

A Magyar Kémikusok Egyesülete Komplexkémiái Szakcsoportja 1978. június 12. és 14. között Pécsen rendezte meg a XIII. Komplexkémiái Kollokviumot. A Kollokviumon, amelyen elsősorban a különböző egyetemekről és kutatóintézetekből több, mint 70-en vettek részt 23 sajtó kutatásról beszámoló előadás hangzott el.

A Kollokviumot a Magyar Kémikusok Egyesülete helyi csoportjának nevében, annak vezetője *Szabó Dezső* egyetemi tanár köszöntötte, majd *Körös Endre* a szakcsoport vezetője értékelte az előző évi kollokviumot és megnyitotta a tudományos tanácskozást.

Az előadások a komplexkémia igen széles spektrumát fogták át.

Bán Miklós, Császár József és Révész Márta (JATE) beszámolt azokról az eredményekről, amelyeket néhány réz(II)-komplex molekula- és elektronszerkezeti vizsgálata során kaptak. A reflexió- és egykristályszínképek a magnetokémiai és ESR-vizsgálatok adataival együtt lehetővé teszik, hogy a molekula-geometriára, az elektron alapállapotra és az energiaszintek sorrendjére feltevéseket tegyünk. A kísérleti adatokból nyerhető ilyen jellegű információkat kvantumkémiái számításokból levont következtetésekkel egészítették ki és ilyen alapon valószínűsítették néhány réz(II)-kelátkomplex térszerkezetét.

Több előadás foglalkozott kinetikai kérdésekkel. *Záhonyiné Budó Éva, Németh Sándor és Simándi László* (KKKI) a propilén és a diperoxo-molibdén(VI) közötti reakciót vizsgálták. A mechanizmus felderítése céljából kinetikai méréseket végeztek oxigénfogyás alapján. Az autokatalitikus jelleget mutató kinetikai görbék, valamint a termékanalízis alapján valószínűsítették, hogy az oxidáció közti terméke a propilén-oxid. A réz (I)-dimetil-glioxim rendszer molekularis oxigénnel való reakciójáról *Szeverényi Zoltán, Németh Sándor és Simándi László* (KKKI) számolt be. Megállapították, hogy réz(I)-ionokat és dimetil-glioximot tartalmazó metanolos oldat számottevő mennyiségű oxigéngáz jelez. A felvett oxigén mennyisége függ a réz(I)-dimetil-glioxim aránytól és az oldat lúgkoncentrációjától. Piridin gátlólag hat az oxigénfelvételre. Feltehetően, hogy nemcsak a réz(I)-ion, hanem a dimetil-glioxim is oxidálódik.

Jáky Miklós, Szeverényi Zoltán és Simándi László (KKKI) a maleátopenantammin-kobalt(III) komplex permanganátos oxidációját tanulmányozva megállapították, hogy a redoxi reakció során a kobalt(III) indukált reakciója is lejátszódik. A reakció mechanizmusát összehasonlították a maleinsav hasonló körülmények között lejátszódó oxidációjának mechanizmusával.

Orbán Miklós és Körös Endre (ELTE) az oszcilláló kémiai reakciók egy új típusáról, a nem katalizált oszcilláló reakciókról számoltak be. Számos egyszerű aromás vegyület (elsősorban fenol és anilin, és ezek származékai) savas közegben bromáttal való oxidációja során kémiai oszcilláció lép fel, amely potenciál- és bromidion-koncentráció oszcillációban nyilvánul meg. Ismertették a reakciómechanizmusra vonatkozó elképzeléseiket is.

Néhány előadás a komplexegyensúlyok vizsgálata terén elért legújabb eredményekről adott tájékoztatást. „A polifunkciós bioligandumok egyensúlyi protonálódásának elméleti és gyakorlati kérdései” címmel *Noszál Béla és Burger Kálmán* (ELTE) összefoglalták az e téren végzett kutatásaik eredményeit. Eljárást dolgoztak ki, melynek felhasználásával ismeretlen másodlagos szerkezetű makromolekulájú polipeptidek esetén is, (ahol a mikrokonstansok meghatározására módszer nem ismeretes) a funkciócsoportokat és hidrogénkötéses csoportpárokat jellemző protonálódási állandók értéke és a hidrogénhidak száma egyidejűleg megkapható. *Debreceni Ferenc, Nagypál István, Far-*

