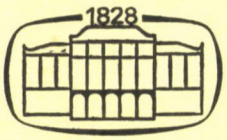


Kémiai Közlemények

56 kötet 1–2

Főszerkesztő
Beck Mihály

A Magyar
Tudományos Akadémia
Kémiai Tudományok Osztályának
Közleményei

Akadémiai Kiadó, Budapest 1981

KEKOAS 56(1–2) 1–210 (1981)

KÉMIAI KÖZLEMÉNYEK

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYÁNAK KÖZLEMÉNYEI

56. KÖTET 1—2. SZÁM

Főszerkesztő:
BECK MIHÁLY

Szerkesztő:
CSÁKVÁRI BÉLA

A szerkesztő bizottság tagjai:
HARDY GYULA, HOLLÓ JÁNOS, LENGYEL BÉLA,
PUNGOR ERNŐ, SCHAY GÉZA, SZABÓ ZOLTÁN,
SZÁNTAY CSABA, TÜDŐS FERENC, VAS KÁROLY

A Kémiai Közlemények változó terjedelmű füzetekben jelenik meg. Egy kötet általában négy füzetből áll. Évente általában két kötet kerül kiadásra.

A folyóiratban a Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Tudományok Osztályán, bizottságaiban és munkabizottságaiban, ill. akadémiai rendezvényeken elhangzott kémiai előadások, továbbá egy-egy tudományág újabb eredményeit kritikailag összefoglaló értekezések, az Osztály és bizottságai munkájáról szóló beszámolók és értékelések, egy-egy intézmény kutatómunkájáról szóló összefoglaló ismertetések, nemzetközi rendezvényekről szóló beszámolók, könyvbírálatok stb. kerülnek közlésre.

A kéziratokat a 48. kötet 277—278. oldalán közölt Tájékoztató szerint elkészítve, valamint 5—15 soros magyar és angol nyelvű összefoglalással ellátve CSÁKVÁRI BÉLA, Budapest VIII., Múzeum körút 6—8. címre (postai küldemény esetén: 1445 Bp. 8. Pf. 323) kell beküldeni.

A Kémiai Közlemények előfizetési ára kötetenként 100 forint. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó (1363 Budapest V., Alkotmány u. 21. — Pénzforgalmi jelzőszám: 215—11488), külföldi megrendelések a „Kultúra" Külkereskedelmi Vállalat (1389 Budapest I., Fő utca 32. — Pénzforgalmi jelzőszám: 218—10990) útján eszközölhetők.

KÉMIAI KÖZLEMÉNYEK

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYÁNAK KÖZLEMÉNYEI

Főszerkesztő:
BECK MIHÁLY

Szerkesztő:
CSÁKVÁRI BÉLA

A szerkesztő bizottság tagjai:
HOLLÓ JÁNOS, LENGYEL BÉLA, PUNGOR ERNŐ,
SCHAY GÉZA, SZABÓ ZOLTÁN, SZÁNTAY CSABA,
TÜDŐS FERENC, VAJTA LÁSZLÓ, VAS KÁROLY

55—56. KÖTET

AKADÉMIAI KIADÓ, BUDAPEST
1981

TARTALOMJEGYZÉK

55. kötet 1—2. szám 1981. július 13.
55. kötet 3—4. szám 1981. augusztus 19.

A fizikai-kémiai definíciók és jelölések II. Függelék. A kolloid- és felületkémiai definíciók és jelölések ... 397
A magyar kémiai elnevezés és helyesírás szabályai II. A. szerves vegyületek elnevezési szabályai. H. Módosított izotóp-összetételű vegyületek elnevezési szabályai ... 453
A magyar kémiai elnevezés és helyesírás szabályai. A szervetlen kémiában előforduló végződések ... 475
Beck M.: lásd Nagypál I.
Bjerrum, J.: Tudományos munkásságom áttekintése ... 103
Dékány I.: Természetes és módosított felületű agyagásványok elegyadszorpciós tulajdonságai ... 179
Forgács P.: Műanyagtermékek alakváltozásának hosszútávú előrejelzése ... 201
Goggin, P. L.: lásd Mink J.
Gottardi, V.: Üvegek készítése gélekből, azok jellemzése és alkalmazása ... 147
Gutmann, W., Resch, G.: A szilárd állapot dinamikus aspektusai ... 115
Gyarmati I.: lásd Lengyel S.
Joó F., Tóth Z.: Átmenetifémionok vízoldható foszfinkomplexeinek katalitikus tulajdonságai homogén vizes oldatokban, kétfázisú rendszerekben és ioncserélő hordozókon ... 353
Kelen T.: lásd Tüdős F.
Kemény G., Mink J., László L.: Az infravörös spektroszkópia speciális alkalmazásai, I. Mikro- és ultramikro mennyiségű anyagok infravörös spektroszkópiai mérése ... 299
Knor, Z.: A lokalizált szabad elektron kölcsönhatás modellje és a gázmolekulák aktiválása átmenetifémek felületén ... 81
László F.: lásd Kemény G.
Lásztity R.: A fehérjeellátás kérdései, új fehérjeforrások ... 163
Lengyel B.: Tíz éves „A kémia újabb eredményei" könyvsorozat. Az 50. kötet megjelenése alkalmából ... 277
Lengyel S., Gyarmati I.: Elemi lépésekből álló reakcióhálók nemlineáris termodinamikai vizsgálata ... 311
Magyar B.: Atomabszorpciós módszerek a komplexkémiai kutatásban ... 63
Mangini, A.: A kétértékű kén vegyértékhéja ... 213
Mink J., Goggin, P. L.: Tetragonális-planáris szerkezet a szervetlen és koordinációs kémiában ... 373
Mink J.: lásd Kemény G.
Nagy T. T.: lásd Tüdős F.
Nagypál I., Beck M.: A komplex egyensúlyi rendszerek koncentrációeloszlását szabályozó törvényszerűségek ... 285
Pracejus, H.: Az aszimmetrikus katalitikus hidrogénezés ... 129
Tóth Z.: lásd Joó F.
Samay G.: A gélpermeációs kromatográfia lehetőségei és korlátai ... 243
Silov A. E.: Nitrogénfixálás protonos közegben. A biológiai nitrogénfixálás és kémiai analógjai ... 13
Uhling E.: Átmenetifémek piridinszármazékokkal képzett kelátkomplexei. Sztérikus és elektromos tényezők hatása a komplex szerkezetére ... 39
Tüdős F., Kelen T., Nagy T. T.: A PVC termooxidatív degradációja ... 223
Zsavoronkov, N. M.: A koordinációs kémia felhasználása az iparban ... 1
Wells H. G.: A kemiszorbeált hidrogén viselkedésének vizsgálata deutérium nyomjelzéssel néhány fémmel és fém-szulfiddal katalizált hidrogénezésben és kéntelenítésben ... 91

TARTALOMJEGYZÉK

56. kötet 1—2. szám 1981. augusztus 17.
56. kötet 3—4. szám 1981. december

A Magyar Tudományos Akadémia 1980. évi közgyűlése. A Kémiai Tudományok Osztályának nyilvános ülése 1
A Kémiai Tudományok Osztálya felolvasó ülése Schay Géza akadémikus 80. születésnapja alkalmából 117
Az Agrártudományok Osztálya, a Kémiai Tudományok Osztálya, a Gazdaság- és Jogtudományok Osztálya 1981. évi április 29-i együttes ülése 213
A hazai vegyész- és vegyészmérnök-képzés 47
Az Osztály hírei 201
Beck M.: A Kémiai Tudományok Osztályának 1976—1980. közötti tevékenysége 3
Bonora, P. L., Cerisola, G., De Anna, P. L.: Acél korróziós kifáradása vizes oldatokban — elektrokémiai vizsgálatok .....
Caroli, S.: Az üregkatódos és a glimmkisüléses sugárforrások analitikai alkalmazásának lehetőségei 391
Cerisola, G.: lásd Bonora, P. L.
Cornides I.: lásd Kecskés Á., illetve Morvay L.
De Anna, P. L.: lásd Bonora, P. L.
Flórián K., Zimmer K., Heltai Gy.: A színképfelvételek kiértékelésének optimális lehetőségei 329
Gál T.: A tömegspektrometria alkalmazási lehetőségei a levegőszennyezettségi vizsgálatok terén 357
Gutmann, V.: lásd Resch G.
Heltai Gy.: lásd Flórián K.
Hollós A.: lásd Sohár Pál
Izsóf K.: lásd Kecskés Á.
Kecskés Á., Izsóf K., Cornides I.: Tömegspektrométeres izotópadatok geológiai értelmezésének problémái szén-dioxid-genetikai vizsgálatok alapján 365
Magyar B.: Az ICP és AAS módszer összehasonlítása az analitikai teljesítőképesség szempontjából 347
Matherny M.: Színképelemzési tapasztalatok az ikerplazmagerjesztéssel, I. Az ikerplazma sugárforrás kifejlesztése és tulajdonságai 381
Morvay L., Novakova, P., Cornides I.: A többszörös ionizáció tömegspektrométeres vizsgálata vákuumszikra esetében 373
Noller H.: Katalízis a koordinációs kémia szemszögéből 401
Novakova, P.: lásd Morvay L.
Plško, E.: Geológiai anyagok szórt elemei spektrokémiai meghatározásának problémái 317
Resch G., Gutmann, V.: Az elektrolitek dinamikus rendezettsége 421
Scharfenberg, P.: Molekulák szerkezetének és konformációjának meghatározása kvantumkémiai módszerrel 167
Sohár P., Hollós A.: Lehetőségek az NMR spektroszkópia felhasználására a rák-diagnosztikában és a rák-terápiában 189
Stone, F. G. A.: Trisz(etilén)-platina és hasonló komplex vegyületek: Általános reagensek a di- és tri-fém-karbénok és -karbinek szintéziséhez 155
Szabó Z.: Az egyetemi vegyész- és vegyészmérnök-képzés problémái és feladatai 75
Szebányi I.: A hazai vegyész- és vegyészmérnök-képzés szerkezete és keretei 47
Trabanelli, G.: Szerves inhibitorok alkalmazása a korrózióvédelemben 447

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA

1980. ÉVI KÖZGYŰLÉSE

A KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYÁNAK
NYILVÁNOS ÜLÉSE

1980. május 7-én

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981 p. 3—46

BESZÁMOLÓ A KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYÁNAK TEVÉKENYSÉGÉRŐL, 1976—1980

BECK MIHÁLY
az MTA rendes tagja, osztályelnök

Az elmúlt időszak során két ízben, 1977-ben a közgyűléskor [1], 1978-ban pedig az Akadémia elnöksége előtt [2] számoltunk be az Osztály tevékenységéről, az elmúlt négy évre vonatkozóan pedig a CXL. közgyűlésre kiadott kötet összegezi munkánkat [3]. Ez felment az alól, hogy most részleteiben ismertessem az Osztály szerteágazó tevékenységét. Ezzel csupán vázlatosan szeretnék foglalkozni és a rendelkezésemre álló időt inkább néhány fontos és időszerű kérdés elemzésére szeretném felhasználni.

I

Az Osztály tevékenysége rendkívül sokrétű és több síkon folyik: az osztályülések, a bizottsági ülések, a munkabizottsági ülések keretében, mindig a feladatokhoz igazodva.

