarizált fény síkját jobbra (ezt jobbraforgatónak nevezzük), mint a másik balra (ezt balraforgatónak nevezzük). Éppen ezért ezt az izomériatípust optikai izomériának nevezzük. A két vegyületet, melyek egymásnak tükörképei enantiomereknek nevezzük. Ha e vegyületeket aszimmetriacentrum nélküli (szimmetrikus vegyületből) állítjuk elő, akkor a két enantiomer keletkezésének a valószínűsége azonos és úgynevezett racém elegy keletkezik, mely a két enantiomer ekvimolekuláris elegye. A racém elegy fizikai tulajdonságai különböznek az enantiomerekétől, mivel nem tiszta anyagok, hanem keverékek. Így például a racém elegy olvadási és forráspontja általában kisebb az enantiomerekénél (ahogy a szennyezett anyagoké is kisebb a vegytiszta vegyületeké-nél), oldhatóságuk, sűrűségük is más, optikai forgatóképességük pedig nincs az intermolekuláris kompenzáció miatt. (A jobbraforgató izomer ugyanannyit forgat jobbra, mint a balraforgató balra, így hatásuk kiegyenlítődik).

A optikai izoméria megjelenésének egyik oka az aszimmetrikus atom (C-atom) jelenléte. Aszimmetrikus az az sp^3 hibridizációjú C-atom, melyhez négy különböző szubsztituens kapcsolódik. Az enantiomerek ábrázolására különböző térképletek és a E.Fisher által bevezetett vetítési (projektív) képletek alkalmasak.

A Fisher féle vetítési képleteket úgy kapjuk, hogy az aszimmetriás szénatom köré képzelhető tetraédert úgy irányítjuk, hogy a vetítési síkhoz közelebb eső éle a síkkal párhuzamosan, felülről lefelé haladó irányban helyezkedjen el, míg a szemünkhöz közelebb eső, balról jobbra haladó éle ugyancsak párhuzamos legyen a vetítési síkkal.

A tetraéder középpontjában elképzelt aszimmetriás szénatomot és a tetraéder négy csúcspontját (amelyek a szubsztituenseket jelképezik) a síkra merőlegesen levetítjük.

A vetületi pontokat összekötve a tetraéder középpontjában megfelelő vetületi ponttal, olyan „tengelykeresztet” kapunk, amelynek egymásra merőleges két szára az aszimmetriás C-



1./a. ábra

atom négy kötésiirányá vetületének felel meg.

A vetítési képletek alkalmazásakor be kell tartani néhány szabályt. E képleteket nem lehet tetszés szerint elforgatni, a szubsztituenseket nem lehet egymás között kicserélni annak veszélye nélkül, hogy a képletünk az enantiomerjének a képletévé átalakuljon. Ha velük dolgozunk be kell tartanunk a következő szabályokat:

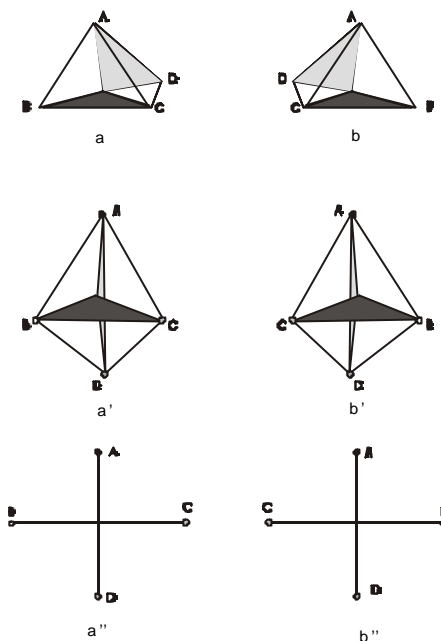
1. Nem szabad két szubsztituens egymás között kicserélni, mert ezáltal az enantiomer képletét kapjuk meg.