kas Etelka és Gergely Arthur (KLTE), a réz(II)-glicin rendszerben lejátszódó ligandum és protoncsere folyamatokat tanulmányozták a víz protonok transzverz relaxációs idejének mérésével. A kapott ligandumcsere sebességi állandók és paramágneses relaxációs idők révén felvilágosítást nyertek a harmadik glicin axiális asszociációjának, valamint a CuG_3 komplex Jahn-Teller inverziójának sebességéről. — Ugyancsak a réz(II) komplexkémiájával volt kapcsolatos *Harman Béla, Sívágó Imre és Gergely Arthur* (KLTE) előadása. Ismertették azokat a tényezőket, amelyek a réz(II)-ion és kéntartalmú aminosavak közötti komplexképződési reakciókat befolyásolják. — *Zékány László, Páka Imre és Nagypál István* (KLTE) az egyensúlyi kémiai számításokban alkalmazott differenciálhányadosok analitikus meghatározását ismertették. — *Paál Tamás* (Chinoin) beszámolt azokról az eredményekről, amelyeket a ciszvicinális glikol-halohidrinek bromátkomplexeinek egyensúlyi vizsgálata terén ért el. — *Márton Attila, Glück Á., Kőmives Tamás és Dutka Ferenc* (KKKI, KLTE) nitrogénmetánban, mint oldószerben lejátszódó sav-bázis kölcsönhatásokkal foglalkoztak előadásukban.

Brücher Ernő és munkatársai (KLTE) a ritkaföld-fémek komplexkémiája terén elért legújabb eredményekről számoltak be.

Országh István (KLTE) a megfelelő oldatok elvének általánosításáról tartott előadást. A megfelelő oldatok elvét kiterjesztette protonált komplexeket és vegyes ligandumú komplexeket tartalmazó rendszerekre is. *Cs. Porzolt Éva és Somorai Tamás* (KLTE) beszámoltak azokról a kutatási eredményekről, amelyek segítségével magyarázatot tudtak adni a $\text{Fe(II)}(\text{bip})_2(\text{CN})_2$ látható spektruma maximumának a szokásosnál lényegesen nagyobb mértékű oldószerfüggésére.

A paramágneses ionasszociátumok $^1\text{H-NMR}$ és Mössbauer vizsgálatában elért eredményekről tartott előadást *Vincze László és Papp Sándor* (VVE). A mérési adatok alapján az ionasszociátumokra a viszonyokat megfelelően leíró modellt szerkesztettek.

A fémorganikus vegyületek kutatása terén jelentős tudományos tevékenységet kifejtő kutatógárda — a Veszprémi Vegyipari Egyetem Szerves Kémiai Tanszéke — számos új eredmény bemutatásával jelentkezett. *Markó László, Nagyné Magos Zsuzsanna, Kvintovics Pál és Heil Bálint* királis ródiium karboxilátó komplexek előállításáról és homogén hidrogénező katalizátorként való alkalmazásukról számoltak be. — Dihalogén — acetilén 2-buten-4-olid-4-ilidén ligandumot tartalmazó kobalt-karbonilokkal való reakcióját ismertette *Horváth István Tamás, Pályi Gyula és Markó László*. — *Galamb Vilmos, Werk T. és Pályi Gyula* a karbonsavészterek stabilis kobaltkarbonil származékainak szubsztitúciós reakcióival kapcsolatos kutatásokról tartottak előadást. — *Dely J. és Speier Gábor* a foszfinok és dioxigén reakcióját vizsgálták cisz-dioxo-trisz (L-etilciszteinato) molibdén (VI) katalizátor jelenlétében, továbbá tanulmányozták a különféle foszfinok szerkezete és reaktivitása közötti összefüggéseket. — Az o-fenilén-diamin és származékainak dioxigénnel való reakcióját rézkomplexek jelenlétében *Baloghné Hergovics Éva, Bodnár György és Speier Gábor* ismertette.

Szakács Sándor, Szammer János és Göbölös Gábor (KKKI) „Alkoholok félmikro-léptékű előállítása alkáli-karbonsavszó/makrociklusos poliéter komplex lítium-alumíniumhidrides redukciója” címmel tartottak előadást. Részletesen vizsgálták különböző koronaéter komplexképzők és a kísérleti paramétereknek a reakcióra való hatását.

Papp Erzsébet és Inczedy János (VVE) arról a kutatómunkáról számoltak be, amelyet a 4-(2-piridilazo)rezorcin víz-kloroform és víz-kloroformos kvaterner am-

mónium-klorid rendszerekben való megoszlásával kapcsolatban végeztek.

A XIII. Komplexkémiai Kollokvium eredményesen szolgálta azt a célt, hogy a különböző helyeken dolgozó és komplexkémiai kutatást végző kollégák megismerhessék egymás eredményeit és személyes viták,

valamint megbeszélések kapcsán kicserélhessék gondolataikat. Igen öröndetes volt tapasztalni, hogy a komplexkémiai kutatásokba újabb kutatócsoportok kapcsolódtak be, valamint azt is, hogy nagy számban tartottak előadást fiatal kutatók.

Kőrös Endre

Beszámoló a Zeolitszimpoziumról

A Magyar Kémikusok Egyesületének Csongrád megyei Szervezete és a József Attila Tudományegyetem 1978. szeptember 11. és 14. között Szegeden, a MTE SZ Székházában rendezte meg a „Zeolitok alkalmazása a heterogén katalízisben és rokon területeken” c. szimpóziumot, az International Zeolite Association-nak (IZA), a MKE Ásványolaj és Petrolkémiai Szakosztályának, valamint a MTA Reakciókinetikai és Katalízis Munkabizottságának védnökségével.

