



Projekt címe: **ZÖLD ENERGIA NEMZETI FELSZŐOKTATÁSI EGYÜTTMŰKÖDÉS - ZENFE**
Projekt azonosító: TÁMOP-4.1.1.C-12/1/KONV-2012-0012 projekt

Segédanyag a Biomonitoring tantárgy oktatásához

Előkészítés alatt



A projektek az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósulnak meg.

Biomonitoring

Környezet és/vagy rendszer

„Az út örök és tétlen mégis mindent végbevisz észrevétlen.
Ha fejedelmek, királyok megőrzik, minden magától rendeződik.
Ha kapálóznak és intéznek, letöri őket a titkos természet.
Vágytalan a titkos természet, s a vágy hiánya:
béke, az ég alatt a rend teljessége.”

Lao Ce: Tao Te King

Ismeretes, hogy a napjainkra kialakult földi viszonyok (élettelen és élő anyag-, energiaformák módosulásai), azaz, **a köznapiban értelemben vett környezet kialakulási folyamata nem tanulmányozható egyetlen tudományos diszciplináris közelítéssel.**

A környezetünket érintő szakmai terület **sokfaktoros** jellege a kooperáló szaktudományos megközelítésekből származtatható. Ezért egyértelmű, hogy **a környezet vizsgálata (kutatása)** során

a föld-,

a kémia-,

a fizika- és

biológiai tudományok fundamentumán,

a *matematikai, számítástechnikai, a mérnöki, a társadalomtudományos és kapcsolt bölcsészeti, művészeti ismeretek* együttes metodikai tárházára építve alakítjuk ki és fejlesztjük tovább a környezettani tudást.

A **környezettudomány multidiszciplináris** jellege, a fenti megfontolás alapján könnyen érthető. Az is belátható, hogy **a környezeti események tudományos megközelítése (a probléma felvetése, megismerése, feltárása, mechanizmus szintű értelmezése és bemutatása) után egy társadalmi szinten megjelenő tevékenységformában testet öltő alkalmazott tudomány, a környezetvédelem segítségével lehet probléma-megoldási módozatokat végrehajtani.**

Ebben nagy segítséget jelentenek a **mérnöki, az agrár, az élelmiszeripari, biotechnológiai, stb. felhalmozott és rendszerezett ismeretek**, melyek napjaink környezetvédelmének haladó és hatékony technológiáit munkálták ki.

A környezettan tehát elméleti jellegű, multidiszciplináris alapkutatásokat folytató fiatal tudományág, mely megteremti a lehetőségét a preventív szemléletű emberi tevékenységek kialakításának.

A környezetvédelem viszont, ami kialakulásától kezdve *alkalmazott tudományos* ismereteket nyújtó és végrehajtási technológiai rendszereket felsorakoztató jellegű volt, eleinte a társadalmi szinten szervezett tevékenységek által okozott környezeti károk elhárítást végezte, mindezt a huszadik század első kétharmadában láthattuk.

A harmadik évezred kezdetén, elsősorban a tervszerű termelő tevékenységek szervezése (majd ezek ellenőrzött hatósági kötelezvényeivel) **a preventív környezetvédelemre helyezték a hangsúlyt. Tehát a környezetvédelem alkalmazott tudománya szakmai indíttatásában és eredményeiben is változást mutat, hiszen az eleinte követő jellegű (az okozott kár elhárításának feladatköreiből kialakult) tudományból, megelőző (preventív technológiákat kidolgozó, adaptáló, ellenőrző és javító) jellegű tudománnyá vált.** Mindezt a tudományon belüli hangsúly áthelyeződést közel egy évszázad alatt prezentálta a környezetvédelem alkalmazott tudománya.

A felvázoltak alapján észlelhetjük, hogy egy rendkívül gyorsan bővülő ismeretanyaggal rendelkező tudományterület a környezettan, amely a klasszikus alaptudományokból származtatja módszertanát és környezetkutatói hipotéziseit, melyeket azonnal a társadalmi alkalmazhatóság szempontjai szerint kontrollál a környezetvédelem szakterületén belül.

Mindezt igazolhatjuk a Föld helyzetének az univerzumon belüli bemutatásával, történeti áttekintésével, rámutatva a diszciplináris törvényszerűségekre. A „Nagy Bumm” elméletet tanulmányozva a világmindenségre érvényes fizikai folyamatokon keresztül ismerjük meg az **„anyag-domináns”-időszakot**, a pulzáló világegyetem modelljében.

A Föld univerzumban elfoglalt helyéből, valamint geológiai adottságaiból eredő viszonyai között folyamatként tanulmányozzuk a történéseket, és azokból származtatható, az alkalmazkodást irányító hatásokat.

Az energia és anyagszerveződés evolúciós alrendszerei

A földi viszonyok folyamatos változása az élet kialakulásának kedvező feltételrendszerét

biztosította. Az élettelen anyag és energiaformák rendkívüli gazdagságát bemutató **élettelen evolúcióban**, egészen az élet megjelenéséig, értelmetlen a változásokat, más szóval, az „evolúciót” idő szerint dimenzionálni.

Talán egyes szerves-anyagformák megjelenése már indokolttá tenné az idődimenzió alkalmazását, de megengedett, hogy átmeneti helyzetnek tekintsük ezeket az állapotokat az idődimenzió evolúciós szempontrendszerében. Oki tényezőként az előzőekhez azt kapcsolhatjuk, hogy a felosztást élő és élettelen vonatkozásában tettük, ebben a kontextusban a szervetlen anyag, mint nem élő került besorolásra.

Az élet, azaz, **az élő anyagforma kialakulását követően** már alapvetően **jellemző szempont és dimenzió az időfaktor**, melynek változásaival az élő anyagformák mintázatainak sokszínűsége időbeli függvényként (kinetikus görbékkel) írható le.

Az élő rendszereket az élettelenektől az **életjelenségeknek** nevezett tulajdonságok alapján különíthetjük el (mozgás, anyagcsere, szaporodás, homeosztázis, stb.), s mindazok **a paraméterek, amelyekkel ezen életjelenségek jellemezhetők** (ioneloszlás, pH, T, energianyerés, stb.) **időkinetikájukban** erősen **eltérnek**, (különböző karakterisztikákat prezentálók) **az élettelen rendszerekhez képest**.

Ugyanakkor igaz marad az a tétel, miszerint **az élő rendszereket működtető objektív törvényszerűségek (szabályszerűségek) az idő függvényében folyamatos változás alatt állnak, akár az életfolyamot, akár az egyedi konkrét élettartamokat vizsgáljuk.**

Az, **az időfüggvényében leírható változássorozat, mellyel az életfolyam jellemezhető** (pl. az élők habituális megjelenését illetően, vagy az élő anyag komplexitásának tekintetében) **az evolúció folyamataként** került be a köztudatba. Ennek értelmében az evolúció fogalma már kiterjeszthető.

Az evolúció tehát, az élő (és élettelen) rendszerek törvényeinek, szabályainak folyamatos változása az idő dimenzió szerint, egyensúlyi feltételek és események mellett, az alkalmazkodást prezentálva.

Amennyiben a **komplexitást**, mint **az anyagi szervezettség irányított alkalmazkodását** képviselő jellemzőt tanulmányozzuk, megállapíthatjuk, hogy az anyagok /*az elemek ↔, vegyületek ↔, szerves vegyületek ↔, szerves-polimerek ↔, szerves-biopolimerek ↔, biomakromolekulák ↔, kettőződésre képes biomolekulák ↔, és ezek komplexei ↔, . ↔, .↔, ↔,*

kezdetleges élő anyagformák , ..., élő anyagok, ↔,különböző szerveződésű élő anyagok ↔, stb.,/ (abszorbeált és átalakított) energiatartalmuk szerint evolúciós sorokba rendezhetők.

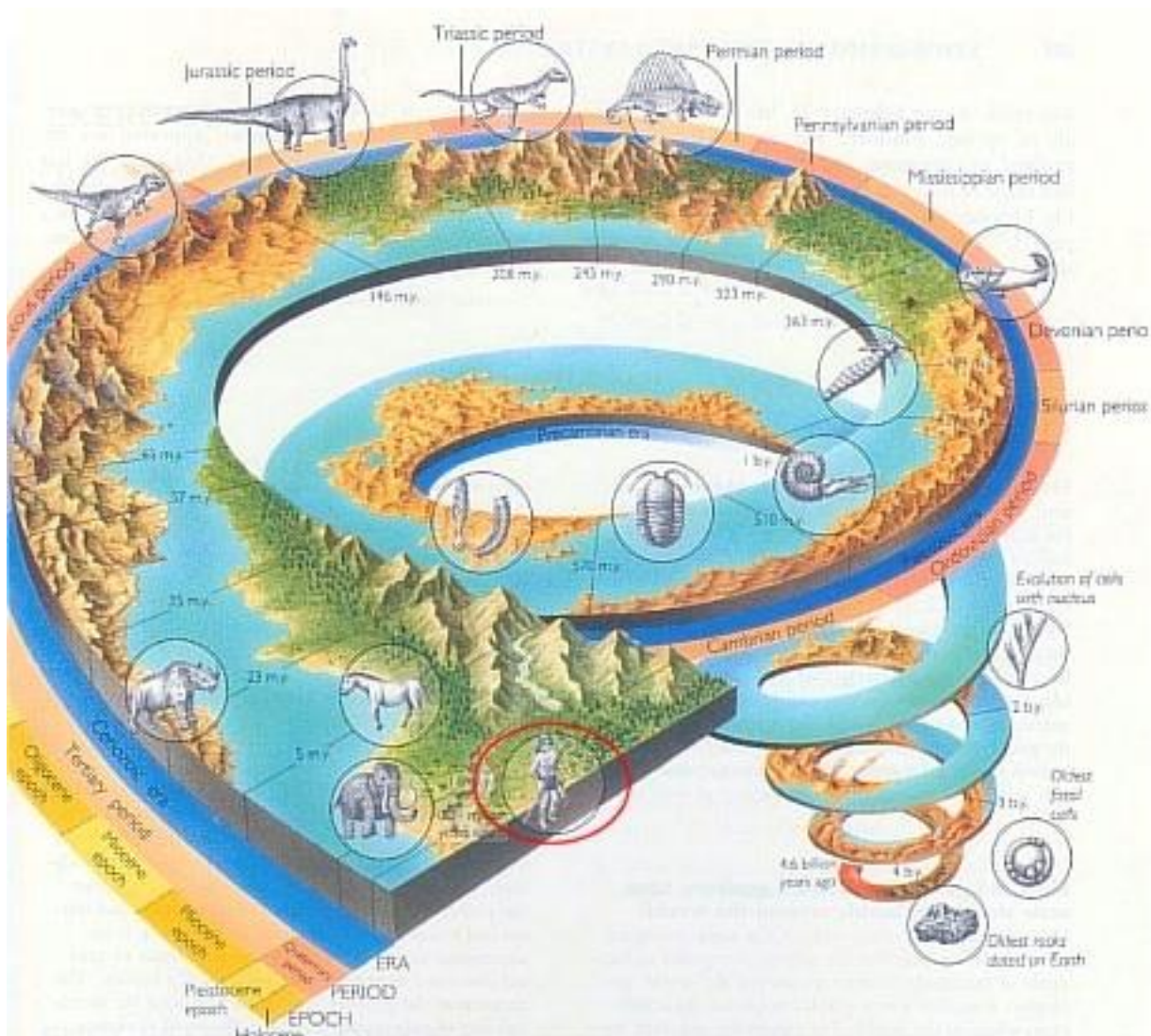
Az anyagi sokféleség konkrét megjelenési formájában, azt a környezetével egyensúlytartásra képes aktuális anyagi minőséget jelenti, amellyel a legnagyobb stabilitási paraméterek megtartása mellett volt képes az anyag alkalmazkodni, tehát fennmaradni.

Az anyag aktuálisan fennmaradó szervezettségi formája a funkcionálisan is megfelelést (aktív alkalmazkodásra képes anyagformát) hordozó habitust jelenti. Ebből adódóan kimondhatjuk, hogy **az anyagok és őket determináló környezetük szerint az élettelen és élő rendszerek alapvető törvényszerűségét, a *funkcionalitás*, azaz, az alkalmazkodási mintázat szerint prezentálják.**

Az alkalmazkodás biztosítéka a folyton változni képes anyag kitüntetett szempontok alapján struktúrába (szerkezetbe), rendszerbe, való szerveződése.

Könnyen belátható a fentiek szerint, hogy **az abiotikus rendszerek körülményekhez való adaptálódása vezetett a biotikus rendszerek strukturális kialakulásához, vagyis az *Életnek* élőlények formájában történő Földön való megjelenéséhez, alkalmazkodási folyamataihoz.**

ABIOTIKUS EVOLÚCIÓ ábra



1. ábra - Az élet evolúciója (University of Wisconsin USA oktató programja alapján módosítva)

(geológiai evolúció ábrái)

Az összes anyag megjelenési formája konkrét anyagi szerkezetével hordozza azt a funkciót, amellyel alkalmazkodik környezetéhez. **Az anyagok és környezetük** (komplement anyagok és energiák) tehát csak **egy egységként kezelhetők és vizsgálhatók**. Ezen megfontolás szerint, pl. a biotikus rendszerek az abiotikus rendszerekkel együtt tanulmányozandók,

ugyanis anyagot és energiát nyernek azokból, melyeket átalakítanak, miközben önmaguk is visszahatnak, mikro-környezetátalakító munkájukkal. Tehát egy **folyamatos dinamikus kapcsolat áll fenn az élő anyagforma és környezete között.**

Erre kiváló példaként szolgál, a **fotoszintetizáló zöld növények** jelenléte, melyek szervetlen anyagokat vesznek fel környezetükből (CO₂ és víz) valamint fény energiát (elektromágneses erőter: fotonok) abszorbeálnak. Ennek eredményeként képesek egyrészt szerves anyagaikat szintetizálni, valamint a szintézishez szükséges strukturális felépítésüket kialakítani és fenntartani. Továbbá más, biotikus és abiotikus rendszerek számára hasznosítható anyagokat (pl. oxigént), valamint energiát előállítani és kibocsátani.

A biotikus rendszerek strukturális felépítése az idő dimenzió módosulásával már nem lehetett akadály a funkcionalitásnak és az életképességnek, hiszen **dinamikusan változó struktúra elemek hordozzák a biológiai funkciókat.**

A biotikus rendszerek a felvett energiákat és anyagokat átalakítást követően visszajuttatják az abiotikus rendszerbe, mellyel nyílt, dinamikus egységet képeznek.

A biotikus és abiotikus rendszer tehát, együttesen képez egy egységes egészet.

A Földön az életjelenségeket hordozó biológiai anyagformákat és struktúraváltozásuk kinetikáját az idő függvényében vizsgálva igen nagy változékonyságot észlelhetünk, melynek során a környezeti feltételeket is képesek voltak az élő rendszerek átalakítani. A **redukáló légkörrel** rendelkező Föld, az élő anyagformák nagy mennyiségű és rendkívül hosszú időtartamú jelenléte során **oxidatív jellegűvé vált.** Mindehhez adaptálódni volt képes az ott és akkor jelenlévő biológiai anyagforma, így a mai élet feltételeit meghatározza az oxidatív földi légkör komponenseinek aránya. **Az oxigén-termelésben feltétlen részt vállaló élő anyagformák a növények** (producensek). Ezeket az élőlényeket, a jelenkori földi élet alapjainak tekintjük, hiszen szervetlenből szerves anyagot képesek produkálni miközben oxigént juttatnak a környezetbe. **A növények, azaz, a termelők által szintetizált szerves anyagok, és a kialakított kémiai energia fogja a heterotróf (állatok, gombák) élő szerveződések létéhez a szükségeszerű életfeltételeket biztosítani.**

Megállapítottuk tehát, hogy

- az élet kialakulásához és fennmaradásához szükséges feltételek (igények), azaz a klasszikus értelemben vett környezet folyamatosan változik, módosul az idő függvényében.
- a biotikus rendszerek együttesen és külön-külön is hatással vannak környezetükre, (így egymásra is) miközben változnak a környezet sajátosságait meghatározó abiotikus tényezők is.
- az abiotikus tényezők alapvetően azt a háttér anyag és energiamezőt képviselik,

melynek jelenléte nélkülözhetetlen az aktuális élő anyagforma kialakulásához, fennmaradásához.

Következményesen kimondható tehát, hogy,

- a biotikus rendszerek strukturális szerveződésének egyik feltétele a „háttér” jelenléte;
- a dinamikus anyagi struktúrákat hordozó élő anyagformák alkalmazkodásukkal követik a háttér, vagy ha úgy tetszik a környezet változásait;
- az alkalmazkodást meghatározó törvényszerűségek az egyre komplexebb biológiai anyagi rendszerek révén valósulnak meg;
- a korai embertípusok megjelenésével bezárólag a belső alkalmazkodási módozatok (szervezeti strukturális elemekkel történő adaptációk) tárházát vonultatják fel.

Belátható tehát, hogy az alkalmazkodás minősége és mértéke döntő fontosságú. Az evolúció szempontjából sikeresebb, („fejlettebb”) élő rendszerek a létező összes változással képviselt kihívásnak jobban meg tudnak felelni, ugyanis strukturális felépítésük biológiai funkciójukat tökéletesebb, szervezettebb (komplexebb) módon szolgálja. Ez a magyarázata annak, hogy az evolúció folyamán változatos felépítésű életformák jelentek (és jelennek) meg, melyek eltérő módon képesek az alkalmazkodásra.

Az abiotikus rendszerek evolúciója a változások mennyisége szerinti léptékben igen erőteljesen emelkedettnek tekinthető.

A Föld kb. 15 milliárd éve alakulhatott ki, majd a *folyamatos fizikai és kémiai változások* eredménye tette lehetővé hogy *a megelőző különböző kémiai anyagformákból a szerves vegyületek, makromolekulák*, majd a kezdetleges bakteriális szervezetek (*prokarioták*) megjelenését.

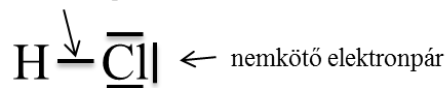
A vázolt rendszerben **a folyamatos átalakulások eleinte az élettelen anyagi strukturális változásokban nyilvánultak meg, melyet természetesen energiakommunikáció kísért.**

pl. A molekulák energiatartalma a kémiai kötésekben realizált energiákkal jellemezhető.