2. Szabad viszont három szubsztituens a 2. ábra III. képletén jelzett módon felcserélni (permutálni), ez a művelet ugyanis páros számú szubsztituens cserével egyenértékű. (2. ábra)

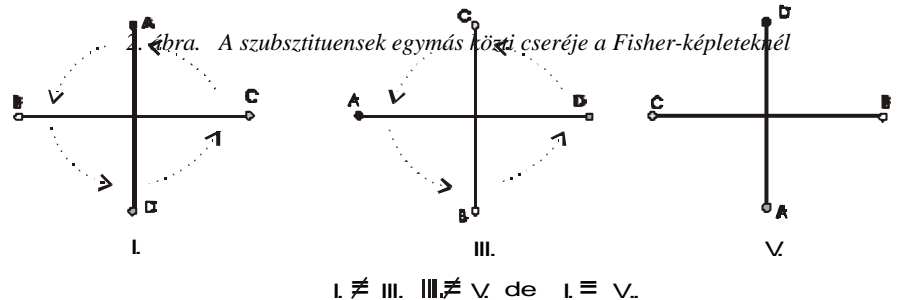
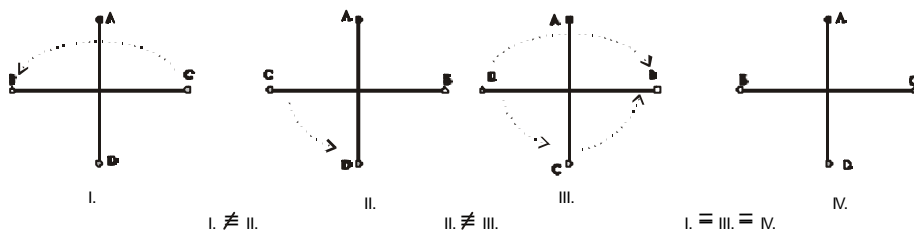
3. Nem szabad a vetítési képleteket síkban 90° -kal elfordítani, mert ezáltal az enantiomer képletét kapjuk meg. (A vetítési képlet 90° -os elforgatása egyenértékű páratlan számú szubsztituens csereével.)

4. Szabad viszont a képleteket 180° -kal elfordítani, mert a 180° -os elforgatás két 90° -os elfordításnak felel meg, s az enantiomer enantiomerje maga a vegyület. (3. ábra)

A két izomert „+” (jobbrafordító), illetve „-” (balrafordító) izomernek nevezzük forgatásuk iránya után, illetve abszolút konfigurációjuk szerint „R” illetve „S” izomernek. Az ab-



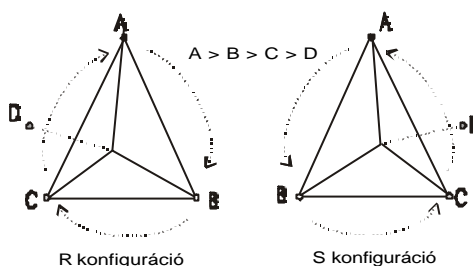
1./b. ábra.
A térképlet síkba való vetítése
(a és b entomerpár)



3. ábra. A Fischer-féle vetítési képletek forgatása

szolút konfigurációt a Cahn-Ingold-Prelog konvenció szerint határozzuk meg a következőképpen:

