

Az infravörös (IR) spektroszkópia bővületében Kutatói pályafutásom első fél évtizede

SOHÁR Pál*

Ez az írás nem tudományos közlemény, még csak nem is tudománytörténet, hanem egyfajta témaorientált életrajz, személyes élményekkel, a szakmai működésemmel összefüggő, részben utóbbihoz legfeljebb lazán kapcsolódó események fölelevenítésével. Mindazonáltal azt remélem, hű képet nyújt a korszak, az 1960-as évtized tudományos életéről, a magánélet mindennapjairól és egy akkor hazánkat meghódító, új nagyműszeres módszer – az infravörös (IR) spektroszkópia – meghonosodásáról, elterjedéséről, jelentőségének felismeréséről a kutatómunkában és ezzel összefüggően, bár csak rövid ideig tartó, ám addig nem tapasztalt mértékű diadalmenetről a tudomány hazai világában.

1. Romantikus ismerkedés az IR-spektroszkópiával

„Cherchez la femme”

Az 1957/58-as tanév negyedéves egyetemi hallgatói a vérbefojtott forradalom és szabadságharcot követő hatalom-restaurációjának rémuralmat hozó napjaiban a félelem és reménytelenség nyomasztó érzését a tanulásba menekülve, felfokozott tudásszomjjal igyekeztek maguktól elúzni. Legalábbis sokan voltak, közöttük én is, akik a szakmai ismeretekbe merülve próbáltak menekülni a kilátástalanság vigasztalan valóságából. A BME (a Budapesti Műszaki Egyetem) Vegyészkarán akkoriban úgyszólván ismeretlen volt – az ELTE-vel ellentétben – a speciális kollégiumok intézménye: a legkiválóbb hallgatók számára tartott, s a tudományok speciális, pl. különösen nehezen emészthető témákat, vagy akkor újdonságnak számító szakterületeket ismertető, fakultatív kurzusok. Ekként különösen időszerű volt akkoriban ilyen előadás-sorozatok meghirdetése. A BME-n a legelső között volt Varsányi György, a Fizikai-Kémiai Tanszék docensének 1957 őszi félévére meghirdetett IR-kurzusa. [1]

Varsányi a spektroszkópiák iránti elkötelezettségét a Szegedi Tudományegyetemen, a Fizikai Kémiai Tanszéken szerezte, ahol egyetemi diplomamunkáját végezte. A Kiss Árpád professzor vezette tanszék volt a hazai spektroszkópiai és kvantumkémiai kutatások bölcsője. A Kiss Árpád iskolából számos, a tudományterület későbbi kiemelkedő szaktekintélye került ki, többek között, Varsányi mellett, Láng László, a KFKI vezető kutatója, BME-professzor, a hazai UV-spektroszkópia egyik legkiválóbb specialistája, az MTA külső tagjai, Sándorfy Kamill a Montreal-i egye-

tem professzora, az alkalmazott IR-spektroszkópia első monográfiájának társszerzője és Paunz Rezső Izraelben működött kvantumkémikus professzor.

Mivel, mint említettem, korábban nem voltak a Vegyészkaron „speckoll”-ok, az előadók, így Varsányi is, reklámozni kellett az előadásokat és toborozniuk a leendő hallgatókat. A fiatal Varsányi természetesen erősen vonzódott a különösen szép és csinos hallgatónőkhöz, s közülük hívta meg a tanulmányokban is kimagaslóakat előadásaira. Közöttük volt későbbi feleségem is, aki iránt akkoriban már heves vonzalom ébredett bennem. Így aztán, bár én nem kaptam meghívást, jelentkeztem én is az IR kurzusra. Az előadások azonban igen tömény elméleti anyagot, sok és nehéz matematikai levezetést, nehezen emészthető, elvont fogalmakat tartalmaztak, s ennek következményeképpen a hallgatók lassanként elmaradoztak az előadásokról, s mire vizsgára került a sor, másodmagammal (a másik fiú hallgatóval) egyedül maradtunk. Így lett belőlem IR-spektroszkópus. [2]

2. Diplomamunka – Inaskodás a BME-KKKI IR-laborban

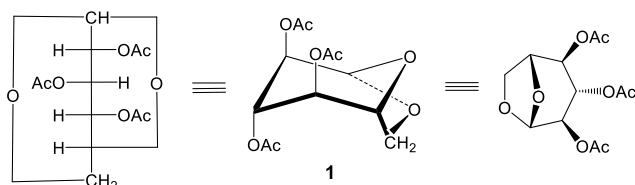
„Végbe sosem viszed, mit a természet tilt.”

Sikeres IR-speckoll vizsgámnak köszönhetően a diplomamunkámat, [3] ötödéves vegyészmérnök hallgatóként – rendhagyó módon, két tanszéken – a BME Szerves-kémiai Technológiai és Fizikai Kémiai Tanszékein végeztem. Diploma-témául a triacetil-levoglükózán (I) titáنتetrakloridos komplexének előállítását és szerkezetük felderítését kaptam. A szintetikus munkát a Technológia-, az előállított új vegyületek szerkezetigazolását a Fizikai Kémiai Tanszéken, IR spektroszkópiával végezhettem.

A szénhidrátok egyes – Friedel-Crafts típusú – reakcióiban a TiCl_4 a katalizátor, de egyes esetekben a szénhidráttal képezett komplexei, mint közbelső termékek, reakciókomponensként vehetnek részt a folyamatban. Korábban csak monofunkciós vegyületek ilyen reakcióit vizsgálták, polifunkciós vegyületek komplexeit csak a BME Technológiai Tanszékén állították elő, s ezek szerkezetére vonatkozó adat nem jelent meg az irodalomban.

* Tel.: +36 1 376 5253, e-mail: pal.miklos.sohar@ttk.elte.hu

Az **1** vegyület acetál-részletet tartalmazó cukoranhidrid [4], s nem anhidro-cukor. Utóbbiak ui. félacetálok, glükózidos hidroxil-csoportot és éterkötést tartalmaznak. TiCl_4 hatására **1** anomerizáció közben klórozódik. A klórszármazék sokféle átalakítása lehetséges és így hasznos kiinduló vegyülete további cukorszármazékok előállításának. **1** a TiCl_4 -dal többféle, közöttük 3:2 (TiCl_4 :**1** összetételű) komplexet képez, s feltételezték, hogy ezek a klórozási reakció közti termékei. Ennek alapján írták le a reakció hipotetikus mechanizmusát.



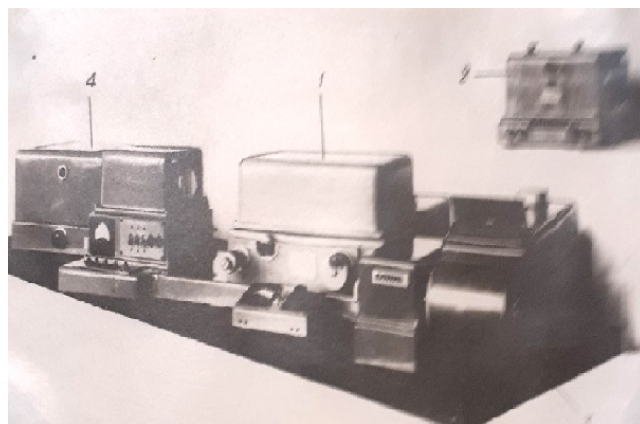
A reagensek relatív mennyiségének függvényében keletkező többféle termék előállítása önmagában nem volt nehéz: a reagensek összeöntésekor a keletkező komplex csapadékként kivált az oldatból, s ezt csak le kellett „nuccsolni” t. i. szűrni. Csakhogy szűréskor a sárga, vagy narancsszínű reakciótermékek sósav távozása közben elbomlottak: a szűrőn fehér TiO_2 és a változatlan cukorszármazék maradt. Az irodalom tanulmányozásával kiderítettem, hogy a komplexek instabil, higroszkópos, a levegő nedvességének hatására elbomló anyagok.



1. ábra. Saját tervezésű szárazkamra (drybox)

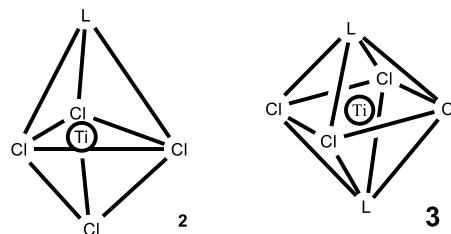
A probléma áthidalására szárazkamrát (1. ábra) szerkesztettem, amelyet szárított nitrogéngázzal megtöltve nedvességmentes atmoszférában végeztem el a reakciót, és a szűrletet paraffinolajban (nujol) szuszpendálva vittem IR-vizsgálatra. Lehetséges, hogy szárazkamrá a szintetikus kémia-történet első „dry-box”-a.

Az IR spektrumok felvételére a BME Fizikai Kémia Tanszékén működő és az MTA Központi Kémiai Kutatóintézetével közösen használt műszerével, egy egysugarmentes, szovjet gyártmányú IKSZ-11 (Infra-Krasznűj Szpektrometer, 2. ábra) berendezéssel került sor. Ezidőtájt az IR-spektroszkópia hazánkban még alig ismert mérési módszer volt, s mindössze két, már akkor korszerűtlennek minősülő spektrométer, a már említett, s egy azonos típusú másik Veszprém-ben, a MÁFKI Bor György vezette laboratóriumában működött. A BME-n lévő IR-labor vezetője Varsányi György professzor volt, s a méréseket Holly Sándor tud. munkatárs és Imre Lajos technikus végezték. Ők ketten vezettek be az IR-mérések mesterségébe.



2. ábra. Az IKSZ-11 egysugarmentes IR-készülék

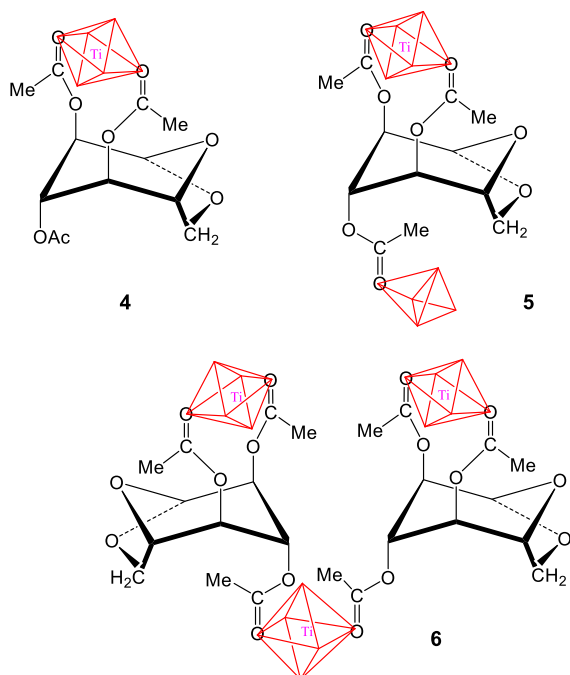
A $3d^2 4s^2$ elektronkonfigurációjú Ti két típusú komplexet képezhet: 1:1 komplex esetén $3d^2 4s^2 p^6$ (**2**), 1:2 komplex létrejöttékor stabilis, 12 elektronos $3d^4 4s^2 p^6$ szerkezet (**3**) alakul ki. Az **1** szubsztrátumban négyféle elektrondonor, t. i. oxigén van jelen, az előállított vegyületek szerkezetének felderítéséhez tehát azt kellett tisztázni, hogy hány és mely oxigén vesz részt a komplexképzésben.



Vizsgálataim és az IR-spektrumok igazolták, hogy – háromféle összetételű, 1:1 (**4**), 1:2 (**5**) és 3:2 (**6**) komplex keletkezik és, ellentétben a korábbi feltételezésekkel, 3:1 komplex nem képződik,

- a komplexek nem intermedierei a klórozási, illetve epimerizációs reakcióknak,
- a komplexekben a TiCl_4 nem az acetálos oxigénekhez, hanem az észter-karboniln koordinálódik,
- a korábban feltételezett reakciómechanizmus nem helytálló, s helyette új mechanizmust javasoltam.

A 4-6 szerkezeteket az elemanalízis-adatok és a $\nu\text{C=O}$ illetve $\nu\text{C-O}$ frekvenciáknak az 1 spektrumában mérhető képest észlelt eltolódása és előbbieik száma alapján sikerült felderíteni. A komplex spektrumában az acetálos $\nu\text{C-O}$ frekvenciák változatlanok, míg a $\nu\text{C=O}$ sávok jelentősen eltolódnak a kisebb hullámszámok irányába (a CO-kötésrend a koordináció hatására gyengül). A triacetil-levoglükózán (1) spektrumában két karbonil sáv jelentkezik 1740 és 1765 cm^{-1} -nél, kb. 2:1 intenzitásarányban (a hetes gyűrű azonos oldalán lévő két, illetve az ellenkező oldalán lévő egy acetyl-csoportnak megfelelően). Az 1:1 komplex (4) esetén az intenzívebb sáv eltolódik és felhasad (1670 és 1640 cm^{-1}), jelezve, hogy a hetes gyűrű azonos oldalán lévő két karbonil tetragonális-bipiramisos (3 típusú) szerkezetet alakít ki egy TiCl_4 molekulával. A nagyobb frekvenciájú sáv alig eltérő frekvenciával 1760 cm^{-1} -nél lép föl.



Az 5 1:2 komplex spektrumában három $\nu\text{C=O}$ sáv észlelhető 1710, 1670 és 1640 cm^{-1} -nél. Tehát itt mindhárom karbonil koordinálódik. Kettő, hasonlóan 4 esetéhez, 3 típusú, a hetes gyűrű másik oldalán lévő harmadik karbonil pedig 2 típusú trigonális-bipiramisos szerkezettel. A 6 3:2 komplex spektrumában ugyancsak három $\nu\text{C=O}$ sáv található, mindhárom eltolódva a kisebb hullámszámok irányába.

Diplomamunkámnak figyelemreméltó utóélete is volt: témavezetőm (konzulensem), Deák Gyula és Holly Sándor tovább folytatták az általam megkezdett kutatásokat és er-

ről több publikációt is közzétettek, sőt Holly Sándor e témából írta akadémiai doktori disszertációját.

3. Közveszélyes munkakerülő szerepben

*„Wenn die Not aufs Höchste steigt
Gott der Herr die Hand uns reicht.”
(Hol legnagyobb a baj, közel a segítség.)*

Részvételem az 1956-os szabadságharc és forradalom eseményeiben katasztrofális „káderlapot” termelt számomra, amellyel megterhelten bocsátott útjára friss diplomámmal az egyetem. Bár semmi konkrét tettem bizonyítéka nem került a hivatalosság birtokába, az, hogy negyedmagammal (a száz körüli létszámú évfolyamunkról) nem voltam hajlandó belépni a DISZ-be, és az 1957 tavaszán sorra került „káderezéskor” (világ- és politikai nézeteimről folytatott kikérdezésemkor) nem voltam hajlandó „megbánást” tanúsítani, elegendő volt a lesújtó politikai minősítésemhez, melynek kíséretében több hónapon át nem tudtam elhelyezkedni. Ekkor a BME táviratban figyelmeztetett: „Ha rövid időn belül nem lesz állása, közveszélyes munkakerülőnek minősül”, és visszavonják épp, hogy csak megszerzett diplomám. Rokoni segítséggel protekciós álláshoz jutottam – higiénikusként – a Kelenföldi Tejipari Vállalatnál és fél évet állatorvosi munkakörben tevékenykedtem. Az első munkahelyemen eltöltött rövid idő különben élménydúsan telt: beutaztam a fél országot és egészségügyi jelentéseket készítettem az Egészségügyi Minisztérium számára tejüzemekről.

A mottóul választott idézet, Humperdinck „Jancsi és Juliska” operájának záró versei és zeneszeretetem segített hozzá, hogy képzettségemnek megfelelő munkához juthassak. 1960 kora őszen egy Károlyi kerti koncert szünetében összelálkoztam az ugyancsak zenekedvelő mentorommal, Varsányi professzorral. Ő szerezte első munkahelyem a Gyógyszerkutató Intézetben (GYKI), amelynek aztán két évtizeden át voltam szerkezetkutató spektroszkópusa.

A szovjet „testvéri segítséggel” eltiport forradalom és szabadságharc bukása után, a Szovjetunió baráti támogatást nyújtott a romokban heverő, éhező és kommunista terror alatt nyögő Magyarországnak. És mi lehetett volna nagyobb és sürgetőbb segítség, mint három elavult és használhatatlan infravörös spektrométer?

Ekként három IKSZ-12 (az IKSZ-11 „korszerűsített”, de éppoly elavult változata) érkezett hazánkba, melyek egyike a GYKI, a másik kettőt a Kőbányai Gyógyszerárugyár (KÖGYO, ma Richter) és a szegedi József Attila Tudomány Egyetem (JATE) Fizikai Kémiai Tanszéke kapta. A GYKI vezetése Varsányi professzorhoz, mint a hazai IR spektroszkópia elsőszámú szaktekintélyéhez fordult, hogy ajánljon szakembert, aki a műsért üzembe helyezné és működtetné. Varsányi pedig engem ajánlott. Így lettem a GYKI munkatársa, s így jutottam képzettségemnek megfelelő munkához.

4. Kilátástalan kezdet, először az ELTE-n, mint vendégkutató

„Per aspera ad astra”

Spektroszkópusi pályafutásom így a GYKI-ban kezdődött meg 1960. január 1-én. Az Intézet ekkor, és még öt évig, a Rottenbiller utcában, egy eredetileg lakóházként szolgáló épületben működött. Az IKSZ-12 készüléket kicsomagolatlanul, a szállítási ládákban, s vele engem, egy ablaktalan, kb. 6 m²-es kamrában helyezték el. A helyiséget eredetileg hűtőszobának használták, ahol különféle állati szerveket, állati májat, hasnyálmirigyet, stb. tároltak, amelyekből gyógyszerek alapanyagaként felhasználható vegyületeket vontak ki.

A szobának nem volt szellőzése, sem vízcsap, sem elektromos csatlakozó, csupán a gyorsan romló állati szervek bűze áradt a falakat borító faburkolatból. A világításról egy asztali lámpa gondoskodott, amelyet egy hosszú, az ajtó alatti résen kivezetett kábel csatlakoztatott a folyosón lévő dugaljhoz. A berendezés ezen kívül egy rozoga székből és egy konyhaasztalból állt.

A szakirodalom tanulmányozása ürügyén igyekeztem minél kevesebb időt tölteni „műszerlaboromban” és egyben „dolgozószobámban”. Szerencsére az intézet igazgatója, Vargha László akadémikus, a nemzetközi szaktekintélynek számító cukorkémikus átlátta, hogy ilyen elhelyezés nem teszi lehetővé sem az IR berendezés üzembe helyezését, sem a normális munkát.

Vargha rokoni kapcsolatban volt (sógorok voltak) Bruckner Győzővel, az ELTE Szerves Kémiai Intézetének nagy hírű professzorával, a magyar szerves kémia kiemelkedő személyiségével. Így aztán „családi alapon” együttműködési megállapodást kötöttek, amelynek értelmében a Tanszék megfelelő helyet biztosít az IR-készülék számára, és vele, mint működtetőjét, vendégkutatóként befogadja személyemet is. Viszonzásul, az üzembehelyezést követően IR-vizsgálatokat végzek a Tanszék számára is, és később bevezetem egy fiatal munkatársukat a mérések gyakorlatába, a műszer kezelésébe és az IR-spektrumok szerkezetkutatásbeli alkalmazásaiba. Így lettem tagja – hat éven át – a tanszéki munkaközösségnek.

5. Az IKSZ-12 spektrométer „felélesztése”: kalandozó műszer-rekonstrukció

„Multis ictibus dicitur quereus.”

(Csak sok fejszeesapással vágthatjuk ki a tölgyfát.)

Az ELTE Szerves Kémiai Intézete akkor, 1960-ban, a Trefort Kertben, a Than Károly építtette „B” épületben működött. Itt kaptam helyet egy, a Múzeum körút felé néző ablakú szobában, s itt került sor a műszer nagy izgalommal várt kicsomagolására. Az üzembe helyezéshez segítséget is

kaptam: a GYKI Műszaki Osztály vezetője és egy műszermérnök, Kliburszky Béla személyében.