Az osztályülésekről nem kívánok részletesebben beszélni, de fel kell hívnom a figyelmet arra, hogy számos esetben tartottunk olyan osztályülést, melynek tárgya nem csupán a Kémiai Tudományok Osztályának hatáskörébe tartozó kérdés volt. Például az 1977. évi közgyűlés során a kémiai szerkezet és a biológiai hatás közötti összefüggés megtárgyalására a Biológiai és az Orvostudományi Osztállyal együttes ülést rendeztünk; 1978-ban az Agrártudományok Osztályával tartott együttes ülésen tárgyaltuk meg a mezőgazdasági szakember-képzéssel kapcsolatban a kémia oktatásának kérdéseit; az 1979. évi közgyűlés folyamán pedig a Matematikai és Fizikai Tudományok, valamint a Műszaki Tudományok Osztályával együttesen vitattuk meg a hazai anyagtudományi kutatások helyzetét és feladatait.

Ezek a kiragadott példák is mutatják, hogy az Osztály tevékenységében teljesen természetesen érvényesült a sokoldalú megközelítés igénye. Az interdiszciplinaritás nem jelszó, hanem a munkának természetes módja, amely nélkül nem lehetne megfelelni a mindennapi gyakorlat támasztotta követelményeknek.

Csak megemlítem azokat az osztályüléseket, melyeket a hazai vegyész- és vegyészmérnök-képzéssel kapcsolatban tartottunk a különböző egyeteme-

ken, mivel a délutáni osztályülés során éppen ezekről a kérdésekről lesz majd bővebben szó. Azt azonban jelezhetem, hogy az ilyen jellegű osztályüléseket azzal a céllal tartottuk, hogy az illetékes főhatóságoknak javaslatokat tegyünk az ésszerűbb és hatékonyabb munkára. Az elmúlt időszak tapasztalatai kedvezőek ilyen vonatkozásban: több javaslatunkat felhasználták és remény van arra, hogy a jövőben még fokozottabban fog érvényesülni az Osztály hatása a különböző főhatóságok intézkedéseiben. Hogy mennyire érvényesül, az természetesen függ mind a főhatóságoktól, mind pedig az Osztály munkájának minőségétől. Amikor Osztályt mondok, úgy vélem, lényegében az egész kémikus társadalmat kell érteni, mert hiszen ilyen vonatkozásban az Osztály fogalmába beleértjük a bizottsági és munkabizottsági hálózatot is, ez pedig átszövi az egész hazai kémiai életet. Ezért, és az elmúlt időszak céltudatos tevékenysége nyomán ma már természetesnek tűnik az az igény, ami az 1977. évi közgyűlés beszámolójakor még némi megütközést keltett, ti. hogy a különböző főhatóságok mindazon kérdésekben, melyek az Osztály kompetenciája körébe tartoznak — ez pedig a kémiával kapcsolatos minden kérdés — támaszkodjanak az Osztály véleményére.

Bizottságaink és munkabizottságaink munkája rendkívül sokoldalú és intenzív volt. Elég, ha arra utalok, hogy az elmúlt négy év során munkabizottságaink ülésein több mint 2000 előadás hangzott el. Nélkülük Magyarországon nem lenne kémiai fórum. Ezek az ülések nemcsak fórumot, hanem műhelyt is jelentenek, hiszen bizottságaink és munkabizottságaink ülésein tudományszervezési és tudománypolitikai kérdéseket is megtárgyaltak. Nagyon vigyáztunk azonban arra, hogy meg legyen az egyensúly a tudományos és tudományszervezési kérdések tárgyalásában. Furcsa lenne, ha bizottságaink jobbára szervezési kérdésekkel foglalkoznának, mert nem feledhetjük el, hogy a tudomány művelői azért foglalkoznak a tudományszervezés kérdéseivel, hogy a tudományos munka eredményesebb és hasznosabb legyen.

Munkabizottságaink működésében egyre inkább érvényesül az egymással való szoros együttműködés, sőt többször előfordult az is, hogy más osztályok munkabizottságaival működtek együtt határterületi kérdések vizsgálatában.

Mint említettem, a bizottságok és munkabizottságok tevékenységének részletes ismertetése megtalálható a közgyűlési beszámolókötetben. Ennek áttekintése és a négy év tapasztalatai alapján most nem lehet más feladatom, mint hogy az Osztály nevében hálásan megköszönjem azt a munkát, melyet a bizottságok és munkabizottságok minden tagja és elsősorban elnökei és titkárai az elmúlt négy év során végeztek.

Említettem már, hogy a testület feladata az, hogy szakértelmével minden illetékes hatóság számára rendelkezésre álljon valamennyi, a kémiával kapcsolatos kérdésben. Az Osztály részéről megvan a készség erre az együttműködésre. A négy év során mindössze egyetlen ülésen volt valamelyes rossz érzésünk azért, mert ez a készség nem mutatkozott meg teljes mértékben, de ez

csak annak a bizonyos szabályt erősítő kivételnek tekintendő. Az Osztály tehát készséggel áll szakértelmével a főhatóságok rendelkezésére, hogy azok munkájukat a legjobban tudják elvégezni. Ez — ti. hogy *segítségünkkel* tudják munkájukat *legjobban* elvégezni — talán kérkedésnek tűnik, de a különböző főhatóságok szervezetének ismeretében meglehetősen nyilvánvaló. A főhatóságok *természetesen* megközelítően sem rendelkeznek azzal a kompetenciával, amely az Osztályban és az Osztály bizottságaiban rendelkezésre áll. Elérhető lenne a szakmai hozzáértés megközelítően ilyen mértékű biztosítása a főhatóságok saját bizottsági rendszerének kialakítása révén. Ez azonban felesleges párhuzamosságokra vezetne. Hogy milyen jó úton járunk, azt legjobban az Agrártudományok Osztályának gyakorlata mutatja. A közelmúltban írták alá azt a megállapodást, amely a MÉM és az Agrártudományok Osztálya között határozza meg a feladatokat. Nincs külön minisztériumi és akadémiai bizottsági hálózat, ami felesleges párhuzamot jelentene, hiszen mindkét helyen jobbára ugyanazok tudnának véleményt nyilvánítani. Sajnos, a mi területünkön nem ilyen egyértelmű a minisztérium és az Osztály hozzárendelése, hiszen munkánk több ipari minisztérium, a MÉM, az EüM és az Oktatási Minisztérium területéhez kapcsolódik.

Már az 1977. évi beszámolóban is jelezhettem, hogy a szakigazgatással való kapcsolatunk kielégítő, most pedig azt mondhatom, hogy e kapcsolat azóta még sokkal jobbá vált. Úgy tűnik, hogy a Természettudományi I. Főosztály minden lényeges kérdésben igényli az Osztály véleményét. A Nehézipari Minisztériummal és az OMFB-vel a beszámolási időszak elején megélénkültek kapcsolataink, de ebben most megtorpanás mutatkozik. Továbbra is igen jónak mondható kapcsolatunk a Magyar Kémikusok Egyesületével. Munkabizottságaink és a Magyar Kémikusok Egyesülete ugyancsak szerteágazó hálózata között semmiféle versengés sincsen, sem felesleges átfedések, — célszerűen egészítik ki egymás tevékenységét.

Néhány szót szeretnék szólni a nemzetközi szervezetekben végzett munkáról. E szervezetek közül a legfontosabb a IUPAC. Örömmel jelenthetem, hogy az elmúlt időszakban a magyar részvétel aránya a IUPAC különböző testületeiben jelentősen megnövekedett, egyes magyar tagok pedig fontos szerepet töltenek be a IUPAC-bizottságokban. A jövőben — úgy vélem — fokozottabban kell élnünk azzal a lehetőséggel, amit a IUPAC alapokmánya nyújt, ti. hogy a különböző bizottságokba nemzeti képviselőket küldjünk. Ennek természetesen csak akkor van értelme, ha kiemelkedő munkásságú és elismert kutatót tudunk delegálni, és csak akkor, ha módunk van képviselőnk részvételét biztosítani az üléseken. Engedjék meg, hogy ezzel kapcsolatban felhívjam a figyelmet arra, hogy a tömeghatás törvénye nemcsak a kémiai rendszerekben érvényesül, hanem a különböző bizottságok működésében is. Ahhoz, hogy tevékenységük kielégítő legyen, nyilvánvalóan arra van szükség, hogy a különböző szervezetekben minél többen képviseljék a hazai tudo-

mányt. Ennek azonban vannak anyagi feltételei. A IUPAC még nem rendezett Magyarországon konferenciát, legközelebb 1983-ban vagy 1985-ben nyílna erre lehetőség. Ennek természetesen ugyancsak vannak anyagi feltételei. Az mindenesetre nyilvánvaló, hogy a IUPAC-ban való érdemi és intenzív részvétel fontos érdeke a magyar tudománynak. Megemlítem, hogy néhány év óta a IUPAC tevékenységének egyik fontos elemét képezi az ún. CHEMRAWN-program (a betűszó a Chemical Research Applied to the World Needs rövidítése). Először 1978-ban tartottak konferenciát, a következőre pedig Manilában 1981-ben kerül sor. Ez nemcsak tudományos, hanem politikai szempontból is fontos munka, és nem véletlen, hogy tőlünk ily távol kerül sor a következő konferenciára: már csak anyagi szempontok miatt is nehéz lesz rajta részt venni. Tekintettel azonban arra, hogy a manilai konferencián arról lesz szó, hogyan lehet segíteni a fejlődő országokat mezőgazdasági termelésük fejlesztésében, fontos feladat hárul ránk. A hazai kémiának a hazai mezőgazdaság eredményeire támaszkodva van hitele, hogy nyilatkozzék e rangos nemzetközi fórumon a fejlődő országok mezőgazdaságának fejlesztését illetően. Minden erőnkkel azon kell tehát lennünk, hogy biztosítsuk ezen a konferencián a megfelelő hazai részvételt.

Hosszú idő óta — és az elmúlt négy év során is — fontos tevékenység folyik a The Combustion Institute-ban és az International Society of Electrochemistry-ban, amely utóbbi egyébként éppen Magyarországon rendezte az elmúlt időszaban egyik nemzetközi konferenciáját. Most alakult meg a CODATA nemzeti bizottsága, melyben természetesen magyar kémikusok is tevékenykednek.

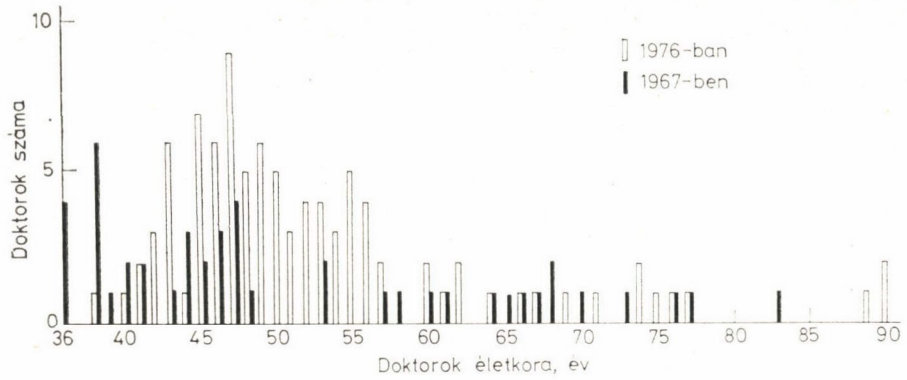
E rövid áttekintésből és még inkább a részletes beszámolóból kitűnik, hogy milyen sokirányú és intenzív az Osztály tevékenysége. Büszkék vagyunk arra, hogy míg országszerte az adminisztráció mértéktelen elburjánzásának lehetünk tanúi, az Osztálynak, annak ellenére, hogy 1970 óta roppant mértékben megnövekedtek feladatai, bizottsági, munkabizottsági hálózata kiszélesedett, — adminisztrációs szervezete változatlan marad. Ma is két és fél munkatársa van az Osztálynak, mint volt 1970-ben. Engedjék meg, hogy e helyen is őszinte köszönetemet fejezzem ki azoknak, akik készséges, áldozatos munkával teszik lehetővé fontos feladataink megoldását. Ugyanakkor azt is meg kell mondanom, hogy még az emberfeletti munka sem lenne elég, ha nem támaszkodhatnánk a különböző intézmények, mind a kutatóintézetek, mind pedig a tanszékek segítségére. A bizottsági, munkabizottsági elnökök és titkárok munkahelyei sokat átvállalnak a teendőkből. Nélkülük képtelenek lennénk feladataink ellátására. Az ő segítségüket is hálásan köszönöm.