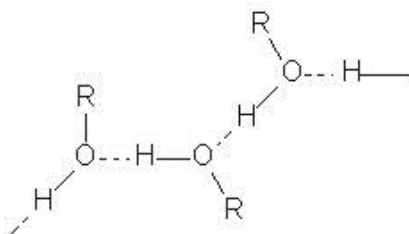
- **kovalens kötés:** közös elektronpár, nagy kötési energia,

50-110 kcal/mol

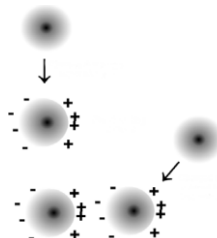
kötő elektronpár



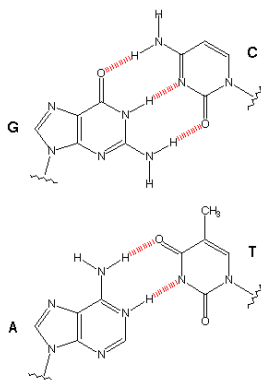
- **H-híd:** 3-7 kcal/mol; 2,7-3,1 Å, poláros molekulák között,



- **Van der Waals kötések:** 1-2 kcal/mol, ~4-10 Å; apoláros molekulák között,

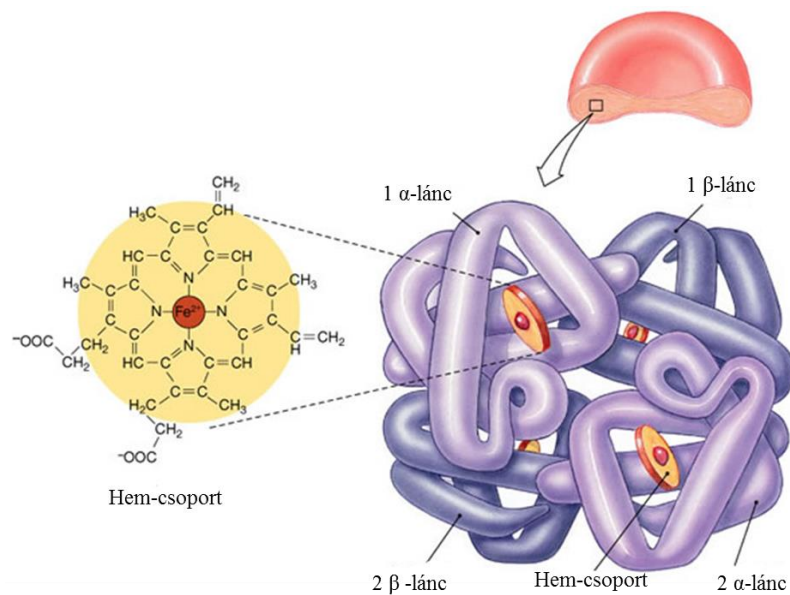


- **Gyenge másodlagos kötések:** a komplementer kötések pl. AG—AT között, max.: 2-6 kcal/mol (Forrás: Manju Bansal, DNA structure: revisiting the Watson-Crick double helix, Current Science, 85, 1556-1563, 2003)



- **Intramolekuláris kötések:** pl. globuláris fehérjéknél, (néhány eV)

Pl.: hemoglobin molekula (Forrás: Jonathan A. Lukin, Georg Kontaxis, Virgil Simplaceanu, Yue Yuan, Ad Bax, and Chien Ho, Quaternary structure of hemoglobin in solution, PNAS, 100, 571-520, 2003)



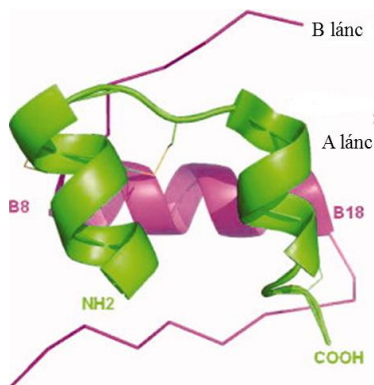
A későbbiekben, a már korábban kialakult és fixálódott strukturális változások biztosították az alapot az élő rendszerek működéséhez (pl. felületaktivitáshoz, kitapadásához).

Élő rendszerekben a strukturális változás szintén energia és anyagszerkezeti változásokat jelent.

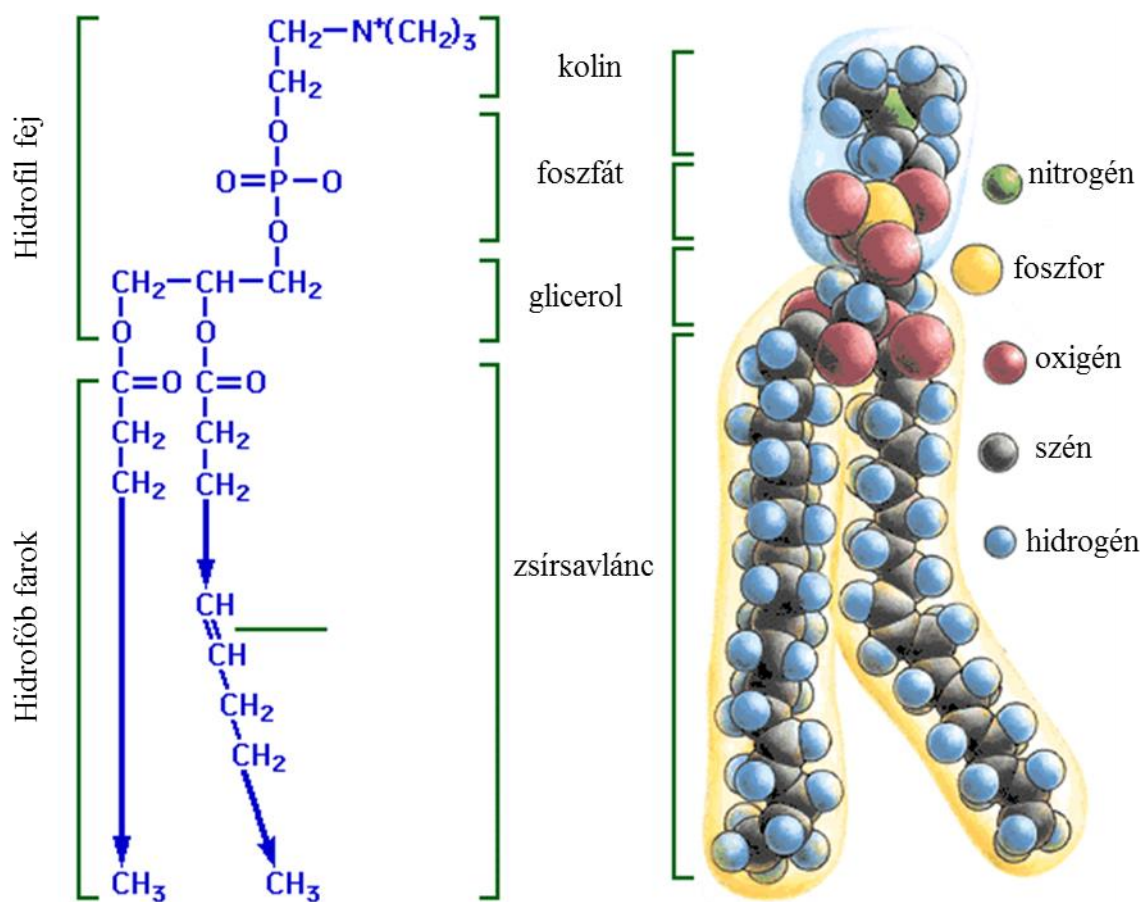
Ez a változás teszi lehetővé a szerves molekulák, fehérjék, lipidek, nukleinsavak, cukrok, stb., vagy sejtorganellek, sejtes egységek, illetve a magasabb szerveződési szintek kialakulását.

Néhány szerves vegyület szerkezete

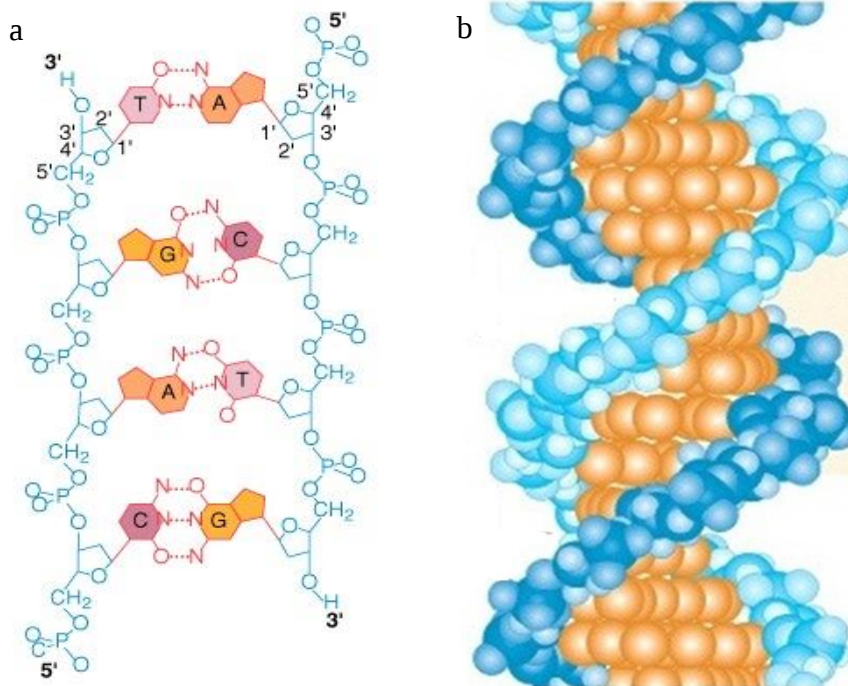
1. ábra Inszulin molekula szerkezete: inzulin A-lánc (21 AS), B-lánc (30 AS) szerkezete (Forrás: John P. Mayer, Faming Zhang, Richard D. DiMarch, Insulin structure and function, Peptide Science, 88, 678-713, 2007)



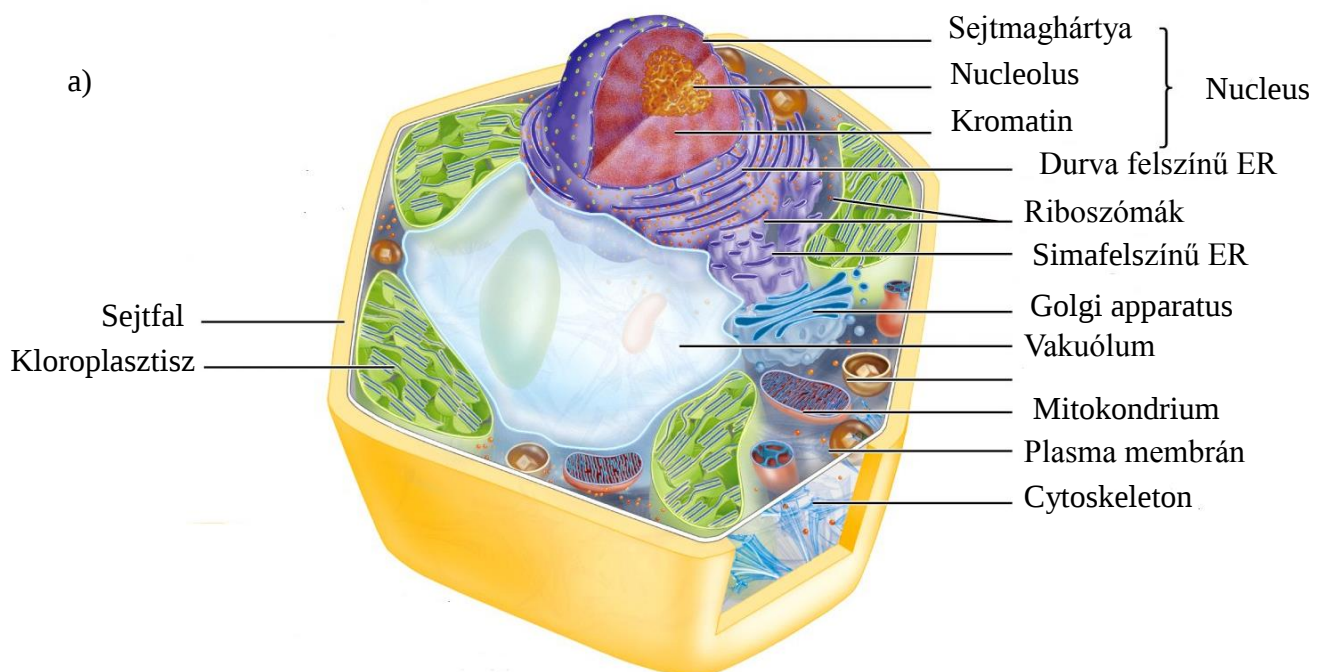
2. ábra A foszfolipidek szerkezete (Forrás: <http://www.madsci.org/posts/archives/2006-12/1164999854.Bc.r.html>)



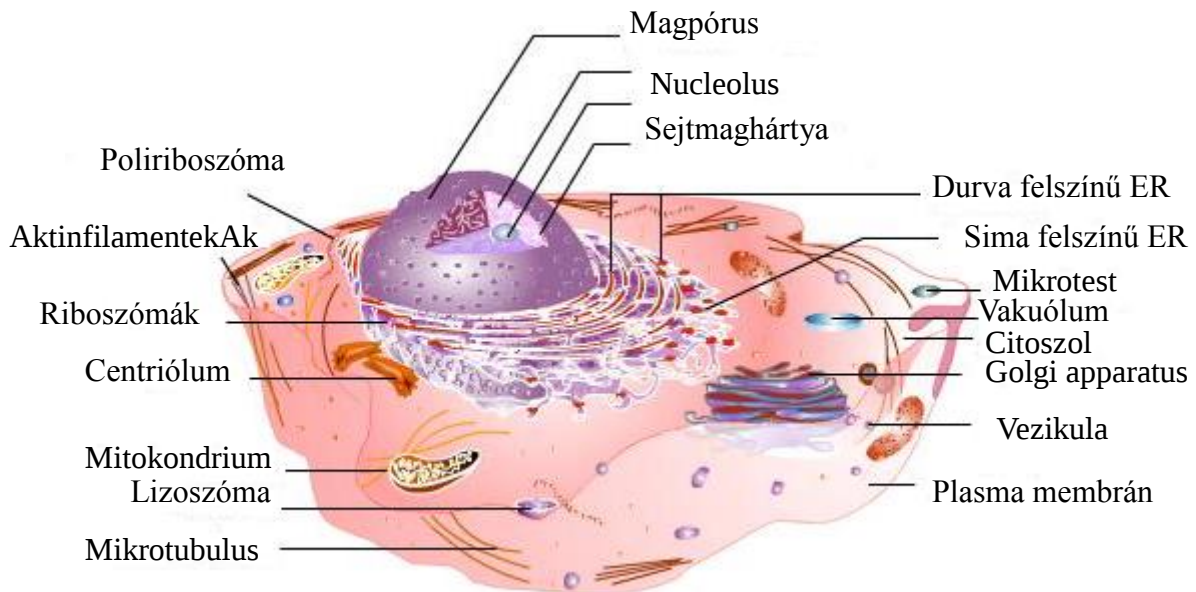
3. ábra A DNS molekula szerkezete a) a polinukleotid lánc szerkezete, b) a DNS kettős hélix modellje



4. ábra a) A növényi sejt felépítése (Forrás: <http://www.uic.edu/classes/bios/bios100/lectures/cells.htm>) b) Az állati sejt felépítése (Forrás: <http://www.tutorvista.com/content/biology/biology-i/cell-structure/cell-organelles.php>)



b)



A makromolekuláris szerveződés és a környezeti feltételrendszerek

Ismeretes, hogy közelítően 3,5 milliárd évvel ezelőtt jöhettek létre **az első kezdetleges sejtes (prokariota) szerveződések, a bio-makromolekuláris rendszerek és a környezet egymásra hatásának, spontán folyamatainak eredményeként.**

Mai ismereteink alapján valószínűsíthető, hogy **autokatalitikus mechanizmusra** („önfeldarabolódásra” és spontán összeállásra, továbbépülésre) képes ribonukleinsav (**RNS**) molekulacsalád volt az első makro-biomolekula típus, amely az akkori organizációt képviselte. A dezoxi-ribonukleinsav (**DNS**), mint a genetikai szerveződés anyagi hordozója, valószínűsíthetően ezután jelenhetett meg, ugyanis **spontán kialakulása nagyobb energetikai igényű. Az RNS-nél kémiaiilag stabilabb szerkezetű DNS jobb, megbízhatóbb információtároló tulajdonságú**, ami érthetővé teszi, hogy miért is nem volt alkalmas az RNS a biológiai anyagformák tervrajzainak (genomiális információ) őrzésére. Mindezt az a tény is alátámasztja, hogy **az életfolyamatok során a sejtes rendszereket ért hatásokra a DNS molekula „flexibilisebben” reagál**, mint az RNS. Ez a néhány adat kiválóan tükrözi, azt a tényt, hogy **az energetikailag jellemezhető anyagi struktúrák hogyan adaptálódhatnak pl. életfunkciók hordozására.**

Az élethez köthető anyagi szerveződések környezeti feltételek által megszabott, és aktuálisan

kialakult megjelenési formáit tanulmányozzuk a következőkben, azért, hogy önmagától értetődő folyamatként kezelhessük az anyagi alkalmazkodás „háttér” által determinált kaszkádszisztémát.

A makro-biomolekulák kémiai evolúciójának eredményeként a nukleinsavak mellett az aminosavak és fehérjék szintézise indulhatott meg az őslévesnek nevezett, vizes oldatban. Az említett molekulák **irányított reprodukciójához biológiai energia átalakulási formákra volt szükség**, egyszerűen a kezdetleges élő megjelenése volt mindezen folyamatok együttes zajlásának feltétele.

A kémiai és fizikai jellegű anyagátalakulások energetikájával a **termodinamika** foglalkozik – **több feltétel megadásával, azaz megszorítással elsősorban a hőenergiával kapcsolatos belsőenergia változásokat, hőenergia és munkavégző képesség közti kapcsolatokat vizsgálja.**

Tárgyalásmódja az „időt”, mint dimenziót figyelmen kívül hagyja, „csak” a kezdeti és a végállapot fontosságát hangsúlyozza.

A biokémiai folyamatok leírásakor a termodinamikai tárgyalásmód sok érdekes szempontot vet fel, és sok „oktalannak” látszó folyamatot tesz érthetővé, logikussá.

Tapasztalati anyagát négy főtételeben fejezi ki, melyek más természeti törvényekből közvetlenül nem vezethetők le. **A tapasztalati alapon leszűrt termodinamikai megfontolások eredményeiből és megállapításaiból sem, a biológiát sem, a bioenergetikát nem sikerült eddig levezetni.**

Csupán kötelező keretüket, azaz, a működési körülmények feltételrendszerét lehetett ezekkel körvonalazni, melyek az élő anyagformák determinált hátterét képviselik.

A termodinamika első főtétele az **energiamegmaradás törvényének kifejezése**, mely szerint **a rendszer és az azt körülvevő környezet összes energiája állandó.** Például hőszigetelt rendszerbe kívülről bejuttatott hő a rendszer belsőenergiáját növeli (**zárt rendszer!!**).

A rendszer a környezetében munkát végezhet, ebből következik, hogy a rendszer belsőenergia növekedése (ΔU) és a rendszer által végzett munka (A) összege egyenlő a rendszer által felvett hőmennyiséggel.

$$Q = \Delta U \pm A$$

(A munka előjele negatív, ha a rendszer végez munkát, pozitív, ha rajta végeznek munkát.)

A rendszerrel közölt energia azonban teljesen belső energiává alakulhat: növelheti a

molekulák mozgási energiáját, megváltoztatja a rendszer halmazállapotát.

A II. főtétel a természetben önmaguktól végbemenő folyamatok irányát igyekszik kifejezni. A II. főtétel azt határozza meg, hogy lehetséges-e valamely reakció spontán lezajlása, vagy sem? De semmit nem mond az illető folyamatok természetéről, illetve mechanizmusáról.

Ennek értelmében csak olyan reakciók mennek végbe önmaguktól (spontán), amelyek során az entrópia vagy változatlan marad, vagy nő, de semmi esetre sem csökkenhet.

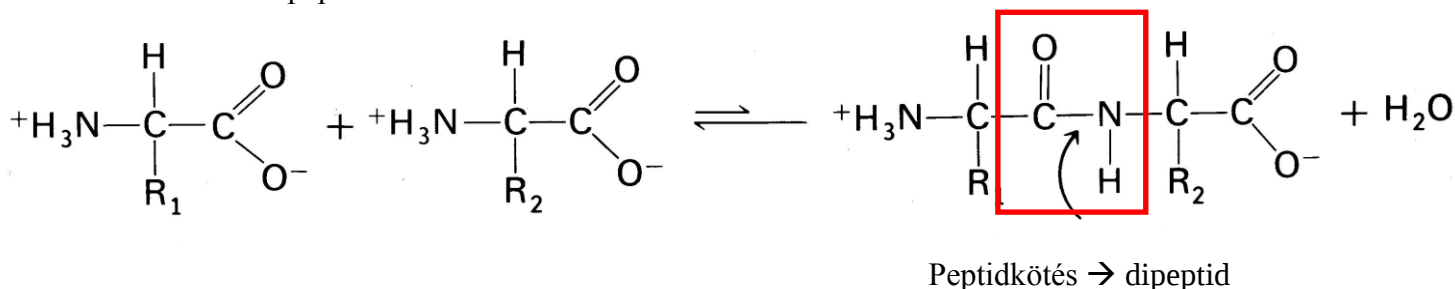
Környezeti feltételek és a peptidek

Vizsgáljuk meg egy konkrét példán, a peptidkötések kialakulásával modellezve, hogy miként érvénysülnek a termodinamikai törvények a struktúra létrejöttében, s az milyen funkcionális lehetőségeket teremthet.

