

Elemnévadás az uránon túl

Az elemek felfedezésének története bővelkedik érdekességekben. Ezek közül is a legváratlanabb fejezet az uránnál nagyobb rendszámú elemekkel kapcsolatos. Ezeket az elemeket tulajdonképpen nem felfedezték, hanem feltalálták, ugyanis tudatos kísérletsorozatokban hoztak létre földi körülmények között nem létező atommagokat. Az újonnan megismert elemek elnevezése hagyományosan az első felfedező joga, így ha a felfedezés elsőbbségét illetően viták vannak a tudósok között, az gyakran elnevezési vitákhoz is vezet.

Magát az *uránt* már két évszázadnál is régebben ismeri a tudomány, az elemet Martin Heinrich Klaproth (1743–1817) berlini kémia professzor fedezte fel 1789-ben a manapság uránszurokérc néven ismert ásványban. Ő is nevezte el az Uránusz bolygóról, amelynek felfedezése tudományos szenzáció volt 1781-ben, hiszen a Naprendszer belsőbb, szabad szemmel is látható bolygóit már ősidők óta ismerték.

A bizmut és az urán közötti elemeket a svéd Jöns Jakob Berzelius (1779–1848) által 1815-ben azonosított és elnevezett tórium kivételével a XX. század hajnalán fedezték fel. Az uránnak több mint egy évszázadig nem volt különlegesebb jelentősége, míg Antoine Henri Becquerel (1852–1908), Marie Curie Skłodowska (1867–1934) és Pierre Curie (1859–1906) az uránszurokérc vizsgálatánál fel nem fedezte a radioaktivitást.

A transzurán (uránon túli) elemeket az 1940-es években kezdte előállítani és kutatni San Francisco közelében, Berkeley városában egy nagy létszámú kutatócsoport, amelynek legnevesebb tagjai Glenn Theodore Seaborg (1912–1999) és Albert Ghiorso (1915–) voltak. Egészen természetesnek tűnt, hogy az akkor már ismert, Uránusz utáni bolygókról az uránt követő elemek neve *neptúnium* és *plutónium* lesz, habár ezeket a bolygókat már jóval az elemek felfedezése előtt megismerték (a Neptunuszt 1846-ban, a Plútót 1930-ban fedezték fel). A Plútótól a csillagászok 2006-ban ugyan megvonták a bolygó elnevezést, így ezentúl hivatalosnak törpebolygónak hívják, de persze az elemneveket ez már nem érinti.

Az új elemek előállításával az új bolygók felfedezése nem tudott lépést tartani, így másféle elnevezési források után kellett nézni. A Pu

utáni három elem elnevezésében a periódusos rendszerben fölötté lévő ritkaföldfém elnevezési módja volt útmutató. Az eurórium elemet Európáról nevezték el, így az alatta lévő elem Amerikáról az *americium* nevet kapta. A gadolínium volt az első elem, amelyet tudósról neveztek el – Johann Gadolin finn földtudós nevét örököltette meg 1880-ban ilyen módon a Gd-ot felfedező Jean Charles Marignac francia kutató – így a Gd alatti elemet is tudósról, Marie Curie Skłodowska-ról nevezték el *küriumnak*. A terbium egy három másik elemnek (Y, Yb, Er) is keresztszülőként szolgáló kicsiny svéd városkáról, Ytterbyről kapta a nevét. Így a Tb alatti elem, a *berkélium* is egy város nevét viseli, mégpedig a kutatócsoport otthonát jelentő kaliforniai Berkeley-ét. A 98-as elem fölötti diszprózium neve egy görög szóból származik, amely a felfedezés nehézségeire utal (diszprozodosz = megközelíthetetlen). Ennek a névadási módnak az utánzása nem tűnt célszerűnek, viszont az természetesen adódhatott, hogy Berkeley után Kalifornia állam is legyen elemnévadó: így lett a 98-as rendszámú elem neve *kalifornium*.

Úgy tűnik, ezzel a Berkeley-ben dolgozó kutatócsoport által kedvelt földrajzi helyek is elfogytak, mert a periódusos rendszerben következő elemeket következetesen nagy hatású tudósokról nevezték el. Albert Einsteint (1879-1955) aligha kell bárkinek is bemutatni, róla nevezték el az *einsteiniumot*. A *fermium* névadója Enrico Fermi (1901-1954) olasz fizikus, aki a II. világháború alatt vezette az első atomreaktor építési munkálatait, s a magyar származású Szilárd Leóval együtt még szabadalmaztatta is az ötletet. A *mendelévium* az első 100-nál nagyobb rendszámú elem, a periódusos rendszer atyja, Dmitrij Ivanovics Mengyelejev (1834-1907) orosz tudós tiszteletére kapta nevét. A következő elem, a *nobélium* névadója Alfred Bernhard Nobel (1833-1896) svéd kémikus, akiről leginkább az általa alapított díj jut az emberek eszébe manapság. 1961-ben fedezték fel a *laurenciumot*, s a nem sokkal korábban elhunyt Ernest Orlando Lawrence (1901-1958), a ciklotron feltalálójának emlékére nevezték el. Ezzel a felfedezéssel le is zárult az a korszak, amelyet az amerikai csoport kutatási fölénye jellemzett. A laurencium mai vegyjele Lr, de néhány korábbi forrásban Lw is előfordul.

Nagyjából ebben az időben vált igazán jelentőssé az akkori Szovjetunióban (ma Oroszországban) lévő Dubna városának új elemek előállításával foglalkozó kutatóintézete. Az elemek felfedezése pedig technikailag egyre nehezebbé vált, így az amerikai és az orosz csoport között szinte folyamatos vita volt egyes felfedezésekről, azok

megegerősítéséről, az elsőségről és így az elemek elnevezéséről is. Ennek a következménye volt, hogy a 104-es elemet a szovjet kutatócsoport ajánlását követve hazánkban is kurcsatóviumnak (Ku) nevezték, míg a világ nagyobb részén az amerikai javaslatot követve a radzerfordium név és Rf vegyjel terjedt el. A tudománytörténet furcsa fintora, hogy a hidegháború után a két nagyhatalom politikusai kevésbé érezték presztízskérdésnek az egyébként igencsak költséges elemkutatások támogatását, ezért ekkor az amerikai és az orosz kutatócsoport munkakörülményei is jelentősen romlottak, s idővel a Darmstadtban működő német GSI intézet vált az új elemek szintézisének vezető kutatóhelyévé.

Az elemelnevezés zavarainak tisztázása felé az első lépést a kémikusok nemzetközi szervezete, a IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) tette meg 1977-ben. A minden nemzet kémikusait tömörítő szervezet ekkor fogadta el a 100-nál nagyobb rendszámú elemek rendszeres nevezéktanát. Innen erednek a sok periódusos rendszerben feltűnő, hárombetűs vegyjelek. Egy fél nem fedezett, vagy véglegesen még el nem nevezett elem nevét a tízes számrendszerben leírt rendszámából lehet megszerkeszteni. Mind a tíz számjegy görög eredetű nevet kapott, és ennek a névnek első betűjét írjuk le a vegyjel betűiként. Az **1. táblázat** tartalmazza a számjegyekre használt szavakat és betűket. Például a 283-as rendszámú elem neve így *bioktrium*, vegyjele Bot, a 713-esé *szeptuntrium* és Sut, a 317-asé *triunszeptium* és Tus. Azonban mindig is világos volt, hogy ezen nevek és vegyjelek csak ideiglenesek, továbbra is triviális neveket kell találni azoknak az elemeknek, amelyek felfedezését széles körben megerősítették.

A nyolcvanas évekre az elnevezések körüli vita különösen ellentmondásossá vált. Végül a IUPAC a probléma megoldására a fizikusok hasonló szervezetével, a IUPAP-pal összefogva 1986-ban egy közös munkabizottságot alakított, amelyben az ilyen jellegű kutatásokban érdekelt valamennyi kutatóhely és minden nemzeti kémiai egyesület hallathatta véleményét. 1991-re sikerült megegyezésre jutni az új elemek elnevezésének irányelveiről. A megegyezés támogatta azt a korábbi gyakorlatot, hogy elemeket tudósról, helyről, tulajdonságról, vagy mitológiai személyekről nevezzenek el. Elutasították azonban azt, hogy elemek élő személyek nevét kapják. A 101-es (Md), 102-es (No), és 103-as (Lr) rendszámú elemek már elterjedt, és ellentmondásoktól mentes nevét véglegesen megerősítették, noha a nobélium első előállításáról szóló

bejelentést megalapozatlannak találták, így a felfedező személye más lett. A 104 és 109 közötti rendszámú elemek nevére és vegyjelére javaslatot tettek. Megegyeztek abban is, hogy a további elemek elnevezéséhez az első, széles körben megerősített felfedezésről beszámoló kutatók tehetnek javaslatot. Ezt a javaslatot a munkacsoport megtárgyalja, majd az elnevezésről hivatalos ajánlást tesz közzé a IUPAC folyóiratában. Az ajánlást egy nagyjából féléves időszakon át bárki véleményezheti. A vélemények megismerése után a bizottság újabb ülésén véglegesíti a javaslatot, amelyet aztán a IUPAC évente egyszer megszervezett közgyűlése jóváhagy.

