

**Kémia** Megérzés és a korlátok szükségessége

# A vegyészek álma

Ötvös Zoltán

Kémiához kötődő tanulmányaink egyik könnyen emészthető emléke *August Kekulé* megérzése, intuíciója. A német kémikus az addig érthetetlen benzol gyűrűs szerkezetét álmodta meg – a farkát kergető majom álmoképe segítette ebben. A valaha létezett egyik legjobb kutatóvegyész, *Robert B. Woodward* a terramycin nevű antibiotikum szerkezetének felderítésében játszott óriási szerepet. Ez a vegyület komoly gyógyszeripari érdeklődésre tartott számot, azonban a számtalan szerkezeti adat ellenére a vegyület pontos szerkezetét sokáig nem tudták megfejteni. Woodward egy nagy kartonlapra felírta az összes elérhető információt, és végül kikövetkeztette a pontos szerkezetet. A DNS modelljének felfedezésével kapcsolatban *James Watson* nyilatkozta, hogy a kettős spirálmodell megalkotása során a kémiai megérzéseikre hagyatkozva vetettek el vagy éppen formáltak tovább ötleteket, és jutottak el végül *Françis Crickkel* a helyes megoldáshoz. Az intuíció a legszembeütőbb szerepét mind a mai napig a természettudomány területén fejt ki, meghatározhat kutatási irányokat, segíthet egy problémakör koncepcionális megértésében vagy éppen az összegyűjtött adatok szabályszerűségeinek a felismerésében. De hogyan működik az intuíciós készség a kémiában?

– erre próbált válaszolni egy magyar és osztrák kutatókból álló csoport a Brit Királyi Kémiai Társaság vezető folyóiratában, a *Chemical Society Reviews*-ban.

*Keserű György Miklós*, az MTA Természettudományi Kutatóközpont főigazgatója, *Soós Tibor*, a központ Szerves Kémiai Intézetének megbízott igazgatója és *Oliver Kappe*, a Grazi Egyetem kémia professzora arra hívta fel a figyelmet, hogy a kémiai intuíció nem csupán a nagy felfedezések szükséges kelléke, de a napi kutatói tevékenység elengedhetetlen része is. A laboratóriumban felmerülő szintetikus problémára a gyakorlott szintetikus vegyész szinte azonnal tud jó választ adni és azt meg is oldani. Ennek is tudható be, hogy a vegyészek képesek voltak több millió új vegyületet létrehozni. Azonban ha részletesen elemezzük az eddig szintetizált vegyületek körét, jól látható, hogy az emberiség csupán a töredékét érte el az elvileg elérhető vegyületek körének, ráadásul a vegyészek által előállított vegyületek szerkezeti változatosága nem túl nagy. Ha az intuíció ilyen meghatározó és nagyra értékelt a szerves kémiában, felvetődik a kérdés, hogy vajon miért csak eddig jutottunk el a lehetséges kémiai szerkezetek terének a feltérképezésében? Mi gátolja a továbblépést?

A *Chemical Society Reviews*-ban megjelent cikk magyar és osztrák szer-



Magyar kutatók a kémiában vizsgálták az intuíció szerepét FOTÓ: TEKNÓS MIKLÓS

zői a szintetikusvegyészek körében nagyra értékelt kémiai intuíció megbízhatóságát elemezték – e cél érdekében az elmúlt 240 év szerveskémia-eredményeinek statisztikai elemzését végezték el. Az adatok egyértelműen mutatják, hogy az alkalmazott kísérleti körülmények szűk térben mozognak – a reakciók hőmérséklete, a reakciókban alkalmazott nyomás, a felhasznált oldószerek típusa és a reakcióidők nagyon szűk intervallumban helyezkednek el. Ez a trend részben várható is volt, mivel a kísérleti körülmények megválasztásában a minket körülvevő környezet fizikai sajátossága, valamint az ember életritmusa meghatározó. Ami meglepő, az az, hogy az ember még a kémiai kísérletek esetén is milyen jelentős mértékben idomul az őt körülvevő környezethez. Ez abból

a szempontból előnyös, hogy ebben a rendezett környezetben a kémiai reaktivitások szabályszerűsége felismerhető, illetve a viszonylag rövid reakcióidők miatt a kutatók gyors visszajelzést kapnak egy adott anyag kémiai viselkedéséről. Tehát a korlátok és a tapasztalatok lehetőséget teremtenek megbízható intuíció kialakulására. Ugyanakkor a korlátok hátrányosak is, mivel a tudományos megismerés bevált, begyakorolt és rutinná vált módszerei és eszközei nehezítik a kitekintést. A szakértői tudás bár meghatározó és elengedhetetlen kelléke a tudományos fejlődésnek, sokszor mégis gondolkodási horgonyt, béklyót jelent. További probléma, hogy a jelenlegi finanszírozási modell a kockázatkerülésre játszó, célzott szintetikus kémiai programokat helyezi előtérbe, a

tudomány fejlődésében meghatározó szerepet játszó felfedező jellegű, akár nagy ugrásokat is lehetővé tevő programokat nem támogatja. Azaz az intuíció ellen van. (Ez nem kémiáspecifikus jelenség, hasonló korlátozó tényezőket ismertek fel a közelmúltban a biológia területén is.)

A szerzők szerint a most publikált cikk fontos előrelépésnek tekinthető, mivel sikerült megérteni az új felfedezések útjában álló korlátok természetét, amelyekről a kutatók sokszor nem is tudnak. A szükséges és elkerülhetetlen korlátok ismerete, kialakulásuk és működésük megértése ugyanakkor hozzájárulhat ahhoz, hogy könnyebben tudják átlépni őket, és így új utak nyílhatnak a további jelentős felfedezésekhez. Hasonlóan *Kekulé* ál-