



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 feleltébb kontrainuitív, 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 értetted, rokon szellem beszédét, hallottad?

Ádám: Az igaz, de ily ridegenek, nem képzelm feljök útamat. E tér oly puszta, olyan idegen, mint hogyha szentségsértő járna benne...” (Madách Imre: Az Ember tragédiája, 13. szín)

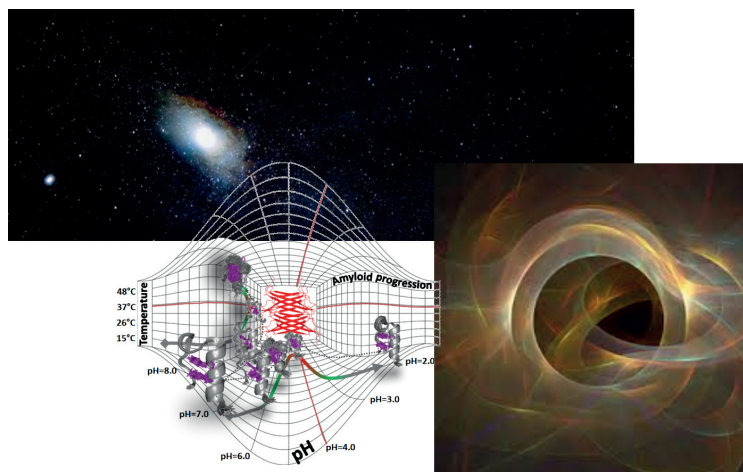
eszköze. A 21. század második évtizedének végén – megállva félúton az atomok „illúziójának” és a molekulák realitásának határánál – a kémikus minden pillanatban ott billeg a newtoni mechanika klasszikus világa és a kvantummechanika „ingoványos” területe között.

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 vizsgáljuk. Durva becslésként megállapíthatjuk, hogy a mintegy 37 billió (10^{12}) sejtből 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 számaival is érdemes barátkozni. Ha például ezt a sejtmennyiséget láncfűzérbe rendeznénk, akkor az mintegy tizennyolcszor 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. Ezeketől 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 sejtpítő 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. Csúpn 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.

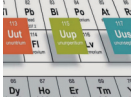
Az információ születésének, fejlődésének, hordozásának, átadásának és lecsengésének megértése kulcsfontosságú kihívás. Az információhordozás mibenlétének tanulmányozása rávilágít

■
 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 és tanítására („creatio ex nihilo”) – a semmiből való teremtésre – reflektál az atomok klasszikus értelemben vett anyagának üressége ugyanúgy, mint magának az Univerzum „ürességének” a tényle is. Ez a különös üresség az, amit a szerző **illúzió**ként aposztrófál.



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 Mícimackó százholdas pagonya, de megjelenik benne a **potenciálisenergia-felszín**, **PEF**, a modern kémikus centrális magyarázó



(azaz: relatíve pontosnak) és mégis látványosnak, illetve könnyebben 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 elektrónpárt, 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. Mengelejev 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