A következőkben három kérdésről kívánok részletesebben beszélni: a káderhelyzetről, a publikációs tevékenységről, valamint a tudomány és gyakorlat kapcsolatáról.

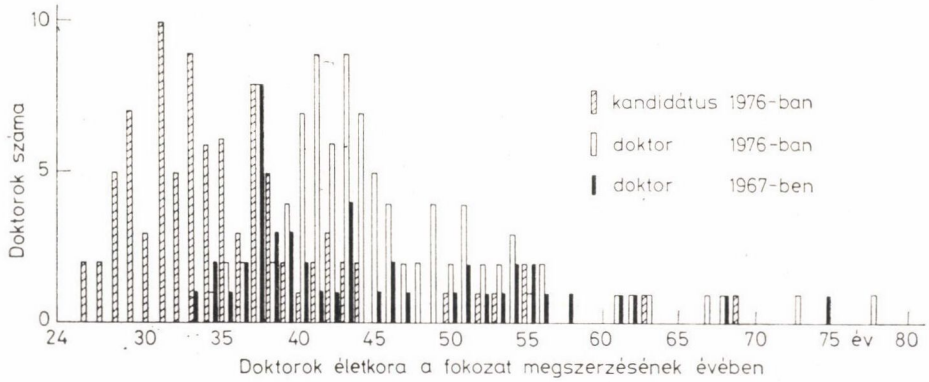
II

Az Osztálynak jelenleg 13 rendes és 8 levelező tagja van. Az elmúlt időszakban egyszer lett volna alkalmunk arra, hogy növeljük az Osztály tagjainak a számát, nevezetesen az 1979. évi tagválasztó közgyűlés alkalmával. Nyilvánvaló, hogy az elkövetkező időszakban az Osztálynak mindent meg kell tennie azért, hogy kiváló új tagokkal gyarapodjék, hiszen sokrétű tevékenységünket csak akkor tudjuk megfelelően ellátni, ha a szűkebben vett Osztály munkájában is többen veszünk részt. A tagválasztás sokrétű és felelősségteljes munka. Úgy érzem, az Osztály ezirányú tevékenysége akkor sikeres, ha ítélete találkozik az egész magyar kémikus társadalom értékítéletével. Ez utóbbit természetesen nem valamilyen népszavazással lehet megismerni, de el kell érni, hogy a Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Tudományok Osztályának új tagjai azok legyenek, akikről a magyar kémikus társadalom úgy tartja, hogy ott a helyük, vagy éppenséggel már tagoknak véli őket.

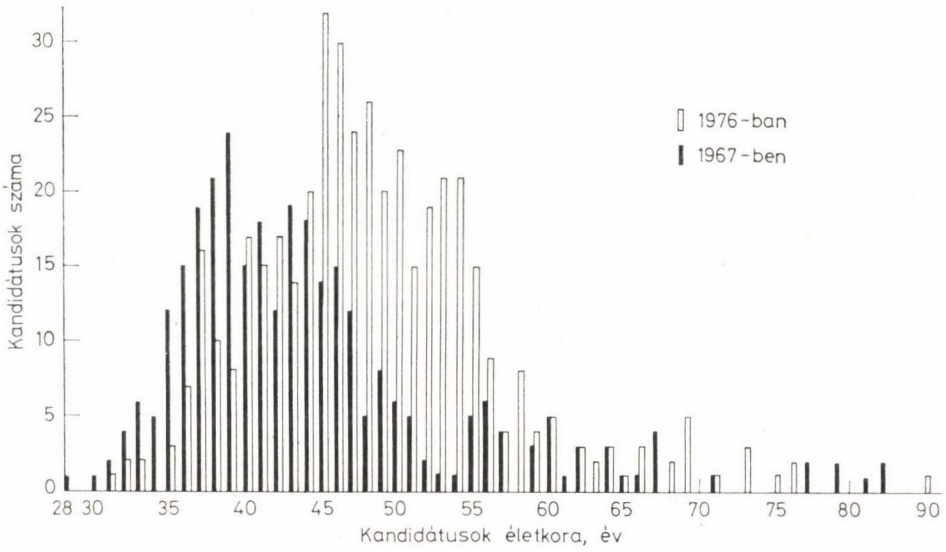
Érdemes röviden megvizsgálni a tagság koreloszlását. Természetesen nem az aktuális koreloszlás az érdekes és fontos, hanem a levelező, ill. rendes tagság elérésének koreloszlása. Az Osztály jelenlegi tagságát tekintve a levelező tagság elnyerésének korátlaga 46,7 év, a rendes tagságé 56,2 év. 1831-től — akkor választották Schuster Jánost az Akadémia levelező tagjává — 1949-ig az Akadémia újjászervezéséig a levelező tagság elnyerésének korátlaga 42,2, a rendes tagságé pedig 52,1 év volt. 1949-től máig a levelező tagság elnyerésének korátlaga 47,9, a rendes tagságé pedig 53,7 év. Az adatokból világosan felismerhető a választási korátlag növekedése mind a levelező, mind pedig a rendes tagokra vonatkozóan. Érdemes azon is elgondolkozni, hogy 1949 előtt kilencen, utána pedig mindössze négyen váltak a kémikusok közül negyvenedik életévük betöltése előtt az Akadémia tagjává. Than Károly 26 éves korában lett az Akadémia levelező tagja. Egyelőre semmi reményünk sincs arra, hogy e kor körüli új tagunk legyen. Than Károlyok persze ritkán születnek. Mindazonáltal elgondolkoztató, hogy nincs-e valami hiba szemléletünkben e tekintetben. Ilyen hiba meglétére utal a kémiai tudományok doktorainak és kandidátusainak koreloszlása is. Az 1. ábrán bemutatott hisztogramokon látható a doktorok száma a doktorok életkorának függvényében, 1967-re, ill. 1976-ra vonatkozó adatok alapján. Megfigyelhető, hogy 10 év során jelentősen növekedett a doktorok száma, és az életkori eloszlásban bizonyos eltolódás következett be a hosszabb életkor irányába. Ez természetes. A 2. ábrán a doktori fokozat megszerzésének idejére vonatkozó adatokat mutatjuk be. Látható, hogy a fokozat megszerzésének életkora már 10 év alatt jelentősen eltolódott, míg 1967-ben 35—40 év között szerezték meg túlnyomórészt a doktori fokozatot, 1976-ban a fokozatszerzés átlagéletkora 45 év volt. Az ábrán azt is feltüntettük, hogy az 1976-ban doktori fokozattal bírók milyen életkorban szerezték meg a kandidátusi fokozatot. Az adatokból kitűnik, hogy



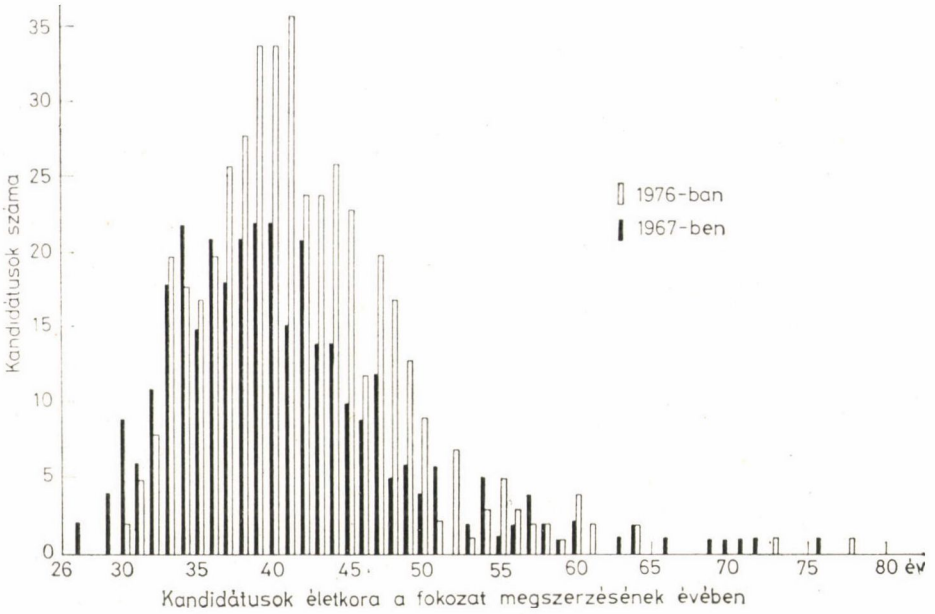
1. ábra



2. ábra



3. ábra



4. ábra

a későbbi doktorokra vonatkozóan a kandidátusi fokozat megszerzésének átlagéletkora 33 év. A 3. ábrán a kandidátusok életkor-eloszlása látható 1967-ben és 1976-ban. A kandidátusi fokozattal bírók számának gyarapodása mellett egyértelműen látható az életkori eltolódás is. Figyelembe véve, hogy a tudományos minősítés három évtizede kezdődött, lassan el kell érnünk a stacionárius állapotot, amikor is a további átlagéletkor-növekedésből már arra kell következtetni, hogy valami akadályozza a fokozat megszerzését a korábbi időszakhoz képest. A kandidátusi fokozat megszerzésének koreloszlása 1967-ben és 1976-ban, melyet a 4. ábra mutat be, világosan jelzi a fokozatszerzési életkor jelentős növekedését. Még elgondolkoztatóbb az elmúlt öt év során doktori fokozatot szerzők átlagéletkorának változása (1. táblázat). Nem egészen öt év alatt hét évvel tolódott el a fokozatszerzés átlagéletkora!

Ennek a változásnak az okait nem könnyű megtalálni, de feltétlenül fel

1. táblázat

Az 1976—1980-ban doktori fokozatot szerzők átlagéletkora

Év	Fokozatot szerzők	
	száma	átlagéletkora
1976	5	44,0
1977	8	45,4
1978	7	48,9
1979	10	49,0
1980 első fele	6	51,0

kell kutatnunk azokat a tényezőket, melyek gátolják az arra érdemeseket a tudományos fokozat megszerzésében. Az okok egy része valószínűleg abban gyökerezik, hogy a mai fiatal kutatóknak talán kevesebb lehetőségük és energiájuk van arra, hogy olyan kérdésekkel foglalkozzanak, amelyek a fokozatszerzésre alkalmas tudományos eredményekre vezetnek. Ennek vannak objektív, valós okai is, de vannak olyan szemléletbeli fogyatékosságon alapulók is, melyekre később, a tudomány és a gyakorlat kapcsolatát illetően még visszatérek, nevezetesen az a felfogásbeli különbség, mely az ún. alapkutatások végzése és a gyakorlati követelményekkel kapcsolatos kutatások terén más-más igényességet támaszt.