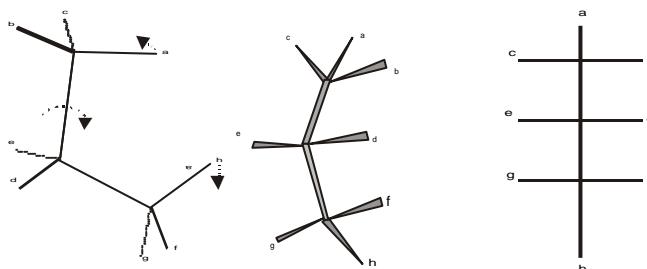
Az aszimmetriás C-atom szubsztituensei között egy prioritási sorrendet állapítunk meg a rendszámuk alapján. Minél nagyobb az aszimmetriás C-atomhoz közvetlenül kapcsolódó atom rendszáma, annál nagyobb a szubsztituens prioritása. Ha a közvetlenül kapcsolódó atomok azonosak, akkor ezen atomokhoz közvetlenül kapcsolódó legnagyobb rendszámú atomot hasonlítjuk össze, majd a második legnagyobb rendszámú atomokat, amíg különbséget nem tudunk tenni közöttük. Ha valamely atom többszörös kötéssel kapcsolódik, akkor úgy tekintjük, mintha két azonos atom lenne. A H (Z=1) prioritása kisebb, mint a Cl-atomé (Z=17), és a -CH=O [C(Z=6)-O,O,H (Z=8,8,1)] prioritása nagyobb, mint a -CH₂-OH-é [C(Z=6)-O,H,H (Z=8,1,1)], mert 6=6, 8=8, de 8>1. Miután megvan a prioritási sorrend, a molekula modelljét úgy forgatjuk el, hogy a három nagyobb prioritású szubsztituens által alkotott sík a szemünk elé kerüljön, a legkisebb szubsztituens pedig e sík mögött, a szemünktől távol legyen. Ebben a helyzetben a három nagyobb prioritású szubsztituens körbejárjuk prioritásuk csökkenő sorrendjében. Ha a körbejárási irány az óramutató járásával egyező, akkor a konfiguráció „R”, ha pedig azzal ellentétes irányú, akkor a konfiguráció „S” típusú. (4. ábra)



4. ábra. Az „R” és az „S” konfiguráció

Amennyiben egy molekulában nem egy, hanem több aszimmetrikus C-atom található, akkor a projektív képletet úgy szerkesztjük meg, hogy a molekulát az egyes kötések mentén elforgatva úgy orientáljuk a papír síkja fölé, hogy az aszimmetrikus C-atomok egymáshoz képest fedő állásban begörbült alakban helyezkedjenek el. Ezt követően az aszimmetrikus C-atomok láncát képzeletben kiegyenesítve képezzük le a molekulát felülről lefelé haladó irányban a papír síkjára. (5. ábra)

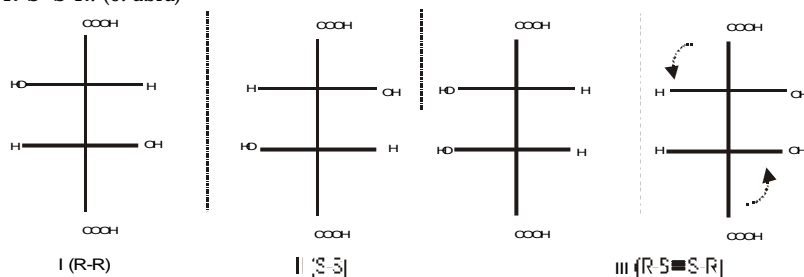
Ha egy molekulában több aszimmetrikus C-atom található, akkor nem két, hanem több izomer létezik. Mindegyik aszimmetrikus C-atom külön-külön lehet R illetve S konfigurációjú, tehát elméletileg 2^n optikai izomer van, ahol „n” az aszimmetrikus C-atomok száma. Mindegyik C-atom külön-külön fejt ki a hatását a polarizált fény síkjára. Ha a vegyületnek van egy szimmetria síkja, akkor a szimmetriasík egyik oldalán található aszimmetrikus C-atomok ugyanannyit forgatják el a polarizált fény síkját egyik, mint a sík másik oldalán található aszimmetrikus C-atomok a másik irányba, így a polarizált fény síkja az intramolekuláris kompenzáció miatt nem fordul el, a molekula optikailag inaktív lesz. Az ilyen vegyületek azonosak a tükörképükkel. Ezeket a vegyületeket mezo formáknak nevezzük. Minden mezo forma eggyel csökkenti az optikai izomerek számát, tehát valójában 2^{n-m} az optikai izomerek száma, ahol n az aszimmetrikus C-atomok, m pedig a mezo formák számát jelöli. Például