Tudjuk, hogy a peptidek aminosavakból felépülő vegyületek, melyekben az aminosav részek sav-amid kötéssel kapcsolódnak össze. Ezt a kapcsolódási módot a vegyületcsoport neve után peptidkötésnek nevezzük (6).

A reakció során két aminosav (alfa-aminosav) úgy reagál egymással, hogy az egyik aminosav α -amino csoportja, a másik aminosav karboxil csoportjával vízkilépés közben reagál, azaz összekapcsolódik és a kapcsolódás eredményeképpen alakul ki a dipeptid.

5. ábra A peptidkötés kialakulása

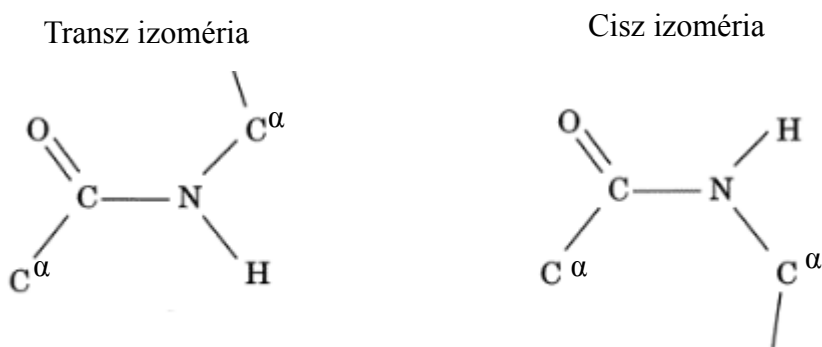


A kötést alkotó három atom: *szén, oxigén, nitrogén* egy síkban helyezkedik el, s köztük a kötéserősség és kötéstávolság az egyszeres és kétszeres kötés értékei között van. A C=O kötés hosszabb, a C-N pedig rövidebb, mint az effajta kötések általában. Vagyis delokalizált elektronok tartják össze a kötést a szén, oxigén, nitrogén atomok mentén.

A peptidekben a C-N távolság 0,132 nm. Ez kisebb, mint az aminosavakban a C-N távolság (0,187 nm), de nagyobb, mint az aminosocsoportban a C-N távolság (0,127 nm).

A mezoméria lehetősége miatt a peptidben a C-N kötés átmenet az egyes és kettős kötés között. A kettőskötés-jellegű kapcsolat miatt transz- (a) és cisz- (b) konfiguráció létezik, melyek közül energetikai okok miatt a transz a valószínűbb (RAWN, J.D. nyomán).

6. ábra A peptidkötés transz és cisz izomériája (Forrás: <http://faculty.smu.edu/svik/6312/Lectures/8Feb.html>)



E kötés keletkezése bonyolult kémiai folyamat, ezért a szervezetben pl. megfelelően aktivált reakciópartnereket igényel. Energetikai okok miatt önmagától nem alakul ki. Tehát reakció rendszerünkkel jelen esetben az aminosavakkal „energiát” kell közölni, és így energiában gazdag kötés fog kialakulni. A vázolt esetben az említett termodinamikai főtételek beigazolódtak. **Energetikailag a peptidkötés magasabb szintet képvisel, mint a szabadon oldott állapotú aminosavak jelenléte az oldatban, ezért a reakció önmagától, vagyis energiabefektetés nélkül nem megy végbe, mert az, szabad enthalpia-növekedéssel járna.** Viszont, **ha energiát adunk a rendszerhez, úgy az** változásokat indít el és a **termodinamikailag „megvalósulható” folyamatot eredményez.** Az így befektetett energia egy energiában gazdag kötéssé alakul át. Ezen okok miatt a peptidkötés kialakításához laboratóriumi körülmények között szükséges, hogy legalább az egyik aminosav származék aktivált legyen. **A szintézis tulajdonképpen három lépésben vezethető le, a termodinamikai megfontolások érvényesülése mellett:**

1. Védett aminosav származék előállítása

2. Peptidkötés kiépítése

3. Védőcsoportok eltávolítása

A védőcsoportokra azért van szükség, hogy a nem kívánt mellékreakciók ne játszódjanak le.

Manapság számos olyan módszer ismeretes, melyek segítségével a megfelelő módon védett és aktivált „amino savak” között peptidkötést lehet létesíteni.

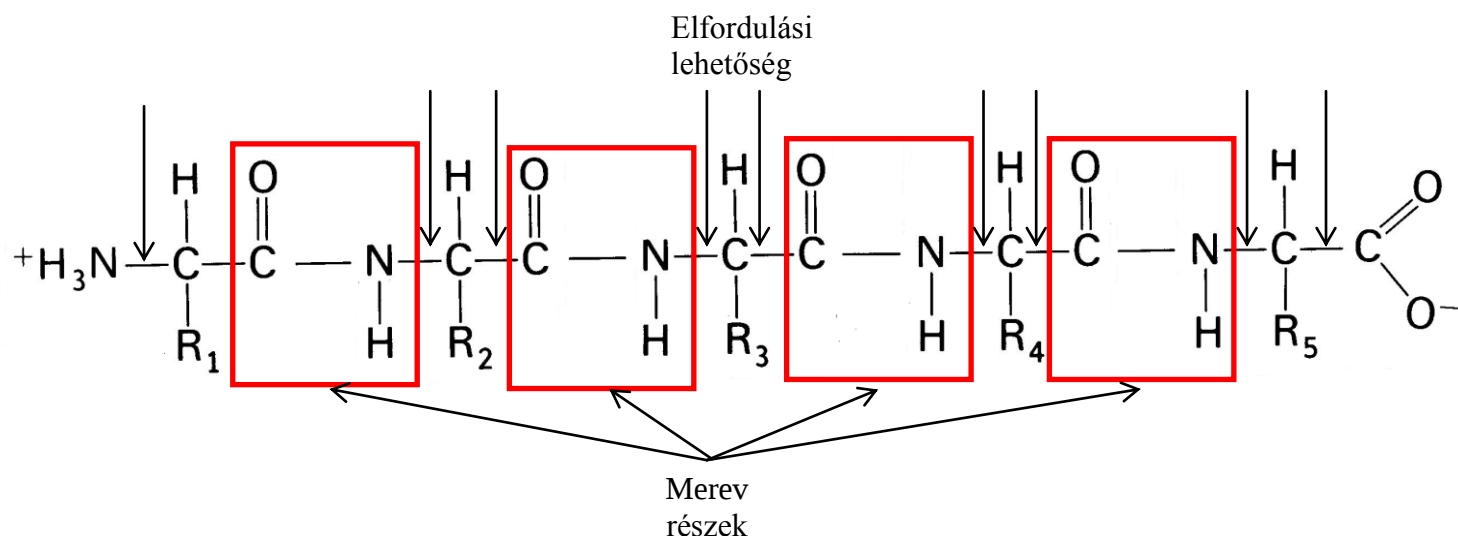
Vagyis olyan: - irányított reakció zajlik le, melyben

- termodinamikailag kedvező állapotot hozunk létre a szintézis során,
- a reakció egyirányban mehet csak végbe.

A **peptidkötés**, az élet építőköveiként ismert fehérjék **univerzális**, alapvető **szerkezeti jellegét adó kémiai kötése**, ezért nagyon **fontos szereppel bír az élő anyagformák struktúrállásában**. A peptidkötés kialakulásának pillanatában energetikai viszonyokkal determinált (meghatározott) módon a fehérjének két konformációja valósul meg.

A peptidkötésben lévő atomok és a hozzájuk kapcsolódó C-atom azonos síkban vannak. A kötésben a π -elektronok delokalizálódnak $\rightarrow$ részleges kettős kötés alakul ki a szén és nitrogén között, e kötés körül a molekula nem foroghat szabadon $\rightarrow$ merev peptidkötés alakul ki.

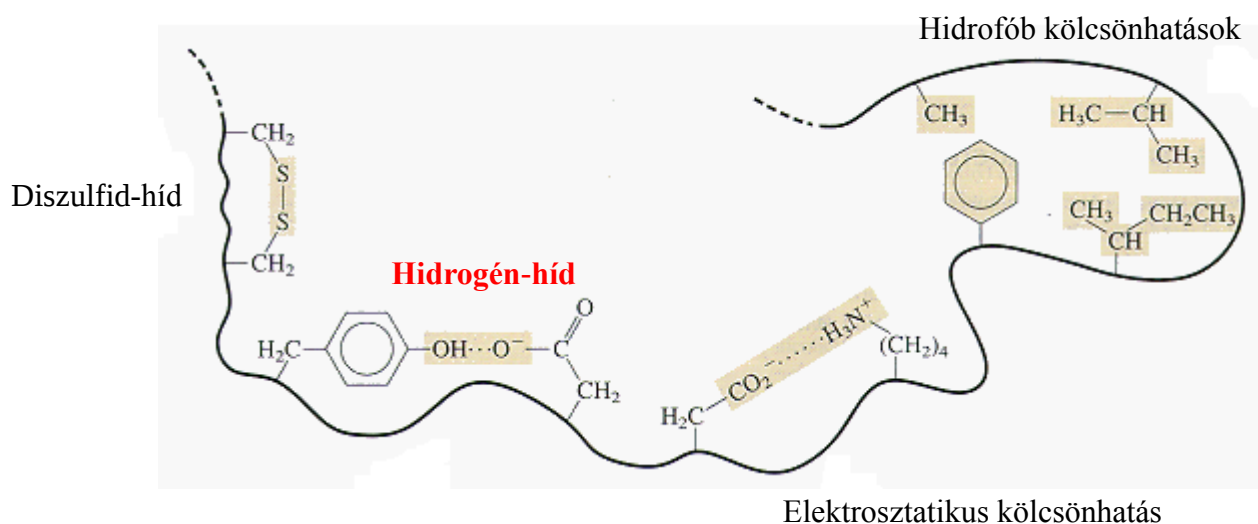
7. ábra A peptidlánc merev és rotációra képes szakaszai



A hidrogénkötés kialakulásának gátlása egy peptidláncban

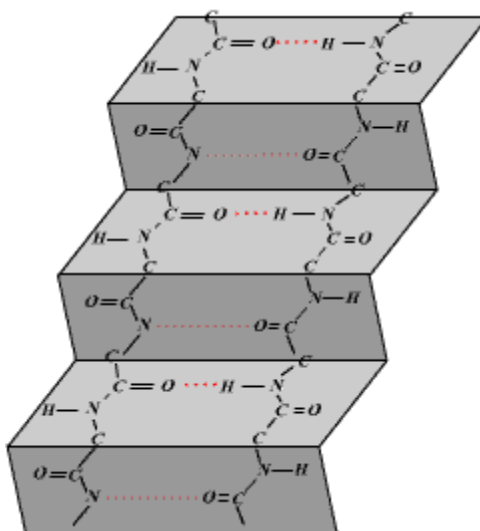
A peptidkötésben realizált merevség következtében az oxigén és a hidrogén atomok pl. transz helyzetben vannak. Mivel a molekula törekszik a lehető legkisebb energiát igénylő helyzetet, állapotot felvenni (ez egyfajta alkalmazkodás a környezethez), csak egy konformáció valósulhat meg, mégpedig az, amelyben a *Van der Waals* kötések energetikailag a legkedvezőbben érvényesülnek.

8. ábra A hidrogénkötések kialakulása a polipeptidláncban (Forrás: <http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/1biochem/proteins4.html>)



A polipeptidlánc konformációjának meghatározásában a hidrogénkötések igen fontos szerepet játszanak. E kötések révén a molekula 40 KJ/mol energianyerésre tehet szert. Ha két nyújtott konformációjú polipeptidláncot egymás mellé helyezünk (gondolatban), belátható, hogy pl. a metil csoportok taszítása miatt nem alakulhat ki hidrogénkötés. → Ez tehát egy kedvezőtlen konformáció. Azonban ha egy 40 fokos csavarodás jön létre, hidrogénkötések kialakulhatnak és kis energiájú redőzött szerkezet jön létre. A kialakult β -konformáció nagy térigényű „R” (szénlánc) csoportoknak biztosít kedvező elhelyezkedést.

9. ábra A β -konformáció kialakulása egy polipeptidláncban (Forrás: <http://click4biology.info/c4b/7/pro7.5.htm>)

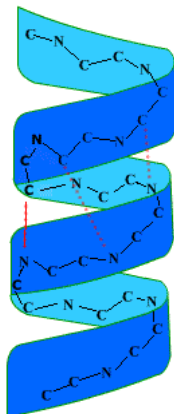


A peptidkötés ún. csavart konformációja

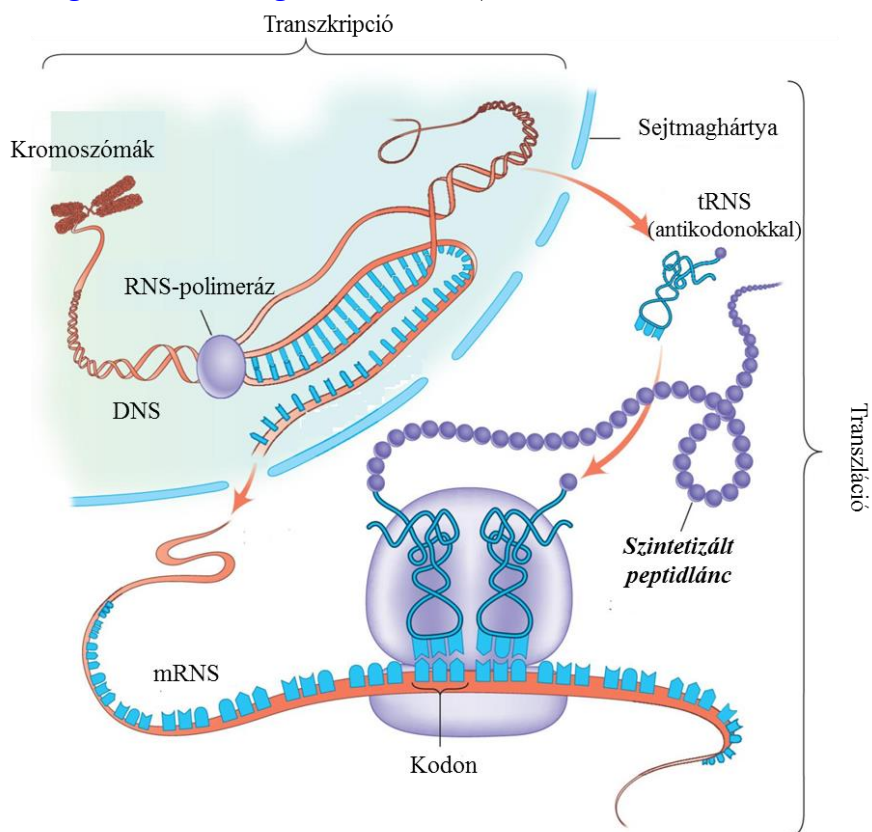
Más peptidrészeknél ún. csavart konformáció felel meg legjobban a stabil térszerkezet megjelenésének, vagyis az energiatartalom ekkor a legkisebb.

Ilyenkor a molekularészletek egy csavar mentén haladnak, $\rightarrow$ csiga (**hélix**) alakot ölt a molekula. Ebben a kötésben **C=O** kötések iránya a **hélix tengelyével párhuzamos**. Köztük **stabilizáló hidrogénkötések alakulnak ki**. Az **α -hélixben a hidrogénkötések tehát egy láncon belül jönnek létre**. Ebben a kémiai szerkezetben a közvetlenül nem kötött atomok közötti atomok éppen a *Van der Waals*-vonzás szempontjából kedvező távolságra közelítik meg egymást.

10. ábra Az α -hélix kialakulása egy polipeptidlánban (Forrás: <http://click4biology.info/c4b/7/pro7.5.htm>)



11. ábra Eukarióták proteinszintézisének mechanizmusa (Forrás: <http://www.evolution-textbook.org/content/free/figures/ch02.html>)



A biológiai szempontból jelentős **molekulák konformációiból is látható**, hogy a kémiai energiákat hordozó **kémiai anyagszerkezetek alkalmazkodtak bizonyos energetikai**

viszonyokhoz, s a diszkrét módon determinált kémiai kötések a termodinamika törvényei szerint alakulnak ki, illetve a reakciók iránya megjósolhatóvá vált a fizikai törvényszerűségek ismeretében.

Jogosan feltételezhető tehát, hogy az élet keletkezése az említett törvények mentén valószínű. Lehetséges, hogy a kb. 3,1 milliárd éves kőzetekben megtalált „korai prokarióta fossziliák” kialakulásában a vázolt folyamatok is szerepet játszottak.

Környezeti feltételek és a nukleinsavak

A nukleinsavak kialakulási feltételeinek tanulmányozása igen érdekes feladat, ugyanis ezek az élet tervrajzát képező molekulák felelősek a flexibilis módon alkalmazkodni képes, biológiai anyagforma fenntartásáért.

A **nukleinsavak** olyan nagy biológiai jelentőségű anyagok, melyek **minden élőben** megtalálhatók.

A **nukleinsavak biológiai funkciói közé tartozik az élő szervezet anyagállományának az egyedre jellemző állapotban való tartása, továbbá a fajra specifikus tulajdonságok átörökítésének biztosítása.** Ezek a funkciók az anyagcsere folyamatokkal függnek össze, amelyeket a megfelelő enzimek, enzimrendszerek szabályoznak. Az **enzimek**, és általában a szervezetre jellemző fehérjék szintézisének irányítása is a nukleinsavak feladata. A nukleinsavak azonban a fehérjeszintézis mellett önmagukkal azonos, sőt más szerkezetű nukleinsavak bioszintézisét is irányítják (**autoreguláció**). A nukleinsavak tehát a szervezet önreprodukciós képességét biztosító, valamint a genetikai információt hordozó anyagok.

A nukleinsavakat **először Miescher (1869) írta le** és választotta el a fehérjétől. Az általa **nukleinnek** nevezett savjellegű, foszfortartalmú, híg lúgokban oldódó anyag más sejtekben is megtalálható volt. A fehérjementes sav jellegű vegyületnek

Altmann adta (1889) a „nukleinsav” nevet. Csakhamar megállapították azt is, hogy a **nukleinsavak nagy moláris tömegű,**

minden sejtben fellelhető anyagok melyek

hidrolízis segítségével kisebb építő kövekké bonthatók le: foszforsavvá, purin- és pirimidinbázisokká, valamint pentózokká.

Ez utóbbi D-ribóz, vagy 2-dezoxi-D-ribózként szerepelhet. Egyrészt ez határozza meg következményesen, hogy kétféle nukleinsavat különíthetünk el, a DNS-t és az RNS-t. (A DNS, a dezoxiribonukleinsav; az RNS, a ribonukleinsav.) Az említett két nukleinsav szerkezete és funkciója is eltérő.

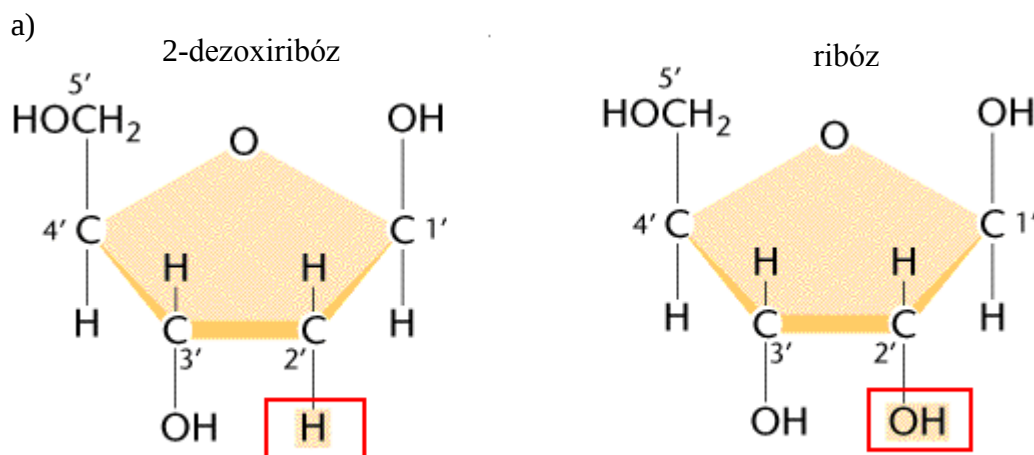
A **DNS** kétszálú, hélikális szerkezetű, cellulárisan genetikai információkat tartalmazó biomolekula. Az **RNS** pedig a DNS-ben őrzött információk „megvalósulását” (szintézis termékek kialakulását) irányítja. Az RNS- molekulák a sejtekben **mRNS** (messenger RNS), a **tRNS** (transfer RNS) és riboszomális RNS-ként (**rRNS**) vannak jelen.