Ezek a kérdések elvezetnek a tudományos minősítés általánosabb problémáihoz, melyekről az elmúlt egy-két év során széleskörű vita bontakozott ki a Magyar Tudományban [4], sőt a különböző heti- és napilapokban is. Sok megszívlelendő észrevételt tettek. A vita azonban nem volt mentes demagóg felhangoktól. Határozottan az az érzésünk, hogy a tudományos minősítés nagy jelentőségű vívmány, — a vitában pedig ez szinte teljesen elsikkadt. Egyes hozzászólásokból már szinte az következett, hogy a tudományos fokozatok bírása nem dicsőség, hanem szégyen. Jellemző módon az egyik polemizáló cikk címe „Nagy szégyen-e kandidátusnak lenni?" [5].

Nyilvánvaló, hogy az ideális minősítési rendszernek az az alaptörvénye, hogy mindenki, aki rászolgál, szerezze meg a megfelelő fokozatot, és senki se jusson hozzá ahhoz a fokozathoz, amelyet nem érdemel meg. Ezt az alaptörvényt sajnos nem lehet teljesen érvényesíteni, de azért valószínűleg sokkal jobban meg lehet közelíteni, mint ma tesszük. Ugyanakkor azonban úgy vélem, hogy minden gyarlóságunk és hibánk ellenére feltehetően sokkal jobban megközelítjük ma is, mint azt sokan gondolják. Azt hiszem, az okozza a legtöbb, legnagyobb kárt a minősítés rendszerében, ha egy-egy személy, aki rászolgálna, nem kap fokozatot, vagy még inkább az, ha olykor-olykor arra érdemtelen akár kandidátusi, akár pedig doktori fokozatot szerez. Az ilyen esetek a közvéleményben rendkívüli mértékben rontják az egész tudományos minősítési rendszer hitelét. Ezért roppant nagy a felelőssége mindenkinek, aki bármilyen minőségben és mértékben (opponens, bíráló bizottsági tag, TMB-szakbizottsági tag, stb.) kapcsolatban van a tudományos minősítéssel. Még azoknak is nagy a felelőssége, akik a minősítéssel nem közvetlenül, hivatalosan vannak kapcsolatban, mert hiszen mindenkinek meg van a lehetősége arra, hogy a különböző fórumokon véleményét kifejtse. Sokszor — és nem alaptalanul — marasztalják el a védési viták szürkeségét, formális voltát. Nem szabad elfeledkezni azonban arról, hogy a munkabizottságok előtt sorrakerülő előzetes viták a legtöbb esetben élénkek, színvonalasak és őszinték. A munkabizottságoknak talán még nagyobb szerepet lehetne adni a tudományos minősítés rendszerében, pl. azzal, hogy hívhassák fel a TMB figyelmét a fokozatszerzésre alkalmas személyekre.

A vita során többször is felmerült a disszertáció-, ill. publikációcentrikusság vádja. Ezt is demagógnak érzem. Publikáció nélkül nincs tudomány. Igaz ugyan, hogy általában nem azért dolgozunk, hogy publikáljunk, de még inkább igaz az, hogy *publikálható* eredmények eléréséért dolgozunk. Aki nem ezt teszi, teljesen felesleges, hogy ezen a pályán tevékenykedjék. Igazi kutató nem dolgozhat az íróasztalfiókja számára.

Ma gyakran beszélnek a tézises védésről. Nem hiszem, hogy ennek olyan nagy lenne a jelentősége, mint azt sokan gondolják. Mind a kandidátusi, mind a doktori értekezések esetén több évtizedes gyakorlat, hogy a disszertációnak vagy szerves része, vagy melléklete a területtel kapcsolatos dolgozatok, esetleg különlenyomatok gyűjteménye. Ugyanakkor a disszertáció megírása nagyszerű alkalom arra, hogy a kutató áttekintse addigi munkásságát és tisztázza jövendő terveit. Aki azt mondja, azért nem szerez fokozatot, mert sajnálja azt, hogy a disszertáció összeállításával néhány hónapra kiesik a tudományos munkából, annak — attól tartok — nincs mivel pályáznia fokozatokra, csak még magának sem vallja be, hogy nincs miről írnia. A tézises védés engedélyezése iránti kérésnek egyébként manapság inkább presztizs-jelentősége van.

Bizonyos zavar tapasztalható az alkotás révén szerezhető tudományos fokozatokkal. Területünkön nagyon kevés esetben szereztek fokozatot alkotás alapján. Sajnos úgy tűnt, hogy jobbára nem azok jelentkeztek ilyen alapon a tudományos fokozat megszerzésére, akik valóban jelentős műszaki alkotással dicsekedhettek. Egyébként a fennálló rendelkezések szerint alkotás alapján tulajdonképpen nem könnyebb, hanem bizonyos mértékig nehezebb a fokozat megszerzése, mint „csak" tudományos eredmények alapján. Ha pl. valaki egy új gyógyszer mint alkotás alapján óhajt fokozatot szerezni, akkor a kémiai kutatások dokumentálása mellett számot kell adnia a hatástani vizsgálatokról és a klinikai vizsgálatok eredményeiről, sőt még az új gyógyszer bevezetése nyomán előálló gazdasági eredményeket is dokumentálnia kell.

Kétségtelen viszont, hogy vannak alkotások tudományterületünkön is, amelyek nem kapják meg a megfelelő elismerést. Pl. a Tiszai Vegyi Kombinátban az elmúlt évtizedben óriási mértékű intenzifikálást értek el. A gyár műtrágyagyártási kapacitás évi 210 ezer tonnáról 500 ezer tonnára emelkedett. Az ICI licenc alapján működő és gyártású üzem évi 24 ezer tonna polietilénkapacitását pedig 52 ezer tonnára növelték. Nyilvánvaló, hogy ilyen hatalmas mértékű kapacitásnövelést csak nagyon átgondolt, sokrétű műszaki, a polietiléngyártás esetében pedig ezen továbbmenően alapos kémiai kutatómunka alapján lehet csak elérni. Világos, hogy a TVK-nál végrehajtott két — egyébként több lépcsőből álló — intenzifikálás nagyon lényeges alkotásnak minősíthető. Mellesleg a műtrágyagyártás intenzifikálása magas állami elismerésben, Állami Díjban is részesült. Már most az, hogy az említett és a hasonló alkotások tudományos fokozat alapjául szolgálhatnak-e, azt elsősorban az

határozza meg, hogy milyen egyértelműséggel lehet az eredményt egy, vagy egy-két személy tevékenységéhez rendelni. Ez olyan kérdés, amelyet esetenként kell megvizsgálnia a TMB illetékes szakbizottságainak.

III

Az előbb már utaltam arra, hogy publikáció nélkül nem beszélhetünk eredményes kutatásról. Az MSZMP XII. kongresszusának határozatai között olvasható, hogy „A tudományos teljesítmény eredményességének megfelelő elismerésben részesüljön". Ez kötelezővé teszi számunkra, hogy kíséreljük meg az eredmények minél objektívebb megítélését. Mind az elnöki, mind a főtitkári beszámolóban szó esett erről. Jól tudom, hogy az ilyen törekvés még egyes kémikusok között is ellenkezést vált ki, noha az Osztálynak nagy szerepe van abban, hogy Magyarországon ma már elterjedt a tudományos teljesítmény mérésének igénye, hiszen éppen az Osztályon hangzott el először előadás a tudománymetriáról [6, 7] és az első ezzel kapcsolatos elemzések is a kémia egyes területeiről készültek [7, 8]. Úgy érzem, ma már egyre inkább elfogadásra kerül az a nézet, hogy a tudománymetria eredményeit megfelelő kritikával, óvatossággal ugyan, de fel kell használnunk az értékelésben.

A tudományos eredményeket bemutató dolgozatok publikálására ma már rendkívül sok lehetőség van. Röviden szeretnék foglalkozni a hazai kémiai folyóiratok helyzetével.

Magyar nyelven az eredeti közlemények a Magyar Kémiai Folyóiratban, az összefoglaló tárgyú dolgozatok a Kémiai Közleményekben, a vegyiparral kapcsolatos munkák pedig a Magyar Kémikusok Lapjában láthatnak napvilágot, és van néhány további folyóirat is, melyekben kémiai tárgyú dolgozatok jelenhetnek meg (Agrokémia és Talajtan, Bányászati és Kohászati Lapok, stb.).

Ezeken kívül van számos idegen nyelvű folyóiratunk is, — talán több is, mint kellene:

Acta Chimica Hungarica,
Acta Alimentaria,
Hungarian Journal Industrial Chemistry,
Reaction Kinetics and Catalysis Letters,
Journal of Radioanalytical Chemistry,
Journal of Thermal Analysis,
Radiochemical and Radioanalytical Letters.

A közelmúltban indult egy új folyóirat, mely hasonlóan az utóbbi háromhoz, az Akadémiai Kiadó és egy külföldi kiadó együttes gondozásában jelenik meg: Oxidation Communications. A felsoroltakon kívül vannak még a különböző egyetemi és kutatóintézeti kiadványok.

2. táblázat

Hazai kémiai folyóiratokkal kapcsolatos mutatók

(*Adatforrás: Journal Citations Reports 1978.*)

	Hivatkozás	Idézet	Idézett folyóiratok száma	Idéző folyóiratok száma	Hatás-tényező
Acta Chim. Hung.	2097	869	599	191	0,343
Acta Alimentaria	—	11	—	—	0,070
Hung. J. Ind. Chem.	—	9	—	—	0,009
J. Radional. Chem.	3739	997	1282	210	0,685
J. Therm. Anal.	1343	334	552	85	0,436
Magyar Kémiai Folyóirat	1703	364	561	75	0,402
Reaction Kin. Catal. Lett.	1178	217	422	87	0,326
Radiochem. Radional. Lett.	2952	674	843	109	0,639

Természetesen célszerű és hasznos lenne, ha meg tudnánk ítélni ezeknek a folyóiratoknak a hatékonyságát. Az MTA Könyvtára Informatikai és Tudományelemzési Kutatási Főosztálya végzett igényes, összehasonlító értékelést [9]. Ennek eredményét mutatja be a 2. táblázat.

A táblázatban a Journal Citation Reports 1978-as adatai szerepelnek. A „Hivatkozás" oszlopban levő adatok azt mutatják, hogy 1978-ban összesen hány hivatkozás található az adott folyóiratban. Az „Idézet" oszlopban szereplő számok pedig azt jelzik, hogy a Science Citation Index folyóirat-bázisában nyilvántartott különböző folyóiratok hány ízben idézték az adott folyóiratban megjelent cikkeket. A „Hatástényező", — mely az „impact factor" nem egészen szerencsés magyar megfelelője — az Institute of Scientific Information által adott mérőszám, mely az idézetelemzési vizsgálatok alapján átlagosan tükrözi a különböző folyóiratok viszonylagos hatását a világszerte folyó kutatómunka egészére. Ahhoz, hogy ezeket az adatokat értékeljük, célszerű lesz néhány külföldi folyóirat hatástényezőjét is szemügyre venni. A legkiemelkedőbb a Journal of American Chemical Society-é: 5,32. Az Acta Chimica Hungarica-val jellegében összevethető csehszlovák Collection-é 0,6, az Acta Chemica Scandinavica-é 0,650, a Journal of the Indian Chemical Society-é 0,281.