Naivan azt gondoltam, hogy a ládából kiszabadított műszer-egységek összekapcsolása és áram alá helyezése után egyből mérésre készen lesz majd az IKSZ-12, és máris vehetem fel a berendezés jó működését bizonyító, s kalibrálásra is alkalmazott vizsgálati minta, a polisztirol spektrumát. Lelkesedésem azonban hamarosan lehűtötte a rideg valóság: a műszer „lelkét” képező egységek közül a vákuum-termoelem és az optikai erősítő rendszer használhatatlan állapotban érkezett, az utóbbi két legfontosabb része, a torziószálas, tükrös galvanométer és a szelén-fotocellák – tán a szállítás során? – tönkrement.

Közel egy évig tartott a műszer működőképes állapotba hozása. E feladathoz nem voltak meg még a legalapvetőbb ismereteim sem. A műszaki osztályvezetőtől nemhogy segítséget nem kaptam, de ehelyett hozzá nem értéssel, fontoskodással, folytonos gáncsoskodással és tehetetlenségével kerékkötője volt a munkának. Szerencsére a műszermérnök, Kliburszky Béla nagy tudású, találékony, ügyeskező, kitűnő szakember, ráadásul rendkívül művelt, barátságos és jókedélyű ember volt, akitől sokat tanulhattam, és aki nélkül nem sikerült volna az IKSZ-12-be lelket lehelni.

A friss diplomás fiatal kezdő beilleszkedését a munkahelyi körülmények közé számomra ez a két ember befolyásolta: egyikük megnehezítette, a másik viszont nagyban segítette. A műszaki osztály vezetője szerencsétlen sorsú, frusztrált ember volt. Érettségi előtt leventeként frontszolgálatra vezényelték, és képzettség híján csak azért tölthette be az osztályvezetői posztot, mert a nagyhatalmú személyzeti vezetőnő barátja volt. Állandó kisebbségi érzés, pozícióföltés gyötörte, s ez minden és mindenki iránt rosszindulatot keltett benne. Sovány vigaszul egy-egy mulatságos „beköpésével” vidám perceket is szerzett, ami nem járult hozzá kapcsolatunk szívélýesebbé válásához. Egy ilyen feledhetetlen mondása ekként hangzott: „Ha a műszer mutatóját kikössük, akkor a műszer stangál (sic!).”

Kliburszky Béla bácsi – a talpig úriember, aki soha durva szót nem ejtett ki a száján, és soha senkit nem bántott meg – ekként jellemezte: „A Misi – az egy nagy ló!” Emlékezetesek bölcselkedései is. Egy ezek közül: „Palikám! Tudod-e, hogy mi a házaselet thrragédiája? (Béla bácsi ui. raccsolt): Hát az, hogy ha benyúlsz a paplan alá, s megfogsz egy lábat, nem tudod, hogy a magadét fogod-e vagy az asszonyét.”

Komolyra fordítva a szót: A legnehezebb feladatnak a vákuum-termoelem megjavítása, pontosabban egy új létrehozása bizonyult. Ez a műszer detektora, ez érzékeli a vizsgálati mintán áthaladó infravörös sugárzást, amelynek különböző hullámhosszú komponenseit szelektíven abszorbeálják a vizsgálati minták, s az ekként változó intenzitású sugárzás megfelelő áramot kelt a detektorban. Maga az érzékelő egy bimetal fólia, amely egy üvegrudacsákára felerősítve van összekötve az elektromos vezetékkel, amely aztán

a keletkező áramot a galvanométer tekercsbe vezeti. Az érzékelőt üvegbúrába rögzítve a búrát vákuum alá kell helyezni. S ez képezi a dolog nehézségét! A vákuum létesítések u. i. a levegővel együtt kiszívódhat a bimetál fólia. De ha ez nem is történne meg, a tökéletes vákuum létrehozása sem sikerül mindig. (A búrába adszorbenst is elhelyezünk, de az csak minimális mennyiségű levegőt képes megkötni.) Ezért aztán csak igen sok sikertelen próbálkozás után tudtunk végül használható detektort építeni. A munkában segítségünkre volt a BME Fizikai Kémiai Tanszékének docense, a kitűnő vákuumtechnikus Demján Sándor.

A következő megjavítandó egység a torziósszálas, tükrös galvanométer volt. Ennek tükre ui. törötten, torziós szála pedig szakadtan érkezett. Az egység feladata a detektorból érkező igen gyenge áram optikai úton történő fölerősítése. A tükröre vetített fény szelencellákra esik, s azokban a detektorból érkezőnél jóval intenzívebb áram indukálódik. A tükrőről érkező, s a szelencellákra eső fény mennyisége, s vele az általa létrehozott áram erőssége a tükrő helyzetétől függ, amelyet pedig a detektor torziós szálon és egy elektromos tekercsen átfutó áramának intenzitása változtat. A szolenoidot magam szerkesztettem Béla bácsi tanácsai alapján. Először is megfelelő átmérőjű és anyagú fémhuzalról kellett gondoskodni. Ezt keresztapám segítségével, aki az Albertfalvai Zománchuzalgyár főkönyvelője volt, a gyártól szereztem. A huzalt egy megfelelő méretű fadarabkára kellett feltekercselni és sellakkal összeragasztani, majd a fabetépet eltávolítani. Előbb azonban ki kellett számítani a huzal hosszát, a menetek számát és méretét, amihez irodalmazással kísérleti fizikai ismereteket kellett gyűjtenem. Torziós szálat Kanadából, Sándorfy Kamill professzortól, későbbi kedves barátomtól, az MTA külső tagjától, és az IR-spektroszkópia szerkezetkutatási alkalmazásairól megjelent első szakkönyv [5] társszerzőjétől kaptam. Postán, egy levél lapjai közé rejtve, borítékban küldte el Kamill bátyám a torziós szálat. A tükröt a MOM-ban csiszolták Láng László professzor, az UV-spektroszkópia hazai első számú szakértője közbenjárására, aki másodállásban a MOM osztályvezetője volt.

A harmadik megjavítandó egység az optikai erősítő volt, pontosabban ennek kiégett szelencelláit kellett pótolni. Hosszas nyomozás végén kiderült, hogy hazailag kizárólag a KFKI-ban (Központi Fizikai Kutató Intézet) használnak szovjet gyártmányú szelencellákat. A KFKI munkatársa, a kitűnő műszerépítő spektroszkópus, Szőke József felajánlott szelencellákat, csupán az intézetből való kihozatalt nem vállalta. Ez ugyanis rendkívül bonyolult, szinte reménytelen feladatnak tűnt. A KFKI-t azidőtájt szovjet fegyveres katonák őrizték és csak nehezen megszerezhető hivatalos engedéllyel lehetett az intézet területére bejutni. Onnan valamit kihozni szinte lehetetlen volt. Kísérleteink legális kihozatali engedély megszerzésére sorozatosan kudarcot vallottak. Kénytelen voltam magamra vállalni a kockázatos feladatot, hogy kicsempésszem a szelencellákat. Nagy keservesen megkaptam a látogatási engedélyt „szakmai konzultációra” Szőkéhez és felbuszoztam Csillebércre.

Szerencsésen átstem a bebocsátási ceremónián, és egy fegyveres őr elkalauszolt a Szőke laborba. Jóska átadta a szelencellákat, de figyelmeztetett, hogy mindketten nagy bajba kerülhetünk, ha elcsúsznak illegális rakományommal. A szelencellákat gondosan elhelyeztem személyi igazolványom lapjai közé, mert ezt belépésemkor ellenőrizték, s remélhettem, hogy kilépéskor nem ismétlik meg a vizsgálatot. Tervem bevált, az akció sikerrel járt!

Minden együtt volt hát az IKSZ-12 beindításához, s ebben nem is csalódtunk. 1961 elején a műszer mérésképes állapotban volt, és sor kerülhetett az első spektrum-felvételekre.

6. Rémalom, avagy mérés az IKSZ-12 spektrométerrel

*„Nehéz gond élénkíti elménk”
(Ovidius)*

A korszerű spektrométerekkel a minta előkészítése, behelyezése a műszerbe, és a mérési paraméterek beállítása után gombnyomásra elindul az IR-spektrumok regisztrálása, és néhány percen belül elkészül a kinyomtatott felvétel. Csakhogy az IKSZ-12 távolról sem volt korszerűnek tekinthető, és egy spektrum elkészülte, legjobb esetben is, ha a mérést nem hiúsította meg semmilyen zavaró tényező, legalább két napot vett igénybe.

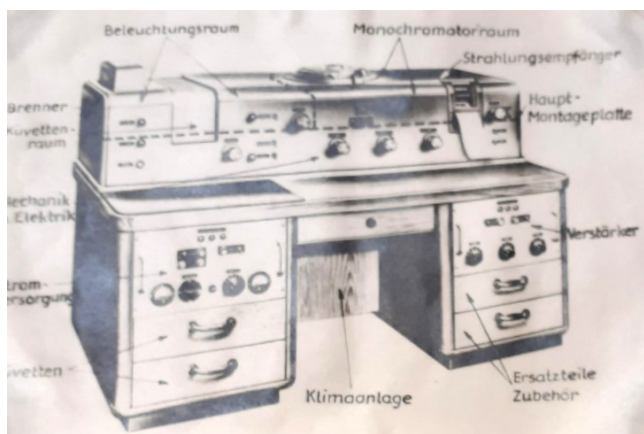
A sugárforrás (Nernst stift) fényintenzitása meredeken változik a hullámszám (illetve a frekvencia) függvényében, s ezért a mérendő IR- hullámszám-tartomány (650-4000 cm⁻¹) csak több szakaszban regisztrálható, az ésszerű regisztrálópapír-méretet figyelembe véve. A műszer „egysugaras” jelzője arra utal, hogy a referens (az oldószer, szilárd minta esetén az „üres” KBr pasztilla, fólia méréskor pedig az üres küvetta), majd pedig a vizsgálandó mintát tartalmazó oldat, pasztilla vagy fólia külön-külön mérendők. A spektrum a százalékos fényelnyelés a hullámszám függvényében, ha a referensen áteső fényintenzitás 100 %. De, mint jeleztem, a fényintenzitás rohamosan változik a hullámszámtól függően, tehát minden mérési ponton más a nagysága.

A %-os fényelnyelés meghatározását ezért a következőképpen kellett elvégezni. A referens és a minta spektrumának egy-egy szakaszát ugyanarra a papírra regisztrálva lefényképeztük és a képet matt üveglapra vetítettük. Egy plexi lapra derékszög körvonalú hálózatot karcoltunk. Az átfogó és egyik befogó kijelölte csúcsból kiindulva a másik befogó felé menő vonalakat karcoltunk, úgy, hogy a vonalak egymástól egyenlő távolságban érik el utóbbit. Tíz vonal esetén az egyes vonalak az átfogó és a „másik befogó” metszéspontját 100 %-nak tekintve 10, 20,...90, 100 %-ot jelentenek. A vonalzó vízszintesen úgy elcsúsztatva, hogy a plexi lapon a mérendő hullámszám-értéknél a referens görbe a 100 % vonalra essen, a minta elnyelési százaléka a vonalhálózatról leolvasható. Ezt a műveletet a külön-külön mért spektrumszakaszok regisztrátumairól készült fotókon a mérési pontosságtól függően, pl 1, 5 vagy 10

hullámszámonként elvégezzük és a leolvasott %-adatokat feljegyezzük. Mivel a kivetítés sötétet követelt, az adatokat diktafonba mondvá kellett rögzíteni, majd világosban visszahallgatva milliméter-papírra beírva jutottunk a szokásos hullámszám versus elnyelési százalék regisztrátumhoz, az IR-spektrumhoz. Maga a mérés, a fotózás, a film előhívása és megszáritása, majd a mérési adatok feljegyzése és kirajzolása ideális esetben is másfél-két napot vett igénybe.

Bármily fáradtságos is volt, az első fent vázolt módon kapott spektrumokat izgatottan, kitörő örömmel, igazi sikerélményként fogadtuk! S a legérdekesebb része munkánknak csak ezután, a mérési eredményeket értelmezve, a spektrumokból nyert információkat a szerkezet-felderítésben felhasználva következett!

A mérés azonban gyakran sok bosszúsággal járt. Hol a műszer valamelyik egysége hibásodott meg (pl. kiégett a sugár- vagy a fényforrás, „megsüketült” egy szelencella, elhomályosodott a galvanométer tükre, áramszünet volt, nem sikerült a fotózás, etc., etc.), hol valami külső tényező okozott zavart. Csupán egyet említve ezek közül: a szobám szomszédos volt egy szeminárium helyiség, ahol egy ping-pong asztal is állt, s ha éppen nem folyt ott oktatás, a tanszéki személyzet gyakran nagy asztalitenisz csatákat vívott. Az optikai erősítő (a szelencellás-berendezés és a galvanométer) a két szoba közötti falon, egy konzolon foglalt helyet, ekként oldottuk meg a rezgésmentes elhelyezést. Amikor valamelyik pingpong játékos nagyot dobantott, a konzol, s a rajta lévő mozgásba jöttek és a spektrumban egy óriási elnyelés sáv keletkezett! A több órás mérés kárba veszett, jómagam pedig heves összetűzésbe bonyolódtam sportszerető kollégáimmal.



3. ábra. Az UR-10 kétsugarmentes IR spektrométer

Az IKSZ-mérések okozta kínlódás szerencsére csupán alig egy évig tartott. Akkor ui. a Szerves Kémia Tanszék kapott egy modern, kétsugarmentes UR-10 elnevezésű keletnémet gyártmányú műszert (3. ábra). Ezzel megismételtem az előző év IKSZ-12-vel készült méréseit. Kiderült, hogy a spektrumok minősége kifogástalan volt és a sok kínlódással készült mérések helyes eredményekkel jártak. Ettől kezdve a Tanszék és a GYKI együttműködése annyiban módosult,

hogy a méréseket az UR-10 műszerrel, rövidesen közösen, a Tanszék frissen felvett fiatal munkatársával, Ruff Ferenc, későbbi kiváló kutatóval, egyetemi tanárral végeztük. A szobám megtarthattam, s cserében Ruff Ferencet segítenem kellett a műszer, a mérések és a spektrumértelmezés tudnivalóinak megismerésében. A két intézet együttműködésének jegyében az első, IR-méréseket kérő kollégák között több ELTE oktató (Vajda Miklós, Brucknérné Wilhelm Adrienn, Császár János, Körmendy Károly, és még többen) is volt. Első tudományos közleményem Körmendy társ-szerzőségével az ELTE *Annales Univ. Sci.* folyóiratában, német nyelven jelent meg. [6]. Eleinte Ruff Ferencel közösen igyekeztünk megoldani a szerkezet-felderítési feladatokat, de hamarosan ő már önállóan foglalkozott a rá háruló problémák megoldásával. Kitűnő, nagy tudású, eredményes kutató, kellemes együttműködő partner és kolléga, ideális munkatárs volt. Később a tanszék legsikeresebb kutatásában, kénvegyületek szerkezetfelderítésében, kvantumelméleti, reakciókinetikai vizsgálatában vezető szerepe volt. Az e témában Kucsman Árpád és Kapovits István professzorokkal együtt elért eredményeiket Széchenyi-díjjal ismerték el.

7. Hazai ismertséget/szakmai kapcsolatokat termő IR-műszer-szakértőként

„Nem mindenki muzsikos, kinek hangszere van.”
(Varro)

Az IKSZ-12 sikeres „felélesztésének” hamar híre ment, és a két további műszer „boldog” tulajdonosa, a szegedi (akkor József Attila nevét viselő) tudományegyetem (JATE) és a Kőbányai Gyógyszerárugyár (KÖGYO, ma – újra – Richter Gedeon) megkeresett, hogy installáljam az ő spektrométereiket is. Így került sor „házon kívüli” vendégszerepléseimre, hamarosan az egész ország kémiai kutatóhelyeire kiterjedő tudományos együttműködésem beindulására.

A szegedi készülék a Fizikai Kémiai Tanszékre került, s a tanszék vezetője, a koordinációs vegyületek, komplexek UV-vizsgálatának kiemelkedő szakértője, Császár József professzor hívott meg. Szerencsére kiderült, hogy a szegedi IKSZ példány sokkal jobb állapotban volt, mint a GYKI-ban újjáépített párja, és ezért rövid időn belül sikerült mérésre képes állapotba hozni a berendezést. E siker nyomán később a tanszék több munkatársát is belföldi tanulmányútra küldte hozzám Császár professzor.

A szakmai kapcsolatnak sok év múltán egy számomra kissé mulatságos utójátékára is sor került. Egy napon, 1987 vége felé, teljesen váratlanul, Márta Ferenc akadémikus, a KKKI akkori főigazgatója felhívott telefonon és arra kért, hogy keressem föl, mert szeretne velem beszélni. Fogalmam sem volt, hogy mit akarhat, mert addig csak távolról ismertem, s nem volt vele semmiféle kapcsolat. Kiderült, hogy Császár prof. nyugdíjba vonulása miatt megüresedett a szegedi Fizkém-en (melynek Császár előtt ő is vezetője volt)

a tanszékvezetői poszt, s ennek betöltésére szemelt ki. Azt akarta megtudni, hogy vállalnám-e a feladatot.

A dolgot ekként adta elő: „Mivel Bérces (Bérces Tibor akadémikus, Márta szegedről magával hozott munkatársa) nem vállalja, rád gondoltam.” Szóval, ha nincs ló, jó a számár is! Életkörülményeim nem tették volna lehetővé sem a Szegedre költözést, sem az „ingázást” (utóbbit lelkiismereti okokból sem vállaltam volna: véleményem szerint a tanszékvezetői poszt megkívánja a folytonos jelenlétet, s az ingázást ezért tanszékvezetőként lelkiismeretlenségnek tartottam volna), de azért vonatra ültem és meglátogattam a tanszéket. Szemügyre véve az ott találtakat, végleg elhárítottam a megtisztelő felkérést.

A KÖGYO-ban valamivel nehezebb volt a műszerelésztés, de a hibás alkatrészek cseréjét, a GYKI készülékkel kapcsolatban már kitaposott utakat használva, sikerült megoldani, és itt is működőképes állapotba hozva tovább erősíthettem műszerszakértői nimbuszom. A meghívóm a gyár Alkalmazott Fizikai-kémiai Kutatólaboratóriumának munkatársa, a fiatalon, tragikus körülmények között elhunyt Bajer Jenő volt. Később ennek a részlegnek a vezetője Görög Sándor akadémikus lett. Vele később, más formában alakult ki szakmai kapcsolat. Az első nagyterű – 250 MHz-es – NMR-készülék beszerzését a Richter és az EGYT (mai EGIS) közösen finanszírozta. Az EGIS, amelynek tulajdonába került a spektrométer, s amelynek akkor, mint az Önálló Szerkezetkutató Osztály vezetője, munkatársa voltam, kompenzációként az én szakértői közreműködésem ajánlotta föl a Richter szerkezetkutatói feladataiban. [2]. Ezen együttműködés keretében több száz Richter-minta vizsgálatát végeztük el osztályomon a gyár számára.

Beszámolóm „műszerszakértői” működésemről annak egy humoros epizódjával „színesítem”. E szakértelmem a hiedelem szerint nem korlátozódott az IKSZ-12 készülékekre, hanem az 1960-as évek elején megjelenő NDK gyártmányú, sokkal modernebb, kétsugármenetes UR-10 típusú spektrométerekre is kiterjedt. 1962-ben a Központi Orvostudományi Kutató Intézet is hozzájutott egy UR-10 berendezéshez, és az üzembeállítást követően, alig néhány nap elteltével, üzemzavar lépett föl: a készülék egyáltalán nem funkcionált. A működtető kutató engem kért segítségül, mert röstellte, hogy alig pár nap után, máris segítséget kérjen a német gyártó cégtől.