Míg az új elemek elnevezési eljárását mindenki elfogadta, addig a 104-109-es rendszámú elemekre elfogadott nevek erősen megosztották a tudóstársadalmat. Az amerikai kutatóknak nagyon rosszul esett, hogy a számos elem felfedezésében nagy szerepet játszó Glenn T. Seaborg munkájának elismerésére tett szíborgium elemnévjavaslatukat elvetette a bizottság azért, mert élő tudósról nem akartak elemet elnevezni. Ugyancsak jelentős kritika érte a 107-es elem nevét, amelyre az 1994-ben elfogadott javaslat nilszbórium volt, vagyis a tudósokról elnevezett elemek közötti egyetlen kivételként a tudós keresztnéve is szerepelt volna az elem nevében. A vita tovább folytatódott, és véglegesen csak 2000. novemberében zárult le. A 104-es elem neve *radzerforium* (Rf) lett Ernest Rutherford (1871-1937) Nobel-díjas kutató tiszteletére. A 105-ös elem végül a *dubnium* nevet kapta a szovet-orosz kutatócsoport munkájának elismeréseként. A 106-os elem neve *szíborgium* (Sg) lett, az elnevezés körüli vitát értelmetlenné tette az a tény, hogy Seaborg professor 1999. február 25-én elhunyt. A tudósról még életében készült olyan fénykép, ahol büszkén mutat a periódusos rendszer Sg elemére, s az elnevezési vitát is időnként csípős humorral kommentálta. A 107-es elem neve *bórium* (Bh) lett Niels Henrik David Bohr (1885-1962), a neves dán tudós tiszteletére. A 108-as elem a GSI német kutatóintézet otthonául szolgáló német Hessen tartományról a *hasszium* (Hs) nevet kapta. A 109-es elemet a maghasadás egyik felfedezőjéről, az életében méltó módon el nem ismert Lise Meitnerről (1878-1968) *meitnerium*nak (Mt) nevezték. A **2. táblázat** foglalja össze a 2000-ben elfogadott neveket az előtte elterjedtebben használt nevekkal együtt.

További két elem elnevezését 2003-ban, illetve 2005-ben hagyta jóvá a IUPAC a már ismertetett eljárás végén. A 110-es elem neve a GSI kutatóintézet városáról, Darmstadtról, *darmstadtium*, Ds lett. A 111-es

elem egy neves német tudós, a röntgensugárzást felfedező Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923) nevét örökíti meg, az elem neve *röntgenium*.

Már beszámoltak a periódusos rendszerben következő néhány elem előállításáról, általában egyetlen elem több izotópjáról is, de ezeknél a felfedezést még 2007. októberére sem erősítették meg olyan biztonsággal, hogy a IUPAC elkezdje az elnevezési eljárást. Az egyes elemek leghosszabb felezési idejű előállított izotópjai a következők: ^{283}Uub 5 perc, ^{284}Uut 0,48 s, ^{288}Uuq 2,8 s, ^{288}Uup 87 ms, ^{293}Uuh 61 ms, ^{294}Uuo 1 ms. A 113-as elem nevére japán kutatók már két javaslatot is tettek: japonium (Jp) és rikenium (Rk). Már évtizedek óta ismert elméleti jóslat, hogy a 112-es és 114-es rendszámú elemek egyes izotópjai viszonylag hosszú felezési idejűek lesznek, pl. a ^{298}Uuq felezési idejét egy évnél hosszabbnak jóslták. Ezen izotópok környezetét hívják a periódusos rendszer stabilitási szigetének. Habár az Uub és Uuq elemeket végegesen meg nem erősített eredmények szerint már előállították, sajnos csak a várható stabilitási szigetbe tartozó izotópoknál jóval kisebb tömegszámúakat sikerült eddig előállítani.

Végezetül essen egy pár szó az elemek nevének írásmódjáról is. A kúrium, berkélium, kalifornium, és laurencium elemek a névadók eredeti nyelven írt formájától eltérő, magyar kiejtést követő írásmódja már évtizedek óta gyökeret vert, és a röntgeniumot is valószínűleg kevesen írják le az angolos roentgenium írásmóddal magyar szövegben. Ezen elemnevek írásmódjának elveit követve helyesebbnek tűnik a radzerfordium, szíborgium, bórium és hasszium írásmód a mai magyar szakirodalomban talán kicsit gyakoribbnak mondható rutherfordium, seaborgium, bohrium és hassium alak helyett.

0	nil	<i>n</i>
1	un	<i>u</i>
2	bi	<i>b</i>
3	tri	<i>t</i>
4	kvad	<i>q</i>
5	pent	<i>p</i>
6	hex	<i>h</i>
7	szept	<i>s</i>
8	okt	<i>o</i>
9	en	<i>e</i>

1. táblázat Száznál nagyobb rendszámú elemek rendszeres elnevezésére és vegyjelére jóváhagyott szabályokban használt számok

2. táblázat Transzurán elemek nevének eredete

rendszám	vegyjel	elemnév a legstabilabb izotóp és felezési ideje	a név eredete korábbi név vagy vegyjel
92	U	urán ^{238}U $4,5 \times 10^9$ év	Uránusz (bolygó)
93	Np	neptúnium ^{237}Np $2,1 \times 10^6$ év	Neptunusz (bolygó)
94	Pu	plutónium ^{244}Pu $8,2 \times 10^7$ év	Plutó (törpebolygó)
95	Am	amerícium ^{243}Am $7,4 \times 10^3$ év	Amerika (kontinens)
96	Cm	kúrium ^{247}Cm $1,6 \times 10^7$ év	Marie Curie Sklodowska (1867–1934)
97	Bk	berkélium ^{247}Bk $1,4 \times 10^3$ év	Berkeley (város, Kalifornia, USA)
98	Cf	kalifornium ^{251}Cf $9,0 \times 10^2$ év	Kalifornia (tagállam, USA)
99	Es	einsteinium ^{252}Es 1,3 év	Albert Einstein (1879–1955)
100	Fm	fermium ^{257}Fm $1,0 \times 10^2$ nap	Enrico Fermi (1901–1954)
101	Md	mendeléviium ^{258}Md 52 nap	Dmitrij I. Mengyelejev (1834–1907)
102	No	nobélium ^{259}No 58 perc	Alfred B. Nobel (1833–1896)
103	Lr	laurencium ^{262}Lr 4 óra	Ernest O. Lawrence (1901–1958) Lw
104	Rf	radzerfordium ^{263}Rf 10 perc	Ernest Rutherford (1871–1937) Ku kurcsatóvíum, Db dubnium
105	Db	dubnium ^{268}Db 32 óra	Dubna (város, Oroszország) Jl zsoltium

106	Sg szíborgium ^{271}Sg 2,4 perc	Glenn T. Seaborg (1912–1999) Rf radzerfordium
107	Bh bórium ^{267}Bh 22 s	Niels H. D. Bohr (1885–1962) Ns nilszbórium
108	Hs hasszium ^{277}Hs 40 perc	Hessen (tartomány, Németország) Ha hánium
109	Mt meitnerium ^{276}Mt 0,72 s	Lise Meitner (1878–1968)
110	Ds darmstadtium ^{280}Ds 11 s	Darmstadt (város, Németország)
111	Rg röntgenium ^{280}Rg 3,6 s	Wilhelm C. Röntgen (1845–1923)

Orgoványi Judit, Tarczay György

AHOL A MADÁR SEM JÁRT: A CSILLAGKÖZI TÉR KÉMIAJA

Az emberiséget mindig izgatta, hogy a világ minél nagyobb, minél távolabbi részét egyre alaposabban megismerje, megértse. Az utóbbi néhány évtizedben nemcsak egyre távolabbi galaxisokat fedeztünk fel, de egyre több anyagot azonosítottunk a csillagközi térben is, amit 100 éve még teljesen üresnek képzeltünk. A világűrben előforduló anyag kémiai összetételének vizsgálatával, a molekulák detektálásával, ezek képződési mechanizmusának felderítésével egy igen fiatal tudományterület foglalkozik, az asztrokémia. Az asztrokémia a csillagászat és a geológia (mint megfigyelő), valamint a fizika és a kémia (mint kísérleti, elemző) tudományterületek határán helyezkedik el. Így felhasználja mind a megfigyelő, mind pedig a kísérleti tudományágak teljes tárházát.

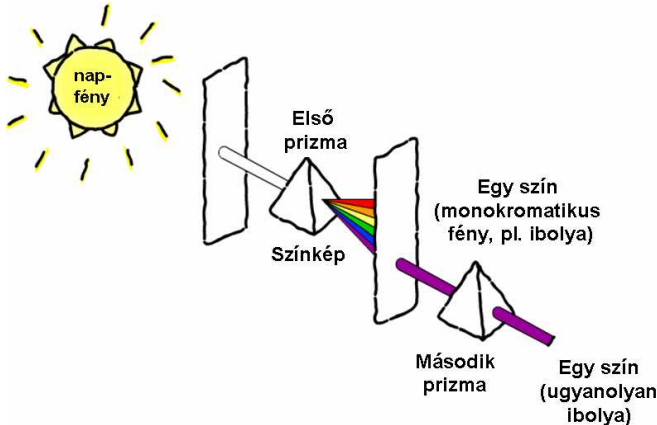
A földi laboratóriumokban analizált mintákról rengeteg információt nyerhetünk. Nagyon nagy pontossággal megállapíthatjuk az elemi, valamint molekuláris összetételüket, de akár a különböző izotópok pontos arányát is fel tudjuk deríteni. Ilyen módon azonban a Világegyetem csak igen kis szeglete tanulmányozható, hiszen Földön kívüli eredetű minták nagyon korlátozottan állnak rendelkezésünkre. Ilyenek például az Apollo űrhajósai által gyűjtött holdközetek, vagy a marsi eredetű meteoritok. A legnagyobb mennyiségben a molekulafelhőkben előforduló csillagközi

molekulákról azonban így nem nyerhetünk információt. Ilyen, jelenleg is tanulmányozott molekulafelhők (pl. Taurus molekulafelhő, Orion óriás molekulafelhő) ugyanis 300 000–1 000 000-szor távolabb vannak annál, mint amilyen távolságra az emberiség által készített, legtávolabb jutott űrszonda, a Voyager-1 30 évnyi utazása alatt eljutott.