A nukleinsavak (NS) élő szervezetben detektálható kémiai felépítése egy univerzalitást jelentő vázra (...-cukor-foszfodiészter-cukor-...) és a specifikitást hordozó (purin /adenin (A),

guanin (G)/, pirimidin /timin (T), citozin (C) uracil (U)/ bázisokra osztatható fel.

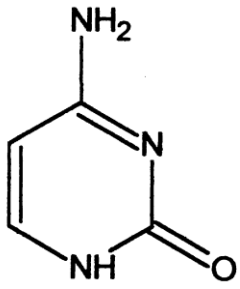
(A DNS és RNS molekulákban is 4-4 bázis található, de az RNS –ben a timin helyett uracil van. Az adeninnel szemben a timin áll /ez csak a DNS-re vonatkozik, RNS-ben uracil van a timin helyett/, a citozinnal szemben guanin.)

12. ábra a) A dezoxiribóz és ribóz szerkezete (Forrás: William, S. Klug, Michael, R. Cummings, Mark, Shotwell, Charlotte, Spencer, Concepts of genetics, Prentice Hall (Upper Saddle River, N.J.), 1997, ISBN: 0135310628); b) A purin és pirimidin bázisok szerkezete (Forrás: Susan E. Geldart, Phyllis R. Brown, Separation of purine and pyrimidine bases by capillary zone electrophoresis with carbonate buffers, Journal of Chromatography A, 831, 123–129, 1999); c) Pirimidin dezoxinukleozid és nukleotid szerkezete (Forrás: Leonard I. Wiebe, Applications of Nucleoside-based Molecular Probes for the in vivo Assessment of Tumour Biochemistry using Positron Emission Tomography (PET), Brazilian Archives of Biology and Technology, 3, 445-459, 2007); d) A DNS és RNS molekula szerkezete (Forrás: <http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/1biochem/nucleic8.html>)

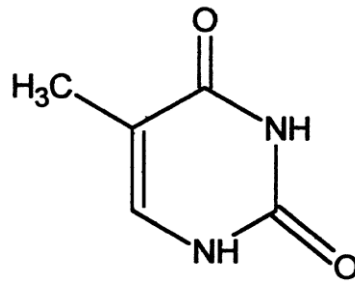


b)

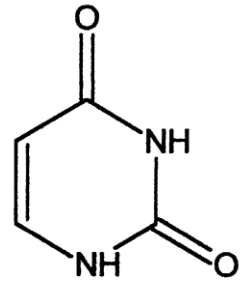
Pyrimidin bázisok



Citozin (C)

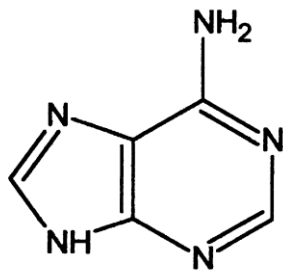


Timin (T)

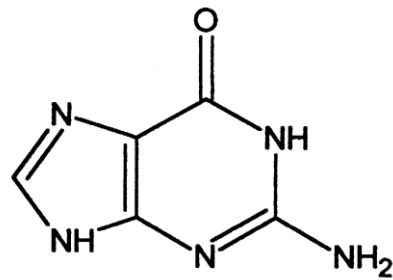


Uracil (U)

Purin bázisok



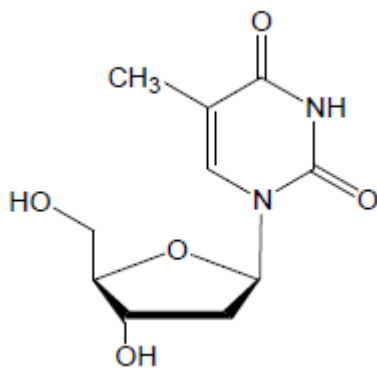
Adenin (A)



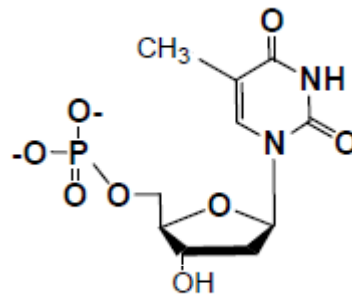
Guanin (G)

c)

Dezoxitimidin

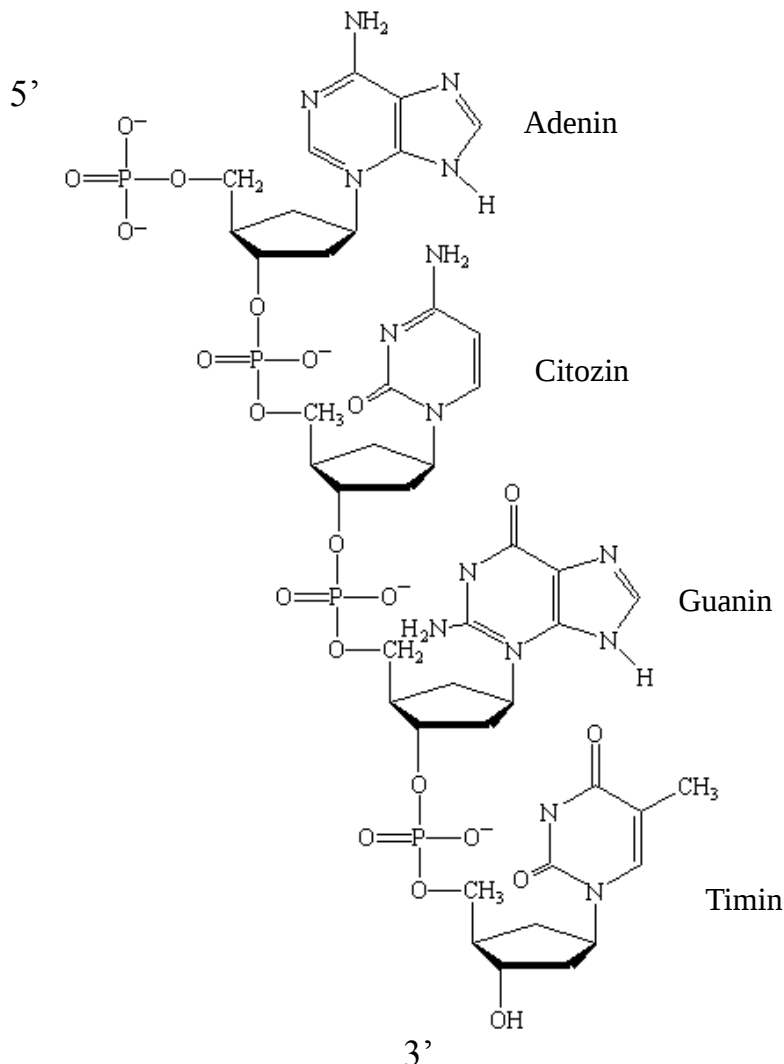


Dezoxitimidin-monofoszfát

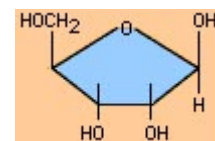


d)

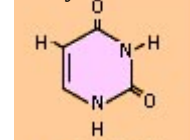
DNS



RNS-ben ribóz



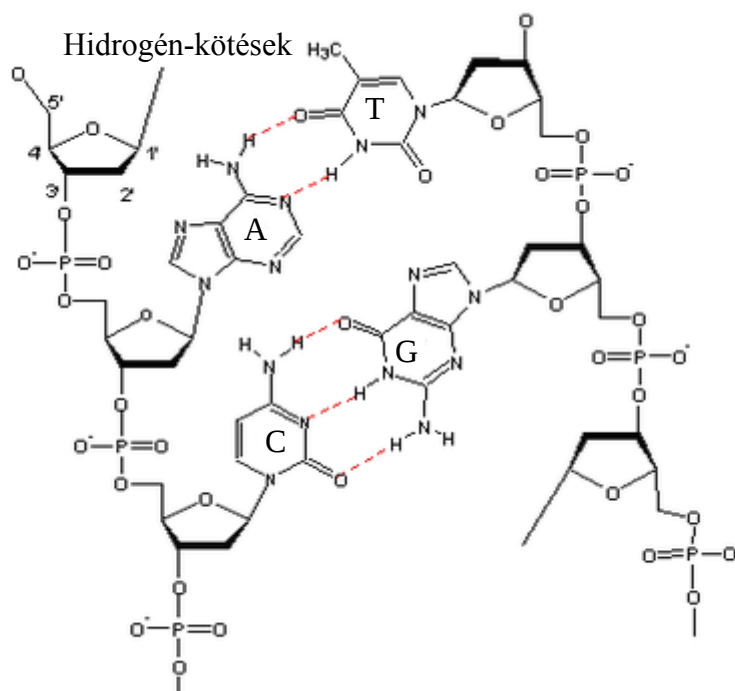
RNS-ben Timin helyett Uracil



Todd (1947-1957) és munkatársai igazolták, hogy a nukleinsavak nukleozidok és azok foszforilált származékaiból, a nukleotidokból állnak.

A ribonukleotidok három izomer alakban fordulnak elő. A dezoxiribonukleotidoknál pedig két izomer vezethető le. Az izomerek megjelölésére a „nukleozid-foszfát” elnevezést használjuk. A nukleinsavak internukleotid-kötése, a nukleozidokat összekapcsoló 3'-5'-foszfodiészter-kötés a polimer molekulalánc kialakulását biztosítja. A polinukleotid szerkezet a nukleinsavak primer struktúrájának az alapja. A teljes primer struktúrához azonban hozzá tartozik a nukleotid sorrend (szekvencia) ismerete is. A primer struktúra a bázisösszetétel. A ribonukleinsavakban a bázismólarányokat illetően szabályszerűség alig van, a dezoxiribonukleotidsavakban a purinbázisok, és a pirimidinbázisok mólaránya azonos: $A + G = T + C$ a kettős hélix miatt

13. ábra A DNS bázisainak befagyottsága (Forrás: <http://www.chemistry.nmsu.edu/studntres/chem435/Lab4/intro.html>)



A kovalens kötésekkel álló primer struktúra mellett a nukleinsavak szerkezetét egyéb kötés típusok is meghatározzák. A nukleinsavak szerkezete megváltoztatható, pl. denaturálható, karbamiddal, guanidinnel, azaz jellegzetes hidrogénkötést módosító bontó, illetve hidrogénkötést létesítő anyagokkal. Ez a denaturálódás a legegyszerűbb bizonyítéka annak, hogy a nukleinsavak secunder struktúrájában is a hidrogénkötések játszanak központi szerepet. A dezoxiribonukleinsavak molekulái két polinukleotid láncból állnak, ezek egy közös tengely körül csavarodnak, s kettős spirált, azaz kettős **hélixet** létesítenek, amelyek **jobb menetűek**, de egymáshoz képest ellenkező irányú bázissorrendet mutatnak fel. A $C^{1'}$ -helyekhez kapcsolódó **bázisok gyűrűi a tengelyre merőlegesen**, egymással nagyjából párhuzamosan helyezkednek el a spirálon belül.

A szomszédos bázisok síkjainak távolsága 0,34 nm.

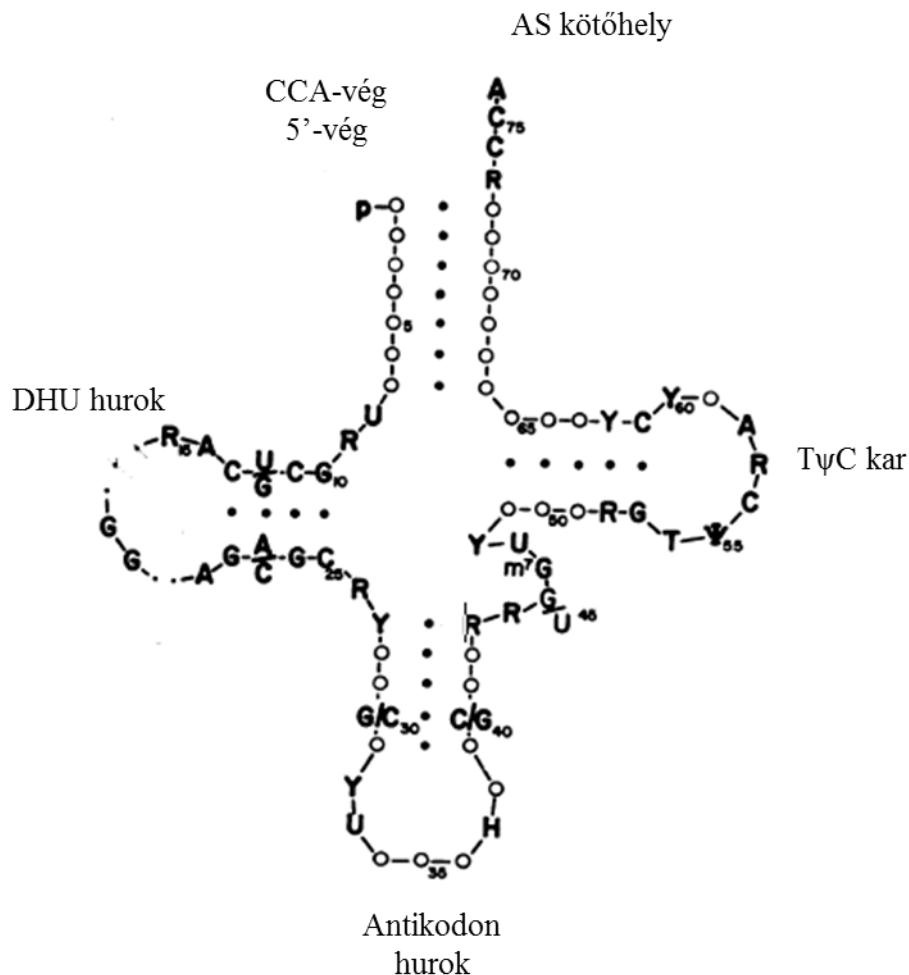
A spirális egyetlen fordulatra 10 nukleotid egység jut. A két spirálisan csavarodó, párhuzamosan haladó láncot a purin- és pirimidinbázisok közötti hidrogénkötések kapcsolják össze. Ez a kapcsolat a secunder struktúrát megszabó tényezők közül a legfontosabb. Az adenin és timin, illetve a guanin és citozin bázispár képes egymással hidrogénkötéseket

létesítve kapcsolatot teremteni a két lánc között. A két lánc így egymáshoz viszonyítva komplement szerkezetű.

Az A-T bázispárhoz kettő, a C-G bázispárhoz három hidrogénkötés tartozik.

A ribonukleinsavak secunder struktúrája hasonlít a dezoxiribonukleinsavakéra, bár korántsem olyan rendezett. A ribonukleinsavak molekulája egyetlen polinukleotid láncból épül fel, s **kettős hélix** csak akkor alakulhat ki, ha a lánc visszahajlik. Emiatt kialakulnak szabályos kettős hélixes szakaszok (pl. **tRNS**), melyeket azonban kevésbé rendezett láncrészek váltanak fel.

14. ábra A tRNS szerkezeti felépítése (Forrás: S., H., Kim, J., L., Sussman, F., L., Suddath, G., J., Quigley, A., McPherson, A., H., J., Wang, N., C., Seeman, A., Rich, The general structure of transfer RNA molecules (base stacking/hydrogen bonding/ tRNA sequences/tRNA conformation), Proc. Nat. Acad. Sci, 71, 4970-4974, 1974)



A nukleinsavak kialakulása *in vitro* és *in vivo*, valamint alapegységeiknek sejten belüli szerepe, **termodinamikailag** meghatározott törvényszerűségekkel közelíthető.

A négy főtétele közül a(z)

- nulladik, az egyes anyagok egyensúlyával foglalkozik.
- első főtétele az energia-megmaradás törvényének kifejezése.
- második főtétele kvalitatív kérdésekkel foglalkozik, pl. igyekszik kifejezni a természetben önmaguktól végbemenő folyamatok irányát.

- **harmadik főtétel az entrópia-függvény abszolút értékének a meghatározását képviseli.**

A **nukleinsavak** szempontjából igen érdekesek a **második főtétel** vonatkozásai, **mely szerint a természetben önmaguktól lejátszódó folyamatok bizonyos egyirányúságot mutatnak.** Ennek a kifejezésére a termodinamika az entrópia-függvényt alkalmazza:

$$\Delta S = Q/T$$

ÁBRA: inszertálni valahonnan a nevezett törvényeket!!)

A **biológiában** ez az összefüggés nehezen használható, emiatt vezették be a **szabadenergia** fogalmát, amely **az entrópia-függvénnyel a következő kapcsolatban áll:**

$$\Delta F = \Delta U - T \cdot \Delta S$$

Ebben a függvénykapcsolatban (egyenletben) az **U: a rendszer belső energiája, T: a hőmérséklet számértéke** abszolút hőmérsékleti skálán mérve.

A **természetben** a fenti törvény szerint, csak **olyan folyamatok játszódnak le önmaguktól (spontán), amelyeknél a szabadenergia mértéke csökken,** vagyis a folyamat eredményeként egy stabilabb energiaállapot alakul ki.

pl. A termodinamika törvényei szerint alakultak ki a hidrogénkötések a NS-ak bázisai között, valamint a kovalens kötéstípusok is, melyek az illető molekulát stabilizálták.

A nukleotidok közül az ATP-nek ismert jelentős szabadenergia változása. Ugyanis ez a molekula egyszerre képes energia donorként, és energia akceptorként is viselkedni. A nagyobb energiájú molekuláktól energiát képes felvenni, és azt egy kisebb energiájú molekulának átadni.

pl.

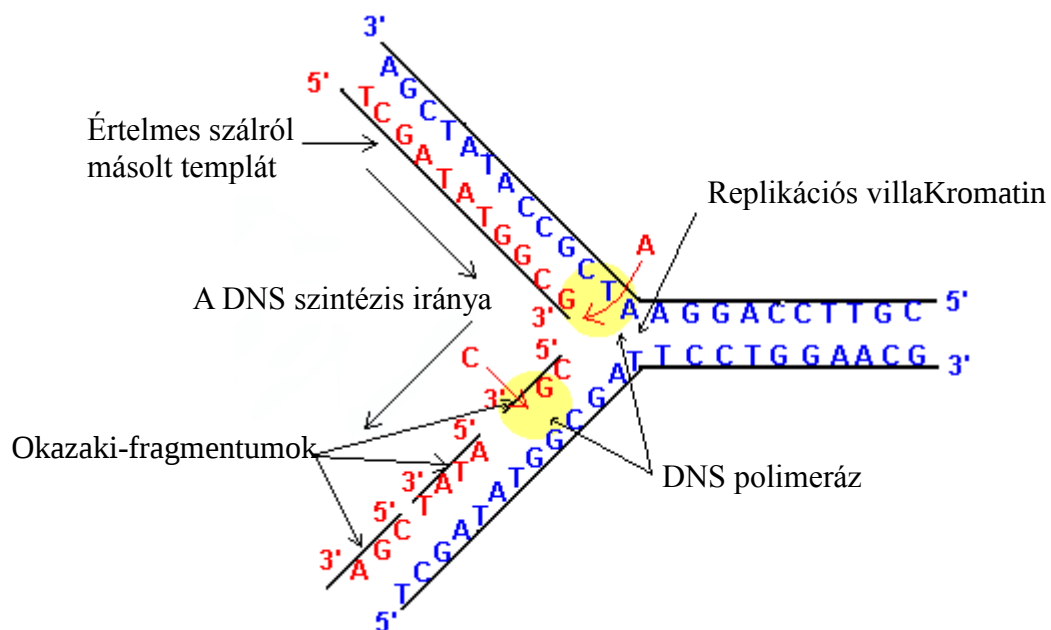
A **nukleotidok bioszintézise** során: a **pirimidingyűrű** esetén **aszparginsavból és karbamil-foszfátból indul ki.** Az utóbbi nagy energiájú vegyület, aszparginsavval **karbamil-aszparginsavat** képes alkotni. A gyűrűzárás **ATP-t igénylő reakció.** Az így lejátszódó folyamat során **orotsav képződik,** ami a

nukleotidok legfontosabb alapanyaga.