Látható, hogy igazában csak három nemzetközi szerkesztőbizottságú folyóiratunk hatékonyságával, valamint — figyelembe véve, hogy a Magyar Kémiai Folyóirat csak magyar nyelven közöl — ezével lehetünk megelégedve. Biztatóan növekszik a Reaction Kinetics and Catalysis Letters ismertsége és hatékonysága is, és nem kifejezetten rossz a helyzet az Acta Chimica Hungarica esetében. Az adatok azonban arra figyelmeztetnek, hogy mind az Acta Alimentaria-val, mind pedig a Hungarian Journal of Industrial Chemistry-vel kapcsolatban ésszerű intézkedésekre van szükség a folyóiratok hatékonysága növelésére. Az Acta Alimentaria jellegénél fogva — tekintetbe véve a hazai

élelmiszertudományi kutatások színvonalát és a hazai élelmiszeripar jelentőségét — potenciálisan jelentős folyóirattá válhat. A Hungarian Journal of Industrial Chemistry-vel kapcsolatban felmerül, hogy jogos-e egyáltalán az elnevezése, hiszen az tulajdonképpen a veszprémi kutatási intézmények folyóirata. Nem lenne-e célszerű, ha ténylegesen a magyar műszaki kémia egészének folyóiratává válna? Ez minden bizonnyal növelné e folyóirat hatékonyságát is.

A táblázatban nem szerepeltek a különböző egyetemi és kutatóintézeti kiadványok. Ennek oka, hogy ezeket az említett adatforrás a Periodica Polytechnica kivételével nem is tartja számon, mert idézettségük elhanyagolható a tudományos irodalom egészében. Ez utóbbinak kémiai sorozata a viszonylag leghatékonyabb, hatásténye zője 0,145. Úgy vélem, az egyetemi Acták fenntartása napjainkban már nem hasznos, hanem káros, mert nem alkalmasak a hazai kutatási eredmények széles körben való megismertetésére, hanem közleménytemetők. Persze a dolgozatoknak két típusa van. Az egyik, mely nem akar, de nem is érdemel nyilvánosságot, és nincs más célja, mint a szerzők dolgozatlistájának gyarapítása. A közlemények más részét azonban nem célszerű eltemetni, hanem nagyobb publicitású, kimutathatóan nagyobb hatékonyságú folyóirataink ban kell közölni őket. Nem tűnik egészségesnek az érdeklődésre számot tartó dolgozatok egyetemi Actákban való közlése akkor, amikor az Acta Chimica Hungarica maga nem kap elegendő számú kéziratot. Az is megfontolandó, hogy a közlés nem olcsó mulatság. Tavaly egy folyóiratoldal megjelentetése ezer forintba került, azaz még a kisebb terjedelmű egyetemi Acták publikálása is évi több százezer forintot emészt fel. Ezért célszerű lenne, ha az illetékesek alaposan foglalkoznának a hazai folyóiratok helyzetével; hatékonyságelemzési, gazdaságossági és egyéb, de nem szubjektív szempontok alapján döntenének azok további sorsáról.

A tudománymetriai elemzések segítségével az egyének teljesítménye meglehetősen nagy hibával, a folyóiratok hatékonysága, a kutatóintézetek, egyetemek tudományos termelékenysége pedig sokkal kisebb hibával minősíthető. A 3. táblázat ugyancsak az MTA Könyvtára Informatikai és Tudományelemzési Kutatási Főosztálya által végzett vizsgálatok [10] eredményét összesíti néhány hazai kutatóintézetre vonatkozóan.

A 3. táblázatban K a kutatók, F a tudományos fokozattal bíró kutatók, P pedig a publikációk számát jelenti; H az intézet hatásténye zője, melyet úgy számítottak ki, hogy az egyes folyóiratokban közölt cikkek számát megszorozták az adott folyóirat hatásténye zőjével és a szorzatokat összegezték. Az F/K, P/K, H/K jelentése értelemszerű. J/P az idegen nyelvű közlemények és az összes dolgozatok számának hányadosa; R pedig a Journal Citation Reports által jegyzett, bizonyos megszorításokkal a jelentősnek nevezhető folyóiratokban közölt cikkek és az összes dolgozatok számának a hányadosa. A VHT a viszonylagos hatásténye zőt jelenti, melynek meghatározásához kiválasztották a Journal Citation Reports által jegyzett folyóiratok közül azt

3. táblázat

Néhány hazai kutatóintézet mutatói

Intézet	K	F	P	H	F/K	P/K	H/K	J/P	R	VHT
MTA Központi Kémiai Kutató Intézet	190	63	689	520,06	0,332	3,63	2,74	0,662	0,901	2,23
MTA Izotóp Intézet	63	22	201	67,09	0,349	3,19	1,06	0,403	0,513	0,78
MTA Műszaki Kémiai Kutató Intézet	55	10	224	7,17	0,182	4.07	0,13	0,371	0,821	0
MTA Természettudományi Kutató Laboratóriumai	53	15	290	121,40	0,283	5,47	2,29	0,538	0,571	2,50
MTA Talajtani és Agrokémiai Kutató Intézet	44	14	278	11,24	0,318	6,32	0,26	0,162	0,717	0,63
Gyógyszerkutató Intézet	192	37	801	156,40	0,193	4,17	0,82	0,126	0,819	3,06
Műanyagipari Kutató Intézet	106	20	245	30,30	0,189	2,31	0,29	0,216	0,269	1,23
Nehézvegyipari Kutató Intézet	116	7	101	8,97	0,060	0,87	0,008	0,158	0,218	0,87
Magyar Ásványolaj- és Földgázkísérleti Intézet	105	10	296	1,74	0,095	2,72	0,02	0,101	0,364	2,34

a magyar nyelvű, idegen nyelvű, de magyar kiadású, valamint külföldi folyóiratot, amelyekben az 1976—1977. évben az intézet kutatói a legtöbb dolgozatot közölték. Kikeresték ezeknek a cikkeknek az idézettségét, és azt elosztották a szóban forgó cikkek számával. Végül az így kapott értéket a kérdéses folyóirat hatásténye zőjéhez viszonyították. A VHT tehát azt mutatja, hogy az adott intézet kutatóinak az általuk legfontosabbnak vélt folyóiratokban megjelent dolgozatait az adott folyóirat átlagához képest milyen mértékben idézik.

Messze vezetne ezeknek az adatoknak a részletesebb elemzése, de jól látszik belőlük, hogy az akadémiai kutatóintézetek többségében és az ipari kutatóintézetek egyik-másikában is igen jelentékeny kutatómunka folyik. Teljesen világos az adatokból, hogy a tudományos teljesítmény mértéke és a tudományos fokozattal bírók viszonylagos száma között egyértelmű az összefüggés. Az is nyilvánvaló, hogy az egyes kutatóintézetek hatékonyságában jelentős különbségek vannak. Természetesen kizárólag ezekre az adatokra hagyatkozva nem lehet megítélni az intézetek tudományos tevékenységének hatékonyságát, hiszen vannak olyan eredmények, szabadalmak, know-how-k stb., melyekre vonatkozó adatok a táblázatban nem szerepelnek. Az akadémiai

és az ipari kutatóintézetek összehasonlításában pedig figyelembe kell venni, hogy az utóbbiak szabadalmi, innovációs tevékenysége nyilvánvalóan nagyobb. A tudományos teljesítmény mérőszámainak semmibevétele azonban ma már aligha engedhető meg, és ezt jobbára csak azok teszik, akik joggal tartanak attól, hogy saját teljesítményük objektív értékelése nem a legkedvezőbb képet nyújtja magukról, illetve intézményükről.

IV

Nyilvánvaló, hogy az utóbbi évtizedekben jelentősen megnőtt a tudomány felelőssége nemcsak Magyarországon, hanem az egész világon. Tudatában is vagyunk ennek a megnövekedett felelősségnek, de úgy érezzük, hogy sem a kémikus társadalomban, sem pedig a tudományirányítók között nem teljesen egészséges a helyzet megítélése. Ne vegyék frivolitásnak részemről, hogy a Ludas Matyiból mutatok be egy rajzot [11] (5. ábra). Elgondolkoztató ez a karikatúra. Valóban számot kell vetnünk azzal, hogy nem hiábavaló dolgokra költjük-e az állam pénzét. Sajnos, meggyőződésem, hogy a tudományos

5. ábra

kutatásra fordított összegek egy része bizony hiábavaló, bár úgy vélem, a kémiai kutatások többsége hasznos és eredményes. Sajnos, a karikatúra egyértelműen kémiai kutatásokra utal és jelzi azt, hogy a tudományos kutatásokról általában, és a kémiai kutatásokról pedig különösen mit tart a közvélemény, és a közvéleményt formáló újságírók és politikusok egy része is. A közgyűlésen is elhangzott olyan kijelentés, hogy túl sokat költünk kutatásra. Ez a sommás megállapítás azt hiszem, nem állja meg a helyét, és nyilván az az alapja, hogy túl sokat költünk hiábavaló kutatásokra. Ha csak végignézzük a kutatóintézetek elnevezését, akkor is megkérdőjelezhető egyikmásiknak a létjogosultsága. Az azonban bizonyos, hogy ahhoz, hogy a népgazdaság valamennyi ága által támasztott igényeknek megfeleljünk, a jelenleginél sokkal nagyobb mérvű és célratörőbb kémiai kutatásra lenne szükség.

Az innováció minden országban — az Egyesült Államoktól Indiáig — alapvető kérdés [12]. Az Egyesült Államok nemzeti jövedelmének közel 50%-át az innovációból eredőnek tekinti [13]. Aligha kétséges, hogy korunkban a kizsákmányolás különböző formái között jelentős szerepet játszik a tudományos eredmények kisajátításán, birtoklásán alapuló értéktöbblet megszerzése.

Az innovációval kapcsolatban számos probléma merül fel, — most csak néhány gondolat felvetésére nyílik lehetőség. Az alapvető kérdés, hogy ezen a területen is végzetes hiba lenne a sarkítás. G. B. SHAW sok szellemes mondása között van néhány, amely igaz, de egyik sem igazabb annál, mely szerint „Az aranyszabály az, hogy nincsenek aranyszabályok" [14]. Számos területen, most pedig különösen az innováció területén a hamis aranyszabályok, a hamis alternatívák korát éljük. Például az innovációval kapcsolatban azt a kérdést vetik fel, hogy licencvásárlás *vagy* kutatás. Hangzatos jelszóval kérdik, hogy minek azt kutatni, amit már mások kitaláltak? A válasz egyszerű: azért, mert nem adják ingyen. A fotográfia volt valószínűleg az utolsó olyan jelentős találmány — több mint 150 évvel ezelőtt —, melyet ellenszolgáltatás nélkül tettek az emberiség közkincsévé. Azóta a találmányokért fizetni kell, és ezért kell kutatni olyant is, amit már kitaláltak, mert más, vagy — mint a Tiszai Vegyi Kombinát példája mutatja — jobb, hatékonyabb eljárást lehet kidolgozni. A lincencvásárlás *vagy* kutatás, nem alternatíva. A kettő nem ellentétes, hanem azokat csak összehasonlítva lehet értékelni. Van, amit meg kell vásárolni, mert reménytelen számunkra az eljárás gazdaságos kifejlesztése és megvalósítása saját erőnkre támaszkodva, de akkor is lehetőség van továbbfejlesztésére; de van, amit nem szabad megvásárolni, mert a mi kutatóink tudják olcsóbban és/vagy jobban megcsinálni.