A fény: hullám és részecske

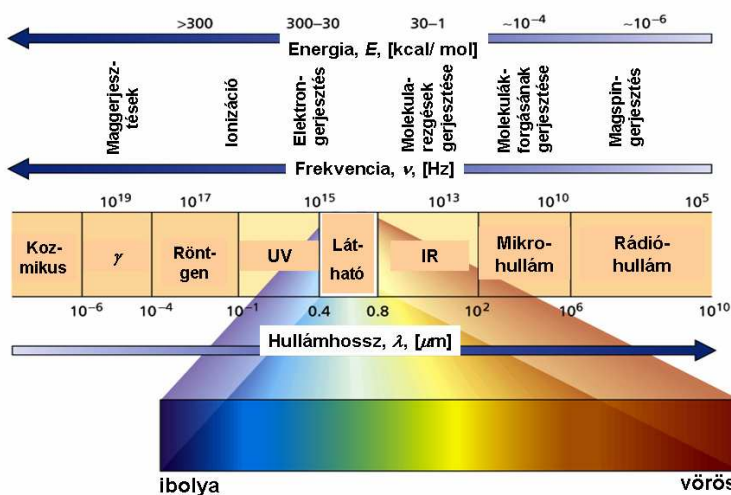
Távolabbi objektumokat, így a molekulafelhőket is az általuk kisugárzott, vagy a rajtuk keresztülhaladó fény segítségével tanulmányozhatjuk. Ahhoz, hogy megértsük hogy kaphatunk a fényből értékes információkat, röviden tekintsük át a fény tulajdonságait, valamint a fény és az anyag (atomok, molekulák) kölcsönhatását a fényvel!

A fényvel már az ókori egyiptomiak is végeztek kísérleteket, az ókori görögök pedig elméleteket állítottak fel, hogy megmagyarázzák a fényvel kapcsolatos megfigyeléseket. A mai modern fényelmélet felállításának kezdete Isaac Newton XVII. század végén végzett kísérleteihez köthető. Ezekben a kísérletekben Newton a napfényt prizma segítségével a szivárvány színeire bontotta, majd az így felbontott fényt másik prizmával újra (sárgás) fehér fényvé egyesítette. Amikor a szivárványból egy szűk színtartományt kivágott, akkor ezt egy másik prizmával már nem tudta tovább bontani, illetve nem tudott ebből újra fehér fényt létrehozni. (Lásd 1.ábra). Ebből arra a következtetésre jutott, hogy a napfény több komponensből áll.



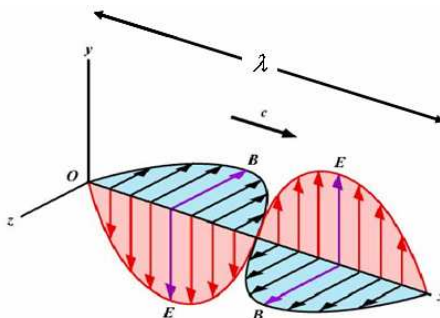
1. ábra: Newton egyik kísérlete a napfényvel

Több mint egy évszázaddal később az Uránusz felfedezője, William Herschel szintén a prizmával felbontott fénnel kísérletezett. Herschel azt mérte, hogy a napfény különböző színű komponensei mennyire képesek felmelegíteni az útjukba helyezett hőmérőt. Kísérletei során véletlenül az egyik hőmérőt a szivárvány szemmel látható vége, a vörös fény elé helyezte el. Legnagyobb meglepetésére éppen ez a hőmérő jelezte a legnagyobb felmelegedést. Ezzel felfedezte a szemmel nem látható, ún. infravörös (angolul: infrared, rövidítve IR) vagy más néven hősugárzást. Csupán egy évet kellett várni egy újabb nagy felfedezésre. 1801-ben Johann Wilhelm Ritter egy hasonló prizmás kísérlettel azt tanulmányozta, hogy az AgCl csapadék a fény színű komponenseivel történő megvilágítás hatására milyen gyorsan feketedik meg. (Megvilágítás hatására Ag keletkezik. Ez volt a fekete–fehér fényképezés alapja.) Hasonlóan Herschel megfigyeléséhez, Ritter is azt vette észre, hogy a legnagyobb hatás a látható tartományon kívül tapasztalható. Ebben a kísérletben azonban nem a vörös előtti, hanem az ibolyán túli tartomány feketíti el leggyorsabban a csapadékot. Ez pedig nem másnak, mint az így felfedezett ultraibolya (angolul: ultraviolet, rövidítve: UV) fénynek a hatása. A XIX. század végéig több további kísérlet szélesítette ki ezt a folytonos színskálát, az ún. színképet vagy spektrumot. (Lásd 2. ábra.) 1888-ban Heinrich Hertz a rádiósugárzást, míg 1895-ben Wilhelm Conrad Röntgen a röntgensugárzást fedezte fel.



2. ábra: Az elektromágneses spektrum és a fény-anyag kölcsönhatás

Heinrich Hertz kísérleteit nagymértékben inspirálta James Clerk Maxwell XIX. század második harmadában kidolgozott, a mai napig modernnek számító fényelmélete. Maxwell a fényt elektromágneses sugárzásként írta le. Ezek szerint a fény elektromos tér komponense időben és térben periódikusan változik, ami térben és időben periódikusan változó mágneses teret hoz létre. Ez utóbbi viszont újra elektromos teret kelt, vagyis a két periódikusan változó tér egymást tartja fenn, és hozza létre a fényterjedést. (Lásd 3 ábra.) A fény különböző komponensei pedig a frekvenciájukban (jele: ν , mértékegysége: Hz) különböznek. Mivel vákuumban a fény meghatározott, állandó sebességgel terjed (fénysebesség, jele: c , értéke: 299 792 458 m/s), ezért az egyszínű (ún. monokromatikus) sugárzást hullámhosszával (λ) is lehet jellemezni: $\lambda = c/\nu$. Érdemes itt megjegyezni, hogy a fény közel 7000-szer gyorsabban terjed, mint amekkora sebességgel jelenleg a Voyager-1 űrszonda mozog a Földhöz képest!



3. ábra: A fény , mint elektromágneses sugárzás
(E : elektromos térerő vektora, B : mágneses térerő vektora, x, y, z :
helykoordináták)

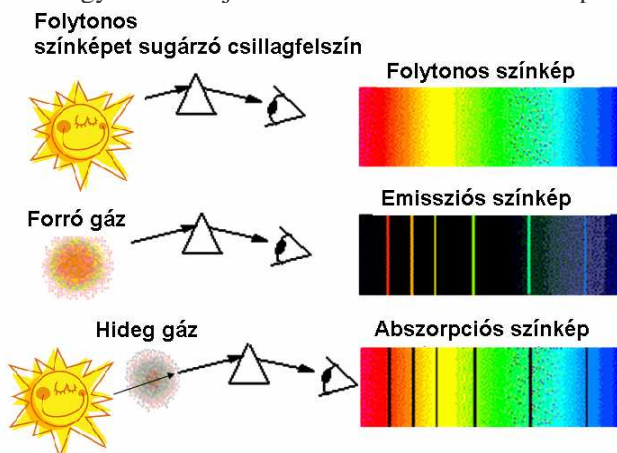
Maxwell elméletével a fényterjedést és sok más kísérleti megfigyelést (pl. fényelhajlás, diffrakció) meg lehetett érteni, de a XX. század elejére több olyan jelenséget figyeltek meg, amelyre nem tudott magyarázatot adni ez az elmélet. Ilyen volt pl. a fényelektromos jelenség is. Ennek a kísérletnek a lényege az, hogy a fényvel megvilágított fémekből elektronok lépnek ki. Ha monokromatikus fényvel világítjuk meg a fémeket, akkor a kilépő elektronoknak csak a mennyisége függ a fény intenzitásától. A kilépő elektronok energiáját viszont csak a fény hullámhossza határozza meg. Minél nagyobb a megvilágító fény frekvenciája, (azaz minél kisebb a hullámhossza,) annál nagyobb a kilépő

elektronok kinetikus energiája. Egy adott értéknél nagyobb hullámhossz felett pedig egyáltalán nem lépnek ki elektronok. Ezt a jelenséget Max Planck és Albert Einstein úgy tudták megmagyarázni, hogy feltételezték, hogy a fénynek nemcsak hullámtermészete (elektromágneses sugárzás), hanem anyagi természete is van. Azaz a fény is elemi részecskékből, ún. fotonokból áll. Egy monokromatikus fényben a fotonok energiáját a következő összefüggéssel lehet megadni: $E = h\nu$, ahol h az ún. Planck-állandó, $h = 6,626068 \times 10^{-34}$ Js. Például, ha a fém egy darab vörös fotont nyel el ($\lambda = 800$ nm), akkor ez $2,5 \times 10^{-19}$ J energiaátadást jelent. Ha a fém egy elektronja erősebben kötődik a fémhez, mint ez az energia, akkor nem léphet ki az elektron. Ha kevésbé, azaz a kilépési munka (vagy másképp az ionizációs energia) kisebb, mint ez az érték, akkor kilép az elektron. A kilépési munka és a foton energiája közötti különbség pedig a kilépő elektron mozgási energiájára fordítódik.