Az **ATP hasadása** során is képes energiát szolgáltatni. Például fiziológiai körülmények között akár **9-10 Kcal/mól energia** is **felszabadulhat**. (Ez természetesen nagymértékben függ a sejtben lévő anyagok koncentrációjától.)

Az ATP-nek jelentős feladata van még a DNS és az RNS bioszintézisekor is. Ugyanis megfelelő mennyiségű energiát szolgáltat ahhoz, hogy a **DNS-polimeráz I enzim képes legyen működni**. A hibás DNS szakasz lebontását követően helyette egy újat létrehozni (**szintetizálni**). Ez a folyamat az ATP difoszfátkötések energiájának rovására megy végbe.

15. ábra A DNS replikáció folyamata



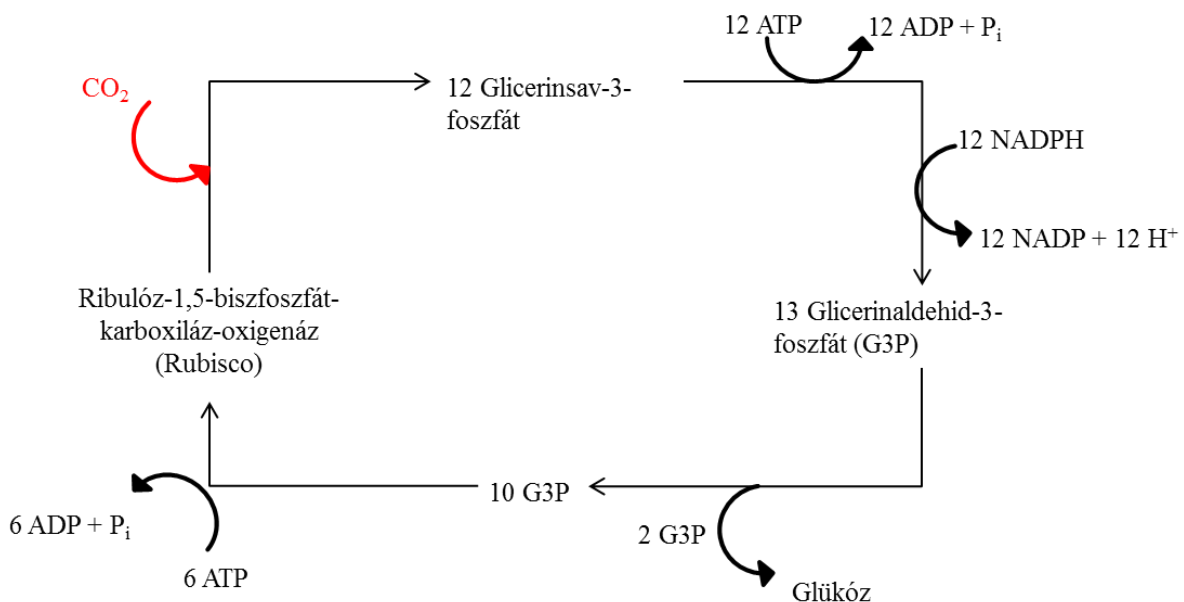
A földi élet kialakulásának elengedhetetlen feltétele volt a **nukleinsavak spontán *in vitro* szintézise**. Ezen anyagok **létrejöttéhez** viszont számos fizikai energetikai feltételre volt szükség. Ilyen **alapvető fizikai feltétel a termikus energiaháttér** volt, de **egyéb elektromágneses energiák** által képviselt feltételek is **rendkívüli jelentőségűek** voltak a makromolekulák szintézisében.

Az élet kialakulásának feltételei

A kezdetleges élő anyagformák, (prokarioták) a mai földi körülményekhez képest extrém környezeti feltételek között, **redukáló-légkörben** éltek. Az **oxigéntermelő prokarioták elszaporodása** mintegy 2,3 milliárd ($2,3 \times 10^9$) évvel ezelőttre tehető. Fokozatos térhódításuk teremtette meg az **aerobizmus** (oxigédús légkörben élés) **lehetőségét**, azaz, az oxidáló környezet létrejöttét. A légkör tehát mintegy 2 milliárd évvel ezelőtt alakult ki. Ezután **az eukarioták** már a **biogén úton létrejött légkör környezeti feltételein**, mintegy 1,5 milliárd évvel ezelőtt **jelentek meg**, a földtörténeti **precambrium** időszakában.

A ma élő ősbaktériumok (archea) nem tekinthetők a valódi baktériumok őseinek. A prokarioták e két csoportja feltehetően egy **közös ősből** származik. Az Archaeobacter fajok pusztán az extrém környezeti feltételekhez való alkalmazkodásuk miatt tűnnek ősi típusúnak. Molekuláris jellegeik összehasonlító vizsgálata alapján valószínűsíthető, hogy egyes csoportjaik kapcsolata közelebbi az eukariotákkal, mint a valódi baktériumokkal.

16. ábra A szén-dioxid fixálás (Calvin-ciklus) folyamata



Az élet keletkezése

Az élet kialakulásával kapcsolatban számos elmélet létezik.

Az ún. **pánspermia** elmélet, mely szerint az élet spórája az elektromágneses

sugárzás révén került a Földre valahonnan a kozmoszból.

Az **ősrobbanás** elmélete (a nagy bumm) szerint, az akkor oly sűrű állapotban lévő anyagból eredt a világ. Elfogadhatóbbnak tűnik, a **statikus világegyetem** magyarázata, bár többen ezt elvetik. Nem hagyhatjuk ki a sorból a teremtésméleletet sem.

Elfogadott ma, hogy az élő az élettelen anyagból alakult ki hosszú, de energetikailag determinált folyamatláncolatok során.

Erre vonatkozólag **Stanley Miller** végzett kísérleteket. Szinte egyidőben jelent meg Miller munkássága **James Watson és Francis Crick a DNS kettős spirál** szerkezetét leíró elméletével. Amíg **Watson és Crick az élet strukturális hordozóival foglalkozott, addig Miller az élet kialakulásának lehetséges módozatait vizsgálta.**

Köztudott, hogy a Föld őslégköre teljesen eltért a maitól: hidrogént (**H₂**), metánt (**CH₄**), szén-monoxidot (**CO**), szén-dioxidot (**CO₂**), ammóniát (**NH₃**) és nitrogént (**N₂**) tartalmazott, szabad oxigént viszont nem. Ezek, a mai élőlények számára igen mérgező anyagok kedvezőek voltak a különböző reakciók számára. Valamikor, közel **3,5 milliárd évvel ezelőtt a Föld felszíne 100 °C alá hűlt.** Ezzel lehetővé vált, hogy fennmaradhassanak olyan szerves molekulák, amelyek a magasabb hőmérsékleten elbomlanak. A korai Földet különféle **energiahatások érték (villámlás, geotermikus hő, lökéshullámok, a Nap ibolyántúli sugárzása, stb.).** Ezek olyan reakciókat indíthattak el a légkörben, melyek során különféle egyszerű szerves molekulák nagy számban keletkezhettek. Akkoriban **természetesen ózonréteg még nem volt, ahogyan oxigén is csak elenyésző mennyiségben volt** a légkörben. A sugárzás a redukáló légkört gerjesztette, melynek során **aminosavak, formaldehid, hidrogén-cianid, és még sok más vegyület keletkezett.** Az elektromos viharok, és kisülési lökéshullámok következtében is hasonló folyamatok zajlottak az alacsonyabb rétegekben. Ezeket a **vegyületeket az eső bemosta az óceánokba,** és így jött létre a sokat emlegetett „**ősleves**”. Az ősseves kis tavacskákból sűrűsödött össze, ahol -, feltehetőleg az anyag **katalitikus hatására-polimerizációs folyamatok indultak meg, és így jöttek létre a polipeptidek és a polinukleotidok.**

*Ma is elgondolkodtató probléma, hogy ilyen **nagy víztömegek mellett hogyan mehettek végbe ezek a polimerizációs reakciók?***

Miller vizsgálódásaiból származó tapasztalatai alapján úgy vélte, hogy nem reális az a feltételezés, hogy az **áramlatokban** a szerves molekulák fennmaradhattak. A **durva hőmérsékleti és nyomásviszonyok** sokkal inkább a szerves molekulák pusztulásához, mint képződésükhöz vezetnének. E megfontolások alapján **Miller az óceán aminosav-koncentrációját** legfeljebb **0,0003 M**-nyi mennyiségűnek **becsülte**.

A **polimerizációs folyamatok után jöhettek létre az elősejtek**, melyek a mostani sejtekhez képest „hiányosak” voltak. A fokozatos alkalmazkodások révén alakult ki az örökítő-anyag. Ez a teória volt az alapja a Miller-féle kísérletnek is.

Eredmények és ellentmondások az életkeletkezési kísérletekhez

Miller kísérletének üvegberendezése egy kis **forralóedényből** s az azzal összeköttetésben álló **wolframelektrodos szikragenerátor-kamrából, kondenzáló egységből**, valamint a képződött termékek gyűjtésére szolgáló **vízcsapdából** állt.

A Miller-kísérlet **a korai Föld körülményeit modellezte** (pl. CERN, ELI működése). A szikragenerátor a földi viharok légköri kisüléseinek felelt meg, ahonnan az eső a képződött anyagokat az óceánokba mosta. A vízcsapda jelképezte az óceánokat és az állóvizeket, amelyekben a légkörből származó vegyületek összegyűltek és felhalmozódtak.

Miller ezután **papírkromatográfiás eljárással** vizsgálta meg az oldatot, melyben **azonosítani tudta az aminosavakat**. Később mások is elvégezték Miller kísérletét, úgy, hogy a kísérleti **gázelegy** a következők közül **legalább kettőt** tartalmazott: **metán, etán, ammónia, nitrogén, vízgőz, hidrogén, szén-monoxid, szén-dioxid, kén-hidrogén**.

A **Miller-kísérletben az aminosavak mellett formaldehid és cukrok is képződtek**. Az elektromos kisülési kísérletben az aminosavak sokkal könnyebben keletkeznek, mint például a cukrok.

Miller kísérlete azért volt nagy jelentőségű, mert aminosavakat tudott előállítani, amelyek nemcsak a primitívebb élő egységeket alkotják, hanem minden élő szervezetet.

Az **elektromos kisülési** kísérlet tehát a **Föld villámlásainak a hatását modellezte**. Ám a valóságban a szintézis bekövetkeztéhez **a vezérvillám túl forró (2000 °K) volt**. Ilyen nagy hőmérsékleten ennél enyhébb kisüléseket is vizsgáltak. E kísérletekben viszont **az energiasűrűség kilenc nagyságrenddel nagyobb annál, semhogy természetes folyamat**

modelljének tekinthetnénk. Másként fogalmazva, a Miller-féle kisülési kísérletben **két nap alatt** közölt kisülési energia a korai Földet **negyvenmillió év alatt** érő energiamennyiségnek felelhetett meg. Egyébként is, mivel **az ősi légkör átlaghőmérséklete mintegy 20°C-kal volt kevesebb a mainál,** a viharok is sokkal ritkábbak voltak. Felhozhatjuk példának a Déli-sarkot, ahol nem nagyon tapasztalunk viharokat. Az atmoszferikus viharok alapfeltétele, hogy a hőmérséklet elég magas legyen ahhoz, hogy az elpárolgó vízgőz energiafogyasztó folyamatban lefelé áramoljon. A kevesebb vihar eredménye pedig a kevés villám, így a villám elég szűkös energiaforrást jelenthetett.

Az elektromos kisülési rendszerek **másik ellentmondása** az, hogy ezek **zárt rendszereikben 75% hidrogént tartalmaznak.** A kezdeti hidrogénkoncentráció valószínűsíthető érték, de amíg nyitott rendszerben a hidrogén meg tud szökni, zárt rendszerben ez nem lehetséges.

Az elektromos kisülési kísérletekben **a fehérjékben található aminosavak közül tizet sikerült előállítani,** és *még másik harmincat,* melyek a fehérjék felépítésében nem vesznek részt.

Amikor **Miller kísérletét módosított** formában végezték el: az elektródok helyére ezúttal **ultraibolya sugárforrást tettek.** Az ibolyántúli sugárzás a korai Föld leggazdagabb energiaforrása lehetett. **Különböző aminosavak, illetve hidrazin, karbamid és formaldehid keletkezését tapasztalták.** Egyes eredmények szerint **a formaldehid ibolyántúli besugárzása során ribóz és dezoxi-ribóz is keletkezik.** Aminosavból ezúttal nem sok keletkezett, tehát az **ultraibolya sugárzás nem ideális az aminosavak keletkezéséhez, az aldehidek keletkezéséhez viszont igen.** Ez arra utal, hogy **az alapvető biológiai elővegyületek keletkezésében és felhalmozódásában többféle energiaforrás is közrejátszott.**

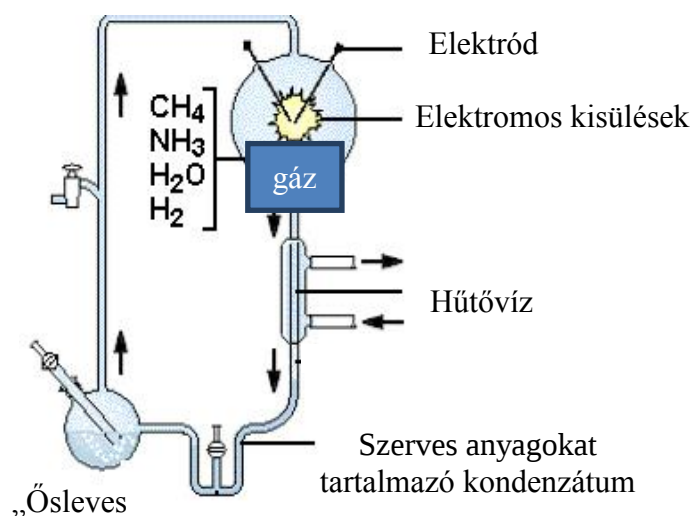
A kísérlet gyengesége, hogy csak rövid hullámhosszúságú sugárzást alkalmaztak energiaforrásként, és eltekintettek az élő vegyületeket egyébként lebontó hosszú hullámhosszúságú sugárzástól, mely szintén megtalálható volt a Nap spektrumában. Másrészt **a szerves vegyületek** az ósóceánok vizeiben **termikus bomlásnak** lettek volna kitéve.

Miller, és társa, **Orgel** azt is kimutatták, hogy **a biológiai evolúció kezdeti lépéseit megalapozó anyagszintézisek legfeljebb 25°C-on mehetett végbe,** mivel a folyamat legfontosabb köztitermékei ennél nagyobb hőmérsékleten hőbomlást szenvedtek volna. A korai Föld átlagos hőmérséklete viszont 20°C-kal alacsonyabb volt a jelenleginél. Ebből következik, hogy a Nap sugárzási energiája is sokkal kisebb volt, feltételezések szerint kevesebb, mint fele a mainak.

Miller és munkacsoportja igazolta, hogy az ősóceánok vizében a szerves vegyületeknek a kémiai evolúcióhoz szükséges koncentrációban történő felhalmozódása akár már 0°C-on is megindulhatott, bár a folyamat szempontjából legkedvezőbb közeghőmérséklet -21 °C lett volna. Így azonban az óceánok természetesen befagytak volna.

Az őslevesben tehát számos olyan aminosav keveréke volt jelen, melyek többsége nem az élő anyagformákban előforduló fehérjék alkotója. A Miller-féle **elektromos kisülési kísérletben** például **több nem élőfehérje alkotó aminosav volt, mint élőfehérjealkotó**, amelyek az esetek többségében legalább két izomer keverékének bizonyultak. **Az evolúciós modellkísérletekben keletkezett aminosavak D- és L-aminosavak 1:1 arányú keverékei.** Az élőfehérje-alkotó és nem élőfehérje-alkotó aminosavak D- és L-sztereoizomerjeinek egymással adott reakciójában a mai fehérjékre a legkisebb mértékben sem hasonlító, véletlenszerű aminosav-összetételű polipeptidek keletkeznének. **A valódi, élő rendszereket felépítő fehérjék azonban nemhogy kizárólag húszféle aminosavból épülnek fel, de ezeknek is csak az L-izomerjét tartalmazzák.** Egy biológiai szempontból meghatározott szerepet játszó fehérje szigorúan determinált aminosav-sorrendet mutat. Alapvető tehát, hogy az aminosavak ne spontán módon kapcsolódjanak össze. Mindezek alapján kimondhatjuk, hogy a fenti kísérletek rendkívüli jelentőségűek ugyan, de nem adnak kielégítő választ arra, hogy hogyan a vázolt módon kialakulhatott-e az élet az akkori környezeti feltételek mellett a Földön.

17. ábra Miller kísérlet elrendezése



A megfelelő légkör kialakulását illetően a következő nézetek ismertek.

Szén-dioxid-vízgőz légkör: A korai Föld vulkanikus tevékenységében felszabaduló gázelegyet a mai vulkanikus gázokkal azonosnak tekintve a korai légkör elsősorban **szén-dioxidból** és **vízgőzből** állt, amely emellett kis **menyiségű kén-hidrogént, kén-dioxidot és nitrogént tartalmazott**.

Metán-ammónia-vízgőz légkör: Miller azon a véleményen volt, hogy a **légkörben maradt egy kevés hidrogén**, amely reakcióba lépett a szintén itt található szénnel, nitrogénnel és oxigénnel, és így alakult ki a metánban, ammóniában és vízgőzben gazdag légkör. Az első álláspont képviselői vitatják a hidrogén jelentőségét, és a metán jelenlétét a légkörben.

Szén-dioxid-nitrogéngáz légkör: Mások az atmoszféra vizsgálatakor arra a következtetésre jutottak, hogy a **korai légkör vízgőzt, szén-dioxidot, nitrogént és 1% hidrogént tartalmazott**. Ez utóbbi a vulkánkitörések során jutott a légkörbe, vagyis az elmélet alapfeltevése, hogy a hidrogén a jelenleginél bőségebb volumenben állt rendelkezésre. A nagy mennyiségben kibocsátott szén-dioxid az óceánok vizében karbonátokat képzett és a jelentős mennyiségű vízgőz, pedig lecsapódott.

Belátható, hogy **vízgőz bizonyosan volt a légkörben** (legalábbis akkor, amikor az életfeltételeknek megfelelő átalakulások kezdetüket vették). Az **oxigén** a légkörbe a **vulkanikus kigőzölgésekből** és a **víz fotodisszociációjából**, valamint az **üstökösökből és meteoritokból származtatható**. (Ma is áll még az a nézet, mely szerint a Földön található összes víz is az üstökösökből származik.) A **víz fotodisszociációja az ibolyántúli sugárzás energiája hatására** megy végbe, melynek során hidrogéngáz és oxigéngáz keletkezik. Az is vitatott, hogy *több oxigén keletkezik-e időegységenként, mint amennyi megszökik a légkörből?*

Az anyag szerkezeti felépítése atomszerkezeti ismereteink szerint és a fenti példák nyomán is érthető módon, folyamatos változás alatt áll. **Az anyag tehát a folyton változó környezethez alkalmazkodó struktúra, mely környezet annak felépítésében és változtatásában meghatározó.** A szerkezeti változások hátterében megtalálhatjuk a különböző energiafolyamatokat. Az élettelen anyag szerkezeti változásainak kialakulásában az abiotikus tényezők változása áll. Az élettelen struktúra egyre szervezettebbé, összetettebbé válhat, mely szervezettség térbeli és időben sajátosságai már esetleg élő sajátosságok kialakulásával is járhat.