Nem szívesen vállaltam a feladatot, mert a bonyolult elektronikával és beállítás-érzékeny optikával működő készülékhez használójaként csak nagyon felületesen, a műszerek működését illető alapismeretek hiányos birtokában joggal féltem, hogy nem tudom megoldani a problémát. De ismét szerencsém volt: nem derült fény a műszerműködés rejtelsei terén fennálló tájékozatlanságomra. Az elektromos csatlakoztató dugalj ui. nem volt bedugva a konnektorba. Nem árultam el a probléma okát, mert nem akartam megszégyeníteni kollégám. Így aztán egy darabig piszkálgattam a készülékben, de igazából egyetlen mozdulattal sike-

rült „megjavítanom” az UR-10-et, működtetőjének nagy öröme, aki nem győzött hálálkodni és szakértői hozzáértésem dicsérni.

A Wander-gyár (később EGYT, majd EGIS) 1963-ban ugyancsak hozzájutott egy UR-10 készülékhez, s kezelésével nekik is nehézségeik támadtak. Ők is (személy szerint Simonyi István, az Analitikai Osztály vezetője) hozzám fordultak segítségért. Amikor sikerült a műszer hibáját megtalálnom és megjavítanom, nem sejtettem, hogy majd két évtized elteltével a gyár és meghívóm munkatársaként térek vissza az EGYT-be.

8. Kudarcos kezdet: az iskolapénz megfizetése. Tanulságos tévedések

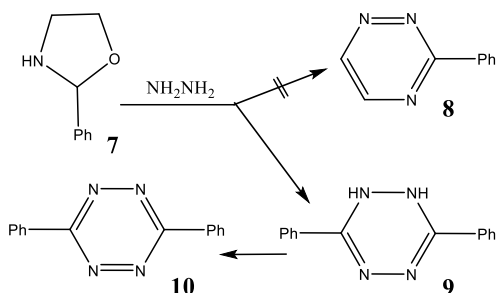
„Tévedni emberi dolog”

Nem mentegetődzés, csupán ténymegállapítás: a legtöbbször igen bonyolult szerkezetű IR-spektrum sokkal átteleesebben ad információkat a molekulaszervezetről, mint a jóval informatívabb, egyszerűbb felépítésű NMR-spektroszkópia, és még inkább, mint a szerkezeteket valószínű atomtávolságokkal és vegyértékszögekkel papírra rajzoló krisztallográfia. Az elemi összetételt illetően pedig a tömegspektrometria nyújt minden tévedést kizáró adatokat. Ezek a nagyműszeres módszerek azonban kutatói pályafutásom kezdetén, az 1960-as évtized első felében még nem voltak hozzáférhetők a hazai szerkezetkutatás számára. Sőt, az IR-módszer is csak akkoriban volt elterjedőben, kevés tapasztalat, adat volt fellelhető a szegényes szakirodalomban. Így aztán nem meglepő, hogy kezdetben egy-két, később tévesnek bizonyult szerkezetre következtettem az IR-spektrumokból.

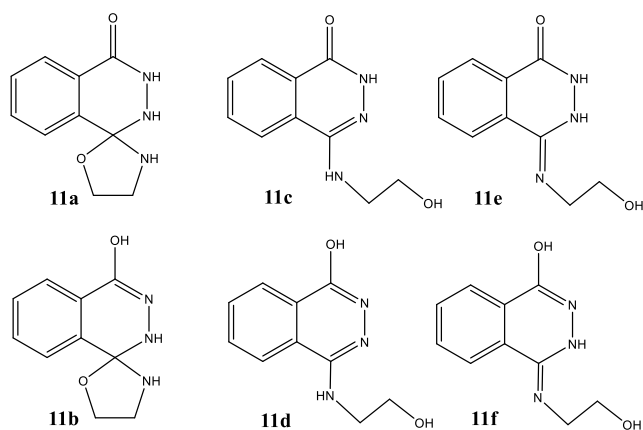
Kutatói pályafutásom első szakaszában a legintenzívebb együttműködés első cikkem társszerzőjével (v.ö. 6. pont) Körmeny Károllyal, az ELTE Szerves Kémia Tanszék docensével alakult ki. Körmeny a fenil-oxazolidin (7) hidrazinos reakciójával egy sárga színű csapadékhoz jutott, amely szűrés közben élénk lila anyaggá alakult. Viszonylag sávszegény IR-színképét a mono-szubsztituált benzolokra jellemző „fenil-sávok” uralták. Ezeken kívül 1390 cm⁻¹-nél a C=N kötést jellemző frekvenciájú rendkívül intenzív sáv jelentkezett, míg OH, NH és CH₂ csoportokra jellemző maximumok nem voltak a spektrumban. Mindebből és az elemanalízis adatokból aromás szerkezetre, az as-triazin (8) képződésére következtettünk.

Mivel nem voltam biztos a 8 szerkezetben és az analízisadatok sem voltak elég meggyőzőek, kérésemre megismételték (más kutatóhelyen is) az elemanalízist, s kiderült, hogy a nitrogéntartalom nagyobbak adódott, mint az első méréseknél. Felmerült ezért, hogy valójában a 3,6-difenil-tetrazinról (9) van szó, amely a sárga dihidro-intermedierből (10), annak atmoszférikus oxidációjával, spontán aromatiszálódás közben, képződik. [7a] Utánanéze az irodalomban kiderült, hogy 9 már a XIX. század vége óta ismert ve-

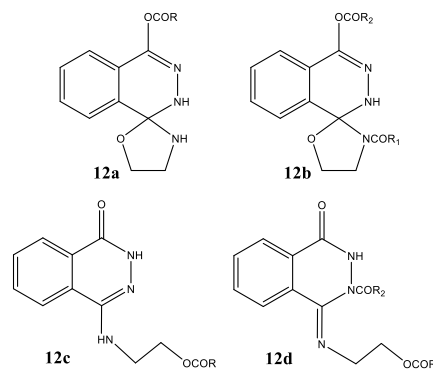
gyület, s olvadáspontja és jellegzetes színe megegyezik az általunk előállított anyagével. Levonva az eset tanulságát, tudatosodott bennem, hogy a sikeres kutatómunka kulcsfontosságú része, első lépése, az alapos irodalmazás.



Másik kezdeti „botlásom” is a Körmendy-témához fűződik. Az ő kutatómunkájának legfontosabb „alapvegyülete” az általa spirooxazonnak elkeresztelt spirooxazolidin-gyűrűt tartalmazó ftalazin-származék (11a-f). Ennek acetilezésével a 12a mono-, és 12b diacetil-származék keletkezését várta, amit az analízisadatok alátámasztottak. Az IR-spektrumokban azonban nem jelentkezett 12a esetén az enolészterekre jellemző 1730 cm^{-1} körüli $\nu\text{C=O}$, illetve 12b spektrumában az 1670 cm^{-1} körül várható amid-I sáv. A 12a vegyület esetén az NH csoport elektronküldő hatásával magyaráztuk a vártnál kisebb frekvenciát, de a diacetil-vegyületnél csak egy speciális (kváziaromás) szerkezetet feltételezve próbáltuk indokolni az amid-I sáv, az észterkarboniléhoz közeli, 1700 cm^{-1} -nél nagyobb frekvenciáját.



Későbbi preparatív, s a közben hozzáférhetővé vált NMR vizsgálatok alapján kiderült, hogy a spirogyűrű felnyílásával kialakuló primer hidroxilcsoport észtereződik, és a monoacetil-származék (12c) vártnál kisebb $\nu\text{C=O}$, illetve a 12d diacetil-származék „anomálisnak” hitt nagyobb karbonil-frekvenciája az észter-csoporttól származik és az alifás észterekre jellemző tartományban van. Utólag megtaláltuk az irodalomban [8] annak leírását, hogy az oxazolidinek hajlamosak a gyűrű-lánc tautomériára és 11 az eredetileg feltételezett két tautomer forma (11a,b) mellett elvileg további négy tautomerként (11c-f) is létezhet. Így, mielőtt mások tették volna, magunk publikáltuk a helyes 12c,d szerkezeteket, korrigálva a korábban tévesen leírtakat. [9]



Mindezek ismét rávilágítottak az irodalmazás fontosságára. Ma már, a hatalmas és egyre bővülő adattömeget tartalmazó adatbázisok számítógépes hozzáférhetősége idején nem kíván sok munkát az irodalom áttekintése, de szakmai pályafutásom kezdetekor hetente fél-egy napot kellett a könyvtárban tölteni, hogy csupán a legfontosabb és hozzáférhető, s az éppen aktuális témába vágó publikációkat átolvashassam. Okulva a történekből azt is elhatároztam, hogy igyekszem elmélyíteni szerves kémiai ismereteimet, és csak kellő óvatossággal fogadom el együttműködő partnereim szerkezeteket illető feltevéseit.

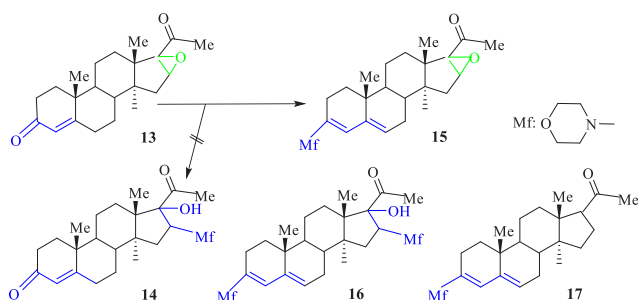
9. Az első sikeres szerkezet-felderítés és az első tudományos előadás

„Merni kell!”
(Goethe)

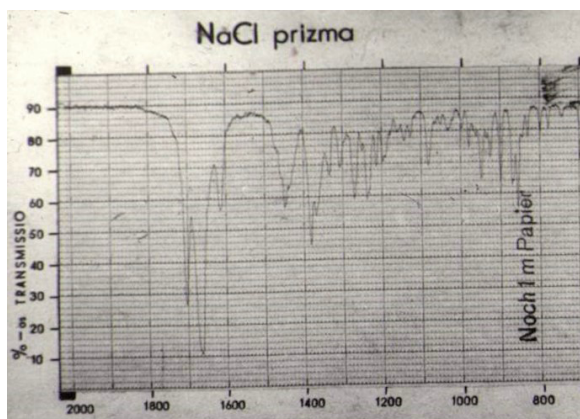
Az IR-spektroszkópia az 1960-as évek elején a kémikusok legtöbbjé számára jöszerevével ismeretlen volt Magyarországon. Amikor pedig megjelentek az első műszerek, bizalmatlanság és gyanakvás fogadta az új szerkezetkutató módszert. Elterjedten afféle „úri huncutságnak” tartották, és nemigen bíztak abban, hogy ismeretlen szerkezetek felderítésére alkalmas lehet. Vargha László professzor, a GYKI igazgatója, bár eleinte ő is tartózkodó volt az IR-módszerrel szemben, jó vezetőként és minden új iránt nyitott kutatóként, amint működőképes lett az IKSZ-12 intézetében, talán a példamutatás szándékától is vezérelve, elsőként keresett meg egy szerkezetazonosítási problémával. Először tanácsára csak egy éppen akkor alkalmazott reagens, az etilénimin spektrumának felvételére került sor munkatársa, Horváth Tibor megkeresésére, de hamarosan egy valódi probléma tisztázásához is segítségem kérte. (Az első IR-spektrum, amelyet, megismételve az IKSZ-12-vel már előzőleg elvégzett mérést, az UR-10 készülékkel 1961. március 7.-én felvettem, így az etilénimin volt.)

Vargha elsősorban szénhidrátkémikus, és e terület nemzetközi hírű szaktekinétye volt, de az intézet más kutatási projektjeit is irányította. Munkatársaival potenciális gyógyszerként alkalmazható szteroidok előállításával is foglalkozott. Egyebek között Rados Márta kutatótársával 16,17-epoxi-progeszteron (13) aminok hatására bekövetke-

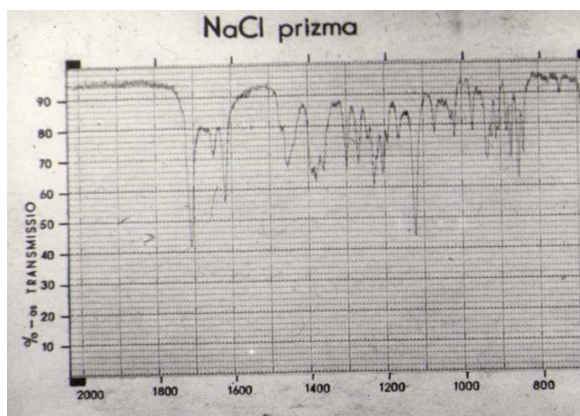
ző gyűrűfelynyítésével további reakciók kiindulási anyagául szolgáló amino-alkoholokat (pl. **14**, R = morfolin) kívántak előállítani. Feladatom a **14** szerkezet igazolása volt.



A várt reakció – a **14** típusú amino-alkoholok keletkezése – helyett azonban a 3-oxo csoporton lejátszódó addícióval, s ezt követő vízkilépéssel 3-morfolino-3,5-dién szerkezetű származék (**15**) keletkezett. Ezt a **13** IR spektrumában 1665 cm^{-1} -nél lévő intenzív, ketonokra jellemző karbonilsáv (4. ábra) eltűnése igazolta a termék spektrumából (5. ábra, R = morfolin). Helyette a konjugált C=C-kettős kötések gyenge sávjai jelentkeznek: az R = morfolin vegyületnél 1630 és 1610 cm^{-1} közelében. A morfolin beépülését erős 1100 cm^{-1} -es $\nu\text{C}-\text{O}$ étersáv, az oxirángyűrű változatlan jelenlétét a rá jellemző 900 és 850 cm^{-1} -es sávpár jellemzi.



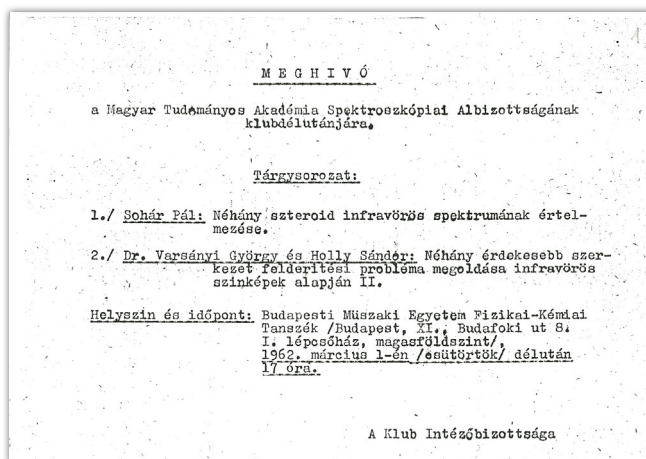
4. ábra. Az epoxi-progeszteron (**13**) IR-színképe



5. ábra. A 3-morfolino-epoxi-progeszteron (**15**) IR-színképe

Az irodalmi adatoknak ellentmondó eredményt szintetikus kémikus kollégáim fenntartással fogadták. Jómagam biztos voltam az általam javasolt szerkezet helytállóságában és arra kértem Vargha profot, hogy előadhassam az MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottságának ülésén ezt a szerkezetfelderítési munkát. Ő hozzájárult, ahhoz azonban nem, hogy társszerzőként megnevezem őt és munkatársát. Így került sor első, tudományos kutatói munkámat bemutató előadásomra. (6. ábra) [10] Az eredmények publikálását azonban nem engedélyezte.

Szerettem volna munkatársaimat meggyőzni igazamról, s ennek érdekében javasoltam, hogy az amino partnert a reakcióban kétszeres sztöchiometrikus mennyiségben alkalmazzák. Sikert is így módon előállítani az addíció mellett a gyűrűfelynyással képződő aminoalkoholos részt is tartalmazó vegyületet (**16**), s ekként preparatív is igazolni az eredetileg keletkezett vegyület (15) alapján javasolt szerkezetét. A progeszteron és morfolin reakciójával pedig megkapták a **16** vegyület A-gyűrűben analóg szerkezetű 3-morfolino-3,5-dién-származékát (**17**), bizonyítva az általam feltételezett addíció + vízkilépéses reakció lehetőségét.



6. ábra. Első szakmai előadásom meghívója

A történet ezzel nem zárult le. Évekkel később, a nagybeteg Vargha prof., akinek akkor már minden lépés nehezebbé esett, kezében a vaskos *J. Am. Chem. Soc.* egy kötetével váratlanul belépett az irodámba, letette a kinyitott könyvet elé és csak ennyit mondott: „Pali, sajnálom, hogy nem mi közöltük.” Rámutatott a lapra, ahol egy cikkben az általam felfedezett reakciót, az aminok addícióját enonokra publikálták. Ez az eset rávilágít Vargha László emberi nagyságára, amellyel kiváta addiginál is nagyobb tisztelem és nagyrabecsülésem.

Vargha professzort ekként sikerült megnyernem az IR-módszer számára. De úgyszólván minden kollégát egyenként, egy-egy őket érintő szerkezetfelderítési feladat sikeres megoldásával kellett az IR számára meghódítanom.

10. Az első, nemzetközi folyóiratban közzétett publikáció

„Dolgozz, teremts:
Semmit sem ér a zene,
amelyet senki sem hall.”

Intézetigazgatóm, a szteroidokkal kapcsolatos sikeres vizsgálataimnak köszönhetően, de talán példaadási célból is, sűrűn igénybe vette közreműködésem kutatómunkájában. Egyebek között egy korábban előállított, de szerkezetét illetően tisztázatlanul maradt cukoranhidrid-származék szerkezetigazolására kért. Segítségül három, ismert szerkezetű analóg (**18-20**) mintáját is megkaptam spektrumaik összehasonlító vizsgálatához.

A **19** vegyület átkristályosítási maradékából új, eltérő szerkezetű analóghoz jutottak. A molekula az analízisadatok alapján a **18-20** analógokéval azonos elemi összetételű cukoranhidrid-származék kellett legyen, vagyis csak az anhidridgyűrű tagszáma volt kérdéses. A szerkezet felderítését a $\nu_{\text{as}} \text{CH}_2$, $\nu_{\text{s}} \text{CH}_2$ és νCH sávok, valamint a négy vegyület és parciálisan deuterált származékaik νOH , illetve νOD sávjainak elemzésével, az eltérő típusú hidrogénkötésekre jellemző különbségek felhasználásával sikerült megoldani.

A $\nu_{\text{as}} \text{CH}_2$ - $\nu_{\text{s}} \text{CH}_2$ sávpár a $2850\text{-}2950 \text{ cm}^{-1}$ tartományban jelentkezik, méghozzá a modellvegyületek spektrumának tanúsága szerint külön-külön a CH_2OH és CH_2OC csoportoké.

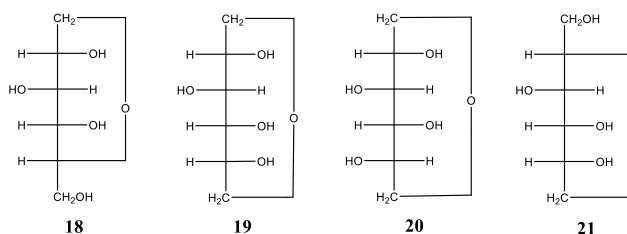
A **18** vegyület spektrumában a CH_2OH csoportok sávpárja intenzívebb és nagyobb hullámszámoknál jelentkezik (2940 és 2885 cm^{-1} -nél, míg a CH_2OC csoportoké 2920 és 2850 cm^{-1} -nél lép föl). A **19** és **20** molekulák esetén, amelyekben csak CH_2OC csoportok vannak, csupán egy sávpár van 2850 és 2950 cm^{-1} között. Mivel az ismeretlen vegyület esetén ebben a tartományban két sávpár található, a kétféle metilén-csoport jelenléte bizonyítottan tekinthető.

A biztos szerkezetű **18-20** spektrumában az *axiális* és *ekvatoriális* csoportok νCH sávja szétválik a $2955\text{-}3000 \text{ cm}^{-1}$ -es intervallumban. A molekula-modellek szerint legkedvezőbb konfigurációk esetén **18**-ban 1:2, **19**-ben 1:3, míg **20**-ban 2:2 az *ax-eq* arány. Ezt tükrözi a νCH sávok intenzitása, jelezve azt is, hogy az *axiális* csoportoknak nagyobb a frekvenciája. Ilyen hullámszámoknál az ismeretlen szerkezetű molekula spektrumában három νCH sáv van, valószínűsítve, hogy a gyűrű-tagszám 6 és így – lévén, hogy a **18** vegyületről nem lehet szó – csak a **21** szerkezet jöhet szóba.