5. ábra: Polikirális vegyület projektív képletének megszerkesztése

a borkősav esetében, amelyben két aszimmetrikus C-atom található nem négy hanem csak 3 izomer létezik, az optikailag aktív enantiomerpár: az R-R és az S-S valamint a mezo forma: R-S=S-R. A mezoformát a projektív képleten úgy ismerjük fel, hogy annak képletét 180°-kal elforgatva az eredeti izomer képletét kapjuk meg.

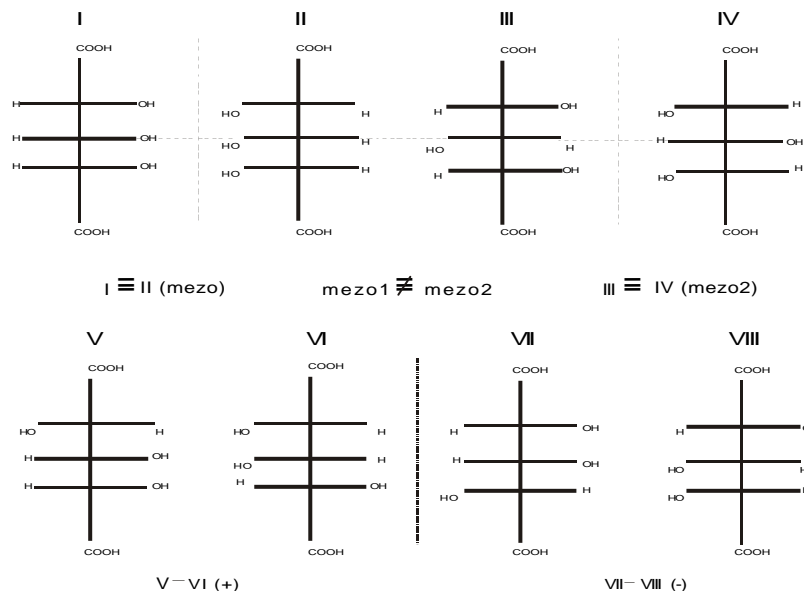
Például a borkősav esetében, amelyben 2 aszimmetrikus C-atom található nem négy, csak 3 izomer létezik, az optikailag aktív enantiomerpár: az R-R és az S-S valamint a mezo forma R-S=S-R. (6. ábra)



6. ábra. A borkősav három izomerje

A mezo formák nem azonosak egyik enantiomerrel sem, de nem is tükörképeik. Az ilyen optikai izomereket, amelyek részben azonos, részben tükörkép-konfigurációval rendelkeznek, diasztereomereknek nevezzük. A diasztereomerek tulajdonságai az enantiomerekkel d -létben nem azonosak.

Érdekes helyzet alakul ki, ha a molekulában páratlan számú C-atom található és a molekula sikképlete szimmetrikus. Ebben az esetben a molekula szimmetriatengelye a középső C-atomon halad át. Ha a középső C-atomhoz két különböző szubsztituens kapcsolódik, akkor ez a C-atom pszeudo-aszimmetriás (látszólag aszimmetriás). Emiatt a molekula minden izomerje két, látszólag különböző, 180°-kal elforgatott alakban írható fel, akár csak a mezo formák. Ilyen eset fordul elő a trihidroxiglutársav esetén. (7. ábra)