A fény információt hordoz: a spektrum

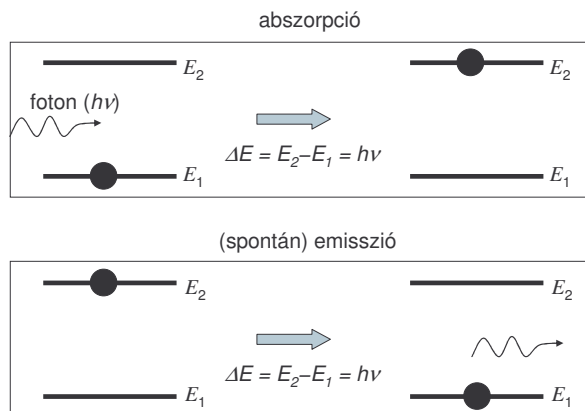
Napjainkban az információ továbbításának egyik legkorszerűbb módja a monokromatikus fény felvillanásainak továbbítása vékony üvegszálon, ún. száloptikán keresztül. Ilyenkor az információt a monokromatikus fény intenzitásának (pontosabban ki/bekapcsolás) időbeli változása hordozza. Azonban fontos információt hordozhat a nem monokromatikus (összetett) fény intenzitásának eloszlása a hullámhossz szerint is. Először 1802-ben William Wollaston vette észre azt, hogy a Nap színképében sötét vonalak vannak, azaz egyes hullámhosszaknál nagyon kicsi a fény intenzitása. Tőle függetlenül Joseph Fraunhofer is elkezdte vizsgálni a Nap spektrumát, és 576 sötét vonalat (ún. Fraunhofer-vonalak) írt le. 1822-ben William Herschel fia, John Herschel és Fox Talbot különféle színű lángokat vizsgáltak. Azt figyelték meg, hogy a lángok színét a lángba bevitt anyagok határozzák meg. A lángok színképe éppen fordított képet mutatott, mint amit Wollaston és Fraunhofer megfigyelt, azaz nem sötét vonalak vannak a folytonos spektrumban (elnyelési, vagy abszorpciós spektrum), hanem éles, intenzív vonalak vannak sötét háttéren (emissziós spektrum). 1849-ben Jean Bernard Leon Foucault kísérletileg megmutatta, hogy a kétféle spektrum (lásd 4.ábra) egyenértékű információt hordoz. A különbség csak az, hogy az emissziós spektrum esetében a forró fényforrás, az abszorpciós esetben pedig a forró

fényforrás és a megfigyelőpont között elhelyezkedő hideg anyagalmaz minősége határozza meg a színképvonalak pontos helyét. (A napfény spektrumában található sötét vonalak úgy jönnek létre, hogy a Nap 6000 K-es felszínéről sugárzott folytonos spektrumból a Nap felszíne fölött, az ún. fotoszférában található hidegebb atomok és ionok egyes fotonokat elnyelnek.) Ezeket a felismeréseket felhasználva dolgozta ki Robert Wilhelm Bunsen és Gustav Robert Kirchoff a spektrumok laboratóriumi felvételét, valamint a spektrumok analizését. Ennek során Kirchoff közel negyven elem jelenlétét tudta kimutatni a Napon.



4. ábra: A színképek típusai

A spektrumok létrejöttének alapjait azonban csak a kvantumelmélet megszületése után sikerült megérteni. A kvantumelmélet szerint az atomoknak és molekuláknak jól meghatározott energiaszintjei vannak. Ezek szerint bármekkora energiát nem közölhetünk a molekulákkal, csak annyi energia elnyelésére képesek, amennyi éppen megfelel az atom vagy molekula éppen betöltött energiaszintje és egy magasabb energiájú szint közötti energiakülönbségnek. Azaz csak azok a fotonok nyelődhetnek el, amelyekre fennáll a $\Delta E = h\nu$ összefüggés. Ez az abszorpció jelensége. A meleg, nagy energiájú atomok, molekulák pedig úgy kerülhetnek alacsonyabb energiájú szintre, ha közben $\Delta E = h\nu$ energiájú fotont sugároznak ki, ami pedig emissziós spektrumot eredményez. (Lásd 5. ábra.)



5. ábra: Az abszorpció és az emisszió folyamata
(A vonalak az energia szinteket jelölik, a pötty pedig azt, hogy a molekula melyik energiaszinten, azaz melyik állapotban van.)

Az atomok, molekulák energiaszintjeit többféle fizikai jelenség határozhatja meg. Például a hidrogénatom energiáját meghatározza az, hogy melyik atompályán helyezkedik el az elektron. Így pl. az $n = 1$ és az $n = 2$ főkvantumszámú pályák közötti energiakülönbség $\lambda = 122$ nm-es foton kibocsátásának (vagy elnyelésének) felel meg. Hasonlóan a hidrogénatomhoz az elektrongerjesztések a legtöbb atom- vagy molekulapályák esetében rendszerint az UV és látható tartományba esnek. A molekulákat felépítő atomok egymáshoz viszonyított mozgásának – vagyis a molekularezgéseknek – az energiája, valamint a molekulák térbeli forgásának energiája is csak jól meghatározott („diszkrét”) értékeket vehet fel, azaz „kvantált”. A rezgési szintek közötti átmenetek jellemzően az infravörös, míg a forgási szintek közötti átmenetek a rádió- és mikrohullámok tartományába esnek. (Lásd 2. ábra.) Fontos újra megjegyezni, hogy minden esetben az energiaszintek értéke, és így a szintek közötti energiakülönbség a molekulától (vagy atomtól) függ. Így ha a spektrumokat kielemeztük, akkor – elegendő adat esetén – egyértelműen meg tudjuk határozni azt a molekulát/atomot, amely létrehozta a spektrumot. Úgy is fogalmazhatunk, hogy a spektrumok a molekulák „ujjlenyomatait”.

A megfigyelőeszközök: spektrométerek, teleszkópok

Az eddig elmondottak alapján már ki is lehet találni, hogy a spektrumok felvételére szolgáló eszközök, az ún. spektrométerek milyen alapelemekből épülnek fel. Először is szükség van egy forrásra. A laboratóriumi (abszorpciós) spektrométerek esetében ez egy megfelelő tartományban sugárzó izzó (pl. látható fény esetében lehet wolframlámpa, IR tartományban izzó SiC rúd), vagy mikrohullámok esetében ún. klisztron. Molekulafelhők vizsgálata esetében a fényforrás lehet egy a molekulafelhő mögött levő csillag. Ekkor abszorpciós spektrumot tudunk felvenni. Azonban a csillagközi felhők általában elég melegek ahhoz, hogy a bennük található molekulák egy része nem a legkisebb energiájú szinten (alapállapotban), hanem kicsivel magasabb energiájú (pl. forgási) gerjesztett szinten legyen. Sok esetben pedig magasabb energiaszinteken is található molekulák, pl. ha a felhők ütközéséből, vagy csillagok által sugárzott fény elnyeléséből plusz energiával rendelkeznek. Ilyenkor maga a felhő is sugárforrás, azaz emissziós spektrumot vehetünk fel.

A spektrumok felvételénél a sugárforrásból származó (és az elnyelő felhőn/mintán keresztülhaladó) fényt össze kell gyűjteni. A csillagászati spektrumok felvételénél erre szolgálnak a teleszkópok. Ezután a fényt hullámhossz szerint fel kell bontani. Ez hagyományosan történhet prizmával, de napjainkban sokkal gyakrabban diffrakció elvén működő optikai rácsot, vagy más elven működő ún. interferométert használnak. („Optikai ráccsal” már mindenki találkozott. Ugyanis egy CD vagy DVD lemezt a napfény felé fordítva az a szivárvány színeiben tündököl. Ez a lemez felületén levő sűrű rovátkáknak, az „optikai rácsnak” köszönhető.) Végül egy detektor segítségével mérjük a fényintenzitást a hullámhossz függvényében.

Csillagászati spektrumok felvételénél ügyelni kell a földi zavaró körülményekre. Ezek közül a legfontosabb a légkör. A légköri mozgások, a páratartalom zavarhatja a látható spektrumok felvételét. Az infravörös hullámhosszakon pedig csak nagyon szűk tartományokban láthatunk a Föld felszínéről a világűrbe, ugyanis a levegőben levő vízgőz és széndioxid az infravörös tartomány nagy részében elnyel. Ezért mind a látható, mind az infravörös spektroszkópiai megfigyelőállomásokat igyekeznek száraz területre telepíteni. A legfontosabb obszervatóriumok pl. Hawaii (Mauna Kea), Arizona (Kitt Peak), Peru száraz hegyein, illetve a kis abszolút páratartalmú Antarktiszon vannak.

Az infravörös spektrumok felvétele egyes tartományokban még a száraz, sivatagos hegycsúcsokon sem lehetséges. Ezért az 1960-as években a légkört ballonokkal, majd rakétákkal elhagyva vettek fel infravörös spektrumokat. Az 1970-es évek közepén pedig egy repülőgépet (Kuiper Repülő Observatórium) szereltek fel infravörös spektrométerrel. (Ezzel sikerült például kimutatni a Szaturnusz és a Jupiter atmoszférájában a vizet.) Ezt a repülőgépet váltotta fel a közelmúltban a NASA (az USA Nemzeti Légügyi és Űrhajózási Hivatala) és Német Űrügynökség Boeing 747-esből átalakított SOFIA (Stratospheric Observatory For Infrared Astronomy) repülőgépe. A XX. század végétől pedig több infravörös űrtávcsövet is állítottak Föld körüli pályára: Japán 1995-ben (InfraRed Telescope in Space, IRTS), ugyanebben az évben az Európai Űrügynökség (Infrared Space Observatory, ISO), 1997-ben a NASA a híres Hubble űrteleszkópjára telepített egy infravörös spektrométert (Near Infra-Red Camera and Multi-Object Spectrometer, NICMOS), majd 2003-ban szintén a NASA fellőtte a Spitzer űrteleszkópot. Minden eddigieknél korszerűbb műszert, a Herschel infravörös űrteleszkópot fogja üzembe helyezni az Európai Űrügynökség 2008 nyarán.

A rádió- és mikrohullámok tartományában nem a légkör a fő zavaró tényező, hanem az emberi civilizáció. A rádió- és tévéadások, mobilhálózatok ugyanis mind zavarhatják a megfigyelést. Ezért a rádióteleszkópokat igyekeznek mély völgyekbe, vagy a lakott területektől messze telepíteni. A rádióteleszkópokat ránézésre is könnyű megismerni, hiszen eltérően a látható és infravörös tartományban működő teleszkópoktól, ezek nem hagyományos tükrökkel vagy lencsékkel gyűjtik össze az elektromágneses sugárzást, hanem hatalmas parabolaantennákkal. Ilyen például a sci-fi filmekből ismert 305 m-es átmérőjű Arecibo teleszkóp Puerto Ricóban, vagy a 76 m-es átmérőjű angol Lovell teleszkóp, valamint az orosz RATAN-600 teleszkóp az 576 m-es átmérőjű parabolatányérjával. Több rádióobszervatórium nem egy, hanem több speciálisan összekapcsolt teleszkóp segítségével állítja elő a képet, illetve a spektrumot. Ezek közül legismertebb a (Kapcsolat című filmben is látható) 27 egységből álló VLA (Very Large Array) megfigyelőállomás Új-Mexikóban. Építés alatt áll Nyugat-Európában egy még nagyobb teleszkóp (LOFAR, LOW Frequency ARray for radio astronomy). Ez 25 000 egységből áll majd, amelynek egységei több országban (Hollandia, Németország, Anglia, Franciaország) lesznek felállítva.