Bizonyítottá vált, hogy az evolúció során a környezet tehát folyamatosan változik. **A környezet determinált változásain, mint feltételen alakult ki az élet.** Ez a definiált anyag és energia szükséglet a környezet további folyamatos, de lassú, az élő rendszerek alkalmazkodásával követhető változások eredményeként az élő anyagformák rendkívüli változékonyságát eredményezte. A sejtekben a **membránszerveződések és a szol-gél fázisok** dinamikus változásai által kialakított **kompartmentekben és felületeken egyidejűleg** akár több ezer **biokémiai reakció** zajlódhatott,

**közeget,
határokat és
kapcsolatot**

teremtve az élet funkcióihoz elengedhetetlenül szükséges strukturális szerveződés létrejöttéhez.

A mai környezeti viszonyok úgy változtak, hogy abban a producens élők, és az élő-anyagformák által megváltoztatott környezeti feltételek mellett, azok, a további élet alapfeltételeivé váltak.

A **biológiai evolúció kritériumaként** napjainkban a kialakult **alapfeltételeket felhasználó, az élő szerveződések által időben követhető módon zajló alkalmazkodási mintázatok fenntarthatósága** nevezhető meg.

Az ember és a környezet relációjában vizsgálódva azt találjuk, hogy tankönyvi adatok szerint evolúció legfejlettebb élőlényeként említik az embert. Az embernél jelenik meg az a komplexitású biológiai anyagforma az evolúció folyamán mely egy új „érték”, a tudat kialakulását biztosította. Ez egy új energetikai minőséget, a tudati energiákat képviseli. A tudat segíti az embert a tökéletesebb alkalmazkodáshoz, sőt a tudatnak köszönhetően az ember a környezetét jelentő feltételrendszert is képes már átalakítani.

Az ember nemcsak arra képes, hogy a szervezetén belüli belső életfolyamatait megváltoztassa, hanem arra is, hogy a környezetéhez való alkalmazkodásban alternatív megoldásokat keressen.

Az ember evolúciója immáron **a társadalom**. Az alkalmazkodás már döntően a kommunikáción alapul, amely kollektív és változatos mintázat. **A társadalmat is, mint a legmagasabb strukturális szerveződést, hasonlóan az abiotikus vagy más biotikus szerveződésekhez objektív törvényszerűségeknek kell irányítani.**

A funkcionalitás fenntartásának feltétele az egyre komplexebb rendszer. A társadalomnak, mint a komplexitási igény feltételeit kielégítő rendszernek, evolúciója során az ezt determináló törvényszerűségeknek megfelelően kell az idő függő kinetikáját prezentálnia. Hasonlóan az evolúciós rendszer bármely szerveződési szintű vizsgált rendszeréhez.

A világegyetem változása

Az evolúció folyamata az élő rendszerek változatos alkalmazkodását megelőző élettelen rendszerek állandó módosulásának talaján zajlik.

Ez a definitív megközelítés az **állandó alkalmazkodást** (a változások rendszerét és láncolatát) tételezi fel az evolúció mögöttes folyamataként, amely az összes anyag és energia rendszer axiómája, azaz önmagától értetődő törvényszerűsége.

A folyamatok az élettelen, élő dinamikus hatásrendszerekben az önszerveződés szükségzerű alapjaira épülnek,

kristályképződés

anyagszerkezeti egységek,

biomolekulák összerendeződése spontán folyamattal,

és a termodinamika fő tételei szerinti energetikai megfontolások alapján értelmezhetőek.

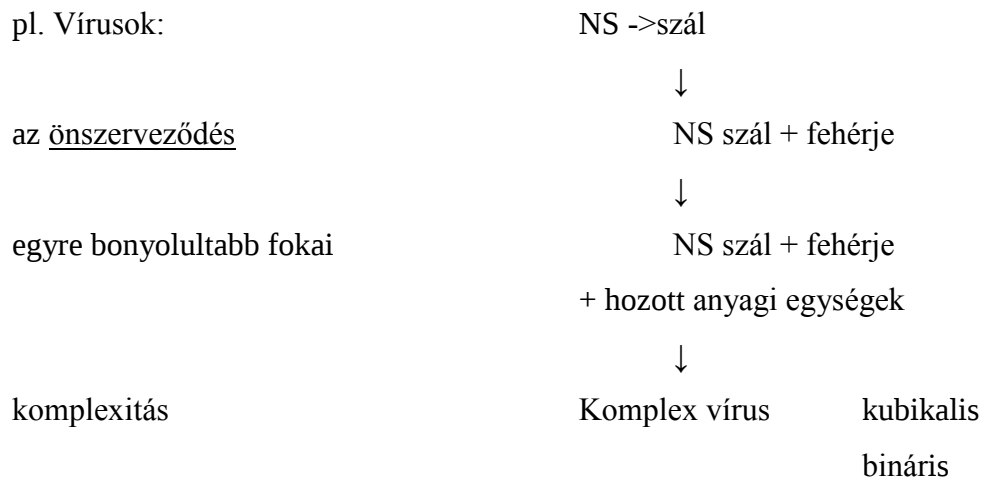
A biológiai rendszerek anyagtartalmuk kémiai viselkedésével jellemezhetőek. A duplikatív kémiai elemek megjelenése (pl. NS-ak) lehetővé teszik a hatékonyabb alkalmazkodást.

MEGSZÜNTETVE MEGŐRZŐ MÓD

Az evolúció tehát, az önszerveződés és szelekció rendszerként értelmezhető folyamatos komplexitás növekedés

A Komplexitás

Az anyagi komplexitás az önszerveződés folyamatának eredményeként egy minőségileg új rendszert képezett, szervezettségében és irányítottságában új kapcsolati elemeket működtetve.



(pl A megszüntetve megőrző mód áttekintése során a NS funkcióit, mint az alkalmazkodás feltételeit értelmezhetjük)

Az anyagi szerveződés bármely szintjén megjelenő általános törvényszerűség (amely az élő rendszerekre is igaz) az önszerveződési folyamatok által triggerelt komplexitás, ami az alkalmazkodást eredményezi.

Az önszerveződés szabályozó lépései

Az evolúció során megismert rend, (pl. az élőlények esetén, a magas fokon rendezett rendszerek) **a pontosan összerendezett, folyamatosan zajló biokémiai folyamatok eredményeként még meg is kettőződik.**

Darwin óta tekintették a **természetes szelekciót a rendezettség** jóformán egyedüli **okának**. A biológiai rendezettség, részben a szelekció nyersanyagának spontán rendezettségét tükrözi. A szelekció viszont (pl. az ontogenezis során) az evolúciós rendszer koherenciáját csak modulálja, de nem determinálja. Az entrópia termelés által kontrollált egyensúlyi állapotok fenntartása ott és akkor érvényes anyag és energia feltételek mellett az evolúció fő szabálya, amit egyszerűen az alkalmazkodási mintázatok mutatnak be.

Filozófiai kérdés, hogy lehetséges-e, hogy a fejlődés és alkalmazkodás képessége maga is evolúciós vívmány?

A korábban természettudományos alapon igazolt anyag-, energia feltételek bizonyításából

látszik, hogy **a szelekció az önszerveződés művének fogható fel.** Viszont az összetettségnek, vagy komplexitásnak még nincs is általánosan elfogadott átfogó meghatározása.

Az ismert, hogy bizonyos esetekben az élő és élettelen rendszerekben a **véletlenszerűen megjelenő viselkedéseket, determinisztikus erők (pl. káosz)** határozzák meg, melyek hatására kialakuló események (pl. pillangó effektus) sokszor nehezen értelmezhetők. A káosz mellett az antikáosz jelensége játszik nagy szerepet az ontogenezisben és az evolúcióban.

A biológiai anyagformák mintázatainak káosz és antikáosz által meghatározott megjelenési formáinak matematikai leírásait az motiválta, hogy érthetetlennek tűnt, hogyan lehet egyetlen megtermékenyített sejtből pl. a többféle sejtípus?

Tudjuk, hogy egy organizmus nagyjából ugyanazon genetikai utasításokat tartalmazza. De **a sejtípusok nem azért különböznek, mert a sejtek különböző géneket hordoznak, hanem, mert más-más gének aktívak bennük.**

A **genom** úgy működik, mint **egy összetett párhuzamosan működő számítógép, vagy hálózat**, melyben a gének vagy közvetlenül, vagy termékeiken keresztül szabályozzák egymás működését (sejtdifferenciálódás).

Ebben az összetett, párhuzamosan működő rendszer tulajdonságait feltáró munkában a matematikai modellek lehetnek segítségünkre.

Minden rendszerben, a **rendszer lokális jellegzetességeinek** nevezett jellemzők írják le a rendszer elemeinek **kapcsolódási szabályait**, és az **elemek lehetséges kölcsönhatásait.**

Amennyiben adott a lokális tulajdonságok tetszőleges soksága, akkor meghatározhatjuk a komplex rendszerek azon összességét, amelyek hordozzák ezt a lokális tulajdonságot. Így a sokasághoz tartozó különböző rendszerek átlagos, statisztikus jellemzőit megadhatjuk.

(A hagyományos statisztikus mechanika /módszer/ ugyanis egyetlen rendszer összes lehetséges állapotának átlagértékére kíváncsi!)

Noha a rendszerek rendkívül különbözők lehetnek, mégis a statisztikailag jellemző viselkedésformáikból és struktúráikból a legcélszerűbb kiindulnunk, ha jellemezni akarjuk őket.

Idealizálva a rendszert a génekből egyszerű bináris („ki”-„be” állapotú) változó lesz. A sok ezernyi elem vizsgálatára a véletlen Boole-hálózatok alkalmazhatók (G. Boole, C. Langton)

Boole-hálózatok

A rendszerben minden változót más változók szabályoznak. Ezen szabályozók képezik az inputot és dinamikus viselkedésüket a Boole-függvény (mely egy logikai átkapcsolási szabály) írja le. A függvény megadja, hogy mi lesz a szóban forgó változó aktivitási állapota, amennyiben az input változók felveszik a lehetséges értékeiket.

pl. a **VAGY-függvény**-nyel a változók aktivitási állapota írható le /a Boole szabálya: a kimeneti változó akkor aktív, ha a bemeneti változók közül legalább egy aktív/.

Az **ÉS-függvény** szerint a kimeneti változó csak akkor lesz aktív, ha az input változók mind aktívak.

A Boole függvény értelmezhető a bináris hálózatok tetszőleges elemén. Amennyiben ennek K bemenete van, akkor a lehetséges jelek **2^K variációjúak.**

Az idealizált biológiai rendszer matematikai változatát autonóm véletlenszerű NK Boole-hálózatnak nevezik. Ez a hálózat N elemből áll, és minden elemhez K bemenet tartozik. Azért autonóm, mert egy elem sem jön a rendszeren kívülről.

Véletlen hálózaton a sokaságból véletlenszerűen vett mintát értjük.

A rendszer egyik állapotból átkerül a másikba. **Az egymás utáni állapotok sorozatát a hálózat trajektóriájának mondjuk.**

A véletlenszerű Boole hálózatok jellegzetessége, hogy véges sok állapotuk van.

A Boole-függvények az egyidejűleg működő elemek rendszerét szinkronban képesek vizsgálni.

Tudjuk, hogy az ilyen rendszerek szükségszerűen jutnak olyan állapotba, amibe egyszer már voltak. Így értelmezhetők az **állapotciklusok**, azaz a **körfolyamatok**.

Az állapotciklusokat a hálózat attraktorainak (vonzóhalmazainak) nevezik.

Ha egy trajektória egyszer bekerül egy állapotciklusba többé nem is kerül ki abból.

Azon állapotok halmazát, melyek a rendszert beszippantják, vagy belökik egy ciklusba, az állapotciklus vonzási tartományának nevezzük.

Minden hálózatnak van legalább egy állapotciklusa.

A magára hagyott állapotciklus – computeren futtatva – előbb vagy utóbb eljut abba az állapotformába, ahol **„egyensúlyi”** folyamatok által meghatározottan **stabilizálódik**. Innen nagyon nehéz kibillenteni. Viszont, ha a hálózatot megzavarjuk, akkor a trajektória

megváltozhat.

A zavarok két típusát kell megkülönböztetni: a kis zavarokat és strukturális zavarokat.

Kiszavar: ha egy bináris rendszer aktivitási állapota átmenetileg átbillen, de ez a változás nem lendíti ki a rendszert a vonzási tartományából. Ilyen esetekben a rendszer visszatér korábbi állapotciklusába.

Azonban, ha a rendszer kitér a változás hatására vonzási tartományából és átlép egy másik vonzási tartományba, akkor a hálózat trajektóriája megváltozik, s az befolyik egy új állapotciklusba. Ettől kezdve a hálózati viselkedés már egy másféle ismétlődést fog mutatni.

Az attraktorok másképpen reagálhatnak a kis zavarokra: kivédhetik azokat, vagy átbillenhetnek akár a legegyszerűbb hatásokra is. De lavinaszerű eredményt is észlelhetünk egy-egy átbillenés következtében. A sérülések különböző mértékben terjednek szét a hálózatban.

Strukturális zavar: A Boole hálózat elemei közötti kapcsolatoknak a tartós megváltozása (pl. két elem bemenetének felcserélése, illetve egy vagy- és függvény kicserélése).

Amennyiben változnak az összetett Boole-rendszer paraméterei, akkor velük változhat a rendszer rendezett viselkedése.

Az összehangolt és alkalmazkodásra képes rendszerek körében a rendezett és kaotikus szervezettség közötti folyadékátmenet állapota a jellegzetes szelekciós célpont. Így a biológiában feltétlenül lenniük kell ilyenfajta lebegtető rendszereknek.

Mennyire rendezett és mennyire kaotikus pl. egy vírus, vagy baktérium genetikai rendszere?

A genetikai rendszerek gyér kapcsoltságúak és rendszerint összeterelő függvények vezérli őket (pl. vagy függvények), ezért igen valószínű, hogy

befagyott elemekkel átszőtt,

párhuzamosan működő rendszerek,

viszonylag kevés kis méretű attraktor,

védettség a kis lavinával szemben,

a dinamika csekélyebb változása a mutációk hatására

jellemzi őket.

Az antikáosz fogalmának van egy különleges értelmezése a biológiában:

EGY SEJTTÍPUS MEGFELELTETHETŐ A GÉNDINAMIKA EGY ATTRAKTORÁNAK.

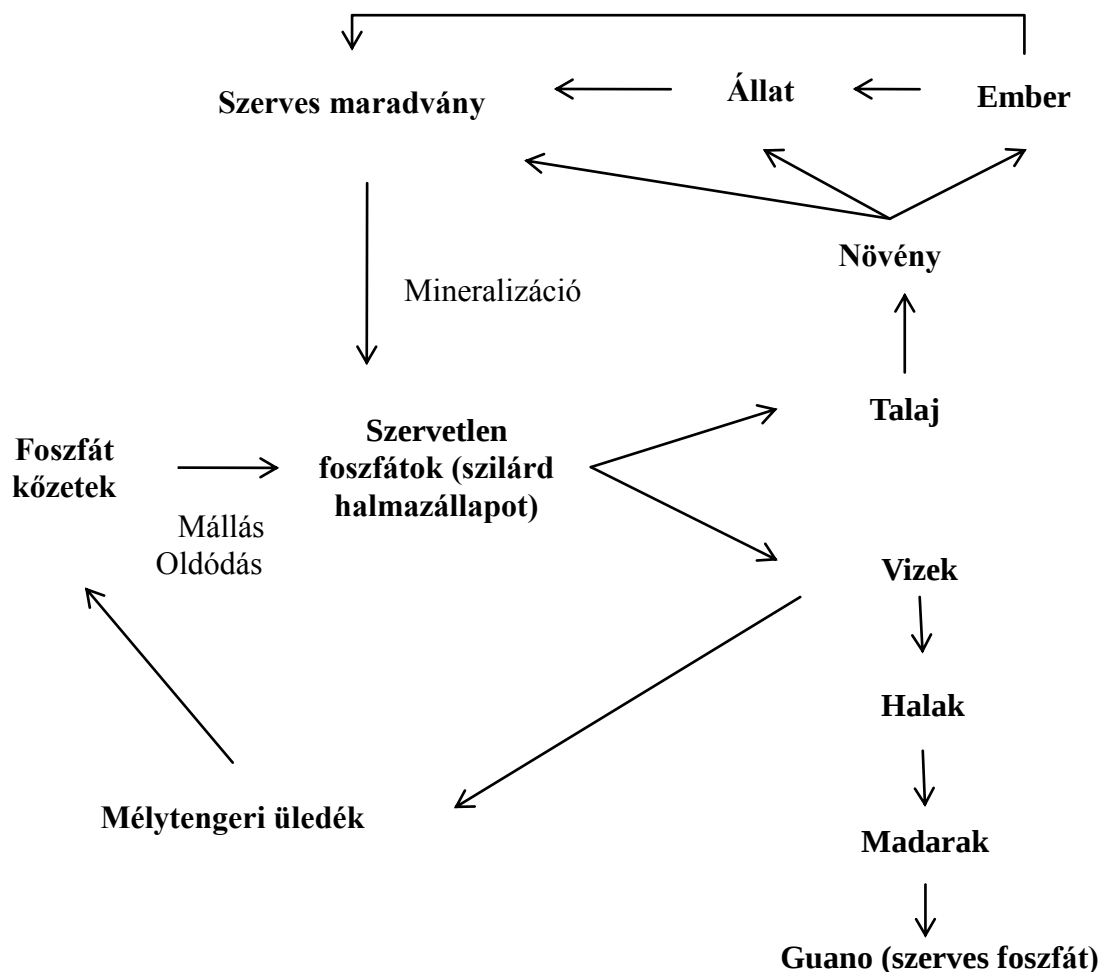
Egy 100 ezer gént tartalmazó genom potenciálisan $10^{30\,000}$ genetikai mintázatot alakít ki. A **genom-szabályozó hálózata ezeket a valószínűségeket időben változó génaktivitási mintázatokká rendezi. A stabil sejttípusok a gének egy korlátozott halmazának folyamatos kifejeződése által jönnek létre.** Ez szinte sugallja, hogy egy sejttípus megfelel egy állapotciklus attraktornak. Ez azt jelenti, hogy a gének egy meghatározott halmazán a génkifejeződés teljesen stabil ciklust testesít meg.