Az asszociációs (hidrogénhidas) szerkezetek részletesebb vizsgálata az IR-spektrumok alapján vált lehetővé, s bár a hidrogénkötések élettani és anyagi tulajdonságokat befolyásoló fontos szerepe az 1960-as évek elején még alig volt ismert, a jelenség – csupán tanulmányozhatóvá válása révén – az érdeklődés homlokterébe került.

A molekulamodelleket megvizsgálva az IR-adatokkal egybehangzó asszociációs szerkezeteket lehetett valószínűsíteni.

A **18** és **21** szerkezetekben a primer és szomszédos szekunder OH intramolekulárisan asszociál, míg a két másik szekunder OH csoport csak intermolekuláris H-hidakat létesíthet. A **19** vegyületben két-két OH csoport intramolekulárisan asszociál. Végül **20** esetén három OH láncszerű H-kötéseket létesít, a negyedik OH pedig monomer: nem asszociál.



Nehézzvízben oldva a mintákat az OH-csoportok részben OD-csoportokra cserélődnek (a savanyú, mobilis H atomok H→D cseréje révén), mégpedig az intermolekuláris H-hidakban résztvevők jóval nagyobb mértékben, mint az intramolekulárisan asszociáltak. A négy vizsgált vegyületnél mért OD/OH intenzitásarányok (ezek **18** és **21** esetén azonosak, **19** és **20** vegyületeknél viszont jelentősen eltérők: rendre 63:37, 63:37, 25:75 és 60:40) megerősítették az IR-sávok és -frekvenciák, illetve -intenzitások alapján a minták térszerkezetére és gyűrűtagszámára vonatkozó következtetéseimet.

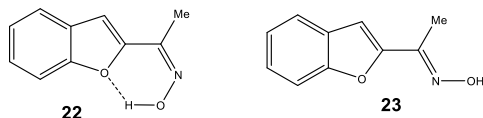
E vizsgálatokról jelent meg első nemzetközi folyóiratban, nevezetesen a Tetrahedronban megjelent közleményem. [7b, 11-12]. Megjegyzendő, hogy a „nyugati”, külföldi folyóiratokbeli közzétételt 1964-ben csak a nagytekintélyű Vargha akadémikus társszerzősége tette lehetővé. Kezdő kutatóknak akkoriban az idegen nyelvű publikálás majdnem kizárólag csupán az *Acta Chimica Hungarica*-ban volt lehetséges és ahhoz is intézeti és minisztériumi engedély kellett. A GYKI-ban még az 1970-es évtized vége felé is a publikálás feltétele az intézet és a Gyógyszeripari Tröszt írásos engedélye volt. Előbbi az intézet kutatási igazgatóhelyettese, az állami díjas Toldy Lajos adhatta meg. Így fordulhatott elő az a humoros eset, hogy a vele közös cikkünkhöz ő írta alá az engedélyt, azaz cikkének közzétételét önmagának engedélyezte.

11. Benzofuril-metil-ketoximok. A *syn* és *anti* izomerek megkülönböztetése az IR-spektrumok alapján

„A természetben nem létezik két hasonló dolog,
amelyek mindenben egyeznének.”
(Leibnitz)

Ocskay György, a SZEVIKI (Szerves Vegyipari Kutatóintézet) munkatársa, Vargha László aspiránsaként benzofuril-metil-ketoxim-származékokat állított elő, amelyek *syn* (**22**) és *anti* (**23**) izomerjeinek megkülönböztetésére a BME Fizikai Kémiai Tanszékét kérték fel. Az izomerek szerkezetének igazolására a tanszéken Raman vizsgálatokat

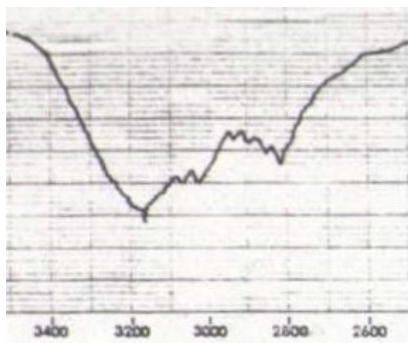
végeztek (IR műszer akkor még nem volt hazánkban) és az eredményeket 1958-ban az *Acta Chimica Hungarica*-ban publikálták. [13] A szerkezetekre vonatkozó feltételezéseiknek azonban bizonyos szintetikus kémiai vizsgálatok elmentmondottak, és a spektrumértelmezés egyes részletei is vita tárgyává váltak.



Vargha professzor ezért e vegyületek IR-vizsgálatára kért, hogy a Raman-adatok alapján javasolt izomer szerkezetek helytállóságát ellenőrizzük.

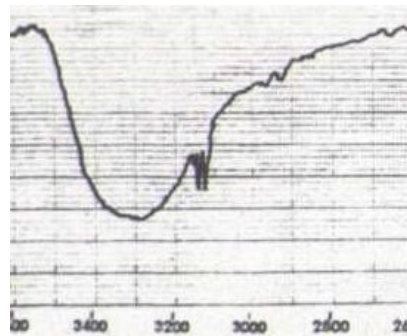
A 10. pontban leírtak, valamint savamidok spektrumainak rendellenes tulajdonságai arra sarkalltak, hogy alaposabban tanulmányozzam az asszociációs szerkezetek IR-jellemzőit, s az ezek kínálta lehetőségeket a különböző hidrogénhíd-típusok felismerésére. Kézenfekvő volt feltételezni, hogy a benzofuril-metil-ketoxim izomereknek (22, 23) jellegzetesen eltérő H-hidas szerkezetük van. A *syn* izomerekben ui. az oxim-hidroxil a gyűrűs oxigénnel stabilis, hattagú intramolekuláris asszociációt alakíthat ki, míg az *anti* izomerekben az OH csoportok között csak intermolekuláris hidrogénkötések létesülhetnek.

Az intra- és intermolekuláris hidrogénhidak megkülönböztetésére több lehetőséget is kínálnak az IR-spektrumok. A νOH sáv frekvenciája a merev gyűrűs szerkezetű intramolekuláris asszociáció esetén nagyobb frekvenciájú, mint a lazább, változó $\text{X}\cdots\text{H}\cdots\text{Y}$ atomtávolságokkal és kötősszögekkel létesülő intermolekuláris kapcsolatok (kivéve a kelátokat). Ugyanezért a sávalak is jellegzetesen eltérő: az intra-hidak sávja élesebb, az inter-kapcsolatoké szélesebb, gyakran diffúz. (A vegyértékrezgési frekvencia utóbbi esetben nagyobb intervallumban változhat.) Mivel az inter-hidak instabilabbak (inkább hozzáférhetők), hígítás hatására könnyebben szétbomlanak, és a monomer csoportok νXH frekvenciája nagyobb, sávja élesebb. Ugyanezért nehézvíz hatására az XH csoportok nagyobb arányban cserélődnek XD csoportokra (v. ö. 10. pont).



7. ábra. Az anti furil-metil ketoxim (22) IR-spektrumrészlete az OH-sávval

Ezeket a jelenségeket felhasználva biztonságosan megkülönböztethetők az izomerek. Az *anti* izomerek spektrumában [7. ábra, 22 spektruma] szélesebb, kisebb frekvenciájú a νOH sáv, mint a *syn* izomerében [8. ábra, 23 spektruma], hígításkor az *anti* izomer esetén a νOH sáv nagyobb mértékben gyengül, s váltja fel az éles, nagyobb hullámszámú monomer sáv, továbbá nagyobb mértékű az OH csoport deuterálódása.



8. ábra. A *syn* furil-metilketoxim (23) IR-spektrumrészlete

E vizsgálatokból kitűnt, hogy az izomerek Raman-adatok alapján feltételezett szerkezete téves: éppen fordított! Számomra kellemetlen volt, hogy volt egyetemi oktatóim közleményét cáfoljam. Ezt a dilemmát úgy hidaltam át, hogy Varsányi professzort felkértem a megírandó cikk [14] társszerzőjéül, s ő vállalta is, és érdemben járult hozzá a kézirat kidolgozásához. Ezzel közös felfogásunkat követte, hogy ti. a tudományban minden állítás addig érvényes, amíg meg nem cáfolják, és a helytálló eredményekhez gyakran tévedések során át vezet az út.

12. Az első konferencia-előadások

„Tisztelni kell a régieket és elismerést kell mutatnunk azok iránt, akik utunk egyengették, ám nem szabad feledni, hogy ők is emberek, mint mi, s ők is tévedhettek.”
(Bacon)

A sors úgy hozta, hogy első nemzetközi konferencia-előadásomra hamarabb (1963 nyarán) került sor, mint első hazai konferencián tartott magyar nyelvű előadásomra. A német nyelvű előadást [15] az előző pontban leírt cukoralkohollokkal kapcsolatos vizsgálatokról tartottam a VII. ECMS (European Congress on Molecular Spectroscopy) rendezvényen. Úgy tudom, ez volt a háború utáni első, kémiai tárgyú nemzetközi rendezvény Magyarországon. A kommunista diktatúra a tudományos élet terén is szigorú elszigeteltségben tartotta a keleti blokk országait. Az ECMS megrendezése ezért kivételes eseménynek számított, és engedélyezése a rendező, Kovács István akadémikus kiváló pártkapcsolatainak volt köszönhető. Kovácsot „málenkij robot”-ra hurcolták, majd a munkatáborból – midőn kiderült, hogy akkor már a végzés előtt állt műegyetemi hallgatóként – a Lomonoszov Egyetemre irányították egyetemi tanulmányai befejezésére. Diplomája megszerzését és alapos „ká-

derképzést” követően, oldalán orosz feleséggel, megbízható pártkatonaként térhetett haza. Hamarosan egyetemi tanár és a KFKI (Központi Fizikai Kutatóintézet) igazgatója lett, valószínűleg mindkét funkció legfiatalabb képviselőjeként. Nemcsak a kétatomos molekulák spektroszkópiájának volt szakértője, de egy népszerűvé vált popsztár szerzőjeként a dal címéről az „ezüstgitáros Kovács” névre szert téve vált széles körökben ismertté. Az ő kedvéért engedélyezték a nemzetközi, „nyugati” résztvevőkkel lezajló konferenciát.

Előadásomhoz hozzászólt Günther Sznatzke, későbbi bonni, majd bochumi professzor is, aki a szünetben folytatandó diskuszióra kért. Akkor még ugyancsak hiányos nyelvtudásom okán nagy megkönnyebbülésemre kiderült, hogy valamelyest tud magyarul. A diskurzus eleinte elég akadozottan ment. Ő ui. számomra alig érthető bécsi dialektusban hadart, míg viszont nehezen követte az én magyar válaszaimat. Javaslatomra felcserélve a nyelveket folytattuk a beszélgetést, ő beszélt magyarul, én pedig németül. Ettől kezdve pompásan ment a társalgás. Mindketten lassan, a szavakat keresgélve beszéltünk, időt engedve a másiknak, hogy felfogja a beszélgetőtárs által mondottak értelmét. Sznatzke a CD-spektroszkópia kiemelkedő szakértőjeként később nemzetközi hírnévre tett szert. Széleskörű kapcsolatokat épített ki magyar kutatókkal. Magyar ösztöndíjasok egész sorát fogadta Bonnban, s később Bochumban is.

Alig pár héttel később Szegeden, a Vegyészkonferencián került sor első magyar nyelvű konferencia-előadásomra. [16] Az előadás, melynek témája a benzofuril-metil-ketoxim származékok *syn-anti* izomerjeinek szerkezetigazolása volt, (v.ö. 11. pont) nemcsak szakmai kihívást jelentett számomra, de az előadás alapjául szolgáló vizsgálataim eredménye „diplomáciai manőverezésre” is kényszerített, egy kínos helyzet sikeres elsimítása érdekében, ahogy azt az előző pontban leírtam.

Az üléselnök a hazai szerves kémia egyik kiemelkedő szakértője, Fodor Gábor professzor volt. Amint befejeztem az előadást, Fodor megdicsérte a sikeres szerkezetfelderítést, s külön is méltatta „a nagyszerű, új műszeres szerkezetvizsgálati módszer, a Raman-spektroszkópia sikeres alkalmazását”. Ebből kiderült, hogy előadásomnak csak a bevezető mondataira figyelt, ahol a Raman-vizsgálatokat említettem, amelyek eredményét IR-mérésekkel cáfoltam. Erre azonban Fodor már nem figyelt.

13. Intézetén kívüli tudományos együttműködések. Egy évtizedek múltán is az érdeklődés homlokterében álló, kiemelkedő kutatási eredmény: a dezmotrópia

„Ritkák, s ezért kívánjuk őket”
(Shakespeare)

Az ELTE Szerves Kémiai Tanszéken eltöltött vendégkutatói években a befogadó intézmény kutatóival való tudományos együttműködést a Tanszék és a GYKI közötti szerződés feladatomból jelölte meg. Így a kezdetektől munkahelyem, a

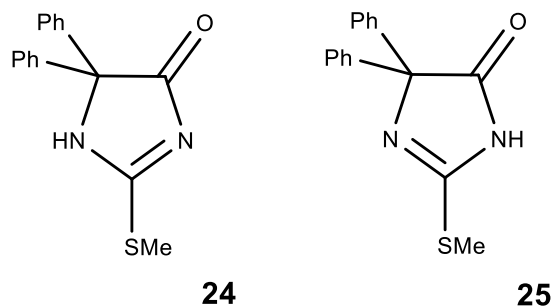
GYKI kutatói mellett a Tanszék oktatóinak a kutatásaiban is részt vettem. Az intézetén kívüli együttműködésem körét tovább bővítette közreműködésem a JATE és a Richter gyár IR-készülékeinek üzembe helyezésében való részvételével. Ennek nyomán ugyanis szerkezetigazolási problémáikkal is megkerestek a két intézmény kutatói. De más úton is gyarapodtak tudományos együttműködésem.

Az 1960-as évek legintenzívebb együttműködése a BME Szerves Kémiai Tanszékével, közelebbről a Lempert Károly professzor vezette kutatócsoporttal jött létre. Több száz, sőt valószínűleg több ezer általuk szintetizált minta, többnyire új vegyület szerkezetigazolását végeztem el, s ezekből az eredményekből tucatnyi közös publikáció született.

Egy hidantoin-származék, a 2-metiltio-5,5-difenil-imidazol-4-on (**24**) vizsgálatakor azt tapasztalták, hogy a vegyületet szublimálva egy merőben eltérő kémiai tulajdonságokkal rendelkező, ismeretlen új, fehér, kristályos anyag képződik. Ennek szerkezetfelderítésére kértek.

Később kiderült, hogy ez a szublimált anyag DMSO-ból átkristályosítva reverzibilisen visszaalakul az eredeti **24** vegyületté.

Mindkét IR spektrumban megjelentek az NH, SMe, Ph, C=N és karbonil-csoportok jellemző sávjai, mindössze utóbbi frekvenciája változott jelentősen: a **24** vegyület spektrumában 1685 cm⁻¹-nél lévő igen intenzív νC=O sávot a szublimált anyag esetén egy valamivel gyengébb maximum helyettesíti 1730 cm⁻¹-nél. Ebből nyilvánvaló volt, hogy a szublimált anyag **24** tautomerje, a **25** vegyület. A νC=O sáv kisebb frekvenciája **24** esetén azzal magyarázható, hogy a konjugált C=N–C=O lánc polarizálódik az elektronszívó karbonil-oxigén hatására a C⁺–N=C–O⁻ határszerkezetnek megfelelő elektroneloszlás irányába, ami a C=O kötésrend gyengülésével, s ezzel a νC=O sáv kisebb frekvenciák felé való eltolódásával jár. [17]

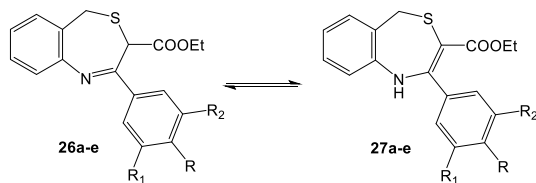


Szerves kémikus kollégáim kételkedve fogadták az általam javasolt szerkezeteket, mert mindkét vegyület hosszú időn át változatlanul eltartható volt szilárd állapotban, márpedig az irodalom szerint a tautomerek tisztán nem tárolhatók. Oldatban, a körülmények függvényében, eltérő összetételű keverékek képződnek, szilárd fázisban pedig vagy hasonlóképpen keverékek vannak jelen, vagy egyikük, s mindig ugyanaz a tautomer szerkezet létezik. Tisztán elkülöníthető

és tartósan változatlan egységes tautomerek, un. dezmotrópok rendkívül ritkán fordulnak elő. A korábbi irodalomban dezmotrópok létezéséről csak egy-két, nem egyértelműen bizonyított esetről voltak adatok. Érthető módon ezért szintetikus vegyész partnereim csak hosszas rábeszélésemre egyeztek bele az általam megállapítottak publikálásába. [18, 19]

Kétségeik azonban a közlést követően sem oszlottak el. Ennek bizonyítéka, hogy évekkel később krisztallográfiai vizsgálatot kezdeményeztek a dezmotrópok szerkezetigazolása céljából. A röntgendiffrakciós mérések, amelyeket az MTA KKKI Kálmán Alajos vezette kutatócsoportjában végeztek el, az általam javasolt szerkezeteket bizonyították. [20] Ez a feltevésem iránti bizalmatlanság azonban számomra igencsak termékenynek bizonyult: kezdetét jelentette a Kálmán Alajos professzorral kialakult több évtizedes, sikeres és termékeny együttműködésnek, ami több tucat közös közleményt eredményezett.

Évtizedek múltán ismét felbukkant kutatómunkám horizontján a dezmotrópia jelensége, mégpedig az SZTE Gyógyszerkémiai Intézetével évtizedeken át folyó rendkívül kiterjedt és eredményes közös kutatások keretében. Bernáth Gábor professzor korábbi munkatársa, Fodor Lajos professzor, a gyulai Megyei Kórház Kémiai laboratóriumának vezetője állított elő benzotiazepineket, amelyek újabb példáját szolgáltatták, ez esetben imin-enamin típusú (26a-e, 27a-e) dezmotrópok keletkezésének. [21]



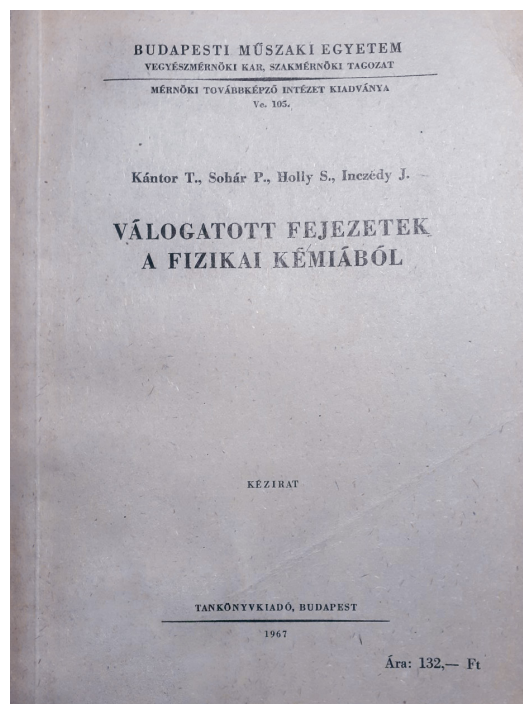
a: R = R₁ = R₂ = H; b: R = Cl, R₁ = R₂ = H; c: R = Me, R₁ = R₂ = H; d: R = OMe, R₁ = R₂ = H; e: R = H, R₁ = R₂ = OMe

14. Visszatérés: Előadások a BME Mérnöktovábbképző tanfolyamán. Jegyzetírás

*„A minket ért sérelmet kezdetben feledni, és évek múltán megőrizni, egyaránt nehéz.”
(La Bruyère)*

A BME-től „útravalóul” kapott káderlap és az eredményeképpen átélt kanosszajárás, ti. kudarcos álláskeresés rossz emlékei arra készítettek, hogy évekig messze elkerüljem Alma Materemnek még a környékét is. Hét évnek kellett elteltie diplomaszerezésemet követően, hogy szakmai kapcsolatba kerüljek az egyetemmel. Egykori tanítómesterem és mentorom, Varsányi György vendégprofesszori megbízást vállalt Algériában (úgynevezett TESCO-szerződéssel) és arra kért, hogy helyettesítsem és tartsam meg helyette IR-spektroszkópiai tárgyú előadásait a BME Mérnöktovábbképző Intézetének tanfolyamán. A megtisztelő felkérést természetesen örömmel vállaltam. Egyik hallgatóm, az MTA későbbi külső tagja, az ETH kiváló profesz-

szora, Pretsch Ernő volt. Ez a tanfolyam hozzá juttatott első terjedelmesebb szakmai művem, a tanfolyam segédanyagául szánt egyetemi jegyzet (9. ábra) megírásához.