Spektrumok elemzése: laboratóriumi vizsgálatok

A számítástechnika gyors fejlődésének köszönhetően a regisztrált csillagászati spektrumok elemzésében egyre nagyobb segítséget nyújtanak az elméleti kémiai (kvantumkémiai) számítások. Azonban teljesen biztosak az azonosításban csak akkor lehetünk, ha a feltételezett molekulát előállítjuk a laboratóriumban, felvesszük a spektrumát, majd összehasonlítjuk a laboratóriumi spektrumot a molekulafelhő spektrumával.

A laboratóriumi kísérleteket az nehezíti, hogy minél inkább közelíteni kell a vizsgált objektumban uralkodó fizikai körülményeket. Ez a molekulafelhők esetében például extrém alacsony nyomást és hőmérsékletet, állandó kozmikus és UV sugárzást jelent. Mint látni fogjuk, ilyen körülmények között egzotikus, nagyon reaktív molekulák, párosítatlan elektronnal rendelkező semleges specieszek (ún. gyökök) is létrejönnek.

Reaktív molekulák laboratóriumi előállítására számos lehetőség kínálkozik. Ilyen pl. a magas hőmérsékletű kemencében történő izzítás. Létrejönnek ilyen specieszek elektromos kisülésekben, plazmákban és lézeres elpárologatás során. Gyakran alkalmazzák a fotolízist is, ilyenkor UV lámpával vagy lézerrel sugározzák be a mintát. A reaktív molekulákat előállításuk után „konzerválni” is kell, hogy elbomlásuk előtt meg tudjuk vizsgálni. Ez történhet úgy, hogy az előállításukkal egyidőben egy szűk résen keresztül nagyobb nyomásról nagyvákuumba eresztjük a molekulákat. Ilyenkor – hasonlóan a hűtőgép működési elvéhez – ún. adiabatikus lehűlés jön létre, amikor a vizsgált molekulák néhány K hőmérsékletre hűlnek le. Ez az ún. szuperszonikus fúvóka (vagy jet) technika. Másik gyakran alkalmazott technika a mátrixizoláció. Ekkor az előállított molekulákat nemesgázzal hígítva néhány K-es hőmérsékletre fagyasztják le. A nemesgázmátrix nemcsak azért előnyös, mert nem reagál a vizsgált molekulával, gyökkel, hanem ideális, közel kölcsönhatásmentes környezetet is biztosít. Ilyen módon kis térfogatban is elegendő speciesz gyűjthető össze a vizsgálatához. Mindkét technikát használják nem reaktív molekulák spektrumának felvételéhez is, hiszen az alacsony hőmérséklet, valamint a közel kölcsönhatásmentes környezet jól szimulálja a molekulafelhőkben uralkodó körülményeket.

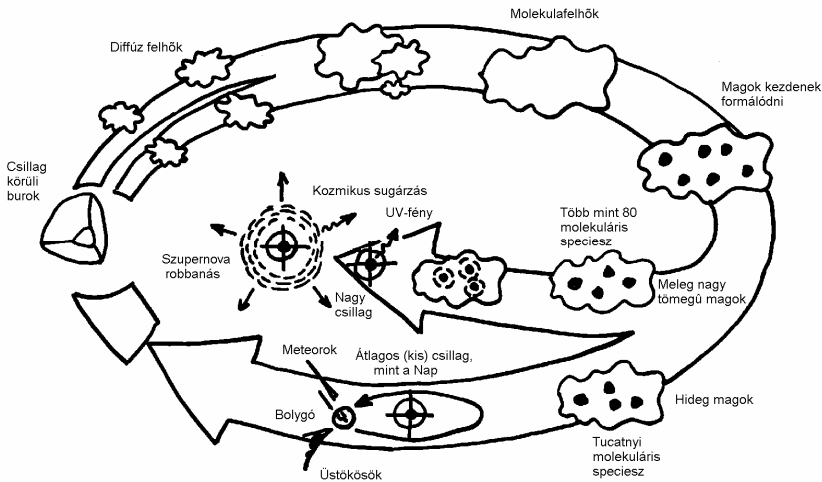
Ahhoz, hogy a laboratóriumi spektrumokat össze lehessen vetni a csillagászati spektrumokkal néhány utólagos korrekciót is el kell végezni.

Ezek közül legfontosabb a vizsgált molekulafelhő mozgásának a figyelembevétele. Ennek az a hatása, hogy a spektrumvonalak más frekvenciánál jelennek meg, mintha a felhő nem mozogna a Földhöz képest. Távolodás esetében minden vonal a nagyobb hullámhosszú értékek irányába tolódik. Mivel a látható tartományban ez a vörös felé tolódást jelenti, ezért ezt vöröseltolódásnak nevezik. (A jelenséget Doppler effektusnak hívják. Ez az effektus a hanghullámok esetében is jelentkezik, amivel már mindenki találkozott: a felénk tartó vonat dudájának hangját magasabbnak, a távolodóét pedig mélyebbnek halljuk, mint az álló vonatét.) Mivel ez a hatás minden vonalat ugyanolyan mértékben tol el a spektrumban, ezért ezt könnyen lehet korrigálni.

Még nehezebb feladat a már azonosított specieszek közötti kémiai reakciók laboratóriumi vizsgálata extrém körülmények között. Ilyen kísérleteket nagyon kevés laboratóriumban végeznek, ezek közül legismertebb az angol és francia együttműködésben végzett CRESU (Cinétique de Réaction en Écoulement Supersonique Uniforme) projekt. Ebben a kísérletben két – szuperszonikus jettel létrehozott – molekulaszugarat ütköztetnek. Ennek során meg tudják állapítani a lehetséges reakciókat és a reakciósebességeket különböző hőmérsékleten. Az így mért adatokat ezután be lehet építeni olyan programokba, amelyek modellezik a molekulafelhőkben végbemenő reakciókat. Így lehetőségünk nyílik arra is, hogy megértsük, hogy az egyes molekulák milyen reakcióúton keletkeznek, illetve reagálnak tovább a tőlünk akár több ezer-tízezer fényévre levő molekulafelhőben.

Egzotikus molekulák gyűjtőtárai: a csillagközi felhők

Mivel az Univerzumban szétszóródó anyag a csillagközi felhőkön keresztül kapcsolódik a ciklikusan ismétlődő csillagképződési folyamatba, állandó kicserélődés van a csillagok és a csillagközi gáz között. Ez az állandó anyagcsere az elemek átlagosan egyenletes gyakorisági eloszlását eredményezi az Univerzumban (6. ábra). A csillagközi anyagban a leggyakoribb elem a hidrogén (93,38%), ezt követi a hélium 6,49%-kal. A biogén elemek (szén, nitrogén, oxigén) együttesen tesznek ki 0,11%-ot (arányuk egymáshoz viszonyítva: O:C:N = ~7:3:1), míg a neon, szilícium, magnézium és kén együtt 0,002% gyakorisággal rendelkeznek (relatív előfordulási gyakoriságuk: Ne:Si:Mg:S = 8:3:3:2). Az egyéb eddig fel nem sorolt elemek teszik ki a maradék közel 0,02%-ot.



6. ábra: Atomok és molekulák körforgása egy galaxisban

A csillagközi anyag 99% gázból és 1% porból áll, a két összetevő aránya nagyjából mindenütt azonos. A csillagközi anyag két jól elkülönülő fázisra osztható: a híg meleg felhőközi anyagban sűrűbb, hideg felhők „úsznak”. A felhőközi anyagnak két fő komponense van: a 10^4 K körüli hőmérsékletű meleg komponens és a 10^5 – 10^6 K hőmérsékletű forró komponens. Ez utóbbi a felhőközi anyagnak csak kis hányadát foglalja magában, de térfogata igen jelentős.

A felhőkben a csillagközi anyag tömegének 80%-a koncentrálódik. Két csoportra oszthatjuk őket: a kevésbé sűrű, 50–100 K hőmérsékletű diffúz (ún. HI) felhőkben a hidrogén semleges, de atomos állapotban van jelen. A másik csoport a 10 K körüli hőmérsékletű molekulafelhők, amelyek sűrűbbek, így a bennük levő porszemcsék leárnyékolják az UV-sugárzást, és felületükön hidrogénatomokat kötnek meg, amelyek így nagyobb valószínűséggel alakulhatnak H_2 molekulákká. A molekulafelhők a legjellemzőbb H_2 molekula mellett más molekulákat is tartalmaznak, összességében több mint 130 különböző molekuláris speciest kimutattak már, ezeket az 1. táblázat foglalja össze az alkotó atomok száma szerinti csoportosításban.

1. táblázat: A csillagközi térben (és csillagok körül) 2007 augusztusáig azonosított molekulák (l: nyíltláncú, c: gyűrűs izomer. A zárójelben szereplő molekulákat még nem azonosították 100%-osan meggyőzően.)