7. ábra A trihidroxi-glutársav optikai izomerjei

Ha a hármas (középső) C-atomot aszimmetrikusnak tekintenénk, akkor három optikai izomerje kéne legyen mint a 2,4-dihidroxi-glutársavnak: egy „+”, egy „-” és két mezo izomer. Érdekes, hogy akkor, amikor a vegyületnek a szimmetriatengelye a 3. C-atomon halad át, tehát nem aszimmetrikus C-atom, akkor nem lehet a 3. C-atom szubsztituenseit anélkül kicserélni, hogy a vegyület ne alakuljon át diasztereomerjévé, (ezért létezik két mezo izomer), mikor pedig a vegyületnek nincs szimmetriásíkja, (az optikailag aktív izomerek esetén), akkor ki lehet cserélni a 3. C-atom két szubsztituensét anélkül, hogy „metamorfozálódna” a vegyület. A magyarázat az, hogy az optikailag aktív izomereknél mindkét C-atom azonos konfigurációjú (R és R, illetve S és S) így ez a C-atom optikailag inaktív, mert két szubsztituense azonos (a két C-lánc), míg a mezo formák esetén a két C-lánc különböző konfigurációjú (egyik S a másik R), tehát nem azonos. A jelenség nem akadály ahhoz, hogy a molekula szimmetriatengellyel rendelkezzen, így optikailag inaktív legyen. Az ilyen feltételesen aszimmetrikus C-atomok konfigurációját „r” és „s” betűvel jelöljük, hogy megkülönböztessük őket a valódi aszimmetrikus C-atomoktól.

A konfiguráció meghatározásánál, ha két olyan C-lánc között kell különbséget tennünk, melyek közt csak konfigurációbeli különbségek vannak, a prioritás megállapításánál figyelembe vesszük, hogy az „R” láncnak nagyobb a prioritása, mint az S láncé, az RR > RS, s a Z-lánc prioritása nagyobb, mint az E-láncé (E-Z izoméria esetén). Így a négy trihidroxiglutársavizomer neve:

- I(II): (2R,3r,4S)-2,3,4-trihidroxiglutársav (mezo1)
 III(IV): (2R,3r,4S)-2,3,4-trihidroxiglutársav (mezo2)
 V(VI): (2S,4S)-2,3,4-trihidroxiglutársav (“+”)
 VII(VIII): (2R,4R)-2,3,4-trihidroxiglutársav (“-”)

Felhasznált irodalom:

- 1] **C.D. Nenişescu:** Chimie generală, Didaktikai és Pedagógiai Könyvkiadó, Bukarest, 1973.
- 2] **Felicia Cornea:** Chimie organică, Didaktikai és Pedagógiai Könyvkiadó, Bukarest, 1983.
- 3] **S. Mager, M. Horn:** Stereochimia compusilor organici, Dacia Könyvkiadó, Bukarest, 1986.
- 4] **R. Bacalogu, C. Csunderlik, L. Cotarcă, H.H. Glatt:** Structura si proprietăţile compuşilor organici, Akadémia Kiadó, Bukarest, 1986.

Vandra Attila

Genetikus algoritmusok

A genetikus algoritmusok (*genetic algorithm, GA*) iránt mutatkozó érdeklődésnek sok oka van, de egy dolog biztosan fontos szerepet játszik: bizonyos mértékig kapcsolatban áll az evolúció darwini elméletével, márpedig ennek pusztán említése is heves érzelmi reakciókat vált ki sok emberből. A módszer egyik fő előnye, hogy a számítástechnikában előforduló problémák egy nagyon széles osztályára alkalmazható, ugyanakkor általában nem használ környezetfüggő tudást, így akkor is működik, ha a feladat struktúrája kevéssé ismert. A mesterséges intelligencia osztályozása szerint, ebből a szempontból a problémafüggetlen metaheurisztikák osztályába tartozik, amelyek közül a legismertebbek a *szimulált hűtés* (*simulated annealing*), a *tabukeresés* (*tabu search*), és a különböző *hegymászó* módszerek (*hill climbers*); valójában egy *globális optimalizáció*.

Történet, irányzatok

A hatvanas években merült fel először az a gondolat, hogy az evolúcióban megfigyelhető szelekciós folyamatok mintájára olyan számítógépes modelleket lehetne létrehozni, amelyek képesek mérnöki (elsősorban optimalizálási) feladatok megoldására.