9. ábra. BME Mérnöktovábbképző. Jegyzet

A jegyzet megírásával eredetileg Holly Sándort, Inczedy Jánost és Kántor Tibort bízták meg. Inczedy és Kántor határidőre el is készültek fejezeteikkel (Atomspektroszkópia, illetve Fizikai kémiai egyensúlyok és Fizikai kémiai folyamatok időbeli lefolyása), Holly viszont november végén még hozzá sem fogott az 1967. december 31.-i határidős munkához. Ekkor Pólos László, a jegyzetkiadások szervezője, engem keresett meg, hogy vállaljam el a fejezet megírását, mert különben a kiadó felbontja a szerződést és a két kész fejezetbe befektetett munka kárba vész. Határidőre elkészültem a 160 oldalas anyaggal, a „Molekulaspektroszkópia. Az infravörös és Raman színeképek elmélete.” című fejezettel. [22] Holly végül egyetlen sort sem írt a jegyzetből, de ragaszkodott a társszerzőkénti feltüntetéséhez, én pedig beleegyeztem. Egyrészt mert adósának éreztem magam, amiért hallgatóként munkatársával, Imre Lajossal ők tanítottak meg mérni az IR-készülékkel, másrészt, mert fiatal pályakezdőként számomra komoly lehetőség volt, tekintélyes kollégák társaságában, az egyetemi jegyzet társszerzőjének lenni.

Nem sejthettem, s biztosan ma sem tudom, de ez a bravúros gyorsasággal megírt jegyzet hozzájárulhatott, hogy első ajánlóm az akadémia levelező tagságra Inczedy János volt, akivel a jegyzetírást követően, majd két évtizeden át, semmiféle kapcsolatban sem voltam és ezért az ajánlást – amely teljesen váratlanul ért – feltehetőleg a közös jegyzetnek, illetve Inczedy professzor személyem iránti érdeklődésének köszönhettem, amelyet a jegyzet megírása felkeltett.

15. Előadások az MTA Sztereokémiai Kutatócsoportjában

*„Példa nélkül semmit sem lehet helyesen tanítani, sem tanulni.”
(Columella)*

Valószínűleg a JATE Fizikai Kémiai tanszékén a műszerfelkészítés és/vagy a szegedi konferencia-előadás lehetett az ötletadója Fodor Gábor professzor meghívásának, hogy tartsak munkatársainak heti két órában féléves tanfolyamot az IR spektroszkópiáról. Fodor, a korszak kimagasló szerves kémikus szaktekintélye, 1957-ig a JATE Szerves Kémiai tanszékének volt professzora, de az 1956-os forradalom és szabadságharcbeli szerepéért (az egyetemi munkástanács elnökének választották) elveszítette állását. Mint az MTA Sztereokémiai kutatócsoport (SZKKCS) vezetője, Budapesten, a Wander (később EGYT, majd EGIS) gyár Gém utcai telephelyén fabarakkokban kapott helyet munkatársaival. Ide jártam ki 1965 első felében, minden héten előadásokat tartani. Kiváló, neves kutatók voltak a csoport tagjai, s igyekeznem kellett, hogy kellően felkészülve bizonyítsam hozzáértésem. Munkatársaival együtt Fodor is meghallgatta az előadásokat, amelyek végén, Fodorral az élen, valósággal elárasztottak kérdésekkel. Alaposan fel kellett hát készülnöm az órákra, hogy felelni tudjak a záporozó kérdésekre. Rövidesen mintákat is kaptam a csoport tagjaitól, hogy szerkezetüket IR-méréssel igazoljam.

A megfejtendő problémák egyike számomra humoros, de ugyanakkor komoly tanulsággal szolgáló eredménnyel járt. A Fodor-csoportban egyebek közt tropánvázis vegyületek kvaternerezési reakcióit tanulmányozták. Egy soklépéses reakció termékeként gyönyörű fehér-kristályos vegyületet nyertek, s ennek a nagy izgalommal várt végterméknek a szerkezetigazolását kérték. Egyik reakciólépés N-metilezés volt, amit metil-jodiddal végeztek. A termék IR-színképe [7c] feltűnően sávszegény volt, ami egyszerű, szimmetrikus szerkezetre utalt. Csupán négy intenzív sáv jelentkezett a spektrumban, 3015, 1490, 1410 és 950 cm^{-1} -nél. Ezek rendre a metil-csoport vegyérték- és deformációs rezgéseirez rendelkeztek. Kézenfekvő volt feltételezni, hogy az anyag a tetrametil-ammonium jodid, amit aztán az olvadáspont is alátámasztott. [7d] Ez az eredmény a preparatív munkát végző kollégáimnak nagy csalódást okozott, számomra viszont azzal a tanulsággal szolgált, hogy ismeretlen vegyület esetén mindig mérlegelni kell, hogy a várt reakciótermék helyett gyakran a reagenseket, vagy az oldószert, a katalizátort, esetleg más, a reakcióelegybe kerülő anyagot, vagy esetleg ezek valamilyen átalakulása útján keletkező nem várt vegyületet különítenek el. Többször előfordult pl., hogy az oldószeres üvegek dugóját a légmentes elzárás érdekében paraffinnal vonták be, s végtermékként a jól oldódó és kristályosodó paraffint különítette el, s küldte vizsgálatra a szintetikus vegyész.

A Mérnöktovábbképző tanfolyamához írott jegyzet és az SZKKCs előadásokhoz készített vázlatok szolgáltak,

mint később kiderült, afféle előtanulmányokként, az IR-monográfia megírásához.

16. Mellékállásban az Akadémiai Műszerügyi Szolgálatnál

*„Dolgozni nem szégyen,
de szégyen tétlenül élni.”
(Hésziodosz)*

Az 1965-ös év az SZKKCS-beli előadások mellett még két fontos eseményt hozott számomra: az Akadémia Műszerügyi Szolgálat (AMSZ) külföldi tanulmányútra ment IR-szakemberének helyettesítőjeként mellékállást vállaltam az AMSZ-nál, és az ELTE Múzeum körüli „B” (kémiai) épületéből Újpestre költöztem a GYKI új központi telephelyére. Ezzel lezárult több, mint fél évtizedes vendégkutatói működésem a Szerves Kémia Tanszéken, és fel kellett építenem, immár másodszor, egy új IR-labort, beüzemelnem a GYKI új UR-10 készülékét, és kialakítanom a labor munkarendjét.

Az AMSZ Perkin-Elmer gyártmányú IR-készüléke a BME Szerves Kémia Tanszékén működött, és bér munkában, megbízással, IR spektrumfelvételeket, illetve szerkezetigazolási feladatokat vállalt olyan szintetikus munkát végző kutatók számára, akik munkahelyén nem volt IR-spektrométer. Heti öt órában, szombatonként (szabad napomat fölládozva) mértem, vettem föl a spektrumokat, értékelésüket hétköznap esténként és vasárnap otthon végeztem. Egy év alatt 216 minta mérésére került sor, ezek közül 46 spektrum bér munka keretében, a többi 170 „lakbérként” a BME Szerves Kémia Tanszéke számára készült. (Ez óránként kb. egy mérést jelentett. Összehasonlításképpen, a külföldi tanulmányúton lévő kolléga, teljes munkaidőben, egy év alatt kevesebb, mint fele ennyi mérést végzett el.) Bár egy éven át szinte minden szabad időm ráment a mellékállású munkára, végeredményben számomra mégis igen hasznos volt, nemcsak a szerkezetfelderítésbeli tapasztalatszerzés szempontjából, hanem mert szaporította szakmai együttműködéseim körét. Többek között így kerültem id. Szántay Csaba és Hideg Kálmán professzorokkal kutatási kapcsolatba, amely később több közös közleményt eredményezett. [pl. 23, 24]

17. Az első szabadalom

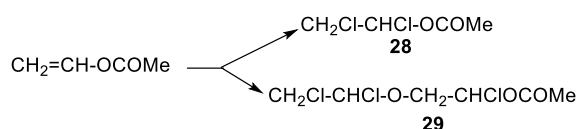
*„Ne maior sit benignitas, quam facultas!”
(Annyit, amennyit tudsz, adományozzál, de ne többet!)*

Az ipari kutatóként eltöltött három évtized a szabadalmak terén nem volt túl termékeny, s mindössze 9 patent szerzői között fordul elő a nevem (a több országban is elfogadottakat nem tekintve). Igaz, ennek főként a szabadalmakbeli részesedést illető averzióm az oka. Úgy voltam ezzel, mint az állófogadásokkal: megalázónak éreztem beállni a tülekedők közé a legjobb falatokért, inkább kockáztattam, hogy mire gyérül a zsákmányra vadászók hada, kiürülnek a tá-

lak, s – ahogy nem egyszer történt – éhen maradok. Ezért sokszor átengedtem a társszerzőségem fiatalabb, beosztott munkatársaimnak, lemondva saját részesedésemről, s többször is úgy kerültem be egy-egy szabadalomba, hogy ez csak később jutott tudomásomra.

Első szabadalmam [25] egy intermedier előállításával kapcsolatos, amely reakció igen gyatra termeléssel járt, s eredetileg a nem kívánt és nagy arányban képződő ismeretlen melléktermék szerkezetfelderítését kérték a szintetikus munkát végző kollégáim. A reagensként előállított, s a vinilacetát klórozásakor keletkező vegyület (**28**) mellett azonos összetételű melléktermék keletkezett.

Az ismeretlen szerkezetű melléktermék és **28** IR-spektrumát összehasonlítva arra következtettem, hogy **28** és dezacetilezett bomlásterméké éterkötést kialakítva a **29** vegyületté alakult. Ebből kiindulva azt javasoltam, hogy dolgozzanak hígabb oldatban, magasabb hőmérsékleten és nagyobb klórozószerszemesleget alkalmazva. [26] A célvegyület ilyen körülmények között drasztikusan megnövekedett arányban keletkezett: emlékeim szerint a termelés 20 % körüliről négyszeresére, kb. 80 %-ra növekedett.



Ez az IR-méréseken alapuló sikeres javaslat megnyerte az IR-spektroszkópia iránt addig szkeptikus, s az ezeket a kutatásokat irányító kollégámat a módszer számára. Sőt „átesett a ló túloldalára”: amit a számára végzett későbbi vizsgálatok során megállapítottam, azt órákulumnak tekintette, és olyan problémák megoldására is kért, amire az IR nem volt alkalmas. Amikor egy-egy mérés eredményeiről tájékoztattam, minden szavam gondosan feljegyezte labornaplójába, s ha valaki kétségre vonta, amit intézeti beszámolóin a munkájáról mondott, fő érve igazának alátámasztására így szólt: „Sohár mondta...”. Ez aztán még inkább tudatosította bennem felelősségem, hogy ti. minden következtetésemmel, feltevésemmel esetleg tévútra vezethetem kollégáimat, tehát minden szavam, állításom alaposan meg kell fontolnom, mielőtt bármit is mondanék vagy leírnék a spektrumokból levont következtéseimről.

18. IR-iskola

„Tanítva tanulunk”
(Seneca)

Műszerfelélesztői működésem, előadásaim a BME-n a Varsányi helyetteseként tartott IR-speckoll és a Mérnöktoábbképző tanfolyam keretében, továbbá az MTA Sztereokémiai Kutatócsoportjában, szakértői munkám az MTA Műszerügyi Szolgálatánál és szakmai együttműködéseim az ELTE és a BME kutatóival, és persze GYKI-beli munkatársaimmal ismertté tette nevem IR-szakértőként a

hazai tudományos közéletben. Ennek következményeként sorozatban kerestek meg a kémiai kutatóhelyek, elsősorban az egyetemek, hogy az akkor még Magyarországon alig ismert, új szerkezetkutató módszer mérés technikájának és szerkezetkutatásbeli alkalmazásainak elemi ismereteit vezetésemmel laboratóriumomban ismerhessék meg munkatársaik.

Hat évtized múltán már nem emlékszem biztosan, hogy ki mindenki töltött egy-két hetet vagy hónapot vendégkutatóként nálam, de az biztos, hogy jó néhány, többségükben nálam idősebb, már szakmai tekintélynek örvendő kollégát vezethettem be az IR-spektroszkópia rejtelseibe. Az első „tanítványok”, ha nem tévedek, a debreceni, akkor Kossuth Lajos Tudományegyetem (KLTE) névre hallgató intézmény Szerves Kémia Tanszékéről érkeztek: Szabó Sándor és Dinya Zoltán, akik addig UV-spektroszkópiával foglalkoztak és akkor készültek átnyergelni az IR-spektroszkópiára.

Egy népesebb „csapatot” a Szegedi Gyógyszervegyetani Intézet delegált hozzám. Ennek külön története van, s abban is egyedi, hogy sok évtizedes gyümölcsöző szakmai kapcsolat, több száz közös publikációt eredményező együttműködés kezdetét jelentette. A dolog úgy kezdődött, hogy a tanszék egy *Acta Chim. Hung.*-ban publikálandó IR-témájú munkáját én kaptam bírálatra. Kiderült, hogy az IR-spektrumokból valószínűsített szerkezet téves volt. Nem csupán ezt állapítottam meg, de a helyes szerkezetre is javaslatot tettem bírálatomban. Az intézetvezető és egyben első szerző először igen rossz néven vette a kritikát, de amikor a tanácsomra elvégzett szintetikus szerkezetigazolás bizonyította az általam ajánlott szerkezetet, a nehezítést teljes bizalom és respektus váltotta fel. Nem csupán a cikk társszerzőségét ajánlották fel (amit elhárítottam, s ezért csak a köszönetnyilvánítások keretében méltatták a tőlem kapott „hasznos tanácsokat”), de az ezután elkészült kézírataikat a folyóirathoz beküldés előtt rendszeresen megküldték, azt kérve, hogy véleményezzem a leírtakat.

„Előlektorálási” közreműködésemet tovább bővítették azzal a kéréssel, hogy fogadjam vendégkutatókként a tanszék oktatóit, hogy nálam ismerkedjenek meg az IR-spektroszkópia tudományával. Klivényi Ferenc és Stájer Géza docensek, Szabó József és Dombi György tanársegédek nevére emlékszem, de talán többen is lehettek a SZOTE oktatói, akiket bevezethettem az IR-spektroszkópia rejtelseibe. Ők mindenesetre később közös közlemények társszerzőiként váltak sok éven át együttműködő partnereimmé. Időközben a tanszék új vezetőt kapott kedves barátom, Bernáth Gábor professzor személyében, akivel több évtizeden át végeztünk közös kutatásokat, amit több mint másfélszáz közös közlemény dokumentál.

A pécsi és veszprémi egyetemokről, a Növényvédelmi Kutatóintézetből is voltak belföldi tanulmányúton vendégkutatóim, nyári és üzemi gyakorlatok keretében pedig hazai és 1990 után erdélyi egyetemi hallgatók, külföldi ösztöndíjasok is gyarapították a tanítványok seregét.

19. Ferrocén először. A ferricínium-sók szerkezetbizonyítása

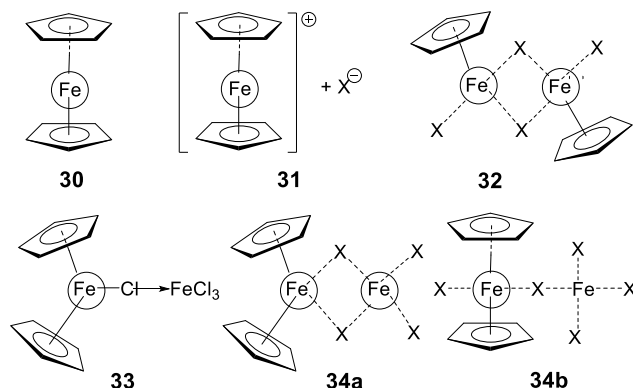
„Ritka madár,
mint a fekete hattyú”
(Juvenális)

A ferrocén-kémia kutatói pályafutásom során – mint egy bűvópatak – több éves szünetekkel, háromszor is fölbukkant. Első találkozásunkra, az 1960-as évek második felében, GYKI-beli kollégám és kedves barátom Kuszmann János professzor közvetítésével került sor.

A ferrocén (FC = **30**) unikális, érdekes szerkezete azonnal felkeltette érdeklődésemet. A Chinoin gyár megbízásából Kuszmann ferricínium sókat (köztük a ferricínium-kloridot, -bromidot és -jodidot) állított elő, s a termékek szerkezetigazolására kért. Ekkor még az IR-spektroszkópia volt egyedüli nagyműszeres eszközöm az ismeretlen szerkezetek felderítésére.

Utánanézve az irodalomban kiderült, hogy e vegyületek szerkezete nem bizonyított és a szerkezetéről több vitatott feltételezés is megjelent a szaklapokban. Pavlik és mtsai a ferrocén és az $\text{FC} \cdot \text{Fe}_2\text{X}_4$ összegképletű ferricíniumsók szerintük hasonló IR-spektrumából arra következtettek, hogy a **31** ionpárról van szó [27]. Fritz és Schäfer viszont éppen az IR-spektrumok eltérései alapján a **32** szerkezetet javasolták. [28] Maitlis és Brown azt tapasztalták, hogy a ferricínium sók redukciója kvantitatíve ferrocént eredményezett. Ezért a **32** szerkezetet elvetették, s helyette a **33** formát javasolták. [29]

Felvéve **30** és a sók IR spektrumát azt tapasztaltuk, hogy utóbbiakban mindössze négy intenzív sáv jelentkezik, míg **30** spektrumában több, bár részben gyenge elnyelési maximum látható. A csoportelméleti megfontolások (un. leszámlálás) arra az eredményre vezettek, hogy a D_{5h} szimmetriaosztályba sorolható ciklopentadién gyűrűnek négy IR-aktív sávja (normál-frekvenciája) lehet, míg a D_{5d} szimmetriájú ferrocén esetén egyes normálrezgések csatlódnak, és ezért több, bár részben gyenge IR-aktív sáv léphet föl a spektrumban. Mindezek alapján a mindkét vas körül tetraéderes **34a** szerkezetet javasoltuk, azzal, hogy eltorzulhat a **34b** síkszerkezet irányába, mégpedig az X ligandumok növekvő térkitöltésével fokozódó mértékben, aminek következtében megjelennek, növekvő intenzitással, az eredetileg (**34a** esetén) tiltott sávok is. [30] Ezt a feltevésünket az $\text{X} = \text{Cl} \rightarrow \text{Br} \rightarrow \text{I}$ sorrendben intenzívebbé váló gyenge sávok alátámasztják. A **33** szerkezet az egyik vasatom körüli kedvezőtlenebb sík-trigonális elrendeződés és a ciklopentadién-gyűrűnek a normálrezgések csatlódlását inkább segítő nagyobb (120° -os) szöge (ez a szög **34a** esetén 109°) miatt valószínűtlen.



A ferrocén másodszor, bő két évtizeddel később, bukkant föl kutatásaimban. Csatóné Nagy Ágnes akadémiai doktori értekezésének bírálatára kértek fel. Bírálatomban a kutatómunka néhány kiegészítését is javasoltam, egyes feltételezések alátámasztásául. Ebből aztán együttműködés és néhány publikáció született, amelyekben ferrocén-származékok NMR- és ciklikus voltammetriás vizsgálatainak eredményeiről számoltunk be. [pl. 31, 32] Csatóné tragikus, korai lehunytája sajnos idő előtt véget vetett ennek a sikeresnek induló együttműködésnek.