2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
atomos	atomos	atomos	atomos	atomos	atomos	atomos	atomos	atomos	atomos	atomos	atomos
H ₂	C ₃	c-C ₃ H	C ₅	C ₅ H	C ₆ H	CH ₃ C ₃ N	CH ₃ C ₄ H	CH ₃ C ₅ N	HC ₉ N	(C ₆ H ₆)	HC ₁₁ N
AlF	C ₂ H	l-C ₃ H	C ₄ H	l-H ₂ C ₄	CH ₂ CHCN	HC(O)OCH ₃	CH ₃ CH ₂ CN	(CH ₃) ₂ CO	CH ₃ C ₆ H	(C ₂ H ₅ OCH ₃)	
AlCl	C ₂ O	C ₃ N	C ₄ Si	C ₂ H ₄	CH ₃ C ₂ H	CH ₃ COOH	(CH ₃) ₂ O	(CH ₂ OH) ₂			
C ₂	C ₂ S	C ₃ O	l-C ₃ H ₂	CH ₃ CN	HC ₃ N	C ₇ H	CH ₃ CH ₂ OH	CH ₃ CH ₂ CHO			
CH	CH ₂	C ₃ S	c-C ₃ H ₂	CH ₃ NC	CH ₃ CHO	H ₂ C ₆	HC ₇ N				
CH ⁺	HCN	C ₂ H ₂	H ₂ CCN	CH ₃ OH	CH ₃ NH ₂	CH ₂ OHCHO	CH ₃ C(O)NH ₂				
CN	HCO	NH ₃	CH ₄	CH ₃ SH	c-C ₂ H ₄ O	(l-HC ₆ H)	C ₆ H ⁺				
CO	HCO ⁺	HCCN	HC ₃ N	HC ₃ NH ⁺	H ₂ CCHOH	(CH ₂ CHCHO)	C ₃ H ₆				
CO ⁺	HCS ⁺	HCNH ⁺	HC ₂ NC	HC ₂ CHO	C ₆ H ⁺	CH ₂ CCHCN					
CP	HOC ⁺	HNCO	HC ₃ OH	NH ₂ CHO							
SiC	H ₂ O	HNCS	H ₂ CNH	C ₅ N							
HCl	H ₂ S	HOCO ⁺	H ₂ C ₂ O	l-HC ₄ N							
KCl	HNC	H ₂ CO	H ₂ NCN	c-H ₂ C ₃ O							
NH	HNO	H ₂ CN	HNC ₃	(H ₂ CCNH)							
NO	MgCN	H ₂ CS	SiH ₄								
NS	MgNC	H ₃ O ⁺	H ₂ COH ⁺								
NaCl	N ₂ H ⁺	c-SiC ₃	C ₄ H ⁺								
OH	N ₂ O	CH ₃									
PN	NaCN										
SO	OCS										
SO ⁺	SO ₂										
SiN	c-SiC ₂										
SiO	CO ₂										
SiS	NH ₂										
CS	H ₃ ⁺										
HF	SiCN										
SH	AiNC										
HD	SiNC										
(FeO)	HCP										
O ₂											
CF ⁺											
(SiH)											
PO											

A molekulafelhőkben detektált molekulák 97%-a semleges, 3%-a pedig pozitív töltésű. Anionok jelenlétét csupán az utóbbi év során sikerült igazolni, 2006-ban fedezték fel az első aniont a Taurus molekulafelhőben (C₆H⁻), amelyet 2007-ben további két negatív töltésű molekulaion detektálása követett (C₄H⁻ és C₈H⁻).

A csillagközi térben a leggyakoribb molekula a H₂, 10⁴-szer nagyobb az előfordulási gyakorisága, mint a második leggyakoribb molekulának, a CO-nak. A szén-monoxidhoz és hidrogénmolekulához képest az összes többi többatomos speciesz csak nyomnyi mennyiségben fordul elő. A detektált molekulák 2–13 atomból állnak, főként szerves vegyületek. A specieszek izotópokban is nagy változatosságot mutatnak, D, ¹³C és ¹⁸O is előfordul bennük. A vegyületek több mint fele ismert és könnyen szintetizálható földi körülmények között, mint például a víz (H₂O), az

ammónia (NH_3), a formaldehid (H_2CO) és az egyszerű alkoholok (mint a metanol, CH_3OH illetve az etanol, $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$). Akadnak azonban szép számban reaktív molekulák (pl. HNC , HCCNC) és molekulaionok (pl. H_3^+ , HCO^+ , H_3O^+ , HOC^+), sőt gyökök (pl. a lineáris C_nH gyökök, ahol $n = 2-8$, vagy a szokatlan háromtagú gyűrűs C_3H és C_3H_2) is. Azonosítottak már a harmadik periódus elemeit, például szilíciumot és ként tartalmazó molekulákat is (pl. SiN , SiC vagy SO , H_2S).

Mivel a földi élet a szerves kémián alapul, ezért a szerves vegyületek jelenlétének vizsgálata segít a lehetséges Földön kívüli élet felkutatásában. A biogén elemekből (hidrogénből, szénből, nitrogénből, oxigénből, foszforból és kénből) álló szerves molekulák jellemző alkotói a molekulafelhőknek. Két jól ismert sűrű csillagképződési területen, az Orion és a Sagittarius molekulafelhőkben végzett rádiócsillagászati megfigyelések azt bizonyították, hogy ilyen molekulák kialakulhatnak ezekben a régiókban.

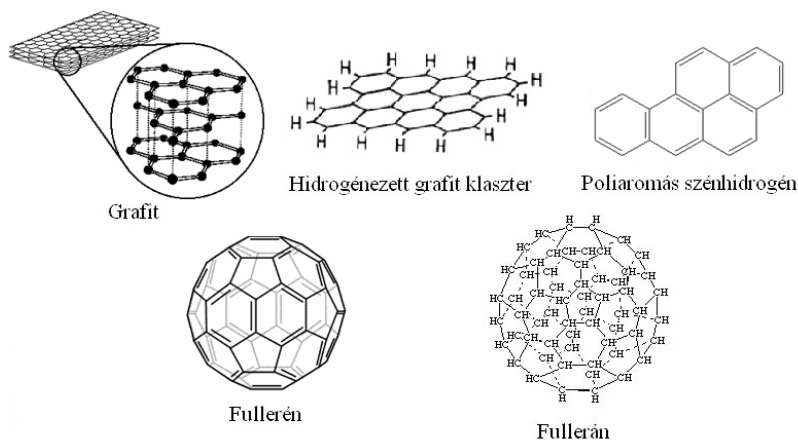
A kozmikus szén nagy aránya a széntartalmú szilárd anyaghoz kötődik, ami különböző szerkezetekben fordulhat elő (pl. amorf szén, korom). A kis széntartalmú vagy szilikát részecskék felületére jég rakódik le a hideg molekulafelhőkben, ezek felülete teret ad további bonyolultabb vegyületek kialakulásához. Az ilyen szemcsék felületén metanol, etanol, és magasabb szénatomszámú alkoholok képződhetnek, amelyekből még nagyobb molekulák jöhetnek létre alkil-kation átviteli reakciókon keresztül. A gyakran észlelt két éter molekula ($(\text{CH}_3)_2\text{O}$ és $\text{CH}_3\text{OC}_2\text{H}_5$) szintén nagy jelentőségű biomolekulák kialakulására nyújt lehetőséget.

Biológiai szempontból kiemelkedő fontosságú vegyületek a szénhidrátok, amelyeknek legkisebb képviselőit már megtalálták a csillagközi környezetben. A legegyszerűbb cukornak, a glikolaldehidnek (HOCH_2CHO) a detektálása Jan Michael Hollis és munkatársainak nevéhez fűződik. Munkájukban a glikolaldehid eloszlását vizsgálták a Sagittarius B2 óriás molekulafelhőben.

Nagy figyelmet fordítottak az aminosavak, különösen a legkisebb aminosav, a glicin ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$) azonosítására is. Az aminosavak azonban nagyon érzékenyek az UV-sugárzásra, már viszonylag alacsony energiájú sugárzás hatására is elbomlanak. Ennek is köszönhető, hogy a glicint eddig még nem sikerült közvetlenül azonosítani a spektrumokban, csak a lehetséges bomlástermékeit. Laboratóriumi kísérletek viszont arra vallanak, hogy a glicin jelen lehet, sőt a glicinmolekulákból nagyobb aminosavak is képződhetnek a sűrűbb, hideg molekulafelhőkben,

amelyekben a porrészecskék felfogják az UV-sugárzás nagy részét. Az eddig azonosított legnagyobb peptidkötést tartalmazó molekula az acetamid ($\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$).

Az 1. táblázatban bemutatott 13 atomot tartalmazó molekuláknál nagyobb vegyületek létezését is igazolták már a csillagközi térben. Kristen Sellgren és munkatársai 1983-ban infravörös spektroszkópiai méréseket végeztek diffúz felhők meleg régióiban, amelynek során grafityszerű anyag jelenlétét sikerült kimutatni. Mivel az ilyen csillagközi környezetben a hidrogénnek igen nagy az előfordulási gyakorisága, ezért a molekuláik szélein található telítetlen szénatomok hidrogénnel telítődnek, így a szerves kémiából ismert poliaromás szénhidrogének (PAH-ok) dehidrogénezett változatát detektálták. Adrian Webster 1992-ben közölt eredményei szerint a diffúz felhők spektrumainak jellegzetes sávjaiért legvalószínűbben a különböző hidrogénezett fullerének (ún. fulleránok) a felelősek. (Lásd 7. ábra.)



7. ábra: Szén- és hidrogéntartalmú nagymolekulák a csillagközi térben

A világűrben minden bizonnyal számos olyan molekula létezik, amelyet még nem sikerült detektálni. Erre bizonyíték, hogy vannak olyan nagyobb molekulák (pl. karbonsavak, aminosavak), amelyeket meteoritmintákban már azonosítottak. Így feltételezhető, hogy a csillagközi térben is léteznek, csak még nem sikerült megfigyelni őket. Ennek különböző okai lehetnek. Az egyik ilyen ok lehet, hogy az adott

molekulát nehéz detektálni (például a N_2). Előfordulhat az is, hogy az adott vegyület csak reakciók közttermékeként létezik (például a CH_3^+) és gyorsan bomlik. A harmadik lehetséges ok, hogy az adott molekulának nincs specifikus jellegzetessége az abszolút azonosításhoz (például egy poliaromás szénhidrogénnek), a vegyületcsaládnak általános spektruma van, nehéz őket egyedileg azonosítani.

Molekulák születése: reakciók a csillagközi térben

A molekulák képződésével kapcsolatosan alapvető kérdés, hogy hol és hogyan (milyen mechanizmussal, milyen kémiai reakciókon keresztül) tudnak szintetizálódni az űrben.