Definíciók:

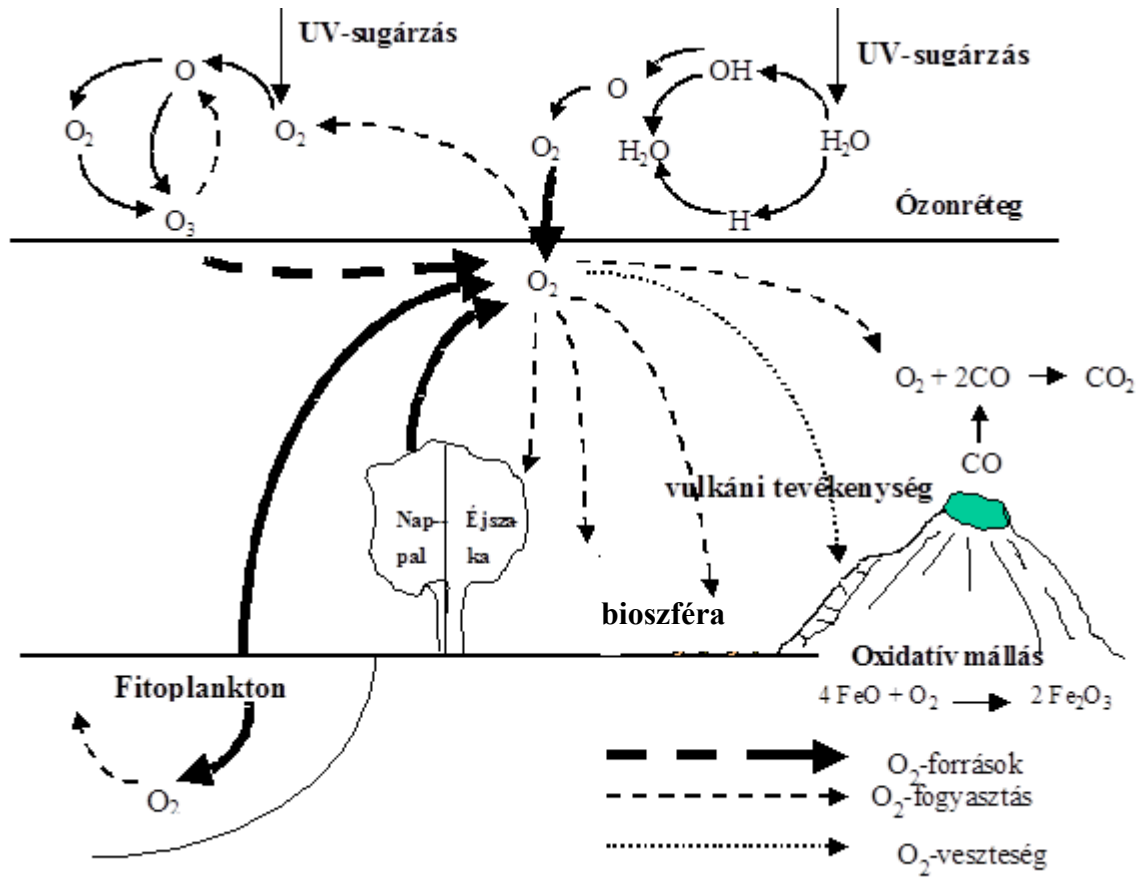
KÁOSZ: Az összetett rendszerek viselkedésének egyik módozata (I.).

ANTIKAOSZ: Az összetett rendszerek káoszszerű viselkedésével ellentétes viselkedés módozat (II.).

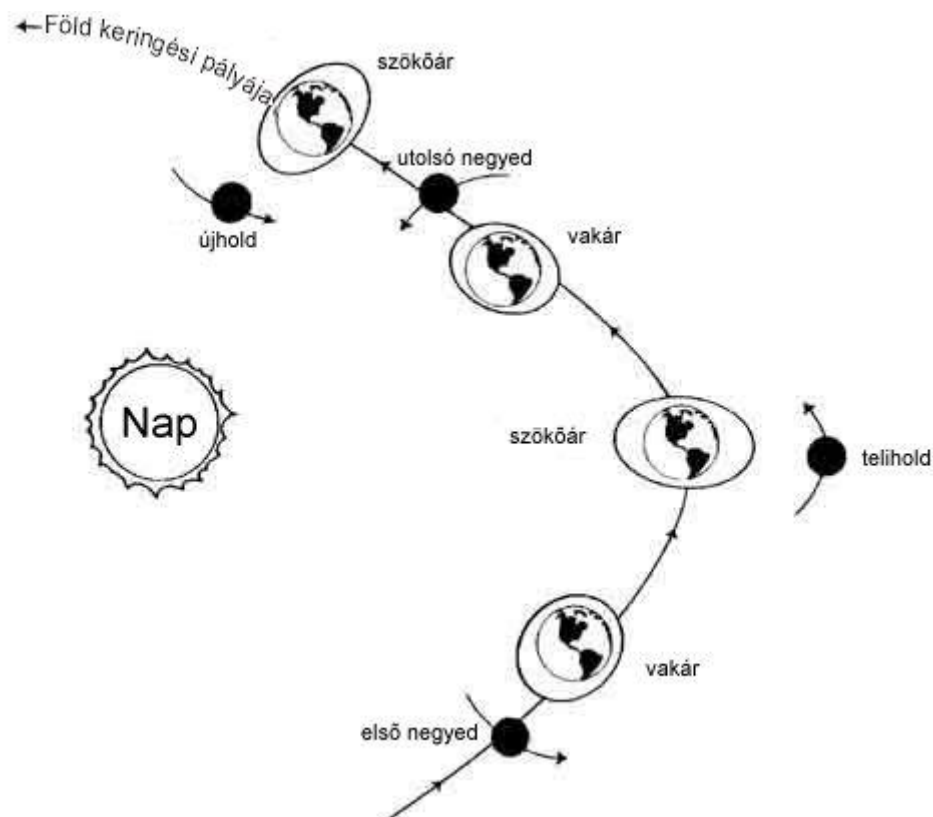
18. ábra A foszfor geokémiai ciklusa



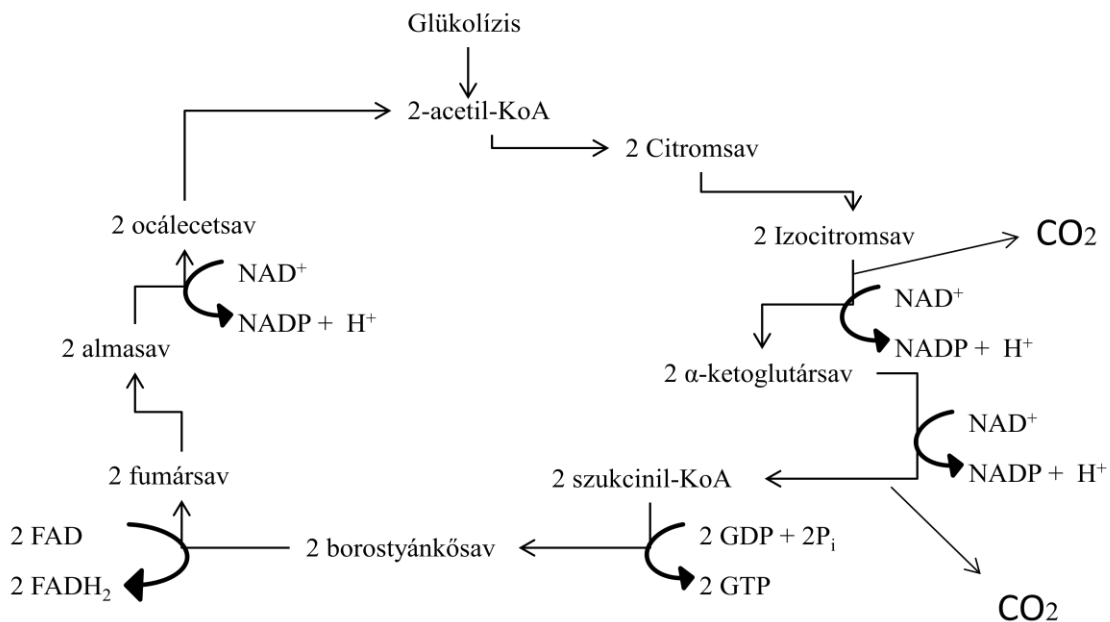
19. ábra Az oxigén körforgalma (Forrás: <http://users.atw.hu/levelezo/Jegyzet/hbiologia2.pdf>)



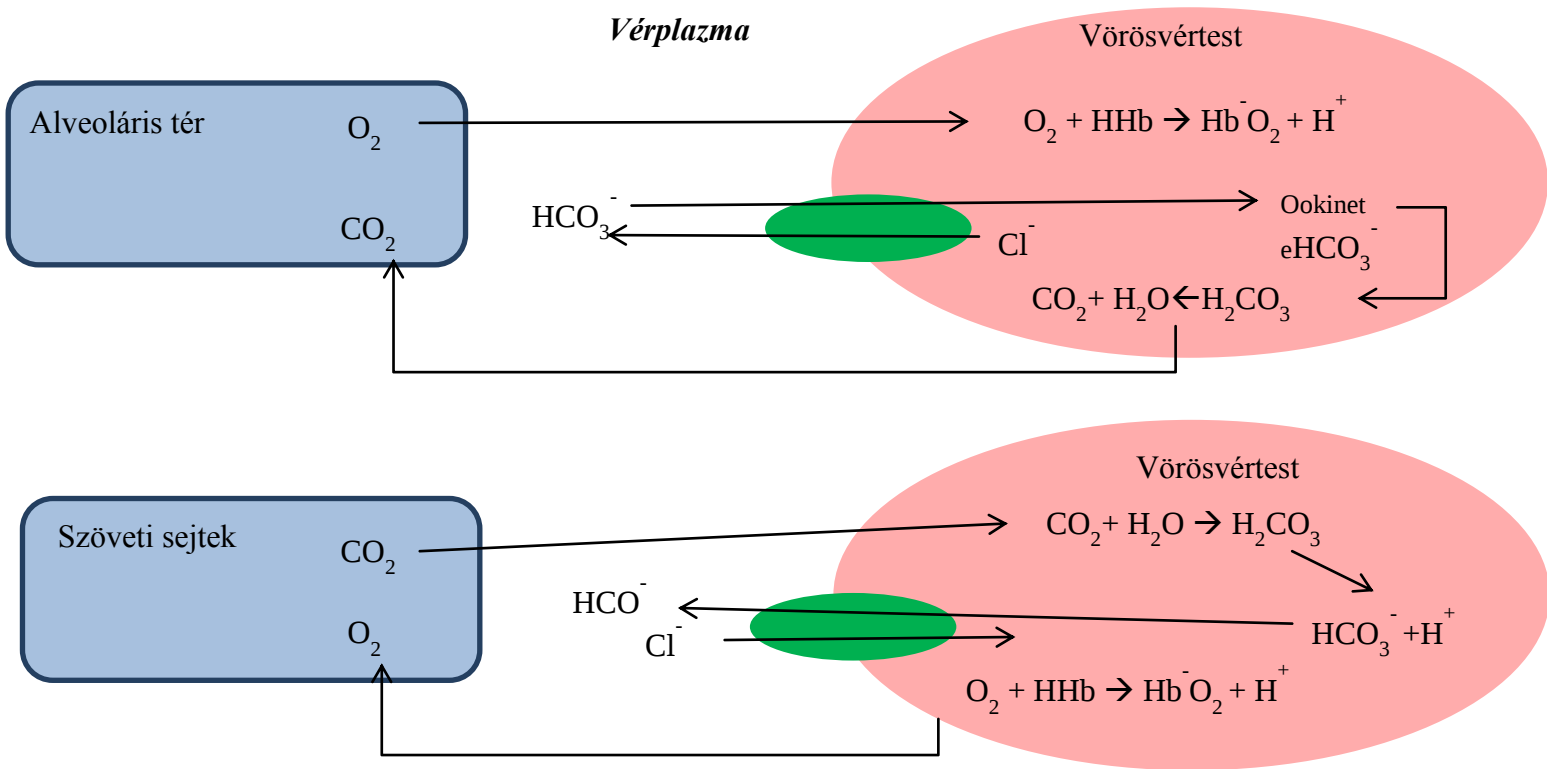
20. ábra Az árapály jelenségének kialakulása (Forrás: http://astro.u-szeged.hu/oktatas/csillagaszat/6_Naprendszer/01030302Hold/Hold.html)



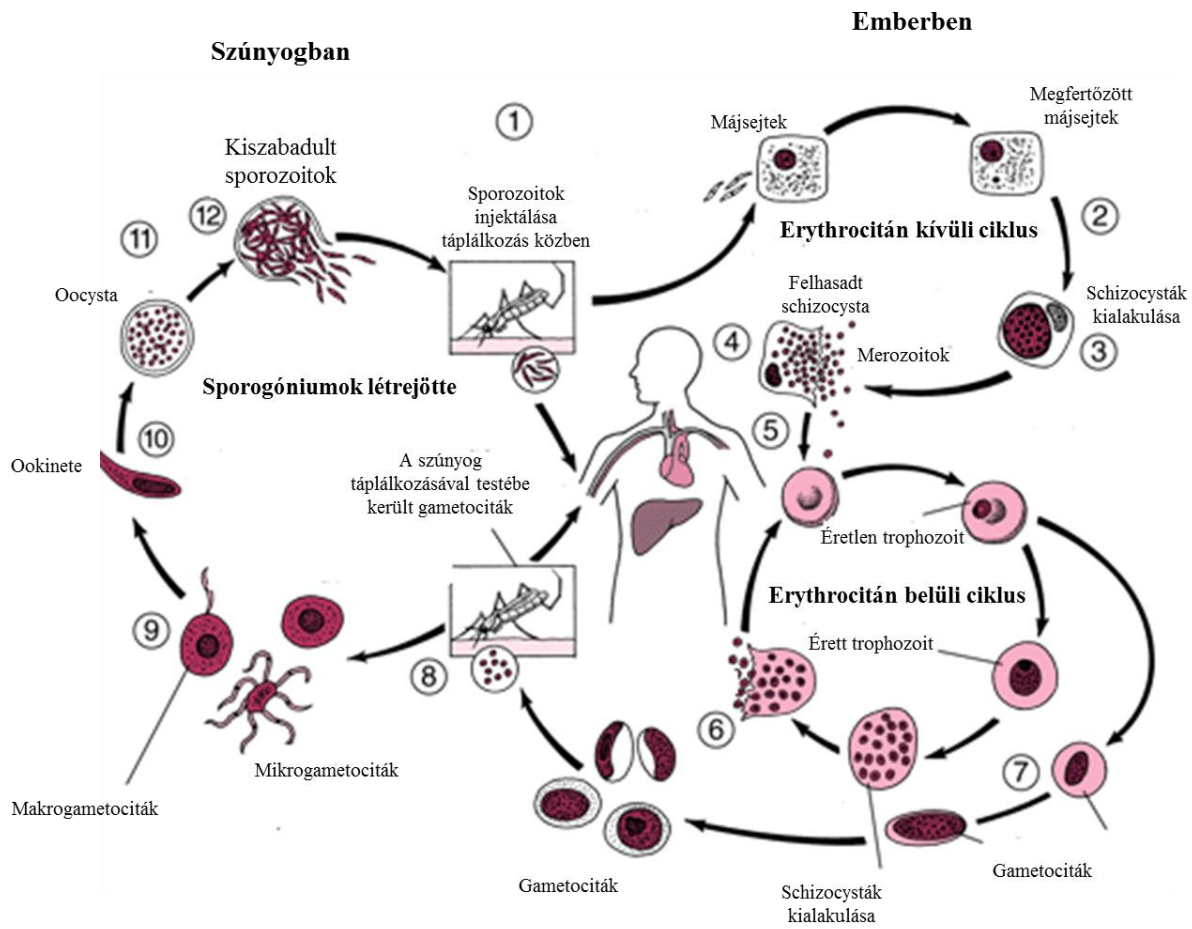
21. ábra Citromsav ciklus



22. ábra A haemoglobin oxigén szállítási ciklusa



http://www.merckmanuals.com/professional/infectious_diseases/extraintestinal_protozoa/malaria.html)



A modell

A **K bemenetű** és **N elemű** párhuzamos működési rendszerű hálózatok vizsgálata:

a) $K=N$ állapot.

Ilyenkor a rendszer a Kezdeti feltételekre is nagyon érzékeny. A véletlenszerűen kialakuló egymás utáni állapotokban minden zavar jelentős változást generálhat a rendszer trajektóriájában, ezzel megváltoztatva az elem állapotát.

Kisváltozásra a rendszerben pillanatszerűen szétterjedő, nagy területen érvényesülő állapotváltozást okoz.

(pl. hangszeres játék, stb. egyes elektrofiziológiai események – szívfrekvencia események, anafilaxia?)

A $K=N$ elemű, kaotikus viselkedésű rendszer rendezettségére utaló jelet a meglepően alacsony állapotciklus és vonzási tartomány számmal mutatja.

Az állapotciklusok számának várható értéke N (elemek száma) e (természetes log. alapszámának) hányadosával egyenlő.

pl. $N = 200$

állapotok száma = 2^{200}

a rendszer viselkedése = 74

Egy attraktor stabilitása annál erősebb, minél nagyobb a hozzátartozó vonzási tartomány mérete.

A környezeti feltételek minél inkább változnak, következményesen annál kisebb lesz a vonzási tartománya az illető attraktornak (állapotciklusnak) s átléphet más tartományba, mert ott lesz most stabilabb a fennmaradása.

(pl. az evolúció állapota a vonzási tartományainak változásai miatt átlép egy másik tartományba, ami új alkalmazkodási rendszerszabályok létezését képviseli már, mert ott és akkor abban az állapotban lévő mintázatok lesznek a stabilabbak.)

Ez annyit is jelent, hogy több a trajektória azon állapotainak száma, amelyből végül a rendszer az attraktorba jut.

Az attraktorok sok zavart képesek kivédeni, de a kicsik instabilak.

A $K=N$ kaotikus rendszer addig marad fenn, amíg a $K<3$ be nem következik.

Ugyanis $K=2$ esetében a véletlen Boole-hálózatok tulajdonságai hirtelen megváltoznak. Váratlanul, spontán rendezettség áll be (ezt nevezzük kollektív rendezettségnek).

A $K=2$ esetben az állapotciklusok (lehetőségek) száma lecsökken, *nagyságuk az elemszám négyzetgyökével becsülhető*. Ilyen rendszerek szinte minden kiszavarral szemben stabilisak, és a strukturális zavarok is csak kissé érintik ezeket.

A $K=1$ elemenkénti bemenettel bíró hálózatok különleges rendezettségi osztályba tartoznak.

pl. $N = 10^5$

$K = 2$

Állapotszám: 2^{100000} (azaz 10^{30000})

A rendszer várható 370 állapotciklusa közül az egyikben stabilizálódna.

A rendszer 370 μ sec-ként futná be az attraktort.

Ha a hálózat K értéke nagyobb, mint 2, de közelít 2-höz a bemeneti elemek száma, akkor az állapot kevésbé érzékeny a kezdeti feltételekre (ugyanaz az eredmény több úton kiváltható).

A kaotikus rendszerekben a nagyon hasonló állapotokból kiinduló hálózatok egészen eltérőkké válnak.

Rendezett rendszerekben viszont igen gyorsan egy állapotsorozat felé haladnak.

Tehát a $K=2$ bemenetű hálózatok attraktorai a kis zavarokkal szemben stabilisak. A mutációk ezeket csak kis mértékben zavarják.

A rendezett hálózat pl. homeosztatisz tulajdonságokat mutat, azaz a hálózat a zavarok megszűnése után visszatér eredeti attraktorába.

- A két bemenetű véletlenszerű hálózat pl. a genomiális élő rendszer.

- Alapos a rendezettsége.

- A hálózat kiépít egy befagyott magot. (DNS, stb), amely egy olyan hurok, amik aktivitási helyeket választanak el egymástól

- A befagyott mag egymással állandósági falat alakít ki, s azok „beszűrődnek”, szétterjednek a teljes rendszerben.

Így a rendszer egy

nem változó befagyott magra és változó elemekből álló szigetekre hullik szét.

A szigetek funkcionálisan elkülönülnek egymástól, a szigetekben kialakult aktivitásváltozások nem képesek a magokon áthatolni. A rendszer egészében rendezetté válik, ugyanis viselkedésének változásai kicsik és helyi jellegűek maradnak.

A rendezetlen ki-bekapcsoló rendszerekben, az említett rendezett viselkedés kialakulásához elég csak csekély kapcsoltság. Ez csak elegendő, de nem elégséges feltétel.

Rendezettség olyan hálózatokban is **kialakulhat**, amelyekben **nagy** az elemenkénti **bemenetek száma**. Ilyenkor **módosíthatjuk** a modellt (Boole-féle) **kapcsolási szabályokat**. Ilyenkor feltétel, hogy az elemek nagyobb gyakorisággal kerülnek kapcsolt állapotba, míg ez más elemeknél fordított.

pl. 2 bemenetű VAGY függvény jelkettőshöz 3x rendel „be” állapotot. Szilárdtest fizikusok a módosított függvényt tanulmányozva megállapították, hogy

ha a módosítás elér egy küszöbértéket (küszöbszintet), akkor a befagyott tulajdonsággal jellemezhető elemek halmazai (homogenitás halmazok) összekapcsolódnak egymással, és szétterjednek az egész hálózatban. A rendezettség hasonló lesz a csekély kapcsoltságú halmazokhoz.