A másik hamis alternatíva: nagy kutató-kollektívákra *vagy* egyéni kutatókra, illetve kis kutatócsoportokra van szükség. Hamis ez a kérdésfeltevés, mert a válasz nyilván attól függ, hogy milyen célra irányul a kutatás. Bizonyos kérdésekkel néhány főből álló kutatócsoport hatékonyabban tud foglalkozni,

mások vizsgálatában pedig csak méreteiben is jelentős kutatócsoporttól várhatunk eredményeket. A kritikus tömeg, amelyet a kutatással kapcsolatban oly gyakran emlegetnek, a magreakciókkal kapcsolatos. Míg azonban az atombombánál csak egy kritikus tömeg van, a tudományos kutatásban nemcsak minimummal, hanem maximummal is számolnunk kell. Az pedig mindenképpen helytelen, ha a kutatócsoport méretének meghatározásában nem a célszerűség és hatékonyság, hanem presztizs-szempontok játszanak szerepet.

Az innovációs tartalékok feltárása még a tudományos eredményeknek a gyakorlati hasznosítása terén vezető USA-ban is állandóan vizsgált kérdés. A kormány számára készült legutóbbi jelentésben az egyetemi kutatást jelölték meg a legfőbb innovációs tartalékként. E jelentésben nem szerepel, de a Science c. folyóirat ezzel kapcsolatos cikkéből [15] kitűnik, hogy noha az USA-ban a K + F-nek mindössze 3 és fél százalékát fordítják a kis kutatócsoportok támogatására, ezek az összes innováció 50%-át szolgáltatják.

Talán nem érdektelen pontosan meghatározni az innováció fogalmát. Az innováció: a megvalósított találmány. Ennélfogva tehát sem a találmány, sem pedig a szabadalmaztatott találmány önmagában még nem innováció, és a szabadalmaztatás nem is feltétele az innovációnak. Mindazonáltal a szabadalmak száma az innovációs tevékenység egyik mérőszámának tekinthető, melyre azonban éppúgy nem lehet kizárólagosan hagyatkozni, mint a dolgozatok számára a tudományos kutatás eredményességének megítélésében. Ezen a területen is szükséges a megfelelő hatástényezőknek a megállapítása és meghatározása. Célszerű lenne, ha a kutatóhelyek innovációs tevékenységét nem pusztán a találmányok, vagy a megadott szabadalmak száma alapján, hanem a megvalósított találmányok gazdasági eredményessége alapján minősítenénk. Mellesleg azonban meg kell jegyeznem, hogy a kémia meglehetősen jól áll a hazai szabadalmak területén. Az összes megadott szabadalomnak legalább a felét teszik ki a vegyészeti tárgyúak. A kutatóintézetek között egyes akadémiai intézetek előkelő helyen állnak, de természetesen a kutatóintézetek közül az ipari kutatóintézeteké a leglényegesebb szerep. A legtöbb kémiai szabadalmat a gyógyszergyárak, elsősorban a CHINOIN és a Kőbányai Gyógyszergyár szerzi, az ipari kutatóintézetek közül pedig a Gyógyszeripari Kutatóintézet és a Műanyagipari Kutatóintézet.

Az innováció: folyamat. A tudományos kutatásnak fontos feladatai vannak az innovációs láncban, és mindent meg kell tennünk azért, hogy lehetőségeinkhez képest, és a rendelkezésünkre álló eszközökkel megnöveljük az innovációs lánc hatékonyságát. A testület — úgy érzem — már eddig is sokat tett ezen a területen. Elsősorban azzal, hogy felhívta a figyelmet a legígéretesebb területekre. Kutatási hagyományainkat és tapasztalatainkat, valamint a gazdasági hátteret és szükségleteket figyelembe véve ma a legfontosabb kémiai kutatási területek a következők: gyógyszeripar, a mezőgazdaság kemizálásának problémái, élelmiszeripar, biotechnológiák, katalízis- és katalizátor-

kutatás, a fotokémia ipari alkalmazásai, műanyagkémia, ritka ásványi anyagok hasznosítása. Ezek a területek lehetőséget adnak valamennyi kémiai diszciplina művelőinek tehetségük kibontakoztatására, tudásuk gyümölcsöztetésére.

Munkabizottságaink pedig sokat tehetnek azért, hogy a különböző területeken született, megvalósításra érdemes és alkalmas, de valamilyen ok miatt megvalósításra mégsem került találmányokat hasznosítsák. Engedjék meg, hogy egy mondatot idézzek a tegnapelőtti főtitkári beszámolóból [16]: „. . . .a kutatók jórészénél viszont nemcsak a jószándék van meg — ez ugyanis itt is kevés —, hanem a hasznosításra alkalmas kiemelkedő tudományos eredmény is, amelyek nagy része mégsem kerül alkalmazásra, nem egy esetben még akkor sem, ha a kutatók sokszor minden tőlük telhetőt megtesznek ennek érdekében."

Ebből is kitűnik, hogy az innováció két tényezőn múlik. Az egyik az *igény* az új, hasznosítható eredményekre, a másik pedig a *készség* az olyan természetű kutatásokra, melyek gyakorlatban hasznosítható eredményekre vezethetnek. A spektrum mind a két vonatkozásban teljes és folytonos. Saját tapasztalataim alapján is állíthatom: van olyan felelős ipari vezető, aki mohón várja, hogy a vezetése alatt álló üzemben új tudományos eredményeket alkalmazzanak. Sajnos gyakoribb az olyan ipari vezető, aki mereven elzárkózik bármilyen, de legfőképpen a hazai tudományos eredmények alkalmazása elől. A kutatók esetében is megtalálható olykor az elzárkózás a gyakorlat folyamán felvetődött problémák vizsgálata elől, de túlnyomó többségükre a gyakorlati problémákkal való foglalkozás készsége a jellemző. E tekintetben inkább az okozza a nehézséget, hogy az ipari jellegű kérdések tanulmányozásában nem ugyanaz a tudományos igényesség mutatkozik meg, mint az alapkutatások vitelében. Valószínűleg ez *is* okozza, hogy fiatalabb kutatóink, akik ma természetesen a korábbinál sokkalta több időt és energiát fordítanak a gyakorlati kérdések vizsgálatára, nem érnek el a tudományos fokozat szerzésére alkalmas eredményeket.

Nyilvánvalóan helytelen és káros, ha a tudományos kutatómunka igényességében a kutatás tárgyától függően mutatkozik különbség. A kémia egész története azt példázza, hogy a tudományosan igényes vizsgálatok előbb vagy utóbb gyakorlatilag is fontos eredményekre vezetnek. A szerves kémia jó része a tudományos kutatás és a szerves kémiai ipar kölcsönhatása, együttműködése során fejlődött ki. Példák tömegét lehetne felsorolni a kémia minden területéről annak bizonyítására, hogy a tudományos kutatások és a gyakorlati alkalmazások között milyen szoros volt a kapcsolat már jó ideje. A trágyázás sok évezredes empíriáját Liebig vizsgálatai fejlesztették tudománnyá, a gazdaságos műtrágyázás lehetőségét pedig Haber reakciókinetikai vizsgálatai alapozták meg. Engedjék meg, hogy egy nem egészen közismert példát is elmondjak. KALECSINSZKY SÁNDOR, az MTA egykori tagja a századfordulón

egy érdekes természeti jelenség, a naptól felmelegedő sós tavak problémájával foglalkozott [17]. Elsősorban Szovátán, a Medve-tónál tapasztalta, de máshol is megfigyelték, hogy a nagy sótartalmú tavak vizének hőmérséklete nem a felszínen a legmagasabb, mint az általában észlelhető, hanem egy bizonyos mélységig fokozatosan emelkedik, majd csökken. Kiderítette, hogy a jelenséget nem különböző oxidációs folyamatok okozzák, hanem „megmagyarázására a napsugárzás teljesen elegendő. A látható és a vörösen inneni napsugarakat a víz és konyhasó oldat bizonyos mélységig elnyeli, különösen az utóbbiakat. Ha a folyadék egész tömegében egynemű volna, a meleg is a felszínén gyűlne össze; csakhogy a folyadék fajsúlya a mélységgel növekedik, ennélfogva ha e sűrű sós víz felmelegedik, nem szállhat fel a felszínre, hanem a melegséget a mélységben megtartja, ahol védi a felszínen levő édes vízréteg."

Vizsgálatainak eredményét magyarul is, németül [18] is közölte, és az utóbbi nagy külföldi visszhangot váltott ki. Egyes megjegyzéseire azonban csak 70 évvel később figyelt fel a tudományos világ, mert a mesterséges sóstavak az egyik legígéretesebb lehetőséget kínálják a napenergia hasznosítására [19]. Néhány rövid idézet KALECSINSZKY közleményéből bizonyítja, hogy ő már 1904-ben tisztában volt az ilyen irányú alkalmazás lehetőségeivel:

„Mivel e meleg sós tavak a Nap melegét bizonyos fokig összegyűjtik és hosszabb időn át magukban tartják, mind ezeket a természetes, mind pedig a mesterségesen készített sós tavakat is hőakkumulátoroknak kell tekinteni."

„Ezeket tudva új jelenség, új hőforrás ismeretéhez jutottunk. Ebbeli ismeretünket, a Nap melegének sósvízben való felhalmozódását, már gyakorlati módon is lehetne értékesíteni."

„A meleg sós tavakat ez idő szerint legalább egészségi szempontból való fürdésre lehetne felhasználni."

„Nincsen ugyan kizárva az sem, hogy a hőakkumulátorokat idővel más célokra is felhasználhassuk."

Akkor még nem volt energiaválság, mely kényszerítővé tette volna a napenergia hasznosítására irányuló törekvéseket, de az igényes tudományos kutatás már akkor olyan eredményekre vezetett, amelyeket ma hasznosíthatunk. A társadalom érthetően támasztja a mai tudományos kutatások iránt azt a követelményt, hogy éberen figyelje, milyen gyakorlati alkalmazása lehet eredményeinek. Az ilyen jellegű kutatás hasznos a tudomány szempontjából, hasznos a társadalomnak és használ a tudomány társadalmi megbecsülésének is.

Az Osztálynak, az Osztály bizottságainak és munkabizottságainak jelentős lehetőségei és feladatai vannak a tekintetben, hogy a tudományos kutatások iránt támasztott várakozásoknak egyre inkább megfeleljünk.

IRODALOM

1. Beck Mihály: Kémiai Közlemények **50.** 3 (1978)
2. Beck Mihály: Kémiai Közlemények **51.** 1 (1979)
3. Az MTA Beszámolója a CXL. Közgyűlésen, 133—156 (1980)
4. Kónya Albert: Magyar Tudomány **23.** 918 (1978)
5. Zádor Erika: Magyar Nemzet, 1978. október 6.
6. Ruff Imre, Braun Tibor: Magyar Tudomány **22.** 117 (1977)
7. Ruff Imre, Braun Tibor: Magyar Tudomány **22.** 216 (1977)
8. Papp Sándor, Ruff Imre: Kémiai Közlemények **51.** 345 (1979)
9. Kézirat. MTA Könyvtára
10. Kézirat, MTA Könyvtára
11. Ludas Matyi, 1980. március 13. 9. o.
12. Press, Frank: Chemtech 69 (1979)
13. Landau, Ralph: Chemtech 22 (1979)
14. Shaw, G. B.: Man and Superman, Tauchnitz, Leipzig, 1913, p. 307.
15. Wade, Nicholas: Science **206.** 800 (1979)
16. Márta Ferenc: Magyar Tudomány **25.** 502 (1980)
17. Kalecsinszky Sándor: Pótfüzetek a Természettudományi Közlönyhöz **33.** 49 (1904)
18. Kalecsinszky Sándor: Ann. d. Physik 4 (7), 408 (1902)
19. Rabl, A., Nielsen, C. E.: Chemtech. 608 (1975)

FELKÉRT HOZZÁSZÓLÓK

HOLLÓ JÁNOS
az MTA rendes tagja

A tudomány és a termelés, helyesebben a tudományos kutatás eredményei és a gyakorlati megvalósítás kapcsolataival, ellentmondásaival számtalan publikáció foglalkozott már. Ez a probléma azonban Magyarországon többé már nem lehet „akadémikus" vita. Ami korábban csupán kívánság és óhaj volt, hogy a népgazdaságban közvetlenül, vagy közvetve, de belátható időn belül anyagi hasznot is hozó egyre több eredményt produkáljanak az akadémiai kutatóintézetekben — az ma parancsoló szükség, létérdek. Ma már nem vitatjuk, lehet-e, kell-e gyakorlati célú kutatásokat folytatnunk, — azon vitatkozhatunk csupán, hogy *milyen módon* végezzük el ezt a feladatot.