Az első kérdésre könnyen válaszolhatunk. A molekulák képződésével elsősorban a csillagközi tér felhőiben: a melegebb diffúz felhőkben, valamint a hidegebb, sűrűbb molekulafelhőkben számolhatunk.

A második kérdés jóval összetettebb. A molekulák kialakulásának mechanizmusaival a reakciókinetika foglalkozik. Az ilyen kinetikai számítások matematikailag igen bonyolulttá válnak, mihelyt a reakció mechanizmusa néhánynál több reakciólépést tartalmaz. Ilyen esetekben különböző egyszerűsítéseket lehet figyelembe venni.

Ha a felhő gravitációs összehúzódásához és a molekulák szemcsékre való kifagyási sebességéhez képest a kémiai reakciók sebessége nagy, feltételezhetjük, hogy egy többlépéses reakcióban (pl. $A \rightarrow B \rightarrow C$) a közttermék (B) koncentrációja kicsi és állandó. (Azaz nem távolodik el és nem fagy ki a szemcsékre, hanem a következő reakcióban továbbalakul.) Diffúz felhőkben, ahol m^3 -ként mindössze 10^8 db speciesz található, ez a feltételezés alkalmazható, ami jelentősen megkönnyíti a többlépéses reakciómechanizmusok kezelését. Ezzel szemben a molekulafelhők sűrű magjában, ahol $>10^{10}$ db speciesz fordul elő m^3 -ként, a fenti feltétel már nem áll fenn, emiatt a reakciókinetikai számítások is sokkal bonyolultabbá válnak.

Ezekben a szimulációkban a feltételezett kémiai reakcióra vonatkozó laboratóriumi mérési eredményeket (pl. a reakciósebesség hőmérsékletfüggése), valamint a csillagközi felhőben uralkodó fizikai körülményeket (pl. hőmérséklet, nyomás, UV sugárzás eloszlása) betáplálják egy számítógépbe. Ezután a reakciókinetikai program kiszámolja azt, hogy a megadott feltételek szerint milyen molekulák és

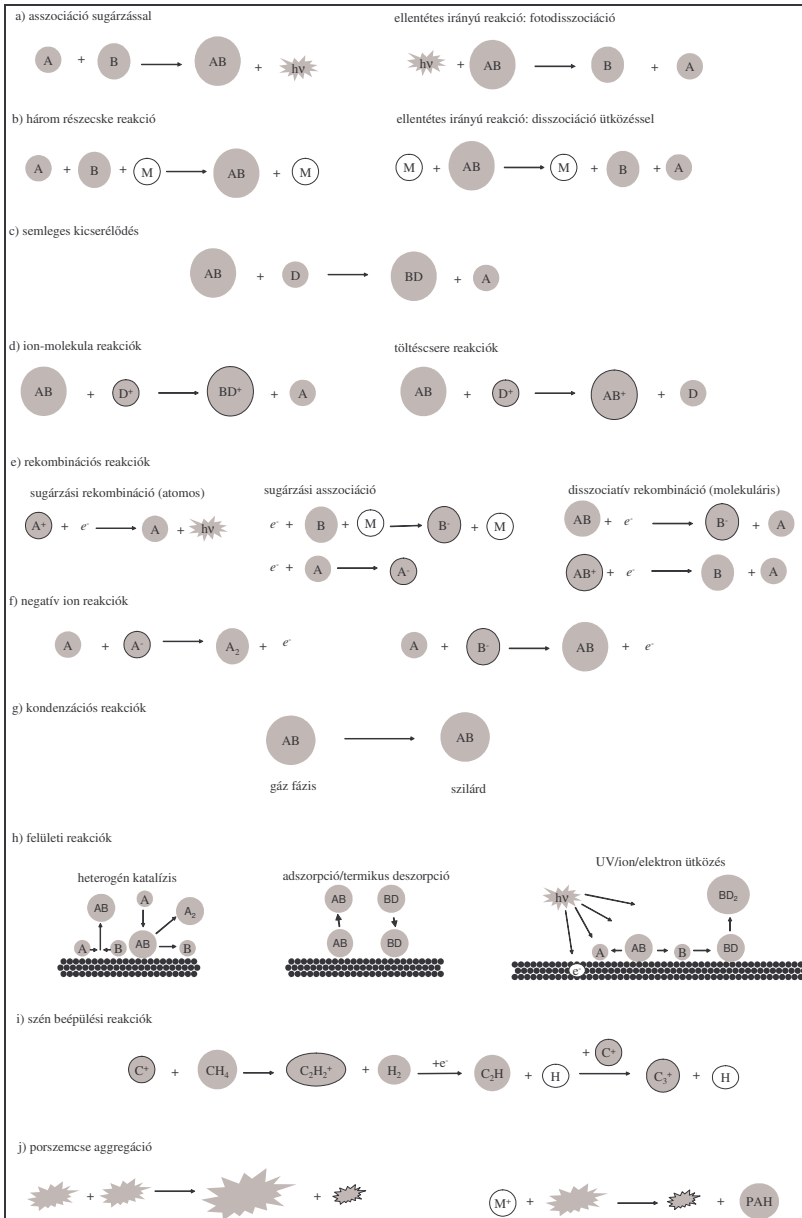
milyen mennyiségben keletkezhetnek az adott csillagközi felhőben. Végül ezt összevetik a felhőben, a spektrumok alapján mért molekulák koncentrációjával. Ha nem elég pontos a szimuláció, akkor összefüggéseket keresnek, újabb reakciókat feltételeznek, vagy módosítják a kiindulási feltételeket. Ez utóbbi lépés jelenti mindig a legnagyobb kihívást. A reakciókinetikai vizsgálatok alapján még egyes 2–3 atomból álló egyszerű molekulák pontos keletkezési útvonalai sem teljesen tisztázottak, a nagyobb molekulák keletkezési mechanizmusairól pedig még szegényesebbek az elképzeléseink.

A csillagközi felhőkben lejátszódó kémiai reakciók modelljei több száz specieszt és több ezerféle reakciót vizsgálnak. A mai ismeretek legátfogóbb reakciólistáját egy folyamatosan bővülő adatbázis (ún. UMIST adatbázis) tartalmazza, amely a leggyakoribb 12 elemből (H, C, N, O, F, Na, Mg, Si, P, S, Cl, és Fe) felépülő 420 speciesz 4573 reakciójának kinetikai leírását foglalja magában.

A csillagközi térben lejátszódó kémiai reakciók típusait a 8. ábra foglalja össze. Míg a sűrűbb csillagkeletkezési területeken megfigyelt néhány speciesz képződésében a gázfázisú reakciók igen jelentősek, a porszemcséken lejátszódó reakciók is igen fontos szerepet játszanak a molekulafelhők összetételének kialakításában.

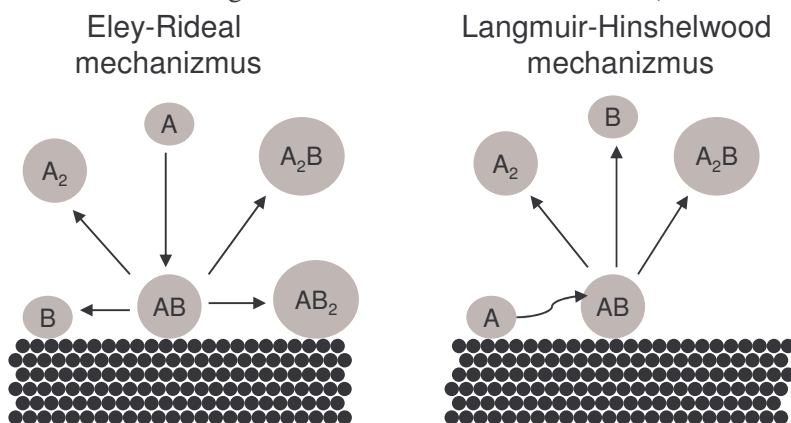
A legtöbb gázfázisú reakcióban termék csak akkor képződhet, ha a reaktánsok ütközésének energiája elegendően nagy. A reakciók során ugyanis az ütköző molekuláknak egy energiagáton (aktiválási energia) kell keresztülmenniük, mielőtt termékek keletkeznek. Egy tipikus reakcióban résztvevő atomok vagy molekulák akkor rendelkeznek elegendő energiával a gát átlépéséhez, ha a gáz több száz vagy ezer K hőmérsékletű. Egy tipikus molekulafelhőben a hőmérséklet azonban csak 10 K körüli. Ezen a hőmérsékleten a szokványos reakciók közül csak néhány játszódhat le, az is csak igen kis reakciósebességgel.

Azonban nem minden reakció igényel aktiválási energiát. A kémiai reakciók könnyebben mennek végbe, ha gyökök vagy ionok vesznek részt a reakciókban. Ellenkező töltésű ionok reakciókorlát nélkül tudnak egymással reagálni. A gyökök között lejátszódó exoterm reakciók pedig az aktiválási energia hiánya miatt nagy reakciósebességet érhetnek el 10 K hőmérsékleten is. Ezekben az esetekben azonban a gyökök, illetve az ionok létrehozásához van szükség energiabefektetésre, amit pl. a jelenlévő UV sugárzás biztosíthat.



8. ábra: A csillagközi térben lejátszódó reakciók típusai

A csillagközi anyag tömegének 1%-át porrészecskék alkotják. Ezeknek a részecskéknek kulcsszerepük van a csillagközi tér kémiájában, mivel felületük katalizálhat egyes kémiai reakciókat. Egy katalizátor úgy hat, hogy kisebb aktiválási energiájú reakcióutat biztosít a reagensek számára, de nem befolyásolja az egyensúlyt, csak azt a sebességet, amellyel ez az egyensúly beáll. Ennek egyik lehetséges módja a heterogén katalízis, amikor a katalizátor és a reagensek különböző halmazállapotúak, jelen esetben gáz-szilárd rendszerekről van szó. Kétféle elmélet létezik a felületeken lejátszódó katalitikus folyamatok tárgyalására: az Eley-Rideal-mechanizmus és a Langmuir-Hinshelwood-mechanizmus. (Lásd 9. ábra.)