Harmadszor, újabb egy évtized múltán, akkor került érdeklődésem fókuszába a ferrocén-kémia, amikor az MTA pályázatán 1999-ben önálló akadémiai kutatócsoport megalapítására kaptam lehetőséget. Négy évtizeden át vegyész-kollégáim kutatási témáiban vettem részt, eleinte csak IR, majd később IR és NMR spektroszkópiai mérésekkel és a spektrumok értelmezésével, szerkezetigazolással vagy szerkezetfelderítéssel hozzájárulva munkájuk eredményeihez, sikerességéhez. Saját kutatási téma választására nem volt lehetőségem, legfeljebb a szerteágazó kutatási témákból valamilyen közös, ismétlődő jellegzetességet kiválasztva szűrhettem le általánosabb érvényű összefüggéseket. Ezt a közreműködői szerepet zokszó nélkül vállaltam, sőt missziónak tekintettem, hogy szintetikus területen működő kollégáimnak, akiknek nem állt rendelkezésére műszer és/vagy az IR és NMR spektroszkópia terén tapasztalt szakember, segítségére legyek. De azért mindig szerettem volna saját kezdeményezésű, magam választotta témájú, önálló kutatásokat is végezni. Erre nyílt lehetőségem az MTA-ELTE Spektroszkópiai Szerkezetkutató Csoport létrejöttével.

Kutatócsoportom saját kezdeményezésű kutatási témájaként a ferrocén-kémiát választottam. Ekkorra már az IR-spektroszkópia fő kutatási módszerből, a hatékonyabb NMR-spektroszkópia és tömegspektrometria, valamint a krisztallográfia árnyékában kiegészítő mellékszereplővé szorult vissza, de azért a molekulák „ujjlenyomataként” és alapinformációk forrásaként továbbra is nélkülözhetetlen segédeszköze maradt a kémiai szerkezetkutatásnak. Mindazonáltal e korszak közleményeiben többé már nem játszott főszerepet. [33, 34]

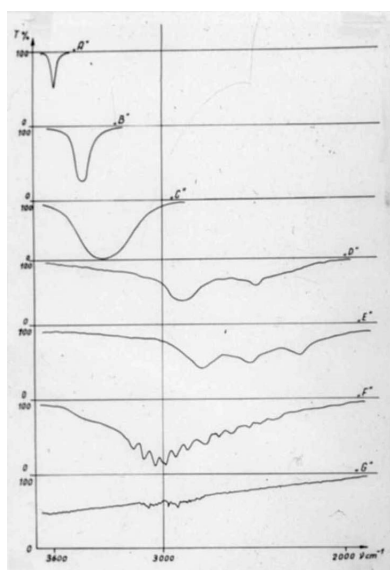
20. OH sávok, ciklikus dimerek

„Az anyag megmarad,
míg a forma változik.”
(Ronsard)

Pályafutásom első négy évtizedében mind munkahelyi feladatörömbben, mind pedig munkahelyeimen (GYKI, EGYT/EGIS, ELTE) kívüli együttműködéseim résztvevőjeként szintetikus kutatásokat végző kollégáimat kellett segítenem az általuk előállított új vegyületek szerkezetének felderítésével, illetve bizonyításával. Vagyis az IR-spektroszkópia szakértőjeként, mások kezdeményezte kutatásokban kellett közreműködnöm. De a kezdetektől élt bennem a vágy, hogy saját magam választotta témával is foglalkozhassam. Erre azonban – mint említettem már – csak pályafutásom vége felé nyílt lehetőségem, amikor pályázatot nyertem egy MTA-kutatócsoport létrehozására (1999-ben).

Addig, saját kezdeményezésű kutatások híján, az együttműködések kapcsán összegyűlt tapasztalataim igyekeztem felhasználni, hogy azokból általánosítható következtetéseket levonva, egy adott témában önálló vizsgálatokat végezzek. Kutatómunkám során ismételten felmerült a hidrogénhidás szerkezetek felhasználhatósága a szerkezetmeghatározásokban. Ezért ésszerű volt, hogy az asszociációs szerkezetek IR-jellemzőivel, s ezen belül elsősorban a H-hidas szerkezetekben részt vevő OH és NH, illetve NH₂ csoportok sávjainak tulajdonságaival részletesebben is foglalkozzam.

A téma iránti érdeklődésemet különösen az un. kelát-szerkezetek jellegzetes sávjai keltették fel. Ez a megfigyelésem egy addig nem vizsgált érdekes jelenség önálló elméleti kutatására érdemesnek ígérkezett. De a különböző H-hidas szerkezetek és ezek jellegzetesen eltérő IR-sávjainak rendszerezése és a közöttük meglévő összefüggések felismerése és értelmezése is vonzó alapkutatói feladatnak tetszett.



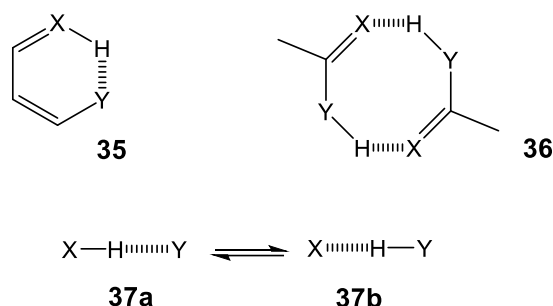
10. ábra. OH-sávkontúrok

Felhasználva irodalmi adatokat és a munkahelyi feladatokkal összefüggésben, illetve együttműködések keretében vizsgált molekulák spektrumait, a νOH sávok különböző H-hidas szerkezetekre jellemző alábbi sajátosságait találtam jellegzeteseknek (10. ábra):

- A monomer, hidrogénkötésben nem résztvevő OH-csoportok sávja a nagy frekvenciánál lép föl és éles kontúrjai vannak.
- Az intramolekuláris H-hidas szerkezeteket élesebb körvonalú és nagyobb hullámszámú sávok különböztetik meg az intermolekuláris asszociációt jellemzőektől, de a monomerek sávjainál ez utóbbiakra is kisebb hullámszámok és jelentősen nagyobb intenzitások jellemzőek.
- Egyes molekulák νOH sávja két vagy három igen széles, kis hullámszámú részmaximumra tagozódik. A részmaximumok frekvenciakülönbsége száz hullámszám nagyságrendű lehet.
- Nagyon erős H-hidak esetén a νOH és νNH sávok extrém kiszélesedése és többé-kevésbé felismerhető részmaximumok sorozatára tagolódása figyelhető meg.
- A folytonosan konjugált, hattagú gyűrűs hidrogénkötések (kelátok, **35**) νOH és νNH sávjai szélsőségesen diffúz kontúrokkal lépnek föl, s gyakran egyáltalán nem is észlelhetőek (észrevehetetlenül beleolvadnak a spektrum alapvonalába).
- A gyűrűs savamidok a savakéhoz hasonló ciklikus dimer asszociációt (**36**) létesítenek. E szerkezetekre a 3000 cm⁻¹-nél kisebb hullámszám-tartományban fellépő, rendkívül diffúz, ekvidisztáns részmaximumokra tagolt νNH sáv jellemző.

A részmaximumok megjelenésének magyarázatára elméletet dolgoztunk ki. [35, 36] A jelenséget a H-kötésben részt vevő hidrogén pillératomok közötti belső oszcillációjával (**37a,b**) értelmeztük. Ez a mozgás hasonló az inverzióhoz és a belső rotációhoz, s ebből kiindulva analóg matematikai formulákkal értelmeztük a részmaximumok megjelenését.

A főként a β-laktámokra jellemző nyolctagú gyűrűs dimer asszociációk (**36**) 3000 cm⁻¹-nél kisebb hullámszámú, diffúz νNH sávok megjelenésének eseteit részletesen vizsgáltam. E vizsgálatok eredményeit cikksorozatban publikáltam [pl. 37]. Amidin-, ftálhidrazid-, piridin-, izonikotinsavtioamid-, kinazolin-, hidantoin- és imidazolin-származékok esetén figyeltem meg ezt a H-hidas dimer szerkezeteket jellemző IR-sávtypust.



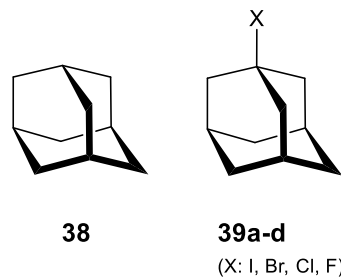
Ehhez a témához kapcsolódik, hogy teljesen váratlanul meghívást kaptam a koppenhágai 1965-ös 8. ECMS kongresszusra. A fiatal, pályakezdő számára rendkívül megtisztelő felkérésnek eleget téve az asszociációs szerkezetek IR-jellemzőivel foglalkozó kutatásaimról jelentettem be előadást, amelyet el is fogadtak. Lelkesen készültem első „nyugati” utamra, első külföldi tudományos előadásomra. Szobát foglaltam, repülőjegyet rendeltem. Derült égből villámcsapásként éltem meg, amikor közölték velem, hogy nem kapok vízumot, nem utazhatok. A repülőjegy-rendelést nevémben lemondták, s erre szólítottak fel a szállodai foglalást illetően is. (Mindezt – mint később kiderült – a fél évtizeddel korábbi, 1956-tal kapcsolatos „bűneimet” felróvó BME-kaderlapnak köszönhettem, de természetesen nem ezzel, hanem a „munkatársaimmal nem megfelelő viselkedés”-emmel indokolták, t.i. számon kértem a Műszaki és az Anyagbeszerzési Osztályokon el nem végzett munkáikat.) Mást nem tehettem, mint hogy a téma társszerzőjét, korábbi professzoromat és mentoromat, Varsányi Györgyöt kérjem meg, hogy tartsa meg az előadást. Mivel egy más témában ő is előadója volt a rendezvénynek, ezt nem vállalta, de azt igen, hogy előadásom anyagát „egy plakátra feldolgozva” magával vigye és kifüggeszse a kongresszus színhelyén, s az esetleges érdeklődőket tájékoztassa kutatásainkról. Akkor még nem jöttek divatba a poszter-előadások, s így talán plakátom lehetett a tudománytörténet egyik első posztere!

21. Szimmetrikus kis molekulák IR-spektruma. Csoportelméleti vizsgálatok

„A szépségnek kiváltsága,
hogy a szíveket magához vonzza.”
(Cervantes)

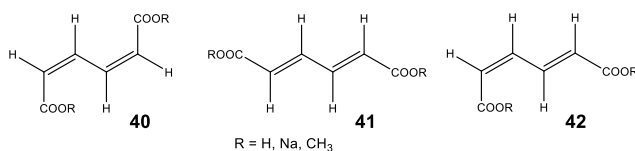
A *syn-anti* izomerek megkülönböztetéséről, majd pedig az asszociációs szerkezetekről, illetve ezek νOH és νNH sávjainak tulajdonságairól és elméleti értelmezéséről írott közös publikációkat korábbi egyetemi professzorommal, Varsányi Györggyel, több más témában folytatott együttműködésekről számot adó további közös közlemények követték. Ezek szimmetrikus kis molekulák IR-spektrumának részletes elemzéséről készültek: a normálrezgéseknek az IR-sávokhoz csoportelméleti alapon való hozzárendelésére összpontosítva. Az adamantán- és mukonsav-származékok vizsgálatát én kezdeményeztem, és Varsányi professzor azal is megtisztelt, hogy saját fő kutatási témájába, a benzolszármazékok spektrumértelmezésébe is bevont.

Az adamantán (38) IR-sávjainak hozzárendeléséről vizsgálataink idején egyetlen kutatócsoport publikációi [pl. 38] voltak megtalálhatók az irodalomban, a tercier szénatomon (szimmetrikusan) halogén-szubsztituált származékok (39a-d) IR-vizsgálatával pedig előttünk ugyancsak csupán egy kutatócsoport foglalkozott, akik csak a spektrumok empirikus leírását közölték, [39] a sávok hozzárendeléséről nem volt irodalmi adat.



Az adamantán egyes IR-sávjainak téves hozzárendelését korrigáltuk, és elvégeztük a **39a-d** származékok spektrumsávjainak asszignációját a normálrezgésekhez. Eredményeinket a szerkesztő felkérésére egy, az Elsevier kiadásában megjelent kötetben [40] és magyarul is publikáltuk. [41] A GYKI kutatójaként eltöltött két évtized lezárulta után, öt éve már az EGYT munkatársaként írtam meg egy adamantán-témájú közleményt. Ez volt az utolsó, még a GYKI-ban végzett vizsgálataim eredményeit bemutató, ottani kollégáimmal közös cikkünk. [42]

A Varsányi professzorral közös, a kis, szimmetrikus molekulák IR-spektrumának elméleti értelmezése céljából végzett kutatásaink részét képezte a mukonsav-származékok (savak, Na-sók és észterek) vizsgálata. A *cisz-cisz* (40), *transz-transz* (41) és *cisz-transz* (42) izomereket szimmetriaosztályokba, pontcsoportokba sorolva (40 és 41 a C_{2h} , 42 a C_s pontcsoportba sorolható) elvégeztük a leszámítást (megállapítva a normálrezgések számát) és hozzárendeltük a spektrumsávokat a normálrezgésekhez. Összehasonlítva az izomerek IR-jellemzőinek (frekvenciák, sávintenzitások) eltéréseit értelmeztük az IR-spektrumok és az izomerek térszerkezete közötti összefüggéseket. [43] Vizsgálatainkról előadást jelentettünk be a madridi IX. ECMS kongresszusra. [44] Másodszor fordult elő, hogy nem kaptam vízumot a kiutazáshoz, hogy megtarthassam elfogadott előadásom. Helyettem az intézetigazgató utazott el a rendezvényre, amelynek témája számára teljesen idegen volt. Részvételét a kongresszuson ekként indokolta: „Madridban még nem jártam.”



Varsányi kutatómunkájának gyűjtőpontjában benzolszármazékok IR-spektrumának részletes tanulmányozása, az IR-sávok hozzárendelése normálfrekvenciákhoz és a különböző szubsztitúciós módok (a szubsztituensek, száma, mérete, elektronaffinitása, stb.) spektrumokra gyakorolt hatásának felderítése, s e hatások rendszerezése, értelmezése állt.

Varsányinak a témáról írott, s 700 benzolszármazék részletes IR-vizsgálatát tartalmazó monográfiája [45] az e tárgykörben kutatók máig legfontosabb forrásmunkája. Egykori

tanítványaként számomra igen nagy megtiszteltetés volt, amikor megkért, hogy vegyek részt ezekben a kutatásaiban. A közös vizsgálatok eredményeiről közös publikációink jelentek meg. [46, 47]

22. Tanulmányút a bonni egyetemen, egy több évtizedes együttműködés és barátság kezdete

*„A világ minden kincse
sem ér fel egy jó baráttal.”
(Voltaire)*

Az 1960-as évek második felében a szokatlanul kis hullám-számoknál fellépő ν_{NH} sávokról megjelent cikksorozatam különlenyomatainak megküldését kérte Heinrich Wamhoff, a bonni egyetem szerves kémiai intézetének fiatal kutatója. Feltűnő volt ez az élénk érdeklődés, de azt nem sejtettem, hogy egy sok évtizedes szoros szakmai együttműködés és barátság kezdetét jelentette. Később kiderült, hogy Wamhoff és intézeti főnöke Friedhelm Korte professzor, a Tetrahedron folyóirat akkori főszerkesztője, felkérést kapott, hogy a heterociklusos vegyületek kutatásának friss eredményeiről fejezetet írjanak a Thieme Kiadó „Methoden der Organischen Chemie” (Houben-Weyl) sorozatába. Publikációim pontosan beleillettek a fejezet tematikájába, s ez volt az oka a különlenyomataim iránti érdeklődésnek. A különlenyomat-küldéseket sűrű levélváltások követték, és Wamhoff hamarosan Budapestre látogatott, hogy személyesen is megvitathassunk szakmai kérdéseket.

Wamhoffnak már előzetesen is voltak magyarországi kapcsolatai. Az 1956-os magyar forradalom és szabadságharc lelkes csodálója volt: magyar menekülteket fogadott be otthonába, segített nekik a németországi egzisztenciateremtésben, később pedig sorozatosan magyar ösztöndíjasokat vett fel kutatócsoportjába.

A személyes konzultációból szoros szakmai együttműködés alakult ki közöttünk, s ennek folyományaként 1970-ben vendégkutatói meghívást kaptam a Bonni Egyetem Kekulé Intézetébe. Két hónapot töltöttem Bonnban, s mivel az intézetben nem volt IR-szakember, ezalatt egyfajta „közintézménnyé” váltam. Szobám ajtaja előtt sorban álltak az intézet kutatói és a diákok, hozták az anyagaikról készült IR-spektrumokat, hogy „megszakértsem” ezeket, és segítsék a szerkezetek felderítésében. Hazautazásom napján, bőröndjeimet cipelve a vasútállomás felé tartottam a Meckenheimer Allén (ez egy kétoldalt fasorral és járdával szegélyezett, az Andrássy útra emlékeztető széles út, amely az egyetem főépületétől nyílegyenesen a vasútállomáshoz vezet), amikor egy diák még utánam rohant egy IR-spektrumot lobogtatva, hogy – míg befut a vonatom – ugyan nézzem már meg, mi lehet a minta szerkezete.

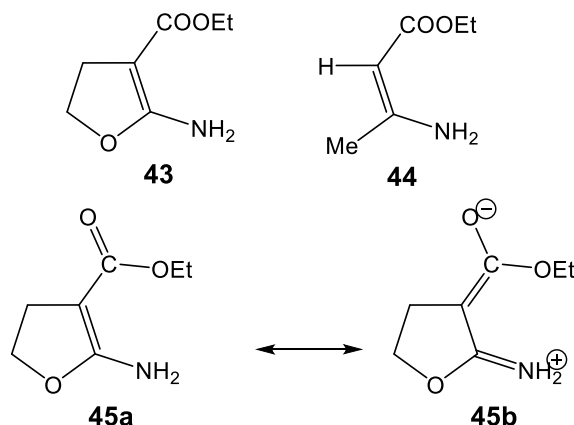
Mint említettem, a Friedrich Wilhelms Egyetem Szerves Kémiai Intézetében a legkülönbözőbb témában előállított új vegyületek szerkezetfelderítésében kellett részt vennem, de természetesen a legtöbb vizsgálatot vendéglátóm, Wamhoff

számra végeztem. Az ő akkori kutatásai a heterociklusos β -enamino-észterekre összpontosultak. Ezek IR spektrumának részletes értelmezése és a szerkezetigazolásban hasznosítható jellegzetességek felismerése jelentette ottani munkám súlypontját. Az eredményekről akkor két közlemény készült, [48, 49] de később még ezeket több is követte, akkor már az NMR-módszert is bevonva vizsgálataink eszköztárába. [pl. 50]

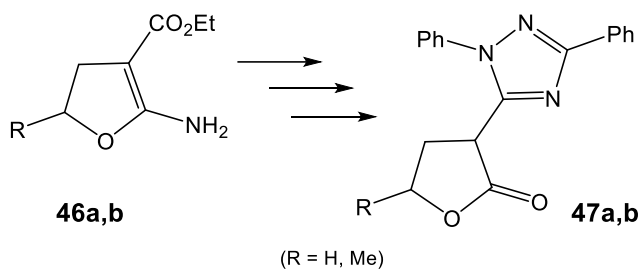
Több tucat enamino-észter IR-vizsgálatát végeztem el. Közülük több, újonnan előállított vegyület szerkezetét kellett igazolnom. Ezen túl kérdéses volt, hogy valóban kialakul-e kelát-típusú szerkezet az észter- és amino-csoportok részvételével, ahogy az irodalomban állították. [51] Ez ugyanis nem volt összhangban a vegyületek kémiai tulajdonságaira, reaktivására és reakcióira vonatkozó bonni vizsgálatokkal.