Alapvető a téma kiválasztása. Az MSZMP Tudománypolitikai irányelvei és az Országos Távlati Tudományos Kutatási Terv megfelelő iránymutatást adott ahhoz, hogy milyen területekre kell erőfeszítéseinket koncentrálnunk. Az Országos Középtávú Kutatási Fejlesztési Terv célprogramjainak kidolgozása a népgazdaság hatékonyabb fejlesztésének igényével, a kutatási lehetőségeknek és a tudomány fejlődésében tapasztalható tendenciáknak az alapján történt. Az országos feladatokat az ipar és a tudomány szakemberei közösen jelölték ki. Ezekben az országos feladatokban kell megtalálniok helyüket az akadémiai és az egyetemi intézeteknek is!

Ehhez azonban még sok kutatóhelyen *szemléletváltozásra* van szükség. Hiszen az ország gazdasági erejéhez mérten amúgy is felduzzadt, illetve felduzzasztott kutatóhálózatában túl sokan foglalkoznak még ma is olyan alapkutatásnak deklarált munkával, amely vagy a korlátozott anyagi-személyi lehetőségek miatt nem hozhat nemzetközi nívójú eredményt, vagy eleve mellék-, illetve vakvágány. Persze, nem könnyű feladat évtizedek óta művelt témákat elvetni és újba kezdeni. Ehhez is, mint annyi minden máshoz, szakismeret, felelősségvállalás és erkölcsi bátorság kell. Sajátságos, hogy éppen a tudományos kutatás szervezetei bizonyulnak alkalmanként rendkívül rugalmatlannak a változásokkal, így a tematikai változásokkal szemben is. Több példát említhetnénk, milyen nehézségekkel találtuk szemben magunkat, amikor a Központi Kémiai Kutató Intézet tematikáját igyekeztünk átformálni a tudománypolitika korszerű követelményeinek megfelelően.

Vezérelvünk az volt, hogy olyan kutatási témákat válasszunk, amelyek vagy az ipar, vagy a mezőgazdaság számára középtávon, vagy távlatilag fontosak, s ezeken a területeken *alapkutatási igénnyel* dolgozzunk, de adott ponton továbbfejlesztve a témát a konkrét alkalmazási lehetőségeket is tárjuk fel, tehát alapkutatás és esetleges hasznossága nem lehetnek ellentétesek egymással! Így indítottuk el az intézetben korszerű szerves kémiai és fizikai-kémiai bázison a növényvédőszer-kutatás egy speciális területén a munkát: új növényvédőszer-antidótumok kutatását. A témán dolgozó vegyészek korábban „tiszta" elméleti szerves kémiával foglalkoztak, s ők ma már — az első eredmények láttán —, ha kérnénk, sem akarnának korábbi témájukhoz visszatérni. Említhetném a modern gyógyszerkutatás fontos területét is: a metabolizmus-vizsgálatokat, melyeknek a nagyműszeres szerkezetkutatással összehangolt hazai elterjesztésében intézetünk úttörő szerepet játszott, vagy pedig a polimerek degradációjának vizsgálatát is. Nem volt könnyű és ma sem az, megtalálni az egészséges egyensúlyt a feltáró kutatások és az alkalmazás lehetőségeinek keresése között, bár a kémia története számos példát szolgáltat a két tevékenység összhangjára. Gondoljunk csak Liebigre, aki a műtrágya alkalmazását kezdeményezte, — Domagk-ra, aki elméleti munkásságával párhuzamosan a kemoterápia megteremtéséhez járult hozzá, vagy Pasteur-re, a modern ipari mikrobiológia megteremtőjére. De közismert, hogy Zemplén Gézától sem volt idegen soha ipari problémák megoldása.

A *témaorientálás* elősegítésére dolgoztuk ki az *Intézet Működési Rendjét*, amely ösztönzi az alaptevékenységünkhöz csatlakozó gyakorlati célú kutatásokat, de egyidejűleg számonkéri és pontrendszer alapján jelentős összegekkel jutalmazza a disszertációkban, tudományos közleményekben megmutatkozó alapkutatási eredményeket is. Meg kell mondanom, hogy ennek a szabályzatnak, pontozásnak nemcsak külső bírálói voltak — még Akadémiánk zárt ülésén is —, de belső ellenzői is. Nyilvánvaló, hogy a tudományos kutatás tervezésére, finanszírozására és értékelésére kidolgozott rendünknek vannak hibái, de tiszta lelkiismerettel állíthatom, hogy enélkül a koncepció nélkül a Központi Kémiai Kutató Intézetben nem valósulhatott volna meg az a nagyarányú fejlődés, amelyet mind a kutatások sokszor nemzetközileg is jelzett elméleti eredményeiben és gyakorlati felhasználásában, mind az intézet létszámában és működésében lemérhetünk.

Miért olyan nehéz a kutatási eredmények gyakorlati megvalósítása? Számtalan vizsgálat elemezte már az okokat, s tudjuk, milyen ellentétek vannak a kidolgozott eljárások, termékek megvalósíthatósága és az ipar befogadóképessége között; tudjuk azt is, hogy elsősorban nem műszaki, anyagi, hanem szervezési, szervezeti és *személyi* okok miatt hiúsul meg a hasznosítás a legtöbb esetben, vagy ellenkező előjellel: ezért valósulhat meg.

Az MTA Szociológiai Kutató Intézete által 1974-ben lezárt vizsgálat kimutatta, hogy a gyakorlati megvalósítást leginkább akadályozó tényezők

közül az egyik: a megfelelő *szervezetközi kapcsolatok* hiánya. Éppen ezért használunk fel minden fórumot arra, hogy találkozzunk az ipari és mezőgazdasági vállalatok vezetőivel, szakembereivel; meghívjuk őket hozzánk, kutatóink pedig gyakori vendégek náluk.

Az iparral való együttműködés egyik fontos formája a *megbízásos szerződés*. Az elmúlt néhány évben egyre több témában sikerült ezeknek a szerződéseknek a keretében az Akadémia kutatói és a gyárak szakemberei között valóban a kölcsönös egymásrautaltságon alapuló kutatási együttműködéseket kialakítani. Ez a többcsatornás támogatás egyik kritikája is volt a helyes témaválasztásunknak. Természetesen ez akkor könnyebb, ha a gyárak és a kutatóintézetek igényei, lehetőségei és színvonala összemérhető. Ebben a tekintetben a magyar gyógyszeripar — legalábbis idáig — rendkívül jó partnernek bizonyult. Ehhez a közös munkához az Országos Műszaki Fejlesztési Bizottság jelentős anyagi támogatása is nagy segítséget nyújtott. Ez az OMFB-támogatás, továbbá ezt kiegészítve az MTA Központi Kutatási Alapjából történő finanszírozás tette lehetővé, hogy 12 MTA-intézet, illetve egyetemi kutatóhely bevonásával *koordinált*, programszerinti irányítású kutatásokat indítsunk el az originális gyógyszerkészítmények kidolgozásához kapcsolódva. Ezeknek eredményei teremtették meg a tematikai és szervezeti alapot az OKKFT keretében tervezett 3 alprogramban való részvételünkhöz is.

Az MTA Központi Kutatási Alapjának felhasználásával indított *projectek rendszerének* megteremtése nagy jelentőségű kutatásirányítási intézkedés volt, amelynek tapasztalatai alapján kívánatos, hogy az országos kutatásirányításban is egyre jobban alkalmazzák az intézmény-finanszírozás helyett az adott kutatási program lebonyolítására benyújtott pályázatok támogatásának módszerét.

Ebben az évben elvégzendő nagy feladatunk: az 1981—85. évi középtávú kutatási terv kidolgozása. A tervek összeállításának során arra kell törekednünk, hogy minél jobban megfeleljünk azoknak a követelményeknek, amelyeket a népgazdaság, s az egész társadalom állít elénk, hogy minél hasznosabban aknázzuk ki azokat a lehetőségeket, amelyek az akadémiai kutatóhálózatban felhalmozódott tudásban és anyagi erőben rejlenek.

HORVÁTH GYULA
a Magyar Gyógyszeripari Egyesülés igazgatóhelyettese

Mindenekelőtt kétirányú köszönetemet szeretném kifejezni. Az egyik személyes jellegű. Megköszönöm, hogy mint „iparost" az a nagy megtiszteltetés ért, hogy jelen lehetek és felszólalhatok az Osztály ülésén. Azt hiszem, ez is demonstrálja — amint az elnök úr említette — a tudomány és a gyakorlat kapcsolatának szorosabbra fűzését.

Másodszor szakmánk, a gyógyszeripar nevében hálás köszönetet szeretnék mondani, hiszen a gyógyszeripar azok nélkül a tudományos eredmények nélkül, amelyeket az itt ülők által vezetett intézményekben elértek, nem tudott volna annyira eljutni, mint amennyire eljutott.

Legyen szabad mindjárt, tisztességből és a rövidség kedvéért elmondanom, hogy a hozzászólásban megmutatkozó szemléletemet két korlát befolyásolja, illetve szűkíti be. Egyik, hogy egész eddigi pályafutásomat, 35 évet a gyógyszeriparban töltöttem, és ebből közel 25 éve úgynevezett kutatási menedzser vagyok, tehát kutatás-szervezéssel, kutatás-irányítással foglalkozom.

Nagyon boldog voltam akkor, amikor az Országos Távlati Tudományos Kutatási Terv előkészítésekor a gyógyszeripar az Akadémiát kapta szövetségesül, hogy a biológiailag aktív vegyületek kutatásának országos főirányként való minősítését biztosítsuk. Lényegében véve a beszámolási időszakra esik ennek a főiránynak a kibontakozása. 1972/73-ban indult el, de valójában 1976 és 1980 között bontakozott ki. Azt az egyet meg kell itt mondanom, hogy ez a kibontakozás nem mindenben felelt meg a várakozásoknak, mert ismét bebizonyosodott az, hogy pénzügyi eszközök nélkül nem lehet irányokat megváltoztatni. Nagyon sok szempontból javultak az irányok és az arányok a kutatásban, de miután anyagi eszközökkel központilag nem rendelkeztek a koordinálók, az eredetileg elképzelt hatásfokot nem lehetett elérni.

Egy dolog azonban nagyon lényeges. Itt köszönettel el kell mondanom, hogy az érdekelt öt főhatóság közül — mert öt főhatóság felügyelete alá tartozó kutatóhelyek vesznek részt ebben a közel száz kutatóhelyet felölelő programban — az Akadémia volt az a NIM-en kívül — egyébként a nehézipari miniszter a téma felelőse — amely kezdettől fogva mellénk állva és a téma mellé állva teljesítette — hogy így mondjam — a kormány kívánságát, és kivételes mértékben adott mindig erre a főirányra szerény eszközeiből, — mert hiszen azok is korlátozottak — megfelelő létszámot és pénzt.