9. ábra: Felületen lejátszódó kémiai folyamatok mechanizmusai

Az Eley-Rideal-mechanizmus szerint a felületi katalitikus reakció úgy játszódik le, hogy egy gázfázisú molekula (A) ütközik egy már a felületen levő molekularészlettel (AB). Ebben az egyszerű esetben egy összetettebb molekula képződik (A_2B), amely maradhat a felületen kötve, vagy deszorbeálódhat közvetlenül a gázfázisba. Egy alternatív reakcióút is lehetséges: szubsztitúciós reakció játszódik le és két új speciesz képződik (A_2 és B), ezeknek bármelyike maradhat a felületen, illetve deszorbeálódhat.

A Langmuir-Hinshelwood-mechanizmus szerint a reakciók a felületen adszorbeált molekula fragmentumok és atomok közötti találkozás révén játszódnak le. Az egyik speciesz egy alacsony energiájú kötési helyen tartózkodik, míg a másik szabadon diffundál a felületen. A

diffundáló részecske (A) nekiütközik a kémiailag kötött (kemisorbeált) speciesznek (AB) és új vegyületet hoznak létre (A_2B), amely maradhat a felületen kötve, illetve deszorbeálódhat.

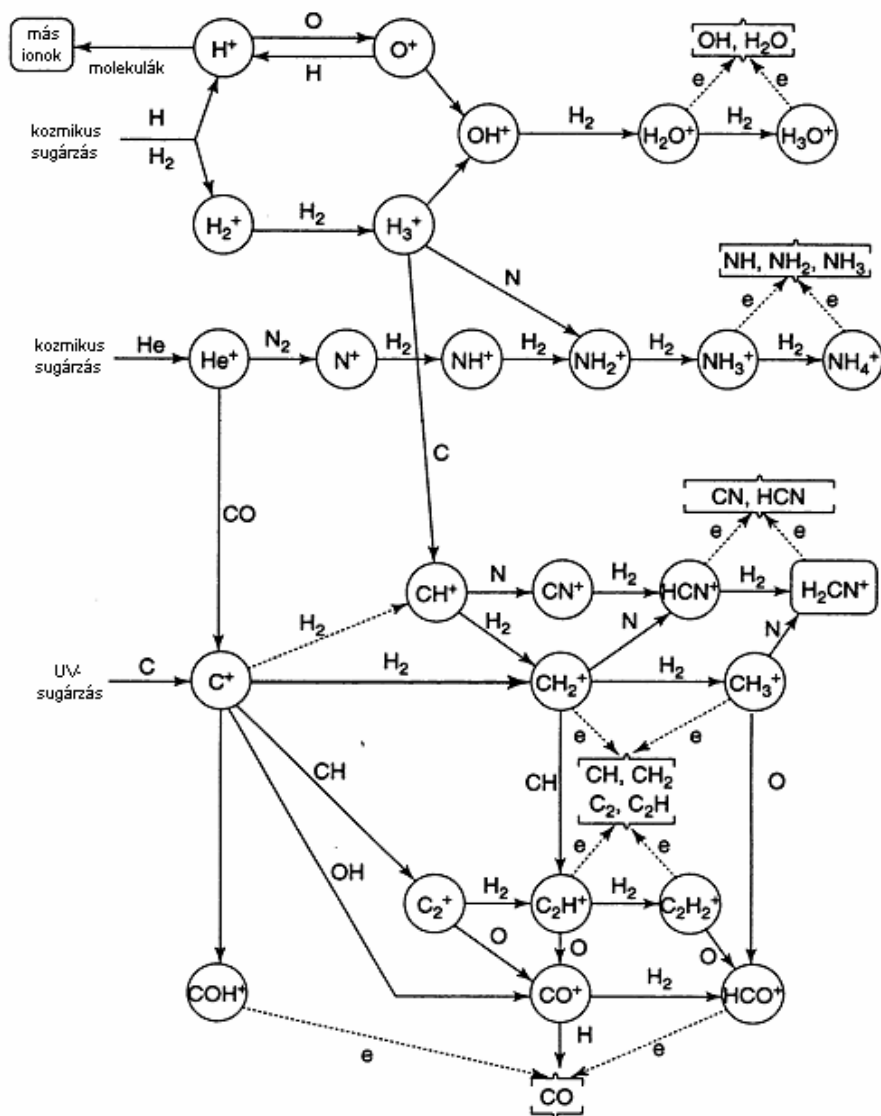
A molekulafelhőkben lejátszódó legfontosabb reakció a H_2 molekula képződése. Egy H atom ütközik egy porszemcsével, a hidrogénatom gyengén kötődik a szemcséhez, diffúzióval mozogni tud a felületén. A diffundáló hidrogénatom végül találkozik egy másik H atommal és rekombinálódnak molekulát alkotva. Közben leadják a kötés létrejöttkor felszabaduló energiát a szemcse felületének, amelynek ezáltal kis mértékben nő a hőmérséklete. Végül a keletkezett H_2 molekula elpárolog a szemcse felszínéről.

A szemcse felületén kötött hidrogénatom diffúzió révén nehezebb elemekkel (O, C, N) is találkozhat és OH, CH vagy NH gyököket hozhatnak létre, amelyek további hidrogénatomok felvételével telített vegyületekké alakulhatnak: H_2O , CH_4 , NH_3 .

Amint a H_2 molekula létrejött a szemcséken és deszorbeálódott a csillagközi gázba, a kozmikus sugárzás hatására ionizálódhat és H_2^+ ion alakulhat ki. A H_2^+ ion igen reaktív és egy további H_2 molekulával gyorsan reakcióba tud lépni, amelyben H_3^+ ion képződik. (A H_3^+ iont infravörös abszorpciója alapján azonosították a csillagközi környezetben.) A H_3^+ ionnak kulcsszerepe van a molekulafelhőkben lezajló reakciókban. Mivel nagyon erős sav, így könnyen protonálja a semleges atomokat, molekulákat. Oxigénnel reagálva például OH^+ ion keletkezik, amely két lépésben H_2 -nel oxóniumionná (H_3O^+) képes alakulni. Nitrogénnel NH_2^+ iont alkot, amely két lépésben H_2 -nel ammónium-ionná (NH_4^+) alakulhat. Szénnel pedig CH^+ iont hoz létre, ami egy H_2 -nel tovább reagálva CH_2^+ iont alkot, amelyből további reakciókkal a nagyobb szerves molekulák is ki tudnak alakulni. A molekulák egymásba alakulásának lehetőségeit az ún. kémiai hálók foglalják össze, egy ilyen hálót mutat be a 10 ábra.

Észlelhetünk-e Földön kívüli életet spektroszkópia segítségével?

Az előzőekben láttuk, hogy a csillagközi felhőkben nagy valószínűséggel lehetőség van arra, hogy számos nagy, az élet szempontjából is fontos biomolekula szintetizálódjon. Ezek detektálását azonban nehezíti viszonylag kis koncentrációjuk, valamint az, hogy a molekulák méretének növekedésével a spektrumok is egyre bonyolultabbá válnak.



10. ábra: Kémiai háló

Jelenlegi ismereteink alapján pedig az élet (legalábbis a földi típusú) szilárd felületű bolygóhoz, valamint folyékony vízhez köthető. A

Naprendszeren kívüli bolygók (exobolygók) vizsgálata spektroszkópia segítségével jelenleg még igen nehéz. A bolygók ugyanis a csillagközi felhőkhöz képest igen kicsik, ráadásul értékelhető spektrumhoz csak akkor juthatunk, ha a bolygó pont a csillaga és a Föld közötti egyenesen helyezkedik el. Ekkor a bolygó atmoszférájában levő molekulák adott frekvenciáknál elnyelhetik a csillag fényét. Ennek a detektálásához viszont nagyon érzékeny műszerekre van szükség. Nem véletlen, hogy elsőként csak idén (a Nature folyóiratban) közölték az első olyan eredményt, amikor egy molekulát, a vizet azonosították egy hatalmas exobolygó atmoszférájában. (A Naprendszer bolygóinak kémiáját egy későbbi cikkben fogjuk bemutatni.)

Nem zárható ki azonban az, hogy a földi műszereink egyszer a Földön kívüli élet jeleire bukkannak. Az arecibo rádiótávcső által regisztrált (nem spektroszkópiái, hanem időben változó) rádiójeleket ugyanis egy világméretű projekt (SETI program, Search for ExtraTerrestrial Intelligence) keretében több mint 5 millió számítógép analizálja, annak a reményében, hogy mesterséges adatsorra leljenek 200 kiszemelt csillag felől érkező jelek zajában.

Ajánlott olvasmányok, érdekes honlapok:

- Balázs Béla, Érdi Bálint, Marik Miklós, Szécsényi-Nagy Gábor, Vízi Zsuzsanna: Bevezetés a csillagászatba, Nemzeti Tankönyvkiadó, 1994
- Marik Miklós: Csillagászat, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1989
- J. Herrmann: SH atlasz: Csillagászat, Springer-Verlag, Budapest, 1996
- A NASA asztrokémiai laboratóriumának honlapja:
<http://www.astrochemistry.org>
- A csillagközi térben azonosított molekulák állandóan frissülő listája:
http://www.ph1.uni-koeln.de/vorhersagen/molecules/main_molecules.html
- Az infravörös csillagászat története:
http://coolcosmos.ipac.caltech.edu/cosmic_classroom/timeline/index.html
- A Herschel űrteleszkóp honlapja: sci.esa.int/herschel
- A SETI program: <http://www.seti.org/>, <http://seti.index.hu/>

A csillagközi tér kémiájáról 2007. november 15-én előadás (*Tarczay György: Kémia a csillagok között*) hangzott el az ELTE Kémiai Intézete által szervezett ALKÍMIA MA előadássorozat keretében. Az előadás fóliái, valamint az előadás videófelvétele letölthető a sorozat honlapjáról: http://www.chem.elte.hu/pr/alkimia_ma.html.