Az IR-spektrumok $\nu_{\text{as}}\text{NH}_2$ és $\nu_{\text{s}}\text{NH}_2$ sávjainak nagy frekvenciája és éles körvonalai nem jellemzőek a kelát-szerkezetekre. Ezeket ui. kisebb frekvenciájú, diffúz és sokszor az alapsávba beleolvadó (eltűnő) elnyelések jellemzik. [7e, 7Ab] (E sávok pl. a **43** és **44** vegyület spektrumában, CHCl_3 oldatban mérve, 3500 és 3360 cm^{-1} -nél jelentkeznek. [48]) Megállapítottuk ekként, hogy az irodalommal ellentétben, hasonlóan, mint pl. az antranilsav-etilészter esetében, [7f] az enamino-észterek sem kelát-szerkezetűek.

Felhasználva a vegyületcsoport nagyszámú tagjának spektrumadatait, feltételeztük, hogy a hasonló frekvenciájú „tisztá” $\nu\text{C}=\text{O}$, $\nu\text{C}=\text{C}$ és βNH rezgésekhez rendelhető sávok helyett ezek csatolásából származó „kevert”, un. csoportrezgések elnyelési maximumai jelentkeznek, amit a **45a** és **45b** mezomer határszerkezetekkel szemléltethető elektrondelokalizáció közvetít. Feltevésünk bizonyítására deutériumra cseréltük az NH_2 csoport hidrogénjeit. Mivel a βND rezgés jóval kisebb frekvenciájú, nem csatolódik a $\nu\text{C}=\text{O}$ és $\nu\text{C}=\text{C}$ rezgésekkel, s így a deuterált vegyületek spektrumában „tisztá”, s ezért nagyobb frekvenciájú $\nu\text{C}=\text{O}$ és $\nu\text{C}=\text{C}$ sávok jelentkeznek (a csoportrezgésekben nagy súllyal résztvevő βNH frekvencia ui. ezeknél kisebb, s ezért a csoportrezgések frekvenciái kisebbek, mint a „tisztá” $\nu\text{C}=\text{O}$ és $\nu\text{C}=\text{C}$ sávoké).



Egyéb bonni munkáim közül egy bonyolult, soklépéses átalakulás egyik termékének szerkezetigazolását említem. A kiinduló vegyületből, amely természetesen egy β -en-amino-észter (**46a,b**) volt, a PhClC=N-NHPh fenil-hidrazon-származékkal reagáltatva, etanol-eliminációval járó többszöri átrendeződéssel képződött a **47a,b** 1,2,4-triazol és γ -butirolakton-gyűrűket tartalmazó termék. Ennek az IR-adatok alapján feltételezett szerkezetét később preparatív vizsgálatok igazolták. A termék spektrumában a lakton-karbonil sáv a várt frekvenciatartományban 1778, illetve 1775 cm^{-1} -nél jelentkezik, s ugyancsak azonosíthatók a monoszubsztituált fenil csoportokat és a triazolgyűrűt jellemző sávok. [49]



A sors úgy hozta, hogy első ösztöndíjas utamat negyed század múltán mindössze még egy követte, s az is Bonnba vezetett (vendégprofesszorként töltöttem egy hónapot a Kekulé Intézetben). Magam helyett viszont több tucat fiatalabb munkatársamat juttattam hozzá külföldi tanulmányúthoz, legtöbbjüket éppen a bonni egyetemre.

23. Egy új heterociklus szintézise: IR-anomália, értelmezése és krisztallográfiai igazolása

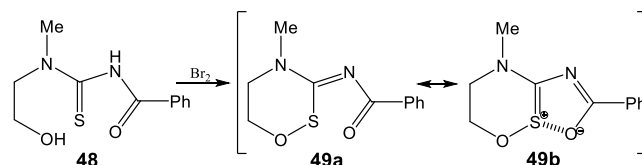
„Együttműködve sokkal messzebbre jutunk, mint külön bárki is eljuthatna.”
(Voltaire)

A hidantoinok dezmotrópiája témában az IR-spektroszkópiái és a krisztallográfiai vizsgálatok sikeres együttes alkalmazása nem maradt folytatás nélkül. Évekkel később egy új, addig nem leírt heterogyűrűs, 1,2,4-oxatiazin-vázis vegyület szerkezetigazolása tette szükségessé a két mérési módszer együttes alkalmazását. [52]

A **48** vegyület bróm hatására bekövetkező oxidatív gyűrűzárásával előállított **49** molekula IR-spektrumában az 1600–1800 cm^{-1} -es tartományban nem volt elnyelési maximum, ahol a karbonilcsoport $\nu\text{C=O}$ sávjának megjelenése volt várható. Ezt egy erős $\text{S}\cdots\text{O}$ nem kötő kölcsönhatással értelmeztem, ami a CO-kötésrend mezomer **49a** és **49b** határszerkezetekkel szemléltethető gyengülésével, s vele a $\nu\text{C=O}$ IR-frekvencia csökkenésével jár.

A **49** molekula röntgendiffrakciós vizsgálata feltevésemet egyértelműen bizonyította. Az $\text{O}\cdots\text{S}$ atomtávolság a van der Waals sugarak összegénél (3,25 Å) jóval kisebbnek

(2.255 Å) bizonyult, míg a CO kötéshosszat jelentősen nagyobbak (1.247 Å) jelezte a mérés a szokásosnál.



Ez a vizsgálat elmélyítette és intenzívebbé tette a Kálmán Alajos professzor és közöttem megindult együttműködést, ami később több tucat közös publikációban öltött testet.

24. „TTT” kutatási együttműködések

„Csak együtt lehet nagy dolgokat véghezvinni.”
(Demokritosz)

Jó sorsom úgy hozta, hogy szakmai pályafutásom kezdetétől munkahelyemen kívül is, mint spektroszkópus, illetve szerkezetkutató specialista igen sok együttműködés résztvevőjévé váltam. Botsinálta műszerszakértőként már a kezdet kezdetén kapcsolatba kerültem a JATE Fizikai Kémiai Intézete és a Richter gyár munkatársaival, az ELTE vendégkutatójaként az egyetem oktatóival és közvetítésükkel a BME, a KOKI és a JATE Szerves Kémiai Tanszéke kutatóival.

A BME-n a Mérnöktovábbképzőn és a speciálkollégiumon tartott előadásaim, s az előbbihez írott jegyzet, valamint az MTA Sztereokémiai Kutatócsoportjánál tartott IR-kurzus, az MTA Műszerügyi Szolgálatnál mellékállásban eltöltött év mind-mind bővítették együttműködői köröm. Legfőként azonban a Holly Sándorral írott IR-monográfia [7] növelte ismertségem. További szakmai kapcsolatot eredményezett, hogy Toldy Lajos, a GYKI kutatási igazgatója többször megkért intézeti és intézeten kívüli kollégák segítségére akadémiai értekezéseik megírásában. Ez nemcsak a fogalmazásbeli javításokat jelentette, de a disszertációk felépítéséhez, szerkesztéséhez is tanácsokat kellett adnom. Részt vettem a szakmai hibák felfedezésében, korrekciójában, javaslatokat tettem bizonyítások, értelmezések hiányosságainak pótlására, esetleges kiegészítő kísérleti munkák elvégzésére, stb. Mindez aztán a későbbiekben szakmai együttműködések kiinduló pontjává vált.

Sok kollégát fogadtam munkahelyemen hosszabb-rövidebb tanulmányutak keretében, akik az IR-spektroszkópia szerkezetkutatói alkalmazásainak lehetőségeit megismerni, a módszer mérés-technikai és elméleti ismereteit elsajátítani jöttek hozzám. Ezek a tanulmányutak is szakmai együttműködésekhez vezettek. Így aztán szinte valamennyi hazai, kémiával foglalkozó intézménnyel közös kutatásaim jöttek létre.

Mivel a hazai műszerezettség hosszú időn át igen elmaradott volt, és részben ezzel is összefüggésben nagy volt a hi-

ány az IR-szakértőket illetően is, valóságos egyszemélyes hazai intézmény lettem az IR-spektroszkópia terén. Csupán a KKKI-ban és a veszprémi MÁFKI-ban folyt az 1960-as években IR-kutatás, s így ezek a kutatóhelyek monopolhelyzetben voltak e téren. Jómagam missziónak tekintetem, hogy a műszerek és szakemberek hiányában hátrányosabb körülmények között dolgozó kutatótársaim munkáját segítsem.

Az együttműködéseket azonban nem mindig támogatta munkahelyem vezetése. Vargha László akadémikus, a GYKI nagytekintélyű, bölcs és emberi tulajdonságaiban is kiváló igazgatója, látván hogy intézeti feladataim maradéktalanul ellátom, mindenben támogatta, sőt bátorította is szakmai kooperációimat. Az ő nyugdíjba vonulása után azonban beköszöntött a „TTT-korszak”. Így jellemezhetem az akkori kulturális élet hírheft irányítási elvére hajazó vezetői hozzáállást intézetem kívüli kapcsolataimhoz. TTT, azaz támogatott < túrt < tiltott: e három kategóriába sorolhatom ezeket. (A < jel a kategóriákba sorolt esetek számára utal.)

Legszorosabb, legtartósabb és időszakonként részfoglalkozású szerződésekkel legalizált együttműködéseim a SZOTE Gyógyszerkémiai Intézetével, a Növényvédelmi Kutatóintézetével és az EGYT-vel voltak, ahol témavezető partnereim Bernáth Gábor professzor, Matolcsi György és Pallos László professzor voltak. A legtöbb, több száz vizsgálatot a BME Szerves Kémiai Tanszékének, Lempert Károly akadémikusnak, valamint kedves barátom, a bonni Friedrich Wilhelms Egyetem szerves kémikus professzora, Heinrich Wamhoff kutatócsoportjának végeztem. Csupán néhányat felsorolva a rendszeresen IR-vizsgálatokért és szakértelemért hozzám fordulók közül, részt vettem Deák Gyula (KOKI), Hideg Kálmán (POTE), Messmer András (KKKI) professzorok, Szántay Csaba akadémikus és természetesen az ELTE Szerves Kémia Tanszék több oktatójának a kutatómunkájában is.

A Bernáth professzor vezette SZOTE-együttműködés 1970-ben kezdődött, de egy évtizeden át csupán alkalmi jelleggel, és intenzívvé az 1980-as években vált, amikor az IR-spektroszkópia kutatómunkámban már háttérbe szorult és az NMR vette át a főszerepet.

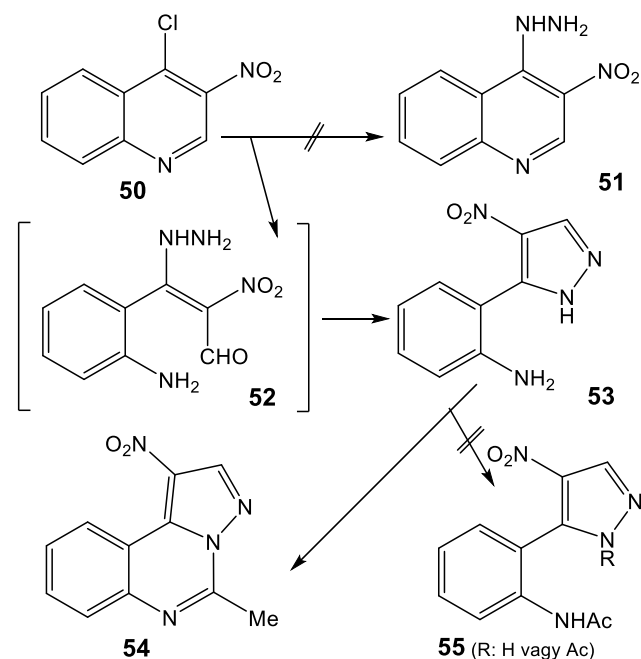
A GYKI-n kívüli közös kutatásaim közül a kivételesen „támogatott” esetek közé tartozik az EGYT-vel, későbbi munkahelyemmel folyó együttműködés. Kezdeményezője majdani EGYT-beli főnököm és kedves barátom, Pallos László professzor, a gyár akkori osztályvezetője, későbbi kutatási igazgatója volt. Azért is választottam ezt a vizsgálatot a jelen írásban bemutatottak közé, mert egyike volt számos „elvetélt” kutatási eredményemnek, amelyet iparjogvédelmi okokból a vizsgálatok elvégzésének idején nem publikálhattunk. (Hasonló okokból jó néhány érdekes és értékes kutatási eredményem maradt örökre az asztalfiókban.) Kivételesen, ugyan csak jóval később, és csak magyar

nyelven csupán egy részlete látott napvilágot ennek a munkánkknak. [26]

A 3-klór-4-nitro-kinolin (50) hidrazinos reakciója várt termékének kémiai tulajdonságai és elemanalízis adatai nem voltak összeegyeztethetők a várt szerkezettel (51). A termék IR-spektruma alapján kellett kideríteni szerkezetét. Segítségül megkaptam a végtermék cetsavanhidriddel készített származékát is.

Az ismeretlen spektrumában megjelentek a nitro- és amino-csoportok és az orto-diszubsztituált benzolgyűrű sávjai: $\nu_{\text{as}}\text{NO}_2$: 1510 cm^{-1} , $\nu_{\text{s}}\text{NO}_2$: 1320 cm^{-1} ; $\nu_{\text{as}}\text{NH}_2$: 3350 cm^{-1} , $\nu_{\text{s}}\text{NH}_2$: 3250 cm^{-1} ; $\gamma_{\text{C}_{\text{Ar}}\text{H}}$: 765-760 cm^{-1} , de a νNH sáv szerkezete és frekvenciája (részmaximumokkal tagolt, diffúz elnyelés a 3600-2200 cm^{-1} -es intervallumban) nem a hidrazinokra jellemző. Ilyen sávjuk pl. az imidazoloknak és pirazoloknak van. [7Aa] Fentiek alapján feltételeztem, hogy az 52 intermediereken át az 53 vegyület keletkezett.

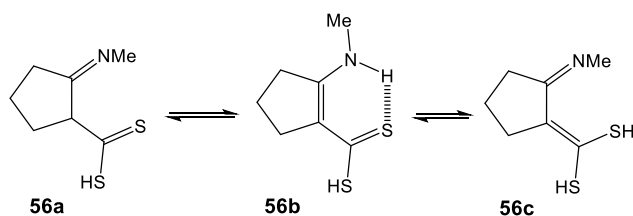
A feltételezett 53 szerkezet alátámasztásul készült acilezett termék nem a várt mono- vagy diacetil-vegyület (55), hanem előbbi gyűrűzárt származéka (54). Ezt a νNH és amid-sávok hiánya igazolja. Megjelenik viszont a spektrumban a $\nu\text{C}=\text{N}$ sáv 1625 cm^{-1} -nél. A háromgyűrűs vázú molekula igazolja a feltételezett 53 szerkezetet.



A Növényvédelmi Kutatóintézet (NÖVIKI) negyedszázadon át voltam szakmai kapcsolatban, szakértői szerződések keretében. Az együttműködés kezdeményezője Matolcsy György volt, akivel „nemzetközi közvetítésen át” kerültem szakmai partnerségbe: Matolcsy a bonni egyetemen ösztöndíjasként ismerkedett meg Wamhoff professzorral, s Matolcsy az ő javaslatára fordult hozzám szerkezetkutatási problémáival.

A NÖVIKI-vel közös kutatásaink egyik témája gombaelles növényvédőszeres szintézise volt. Az e célból előállított új vegyületek között olyan molekulák is voltak, amelynek szerkezetigazolása során előfordultak kedvenc elméleti kutatási területemre eső problémák, pl. kelát-szerkezetek és tautomer rendszerek.

Az **56** molekula pl. három (**56a**, **b**, **c**) tautomer formában létezhet, s az **56b** és **56c** tautomerekben kelát-típusú asszociáció alakulhat ki. Az IR-spektrumban nincs νNH sáv, s ez az **a** vagy **c** izomerek mellett szólna, de a **b** tautomerben hattagú gyűrűs, folytonosan konjugált kelátgyűrűs szerkezet ($\text{N-H}\cdots\text{S=}$ szerkezetű H-híd) lehetséges, amelynél a νNH elnyelés nem azonosítható (beleolvad az alapzajba) [7Ab], s így az IR adatokból nem derül ki egyértelműen a tautomer szerkezet. Az $1650\text{--}1350\text{ cm}^{-1}$ között megjelenő három sáv csoportrezgés jellegét a deuterált származék spektruma igazolja. Ha ezek valamelyike tiszta βNH sáv volna ui., akkor a megfigyeltnél jóval nagyobb frekvenciacsökkenés következne be ezek egyikénél (az 1610 , 1510 és 1360 cm^{-1} -es sávok mért frekvenciacsökkenése 30 , 50 , illetve 5 cm^{-1}). A csoportrezgések az **56a** tautomerben nem valószínűek, **56c** esetén pedig nem várható 30 és 50 cm^{-1} mértékű frekvenciaváltozás. (A βSH rezgések frekvenciája jóval kisebb, mint a βNH analógé, s ezért ennek részvétele a csoportrezgésekben nem lehetséges.) Az **56b** szerkezetet végül az ^1H NMR adatok igazolták, egyebek között a kelátokra jellemzően nagy δNH eltolódás (12.4 ppm) jelentkezésével. Ilyen nagy eltolódásnál SH-jel nem lehetséges. Az e vizsgálatainkról írott közlemény [53] igen nagy visszhangra talált (a független hivatkozások száma >170), s fél évszázad múltán is hivatkoznak rá.



25. Az első magyar IR-monográfia

„A jó alkotást sem idő, sem más művek nem feledtetik”

A 14. pontban leírtam, mint került sor – számomra teljesen váratlanul – részvételemre a BME Mérnöktoábbképző Intézetének tanfolyamához segédanyagként szánt jegyzet megírásában. A történet kisvártatva – részben azonos szereplőkkel – megismétlődött. A Műszaki Kiadó eleget teendő a kor követelményeinek (ti. hogy az 1960-as évtized első felében az infravörös spektroszkópia népszerűsége rohamos növekedésnek indult, és alkalmazásának robbanásszerű elterjedése következett be a hazai kémiai kutatómunkában), magyar nyelvű szakkönyv, egy IR-monográfia megírására szerződött a Bor György-Holly Sándor szerzőpárossal.

A lejáró határidőkkel visszatérően reménytelen csatákat vívó, egyébként azonban kiemelkedő szakértelmű és sikeres

kutatómunkát végző IR specialista Holly egy hasonló habitusú, szakmailag kiváló, de bohém természetű és a terminusok betartásával szintén hadilábon álló szerzőtársat kapott Bor György személyében. (Bor György volt, Varsányi György mellett, az IR-módszer hazai úttörője és első kémiai kutatásbeli gyakorlati alkalmazója Magyarországon.) Így aztán, hasonlóan a 14. pontban említett jegyzet esetéhez, a könyv kézírata sem készült el, többszöri határidőmódosítást követően sem. A Kiadó végül szerződésbontást helyezett kilátásba, és mivel Bor véglegesen visszalépett a kézirat megírásától, engem kértek fel, hogy vállaljam helyette a társszerzőséget. Vállaltam! A szakmai pályafutása elején lévő, fiatal szakember számára a könyvírás ui. igen kecsegtető lehetőséget kínált a tudományos közéletbeli ismertség és megbecsültség elnyeréséhez. Meglehet, ha tudtam volna, milyen nehézségek árán készül el a mű, nem biztos, hogy vállalkoztam volna a feladatra.

Társszerzőmmel abban állapodtunk meg, hogy a kézirat megírását fele-fele arányban vállaljuk. Az elméleti, kvantummechanikai alapokat tárgyaló részt én, a műszerek szerkezetét, működését és a mérés technikai ismereteket tartalmazót Sándor írja. A csoportfrekvenciákról, funkciós csoportok IR-jellemzőiről szóló fejezetek és a példatár megírást nagyjából azonos terjedelemben, megosztva vállaltuk.

Az 1960-as évtized közepe életem egyik legmozgalmasabb, legeseménydúsabb korszaka volt. Ezekre az évekre esett – egyebek között – költözésem az ELTE-ről a GYKI nemrég elkészült újpesti telephelyére, ott az IR labor berendezése, a munka megszervezése, új munkatársak betanítása, kandidátusi értekezésem megírása és védelme, a fokozat elnyerésének feltételül szabott két nyelvvizsga letétele és második és harmadik gyermekünk születése. Ezekhez csatlakozott az IR-monográfia megírása.