A **különálló elem** aktivitásának átmeneti megváltozása nem terjedhet túl az elzárt sziget határán, így komolyabb kárt nem okozhat

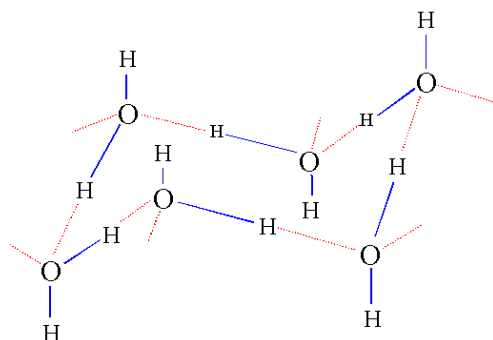
Viszont ha a **módosítások** mértéke erősen alatta marad a **küszöbértéknek**, /MÓDÓSÍTÁS < KÜSZÖBÉRTÉK/ akkor az **oszcilláló elemek hálója terjed szét a rendszeren, s a befagyott elemek csak igen kis szigetekben lesznek jelen**. Az ilyen rendszerekben a **kiszavarok hatása sérülés-lavinát** kelt, mely megváltoztatja a be nem fagyott elemek többségének viselkedését.

Christopher Langton: A rendezett hálózatok a szilárd, a kaotikusak a gáz, és a kettő közötti állapotban lévő hálózatok a folyadék fázisúak.

Az igazi folyadékok az anyag elkülönülő fázisát alkotják, s nem közbülső állapotok a gáz és a szilárd fázis között.

Amennyiben egy rendezett hálózatban a módosítások mértéke a küszöbértékig csökken, akkor a befagyott alkotórészek nagy valószínűséggel oldódni kezdenek (DNA, víz).

24. ábra A fagyott víz stabilizált szerkezete (Forrás: <http://www.ibchem.com/IB/ibnotes/brief/bon-sl.htm>)



A Káosz közelében a dinamikai viselkedés:

Egyszerre vannak jelen ebben a fázisátmenetben a kis- és nagyméretű nem befagyott szigetek.

Az apró zavarok ilyenkor számtalan kicsi és néhány nagy lavinát keltenek (osztódás veszélyes állapot!).

A hálózat elemei tehát kapcsolatba léphetnek egymással – befolyásolva egymás viselkedését – mégpedig hatványfüggvényeknek megfelelő eloszlást követve, mert a közeli helyek kis sérüléslavinákon keresztül gyakran érintkeznek, a távoli helyek csak ritkán.

Ebből adódik, hogy a Káosz szélén lebegő hálózatok (párhuzamos működésű rendszerek) az evolúciós célpontok.

Az erősen kaotikus hálózat túl rendezetlen ahhoz, hogy összetett viselkedéseket tarthatna kézben; az erősen rendezett hálózatok pedig túlságosan befagyottak ehhez.

Az olvadás a hálózati aktivitások koordinálásának kedvez, megfelelő dinamika alakulhat ki.

Az összetettség, amelyet a hálózat koordinálni képes, a szilárd és gáz fázis közötti folyadékfázisban a legnagyobb.

Ezért mondtuk, hogy az evolúció színtere az átmeneti, folyadék állapotban lebegő párhuzamos működésű hálózatok. (Folyamatos, apró változások, foltozgatások, stb.) pl. Computeres programoknál minél tömörebb és pontosabb a kód, annál kevésbé képes az „evolúcióra”.

A Káosz és a rend határán álló hálózatokban jelen lehet a rugalmasság, amelynek birtokában a rendszerek gyorsan és sikeresen alkalmazkodhatnak.

A legtöbb mutációnak nincs homeosztatisz következmenye. Néhánynak viszont változásuhatag az eredménye.

A lebegő rendszerek jellemzője a folyamatos alkalmazkodás a folyton változó környezethez, de ha a szükség úgy hozza, akár az alkalmankénti gyors változás lehetősége is a rendszerben van.

Kérdés, hogy a szelekció elsodorhatja-e a Boole-hálózatokat a Káosz széléig? - Igen.

Az evolúció a Káosz határa felé tart. Ugyanis a rend és Káosz közötti átmenet attraktora lehet az egyszerű és összetett problémákat megoldó hálózatok evolúciós dinamikájának színtere.

Definíció: A bonyolult feladatok összehangolására és alkalmazkodásra képes rendszerek körében a rendezett és a kaotikus szervezettség közötti folyadékátmenet állapota a szelekciós célpont.

Pl. genom: Bináris Kód - ki; be kapcsolt állapot, 100 ezer gén (10^{30000}) féle mintázat, ezeket a genom szabályozó hálózata a valószínűségek időben változó dinamikájaként, génaktivitási mintázatként irányítja.

Állapotciklus: a gének egy meghatározott halmazán a génkifejeződés teljesen stabil ciklusa valósul meg. (egy) Sejttypus(ban)

A gyengén kapcsolt, összeterelő Boole-függvényeket tartalmazó hálózatokban, spontán kialakuló rendezettségéből levonható következtetések:

1. Minden sejttypusnak igen kis számú génkifejeződési mintázat felel meg. (100 000 gént reprezentáló genom 1 attraktor, melynek kb. 350 állapota van. Tehát az adott sejttypusra jellemző összes génkifejeződési mintázaton az expressziós folyamatkaszád kb. 370-3500

perc alatt fut végig. Ez az időtartam megközelíti a biológiai rendszerek jellemző időhatárait.)

2. A sejtciklus hossza a sejtben lévő DNS mennyisége között nagyjából négyzetgyökös összefüggés áll fenn.

Ha a sejtípus 1 attraktor, akkor megmondható, hogy hányféle sejtípusa lehet egy élőlénynek.

3. A hálózatban lévő attraktorok száma közelítőleg a hálózat elemeinek négyzetgyökével egyenlő.

Így a sejtípusok száma $\sim$ gének számának négyzetgyökével

Ember: 100 ezer génje - 370 sejtípus
ismert 254 sejtípus

Baktériumok: 1-2

Vírusok: 12-15

Gyűrűsférgek: 60 sejtípusa van

4. Nem minden génről másolódik fehérje, így a gének száma nem szükségszerűen növekszik együtt a DNS mennyiségével.

A sejtípusok száma (DNS-vel $^{1/2} - 1$ közé esik)

Legfeljebb lineárisan nő.

Ismert az a nézet is, hogy a genetikai rendszerek más egyszerű modellje szerint a sejtípusok száma nem hatványfüggvény, hanem exponenciális függvény szerinti.

Sejttípusok stabilitása:

Ha egy sejttípus azonosítható egy attraktorról, akkor a sejttípusokat a **zavarok** (a környezet) nem változtatják meg.

- A sejttípusok stabilitása a génszabályzó rendszer tulajdonságaiból fakad.

- Így a differenciálódáskor a zavarokra adott válasz egy másik sejttípus vonzó tartományába viszi át a sejtet.

Mindebből megállapítható, hogy a megtermékenyített petesejtből induló egyedfejlődés a differenciálódás elágazó ösvényein halad. **Ha egy sejt elkezdett valamilyen úton differenciálódni, akkor már nincs módja egy másik differenciálódási útvonalat követni.** A soksejtűek sejt differenciációja az egymást követő elágazások kiválasztására korlátozódik a Kambrium óta (6×10^9) éve.

A sejttípusok attraktormodellje szerint 1 gén mutációja csak korlátozott hatást fejthet ki. Ilyenkor a mutáció okozta sérülés-lavinák nem terjedhetnek ki a szabályozó hálózatok nagy területeire.

Az aktivitás változások csak a gének elzárt szigetére korlátozódnak mutáció során.

Ezeket igazolta a tapasztalat is.

A Rend – Káosz határán lévő genomrendszerek, mint bináris, véletlenszerűen működő, párhuzamos hálózatok modelljeként foghatók fel. Ezért az egyedfejlődés során zajló sejt differenciálódásoknak számos tulajdonságára nézve le kell írnia az evolúciós jellemzőket.

Az evolúció az alkalmazkodó génszabályzó rendszereket a rendezett tartományba vezeti, valószínűleg a rend és Káosz határának közelébe.

Környezetrendszer (–módszertani anyag: munkafeladathoz a kurzus kapcsán)

Következőkben a **I. rendszerelem** (élettelen); **II. rendszerelem** (élettelen+élő); már ismert törvényszerűségeit vizsgáljuk, keresve ily módon a **III. rendszerelem** (TÁRSADALOM+ ember +élő +élettelen) alapszabályait, illetve ezzel kísérletet teszünk egyes hiányzó láncszemek helyeinek kijelölésére (a teljesség igénye nélkül).

I rendszerelem	II. rendszerelem	III. rendszerelem	Szempontok
(1) Universum 15 milliárd év (2) Föld 4, 6 milliárd év	(3, 4) primitív szervezetek 3, 5 milliárd év	10^4 év	Időbeli megjelenés
Világegyetem szűkül Föld	Víz Víz + Gáz Víz + szárazföld + gáz Bioszféra (tágul)	Csak a bioszféra szűk régiói a szárazföldön belül	Térbeli megjelenés
Fizikai E -> Kémiai E -> E $\leftrightarrow$ A > > >	Biológiai E -> E $\leftrightarrow$ A > > >	Tudati E E $\leftrightarrow$ A	Szabály, mely az idő és térbeliséget összefogja az = evolúció (Ev.) E = energia A = anyag Diszkrét rendszerek fizikai kémiai törvényeivel meghatározottan

Tökéletes (Végtelen szabadsági fokkal)	Szűk határok között (korlátozott szabadsági fokkal)	Csak diszkrét esetekben (biztonsági intervallumokon belüli szabadsági fokkal, azaz, lokalizáltan)	Egymásba alakulás képessége -> alkalmazkodás E ↔ A között
Anyagi sokféleséggel prezentáltan (egy-egy reaktánssal)	Egyedeken belüli (anyagcserén át)	Csoportos (megszámlálhatóan végtelen sok)	E hasznosítók volumene
„Független” a Föld rendszerétől	A Föld „mikroadottságai” által determinált	- szerves anyagmennyiségétől – a II rendszerelem elégséges és az I. rendszerelem szükséges feltétel rendszerétől – a tudat (korlátozott) fejlettségétől függ	Rendelkezésre álló, hasznosítható E mennyisége
Fizikai E -> φ Kémia E -> Fizikai E determinálja	Biológiai E -> Kémiai E-t definiál Önmagát nem jeleníti meg (axiomaként)	Tudati E -> Életet (élő energiaformát) definiál „Önmagát” definiálja induktív módon Ez lehetetlen, logikai hiba!	Az meghatározott szervezetségi szinten álló rendszer E definiáló képessége
Objektív E ↔ A	I. rdsz.-től függő objektív A -> B	? hiány! Itt objektív törvény irányító szerepének kellene lenni, helyette	A szabály- és törvényszerűségek

Átalakulási formában	átalakulási forma	a szubjektív szabályozók „ <u>nem globalizált, objektív, kauzális törvények működnek</u> ”.	megjelenési formája
Érzéketlen	Csak jól definiált körülmények között, csak bizonyos energiafajtákat képes tolerálni	? hiány! Itt nem értelmezett a tudati E bevitel, mert rendszer definiálatlan (kis quantumokban nagy felületen, jó hatásfokkal működő lehet csak, ha az élő törvényszerűségei által determinált)	Érzékenységi küszöb változása + E közlés hatására + E = energiabevitel
Alacsonyabb hatékonyságú a Fizikai E-áknál Magasabb hatékonyságú a Kémiai E-áknál	Kiváló a Biológiai E-ák hasznosításánál	? hiány! (Ökorendszerek működési elve szerinti r stratégistát mindig k stratégista követ -> egyensúlyra törekvés a társadalomban törvény-szerint nem értelmezett)	E hasznosítás hatásfoka
Tökéletes Szabad információ áramlás	Nagyon jó, (de szegregált elemekkel már komplexitást képviselő) áramlás	? Gátolt információáramlás? (a <u>rendszer</u> működése az információ-áramlás függvényének tekinthető)	Kommunikáció
			η (hatásfok)

Fizikai E -> magas szabadságfok = Szf. (térben kifelés és befelé) Kémiai E szűkülő Szf. (térben kifelé)	Biológiai E tovább szűkülő Szf. (térben kifelé)	!Hiba! Az átalakulást <u>érdekek</u> determinálják	Információ = I E Λ átalakulási lehetőségei
--	---	---	--

I. rendszerelem	II. rendszerelem	II. rendszerelem	Szemponatok
Érdek -> nem értelmezett Determinált (egységes)	Kémiai E x -> <u>Biológiai E</u> $\Sigma \Lambda$ egyedek -> $\boxed{P}$ Cönózisok Biomokok Bioszféra (Egységes)	Populációs szintű embercsoportok Települések -> érdeke <u>nem egységes</u> Nemzetek -> „ Földrészek -> φ Világ -> φ (a tudat evolúciója még kezdeti, viszont rendszerbéli komplexitása miatt sérülékeny, s így pusztulása törvényszerű, ha önnön szabályai ellen „akar” működni)	Érdekek = η P -> populációk
E szabad áramlása, anyaggá alakulása, ott és akkor objektív természettud. törvények szerint	Biológiai E bonyolult szerveződéssel	Tudati és még újabb energiák képzése, finom átalakítással <u>Fejlődve</u> (alkalmazkodva) (nem észleljük a mai politikai-gazdasági	Alaptörvényszerűsége leírható-e? (vagyis, „Céltudatosságot”,

(céltalanul?) <u>fejlődve</u> (alkalmazkodva) /Élettelen anyagformák külső alkalmazkodással/	Az I. rdsz. + II. rdsz.-hez való alkalmazkodás-ban <u>fejlődve</u> (alkalmazkodva) (Élő anyagformák belső alkalmazkodással)	viszonyrendszert kialakító vélt szabályok determinizmusát) (Emberök külső alkalmazkodással)	valamire hivatottságot mutat-e?)
E $\leftrightarrow$ Λ A (kémiaiailag leírható, standard struktúrák, statikusak.)	Biológiai E -> Biológiai egyedben jeleníti meg a struktúrát, mely dinamikus. Új helyzet Új struktúra <u>reakció</u> Új funkció	Embercsoportok <u>államgépezet</u> Tudati szervezeti régiók Rendkívül dinamikus jellegűek Új helyzet Reakció Új struktúra szükségszerű (társadalmi berendezkedés struktúrája az épített környezetben érhető tetten, a társadalom működési szabálya a közigazgatási rendszer struktúrájában realizált,)	Funkció $\leftrightarrow$ struktúra

Környezeti-rendszer:

Szabad kapcsolatú energiák (és anyagformák) rendszere az

I. rendszerelem

Környezet (I.) „Szabad kapcsolatú energiák”-kal definiált környezet (SZKE): Az összes létező Energia (E)-forma szabad kapcsolatrendszer, melyben törvények (szabályok) által determinált $E \rightarrow A$ és / vagy $A \rightarrow E$ átalakulás. A SZKE „kifelé” és „befelé” térben és időben végtelen.

Megjegyzés: A SZKE, azaz az I. rendszerelemre értelmetlen a kifelé és befelé, tér és idő fogalom. Ezek csak antropogén megközelítésünk miatt jelentek meg.

A SZKE-i rendszer egyszerű, működését az entrópia (mint önszervező) folyamat) irányítja (determinálja) az egyensúlyi folyamatrendszerekre érvényes törvényszerűségek mellett. A SZKE (I.) rendszere egyszerű; végtelen tűrőképességű.

SZKE vizsgáló módszerei és diszciplinái: természettudományok,

Fizika,

Kémia,

Csillagászat,

Geológia, stb.

Nyelve: matematika

II. környezeti rendszerelem, a (TKE vagy II.) „Térbelileg korlátolt energiákkal” jellemzett környezet: **Térbeli (időbeli) korlátú energiaátalakulással jellemezhető energiák rendszere.** A környezetrendszerben a TKE fogalmában az energia (E) áramlás szabad, de **TÉRBELI lehatároltságot (lokalizálást) mutat. A kitüntetett E-k időbeli lokalizáltságot is mutatnak.**

Kitüntetett E hasznosítási utak az önszerveződési folyamatok révén komplexitásukban növekvő struktúrákat, ÉLŐ anyagformákat hoznak létre.

ÉLŐ

NEM ÉLŐ

ÉLŐ struktúrák és folyamatok között szabad, a

SZKE (I.) (r) szélsőérték tartománya által meghatározott anyag energia szabad áramlás van.
Önszerveződési folyamataiban „a legkisebb ellenállás” elve érvényesül

entrópia -> autokatalízis -> növekedés -> fejlődés

folyamataikon a különböző komplexitások kialakulásáig.

A folyamatok konszekutív módon és / vagy egyszerre képezik a komplexitások működési elvét, A; E mérlegét. (Párhuzamos működésű, véletlenszerű kombinációkkal alakuló rendszerek)

A TKE (II.), „befelé” végtelen; térben lokalizált BIOSZFÉRA

időben lokalizált: az élő komplexitás megjelenésétől.

A TKE rendszer KOMPLEX; DETERMINÁLT TŰRŐKÉPESSÉGŰ.

A TKE vizsgáló tudományi és módszerei a biológiai és élettudományok.

Nyelve: biológiai kommunikáció – ?

A III. környezetrendszer elem, a (K) Komplex energiák (anyagi formák) rendszere

„Komplex E-r.”: A KE rendszerben az A; E formák átalakulási viszonyai

(1) a SZKE és TKE szélsőérték tartománya által, valamint újabb törvényszerűségek (önszerveződési folyamatok) révén meghatározottak.

(2) A KE-ri a komplexitás talaján A; E áramlás lehet gátolt (mesterségesen, az információ hiánya miatt).

(3) Egyes kitüntetett K-i E hasznosulási formák térbeli lokalizációja fokozódik (pl. település és környezete) a tudati energiahordozók által

(4)

NEM ÉLŐ -> ÉLŐ

A_N

NEM ÉLŐ -> NEM ÉLŐ

D_I

ÉLŐ -> NEM ÉLŐ

B_Z

TÁRSADALOM <-> D_I ; A_N ; B_Z ;

C_X és / vagy

ÉLŐ -> ÉLŐ

C_x

Stb.

Relációkban az E; A áramlás lehetősége csak kitüntetett helyeken és utakon lehetséges, tehát a SZKER-hez és a TKER-hez képest

Csökken (a)

Nem egyszer gátlődik (b)

pl. Társadalmi entrópiák nem érvényesülhetnek a valós és mesterséges tudati energia határfok = érdek viszonyok felállítása miatt. Ez (b)-t eredményez.

A komplex energiák rendszere (KER) diszkrét térbeli szférákon belül végtelen (pl. települési bioszféra). A KER globális, szűk tűrképességű.

A KER vizsgáló tudományok és módszerek: társadalomtudományok

Nyelve: informatika, biológiai kommunikáció, matematika

A rendszer fejlődni képes az értelmezett végtelen halmazán belül. A lokális rendszer elemei tanulmányozhatók a társadalomtudományok, informatika, természettudományok eszköztárával. A feltárt hiányok pótlása lehetséges, korrekciók végrehajthatók.

Bármely paraméter is az, amely az új összefüggés hálózatokon kívánunk tanulmányozni

- el kell helyezni a szabad kapcsolatú energia rendszert (I), a térbeli (II) korlátolt energia rendszert a komplex energia rendszerben.
- Meg kell határozni a determináló törvényszerűségeit és az ezekhez rendelhető A Információs háló (Ih) E működését
- meg kell vizsgálni, hogy a fentiek ismeretében a komplex rendszer összefüggéseit meghatározó törvények szerint a K rendszer identitása fennmaradhat-e, ha a vizsgált paraméter változásának mértéke nő.