A Szimpózium rendezőségének felhívására 80 előadás-bejelentés érkezett. Ezek közül a publikációs bizottság, előadásonként legalább két európai szakember lektori véleményére támaszkodva, összesen 43-at fogadott el. Ezen saját kutatási eredményeket ismertető előadásokon felül a rendezőség felkérésére öt neves kutató készített összefoglaló előadást a zeolitkatalízis aktuális problémaköréből. Az előadások teljes szövege „PROCEEDINGS of the SYMPOSIUM on ZEOLITES” címmel még a konferencia előtt megjelent, mint az Acta Physica et Chemica Universitatis Szegediensis 24. kötetének 1–2. füzeté.

A szimpóziumon 24 országból kb. 180-an vettek részt. A mintegy 140 külföldi résztvevő közül 30 érkezett szocialista országokból. A szimpózium hivatalos nyelve angol volt.

A konferenciát Szabó G. Lászlónak, a Csongrád megyei Tanács elnökhelyettesének üdvözlő szavai után Fejes Pál egyetemi tanár, a konferencia rendező bizottságának elnöke nyitotta meg, a MKE Csongrád megyei Szervezetének nevében. Ezt követően Schay Géza akadémikus, a konferencia tiszteletbeli elnöke mondott bevezetőt. Méltatta a zeolitok jelentőségét a heterogén katalízisben, és összefoglalta a konferencia előzményeit.

A szimpózium előadásai ülészekonként egy-egy témakörbe csoportosítva, egyetlen szekcióban folytak. Az egyes tématerületeket a felkért előadók összefoglaló előadásai vezették be, és ezt követték a hasonló témájú, eredeti előadások. Így Rabo, J. A. (Tarrytown, USA) „Zeolites in industrial catalysis” c. összefoglalója után 6 előadás hangzott el különféle zeolitokon végbemenő, iparilag is jelentős szénhidrogén reakciókról. A következő ülészekot Minavocs, K. M. akadémikus (Szovjetunió) „Reactions of isomerization, hydrogenation and dehydrogenation over zeolites containing no transition metals” c. előadása vezette be, és azt 6 referátum követte az alkáli fémionokkal helyettesített

zeolitok katalitikus tulajdonságaira vonatkozó eredményekkel. Bremer, H. (Merseburg, NDK) „Shape selective cracking of hydrocarbons over zeolite catalyst” c. áttekintését követően 3 előadás szénhidrogének krakk-áttekintését követően 3 előadás szénhidrogének krakk-reakcióival foglalkozott. További 5 előadás az üzemi katalizátorokon végbemenő alkoholreakciókról (elsősorban dehidratálásról) hangzott el. Naccache, C. (Villeurbanne, Franciaország) „Spectroscopy applied to zeolite catalysis” c. előadása után 6 referátum képviselte azokat a kutatásokat, amelyek során spektroszkópiai módszerek (IR, NMR stb.) alkalmazásával vizsgálják a szubsztrátumok, ill. a kationok mozgékonyágát különféle zeolitokban. Uytterhoeven, J. B. (Leuven, Belgium) „Metallic clusters in zeolites” címmel vezette be azt a témakört, amelyhez a zeolitok cserélhető átmeneti fémionjainak redox tulajdonságaival, valamint a fémionok (bifunkciós) katalizátorok vizsgálatával foglalkozó, további 8 előadás rendelhető. A konferencia utolsó ülészekán 7 előadás foglalkozott a zeolitokon található savas csoportok és egyéb katalitikusan aktív centrumok természetével.

Az előadásokat minden esetben élénk vita követte, ami valószínűleg annak volt köszönhető, hogy a viszonylag szűk tématerületről gyakorlatilag a világ összes érdekelt kutatóhelye képviselve volt. Az egyes ülészekok előadásainak egyetlen, központi probléma köré való csoportosítása is gyümölcsözőnek bizonyult. Ezt Whittam, T. V. (Billingham, Anglia) is nagyra értékelte zárszavában. Összefoglalásul elmondta, hogy napjainkban már nemcsak az újabb zeolitféleségek felfedezésén ill. szintetizálásán van a hangsúly, hanem a meglévők alkalmazásán is; ez a szimpózium is megmutatta, hogy a gyakorlat igen érdekes elméleti problémákat vet fel, és éppen ezért a jövőben elsősorban a már nagy vonalakban ismert jelenségek részleteinek feltárására kell törekedni.

A tudományos program mellett a kulturális rendezvények is elősegítették a Szimpózium sikerét. A kötetlen beszélgetések lehetővé tették, hogy a különböző nemzetiségű résztvevők közelebbről megismerhessék egymást. A résztvevők kísérői a változatos összeállított „hölgyprogram” keretében Szeged és környékének nevezetességeit tekintették meg. A szimpózium sikerességéhez nagymértékben hozzájárult az utolsó napon Kecskemétre és Bugacra rendezett kirándulás.

Beyer Hermann és Varga Károly