A könyvírás sok egyéb teendőm mellett is igen gyors ütemben, könnyen ment. Igaz ugyan, hogy napi tíz-tizenkét órát dolgoztam, beleértve a hétvégeket is. Az otthoni, gyerekek és háztartás körüli minden feladatot feleségem vállalta át, biztosítva számomra a nyugodt, zavartalan munkahelyi és otthoni munkát, s a szeretetteljes, gondoskodó családi légkört. A könyvírás igen jelentősen megkönnyítették számomra a BME-jegyzet és az egyetemi, valamint a Sztereokémiai Kutatócsoportnál tartott előadásokhoz írott vázlatok.

A könyv általam megírandó része határidő előtt elkészült, s csak a kézirat legépelése volt hátra. Kiderült azonban, hogy társszerzőm az ő részének csupán töredékét írta meg, és kilátástalan volt, hogy a maradékkal határidőre elkészülhessen. Terminusmódosítást kértünk, s kaptunk, de annak elteltével is reménytelen maradt a kézirat teljessé tétele belátható időn belül.

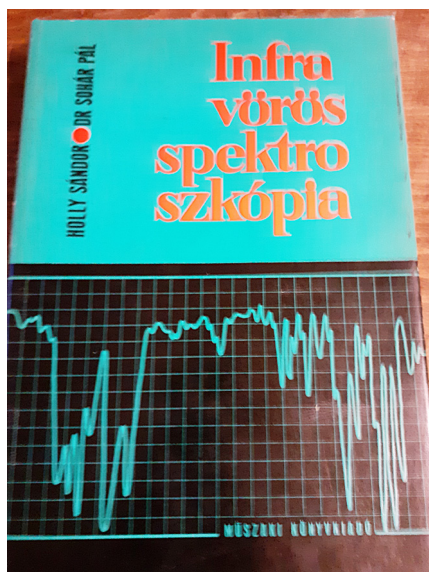
Társszerzőm ekkor arra kért, hogy a különböző funkciós csoportok IR-jellemzőiről általa megírandó pontok közül vállaljak át egyet. Ezt a kérését aztán többször is megismételte, de hiába írtam meg az eredetileg általa vállalt pontot-

kat, a neki maradtakkal még mindig késésben volt. Ekkor a példatár fele-fele arányát kérte társszerzőm módosítani. Az átvállalt könyvrészek megírásáért cserében Sándor felajánlotta, hogy technikuskője legépeli az én kéziratomat. Számomra ez nagy segítség volt, mert megtakaríthattam a gépelés rengeteg időt rabló, s igen terhes, monoton, idegölő „rabszolgamunkáját”. Az „alku” létrejött és a KKKI IR-laborjának technikuskője, becenevén „Masuka” heti két napon megjelent Újpesten és felügyelettemmel legépelte a leendő könyv kéziratának általam megírt részét. (Természetesen akkor még nem voltak számítógépek, sőt elektromos írógépek sem, s egy régi ütött-kopott masinán kellett dolgoznia, az elírásokat, mellélütéseket festékekkel javítani, gyakran teljes oldalakat újra gépelni.)

Keserves, fáradságos munka volt a kézirat legépelése! Sok bosszúsággal járt, de igyekeztünk a dolgokat, ahol lehetett, humoros oldalukról szemlélve elviselhetőbbé tenni.

Egy ilyen esetet feleleveníték itt: az IR-elméletben fontos szerepe van a „term”-eknek (hullámszám-dimenziójú $[\text{cm}^{-1}]$, a kvantumállapotokat jellemző mennyiségek). A term kifejezés gyakran előfordul könyvünk elméleti fejezetében. Masuka nem ismerte ezt a szakkifejezést és többes számú előfordulásait (termek) *termékre* „helyesbítette”. Mire észrevettem a hibát, már több tucatszor előfordult. Ezeket megtalálni és javítani fáradságos és főként bosszantó dolog volt. Több hasonló javítanivaló is akadt, ami sok időt rabolt, de végül elkészült a teljes nyomdakész kézirat. A nyomdai korrektúrákra ráment évi szabadságom is (az utolsó Balatonlellén, nyaralás közben került sor).

A könyv [7] máig versenytárs nélküli magyar IR-monográfia (11. ábra), amelyből több generáció fiatal szakemberei ismerkedtek meg eme nélkülözhetetlen szerkezetkutatási nagyműszeres módszer alapvető tudnivalóival, s amelyet a kémiai szerkezetigazolás területén tevékenykedő kutatók ma is alpműként használnak.

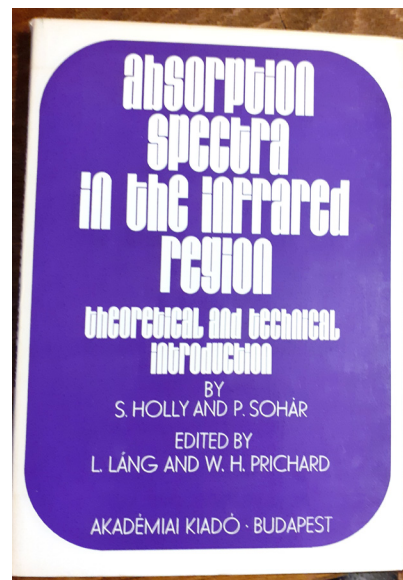


11. ábra. Holly-Sohár Infravörös spektroszkópia

IR-könyvünk születéstörténete nem zárult le a magyar nyelvű megjelenéssel. Már a megírására a Műszaki Kiadóval kötött szerződésben is szerepelt idegen nyelvű kiadásának lehetősége, illetve terve. Az akkori rendelkezések értelmében magyar szerzők műveinek idegen nyelvű kiadására kizárólag az Akadémiai Kiadó volt jogosult, s könyvünk esetében erre igényt is tartott. A könyv megjelenését követően hamarosan megindultak a tárgyalások külföldi kiadókkal a német és angol nyelvű megjelentetésről.

A német kiadást egy NDK kiadóval (névére nem emlékszem már) közösen tervezte az Akadémiai Kiadó. A szerződés létrejött, és elkészült a német nyelvű fordítás is (a fordító, s egyben lektor, egy Malewsky nevű szakember volt). A német változat azonban végül mégsem látott napvilágot: hosszas alkudozások következtek a német kiadó és az Akadémiai Kiadó között a terjesztési jogokról, és nem sikerült megállapodniuk. A közös kiadás terve végül meghiúsult.

Az angol nyelvű kiadás sem volt zökkenőmentes! Több potenciális partnerrel sem sikerült megállapodnia az Akadémiai Kiadónak, bár – ha jól emlékszem a Hilger céggel – már az átdolgozás részleteiről (lényegében a magyar változat alapos tömörítéséről) is közös nevezőre jutott a magyar fél. Végül az Akadémiai Kiadó önállóan, a Láng László szerkesztette „Absorption Spectra in the Infrared Region” sorozatának bevezető köteteként (12. ábra) jelentette meg a könyvet, de a tervezett közös kiadás számára átdolgozott formában. (Így lett H. Prichard is, akit a Hilger a könyv lerövidítésére vonatkozó javaslatával bízott meg, a kötet másik társszerkesztője.)



12. ábra. Az IR könyv angolnyelvű kiadása

Ha már szóba került a Láng László szerkesztette, s az Akadémiai Kiadó gondozásában közreadott IR-atlasz, erről annyit érdemes megjegyezni, hogy 1974 és 1980 között öt kötete jelent meg, „kollaborátorként” Holly Sándor és jó-

magam közreműködésével és mintegy 1500 kettőnk által mért spektrumot tartalmazott. A számítógépes adatbankok korszakát megelőzően több ilyen atlasz került forgalomba, főként az IR spektrométereket gyártó cégek (pl. Hilger, Perkin-Elmer) szerkesztésében, és nagy segítséget jelentettek az IR-szerkeztfelderítésekkel foglalkozó kutatók számára.

IR-könyvünk idegen nyelvű megjelentetésének ügyeit az Akadémiai Kiadó nagytekintélyű és nagyhatalmú főosztályvezetője, bizonyos Róthné intézte, illetve felügyelte, akivel sorozatos heves vitákba bonyolódunk a legkülönbözőbb, többnyire nem túl lényeges formai, esztétikai, szerkesztési (pl. a kihagyandó vagy rövidítendő részek, táblázatok, ábrák, képletek mérete, elhelyezése, elrendezése, stb.) kérdések kapcsán. Sándorral magunk között csak „Infrarótné”-ként emlegettük a harcias, ellentmondást nem tűrő amazont.

A kiadás [7A] hosszan tartó sikert ért meg: megjelenése után közel fél évszázaddal, máig gyakran hivatkoznak rá, az azóta forgalomba került sok tucat rivális kiadvány és a módszert illetően a tudományterületi ismeretek és a mérés-technika robbanásszerű fejlődése ellenére is.

Az NMR spektroszkópia az 1960-as évek második felétől kezdődően egyre inkább kutatómunkám fő eszközévé vált, háttérbe szorítva az IR-vizsgálatokat, de azért nem lettem hűtlen „első szerelmemhez”, az infravörös spektroszkópiához sem: az IR-spektrumok értelmezése továbbra is megmaradt mint a szerkeztfelderítés első lépése, és továbbra is gyakran a szerkeztbizonyítás perdöntő információforrásának bizonyult.

Irodalom

- Sohár P.: 100 éve született Varsányi György. *Magyar Kémikusok Lapja*, **76**(9), 262-264 (2021). <https://doi.org/10.12946/rg29/262-264>
- Sohár P.: *Elveimhez híven, konokul*. Lexica kiadó, 104 (2016).
- Sohár P.: *A triacetil-levoglükózán titánetetrakloridos komplexeinek előállítása és infravörös spektroszkópiai vizsgálata*. (Diplomamunka, BME, 1959).
- Pictet, A., Castan, P., *Helv. Chim. Acta*, **3**(1), 645-652 (1920) <https://doi.org/10.1002/hlca.19200030160>
- Jones, R. N., Sándorfy, C.: *Infrared and Raman spectroscopy to the elucidation of molecular structure*. In: Weissberger, A.: *Chemical applications of spectroscopy*. Interscience, New York (1956).
- Körmendy, K., Sohár, P. und J. Volford, J.: *Ann. Univ. Sci. (Budapest, Eötvös Univ.)*, 61-88 (1962).
- Holly S., Sohár P.: Infravörös spektroszkópia. Műszaki Kiadó, Budapest, 1968. a) 183-184; b) 208-209; c) melléklet 57; d) pp. 188-189; e) 80; f) 77; 7A. Holly, S., Sohár, P.: Absorption spectra in the infrared region. Theoretical and technical introduction. (Szerk.: Láng, L., and Prichard, W. H.). Akadémiai Kiadó, Budapest (1975). p. a)132; b) 92-93
- Bergmann, E. D., Gil-Av, E., Pinchas, S.: *J. Amer. Chem. Soc.*, **75**, 358 (1953). <https://doi.org/10.1021/ja01098a031>
- Körmendy, K., Sohár, P., Pfisztner-Freud, A., Ruff, F.: *Acta Chim. Hung.*, **60**, 151-161 (1969).
- Sohár P.: Néhány szteroid infravörös spektrumának értelmezése. MTA Spektroszkópiai Albizottság, Budapest, BME, 1962. III. 1.
- Sohár P.: Cukoralkoholok konfigurációjának és gyűrűtagszámának meghatározása, asszociációs viszonyaik vizsgálata IR szinképek alapján. MTA Spektroszkópiai Albizottság, Budapest, BME, 1962. X. 4.
- Sohár, P., Vargha, L. and Kasztreiner, E.: *Tetrahedron*, **20**, 647-653 (1964). [https://doi.org/10.1016/S0040-4020\(01\)98627-2](https://doi.org/10.1016/S0040-4020(01)98627-2)
- Schay, G., Varsányi, Gy., Dullien, F.: *Acta Chim. Hung.*, **15**, 273 (1958).
- Sohár, P., Varsányi, Gy., Vargha, L. and Ocskay, Gy.: *Acta Chim. Hung.*, **40**, 431-443 (1964).
15. Sohár, P. Vargha, L. und Kasztreiner, E.: *Ermittlung von Assoziationsverhältnissen, Konfiguration und Ringgliederzahl bei Zuckeralkoholen mit Anhidroring und ihren partiell deuterierten Derivaten auf Grund des Infrarotspektrums*. VII. European Congress on Molecular Spectroscopy, Budapest, 1963. VII. 22.-27.
- Sohár P., Varsányi Gy., Vargha L. és Ocskay Gy.: A furilketoximok asszociációs viszonyainak és acilszarmazékaik konformációjának vizsgálata az IR szinkép alapján. Vegyészkonferencia, Szeged, 1963. IX. 5.-7.
- Sohár P.: *Szerkeztvadászati spektroszkópiával a molekularenetegben*. Akadémiai székfoglaló. MTA Kémiai Tudományok Osztálya, Budapest (2001).
- K. Lempert, J. Nyitrai, P. Sohár and K. Zauer: *Tetrahedron Letters*, 2679-2684 (1964).
- K. Lempert, J. Nyitrai und P. Sohár: *Tetrahedron Letters*, 1795-1799 (1965).
- K. Lempert, J. Nyitrai, K. Zauer, A. Kálmán, Gy. Argay, A. J. M. Duisenberg and P. Sohár: *Tetrahedron*, **29**, 3565-3569 (1973). [https://doi.org/10.1016/S0040-4020\(01\)93518-5](https://doi.org/10.1016/S0040-4020(01)93518-5)
- P. Csomós, L. Fodor, A. Csámpai and P. Sohár: *Tetrahedron*, **66**, 3207-3213 (2010). <https://doi.org/10.1016/j.tet.2010.02.084>
- Kántor T., Sohár P., Holly S., Inczédy J.: Válogatott fejezetek a fizikai kémiából. (Egyetemi jegyzet. Mérnöktoábbképző Intézet). Tankönyvkiadó, Budapest, 1967.
- Cs. Szántay, L. Novák and P. Sohár: *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, **57**, 335-343 (1968).
- K. Hideg, O. Hideg-Hankovszky und P. Sohár: *Chem. Ber.*, **107**, 2079-2083 (1974). <https://doi.org/10.1002/cber.19741070629>
- Gyimesi J., Tóth G., Gimesi I., Bajusz S., Horváth M., Sohár P.: Eljárás glikolaldehid-triacetát előállítására (GO 954). Magyar szabadalom 154.155 (1967. VIII) <https://doi.org/10.1126/science.155.3765.954>
- Sohár P.: *Magyar Kémikusok Lapja*, **30**, 100-109 (1975).
- Pavlik, I. and Klikorka, J.: *Coll.*, **30**, 664 (1965). <https://doi.org/10.1135/cccl19650664>
- Fritz, H. P. und Schäfer, L.: *Z. Naturforsch.*, **19**, 169 (1964). <https://doi.org/10.1515/znb-1964-0222>
- Maitlis, P. M. und Brown, J. D.: *Z. Naturforsch.*, **20b**, 597 (1965). <https://doi.org/10.1515/znb-1965-0622>
- Sohár, P., Kuszmann, J.: *J. Mol. Structure*, **3**, 359-368 (1969). [https://doi.org/10.1016/0022-2860\(69\)87032-8](https://doi.org/10.1016/0022-2860(69)87032-8)
- Nagy, Á. G. and Sohár, P.: *J. Organomet. Chem.*, **390**, 217-225 (1990). [https://doi.org/10.1016/0022-328X\(90\)85033-U](https://doi.org/10.1016/0022-328X(90)85033-U)
- Nagy, Á. G. Sohár, P. and Márton, J.: *J. Organomet. Chem.*, **410**, 357-364 (1991). [https://doi.org/10.1016/0022-328X\(91\)83009-S](https://doi.org/10.1016/0022-328X(91)83009-S)

33. a. Sohár P.: *Szerkezetvadászat spektroszkópiával a molekularenetegben*. Akadémiai székfoglaló. MTA Kémiai Tudományok Osztálya, Budapest (2001).
b. Sohár P.: *Magyar Kémiai Folyóirat – Kémiai Közlemények*, **108**, 277-290 (2002).
34. a. Sohár P.: *Alkonyi szerkezetnyomozás. Poliheterociklusok és ferrocén-vegyületek szintézise, szerkezet-felderítése és komplex nagyműszeres vizsgálata*. Akadémiai székfoglaló. MTA Kémiai Tudományok Osztálya, Budapest (2007).
b. Sohár P.: *Magyar Kémiai Folyóirat – Kémiai Közlemények*, **113**, 62-73 (2007).
35. Sohár, P. and Varsányi, G.: *Spectrochim. Acta*, **23A**, 1947-1948 (1967).
[https://doi.org/10.1016/0584-8539\(67\)80079-5](https://doi.org/10.1016/0584-8539(67)80079-5)
36. Sohár, P. and Varsányi, G.: *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, **55**, 189-201 (1968).
37. Sohár, P.: *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, **57**, 425-444 (1968).
38. Mecke, R., Spiesecke, H., *Chem. Ber.* **88**, 1997 (1955).
<https://doi.org/10.1002/cber.19550881231>
39. Landa, S., Hala, S., *Coll. Czech. Chem. Comm.*, **25**, 2692 (1960).
<https://doi.org/10.1135/cccc19602692>
40. P. Sohár, Z. Zubovics and Gy. Varsányi: *Magyar Kémiai Folyóirat*, **75**, 432-440 (1969).
41. P. Sohár, Z. Zubovics and Gy. Varsányi: *Adamantene-Part II: Spectroscopic study* (In „Molecular Structures and Vibrations”. Ed. S. J. Cyvin, (ld. FI). Elsevier, Amsterdam, 358-362 (1972).
42. P. Sohár, J. Kuszmann and A. Néder: *Tetrahedron*, **42**, 2523-2532 (1986).
[https://doi.org/10.1016/0040-4020\(86\)80017-5](https://doi.org/10.1016/0040-4020(86)80017-5)
43. P. Sohár and Gy. Varsányi: *J. Mol. Structure*, **1**, 437-448 (1968).
[https://doi.org/10.1016/0022-2860\(68\)87018-8](https://doi.org/10.1016/0022-2860(68)87018-8)
44. P. Sohár and Gy. Varsányi: *Infrared spectra of muconate-isomers*. IX. ECMS (European Congress on Molecular Spectroscopy), Madrid (Spanyolország), 1967. IX. 10.-15.
45. Varsányi G.: *Vibrational spectra of benzene derivatives*. Academic Press, New York (1969).
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-714950-9.50007-7>
46. Gy. Varsányi and P. Sohár: Infrared spectra of 1,2,3,5-tetrasubstituted benzene derivatives, I. *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, **74**, 315-333 (1972).
<https://doi.org/10.1002/lipi.19720740516>
47. Gy. Varsányi and P. Sohár: Infrared spectra of 1,2,3,5-tetrasubstituted benzene derivatives, II. *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.*, **76**, 243-268 (1973).
48. Wamhoff, H., Dürbeck, H. W. und Sohár, P.: *Tetrahedron*, **27**, 5873-5891 (1971).
[https://doi.org/10.1016/S0040-4020\(01\)91752-1](https://doi.org/10.1016/S0040-4020(01)91752-1)
49. H. Wamhoff und P. Sohár: *Chem. Ber.*, **104**, 3510-3518 (1971).
50. Szilágyi, G. Sohár, P. und Wamhoff, H.: *Synthesis*, 698-700 (1980).
51. Dudek, G. O., *J. Org. Chem.*, **30**, 548 (1965).
<https://doi.org/10.1021/jo01013a061>
52. Sólyom, S. Sohár, P. Toldy, L., A. Kálmán, A., Párkányi, L.: *Tetrahedron Letters*, 4245-4248 (1977).
53. Bordás, B. Sohár, P. Matolcsy, Gy. and Berencsi, P.: *J. Org. Chem.*, **37**, 1727-1730 (1972).
<https://doi.org/10.1021/jo00976a011>