Ez a főirány pillanatnyilag az átalakulás stádiumában van. Minden valószínűség szerint 1981. január 1-től országos célprogram formában fog tovább folytatódni, ami lényeges érdemi változást nem jelent.

A változást a következő jelenti: Ma már tudjuk azt, hogy termelésünket, exportunkat újabb emberek munkába állításával, extenzív módszerrel nem tudjuk növelni. Azt is tudjuk, hogy a világgazdaság adott helyzetének behatása folytán a mi gazdaságunkban is egyensúlyi problémák vannak, tehát a beruházási lehetőségek korlátozottak. Így most a tudósok, a kutatók azok, akikre a nemzet szeme néz, tőlük várjuk azokat a zseniális kutatási eredményeket, amelyekkel a meglevő szerény lehetőségek mellett a termelési kapacitást dinamikusan bővíthetjük.

Itt elhangzott az elnöki beszámolóban az, hogy egy kutatási témán lehet kis csoportot, lehet nagy csoportot foglalkoztatni, és az is, hogy van egy

kritikus tömeg. Én ezt teljes mértékben eláírom. Szerény tapasztalataim alapján csak két dolgot szeretnék megjegyezni. Biztos, hogy egy ember nem lehet a kritikus tömeg, mert nincsenek polihisztorok. Ez az egyik. A másik pedig az, hogy ebben a személyiség nagy szerepét látom abból a szempontból, hogy ha kisebb vagy nagyobb csoportok összeállnak egy adott program végrehajtására, nem lehet nélkülözni a tudományos tekintélyt, mert a zavartalan munkát nem lehetséges egyenrangú emberek közösségében elérni. Kell egy primus inter pares, aki az egészet összefogja, orientálja, vezérli és az egyének eredményeit szintetizálja. Ebben nagyon nagy szerepe van a tudománynak és az Akadémiának.

Arról is szó volt, hogy milyen lesz a hatékonysága ennek a kutatásnak. Sok minden mutatót láttunk, ezt a sort variálni lehetne. Megint csak mint prakticista „iparos", azt mondom: a kutatás hatékonyságát legjobban az mutatja, hogy az eredményekből effektíve mit valósítottunk meg iparilag, hogy azokból mennyi árbevételt, mennyi hasznot értünk el forintban, rubelben vagy dollárban. Persze, ennek nagyon sok feltétele van.

Itt szeretnék egy alapvető megjegyzést tenni. Sokat aposztrofálják napjainkban az innovációs folyamatot. Azonkívül, hogy itt fennállnak mindazok a problémák, amelyekről az elnöki beszámolóban és Holló akadémikus hozzászólásában hallottunk, van még egy tipikus magyar dolog. Mi 1948—49-ben, az államosítások után ezt az akkor még tudományosan fel sem ismert innovációs láncot, amely korábban egy-egy vállalat kezében volt teljes összefüggésében, feltördeltük, és azt mondtuk, hogy legyen szervezetileg külön a kutatásfejlesztés, külön a termelés és külön a bel- és külföldi értékesítés. Ráadásul az egyes részek más-más tárcák felügyelete alá kerültek. Nem elég, hogy ezt feltördeltük, és az egység a mai napig is csak részlegesen állt vissza, hanem ezeknél a különféle láncszemeknél vagy teljesen elfelejtettük az érdekeltté tételt, vagy pedig ellentétes az érdekeltség.

Mondok egy példát: hol van a kutató érdekeltsége abban, hogy — ha olyan értelemben szükséges, mint az elnök úr mondotta — külföldi eredményt vegyen át, amikor azért semmiféle erkölcsi és anyagi elismerést, — még kézfogást sem kap? Ugyanakkor pedig az üzemnek sem az a csoportérdeke, hogy a kutatók egy tökéletes gazdasági optimumra kidolgozott gyártási eljárást adjanak át, hiszen akkor miből él az újító brigád? (Derültség.) A külkereskedőnek nincs érdekeltsége, mert náluk a külkereskedelmi mérlegegyensúlyra való kényszerű törekvés folytán úgynevezett volumen-érdekeltség van. Mivel a tudósok nem kötelesek az ilyen közgazdasági tolvajnyelvet megérteni, elmondom magyarul: a külkereskedő lényegében ugyanannyi prémiumot kap, ha száz kilót ad el 10 dollárjával, vagy kétszáz kilót ad el 5 dollárjával ugyanabból a termékből. Ijesztő, de így van!

A gyógyszeriparban megszerveztünk egy olyan akciót, hogy — részben társadalmi segítséggel — megpróbáljuk felderíteni ezeknek az érdekeltségeknek

a hiányait, ellentmondásait, megkísérelünk megfelelő megoldásokat javasolni, és néhány évre úgynevezett kísérleti rendszerként valami értelmes, ösztönző dolgot bevezetni. Tudniillik, ha van Magyarországon tevékenység, amely fontos — ez elhangzott egyébként a közgyűlés nyitó ülésén is, ahol Aczél elvtárs is hangsúlyozta —, az az innováció. Miután természeti kincseink nincsenek korlátlanul, s tőkében sem bővelkedünk, az agyunkból kell ezeket pótolni, semmi másból.

Legyen szabad megjegyeznem az innovációval kapcsolatban, hogy egy dolog eldőlt, — és ezt azért érdemes elmondani, mert akik itt ülnek, talán nem is mind így gondolják —: az innováció rendszergazdája csak egy ipari termelő vállalat lehet. Nincs az a legkitűnőbb akadémiai, egyetemi vagy ipari kutatóintézet, amely kutatási eredményből piacra hozható gyógyszert tudna csinálni. Az egy külön szakma. Ezt a vállalati emberek tudják megcsinálni, és éppen ezért nekik ebben az egész folyamatban nagyon-nagyon fontos, vezető szerepük van.

Csak egyetlenegy témára hívnám fel pótlólagosan a figyelmet — az elnöki beszámoló mozgatta meg bennem a gondolatot —, ez pedig a nemzetközi együttműködés. Erről szó esett, de érdekes módon akárhányszor érdeklődünk iránta, viszonylag keveset beszélünk a KGST-n belüli együttműködési lehetőségekről.

Nekem ezzel kapcsolatban meggyőződésem, amelyet tapasztalatok támasztanak alá, hogy mi — helytelenül — nagyon defenzív nemzetközi együttműködési politikát folytatunk, hiszen általában vagy elfogadjuk, vagy elutasítjuk a baráti országokból felénk jövő javaslatokat.

Az az érzésem, hogy ha felmérjük, hogy mit akarunk, és felmérjük, hogy mire van szükségünk a barátainktól, a szocialista országoktól, akkor nagyon értékes, olyan dolgokat kaphatunk meg, amelyek anyaországukban esetleg nehezebben realizálhatók, vagy éppen nem illeszkednek be az ottani gazdasági szerkezetbe. Most is van konkrét eredmény például a gyógyszerkutatásban. Egy szovjet intézet által kidolgozott maláriaellenes gyógyszert remélhetőleg egy magyar vállalat fog gyártásba venni.

A nyugati kapcsolatokba is célszerű nagyobb tervszerűséget bevinni. Ne azt nézzük, hogy ez vagy az a derék kutató hol nem járt még, és ne e szerint keressünk partnert, hanem ha jó az a kapcsolat, és elősegíti a mi alapvető, főbb — hogy úgy mondjam — motorjellegű témáink előbbrevitelét, akkor ugyanaz a kutató menjen el akár húsz alkalommal is ugyanoda. Tehát ne az legyen a szempont, hogy a világ minél több részét ismertessük meg vele.

Még egyet mondok: bármennyire nehezek is most az anyagi feltételek, egy örömteli bejelentést tehetek, bár felelőtlenségnek látszik, hiszen erről aláírt váltók még nincsenek a kezünkben. Az elkövetkező öt évben feltehetőleg el fogjuk érni azt az örvendetes állapotot, hogy miközben gyógyszeriparunk termelése évi 10 százalékkal növekszik, a kutatásra ezt meghaladó összeget,

évi 12—13 százalékkal többet tudunk fordítani. Ezt azért mondom, mert vannak közgazdászok, akik szerint az ilyen arány alapvetően fontos, és ez a mozgatóereje a fejlődésnek.

Remélem, hogy érdekeltségi rendszerünk úgy módosul, hogy az a bizonyos jó igazgató vagy vezető, akit elnökünk említett, s aki tárt karokkal várja a kutatás eredményét, a jövőben nemcsak hobbiból, hanem a vállalati és egyéni gazdasági érdekeltségi szabályozók kényszere alapján is fogja ezt csinálni, mert — sajnos — a jelenlegi szabályozók erre nem szorítják. Mivel emberek vagyunk és így esendők, jobb lenne, ha erre gazdasági tényezők ösztönöznének.

Még egyszer nagyon köszön a felszólalási lehetőséget és szíves figyelmüket.

PÉCELI BÉLA
az Országos Kőolaj- és Gázipari Tröszt vezérigazgató-helyettese

Először is szeretném megköszönni azt a lehetőséget, hogy a magyar szénhidrogénipar területén folyó kutatási-fejlesztési munkákról és azok intenzifikálásáról itt Önök előtt röviden szólhatok.

Azt hiszem, közismert, hogy az elmúlt évtizedekben az ipar és általában a gazdaság fejlődésében igen jelentős szerepet játszottak a szénhidrogének, és ezt a szerepet a jelen dekád első éveiben bekövetkezett alapvető árarányváltozások még inkább kihangsúlyozzák.

Az új helyzet parancsolólag követeli tőlünk, hogy a szénhidrogéneket, amelyek az elmúlt időszakban főképpen energetikai felhasználásra kerültek, egyre nemesebb célokra, egyre inkább nagyobb értékű termékek előállítására használjuk fel, illetőleg igyekezzünk egyre inkább kihasználni azokat a hazai, már megtalált forrásokat, amelyek szénhidrogénbázisunkat képezik.

Bár a világ szénhidrogénkészleteire vonatkozó becslések különbözőek, abban azonban megegyeznek, hogy további új szénhidrogéntelepek megtalálása és kitermelése csak egyre nagyobb költséggel, egyre bonyolultabb műszaki megoldásokkal lehetséges. Éppen ezért a meglevő, megtalált szénhidrogéntelepek minél nagyobb fokú kihasználása és kitermelése elsődleges, feladattá vált. Mint az ipar és a gazdaság fejlesztésének más területein itt is a kemizálás jelenti a fejlődés útját. Tulajdonképpen a kőolajfúrási segédanyagok ma is sok vegyszert, vegyipari terméket tartalmaznak, de a vegyszerek hasznosítása a kőolajbányászatban, azoknak óriási szerepe a kőolajtermelés úgynevezett harmadlagos módszereinél lép be. Gondolok itt a viszkozitást, felületi feszültséget, tapadást módosító vegyszerekre, a szénhidrogént kiszorító polimerdugókra, a földalatti oxidációra, amelyekkel igyekeznek a föld mélyéből a kőolajkincs minél nagyobb mértékű kitermelésére. A földgáz kitermelésénél pedig igyekeznek a nagyobb értékű, kémiailag hasznosítható

termékeket a metán mellől leválasztani és az értékes izo-paraffinokat a normál paraffintól szétválasztani.

Ami magát a kőolajfeldolgozást, a petrolkémiát illeti, ott is az egyre magasabb használati értékű termékek irányába tolódik el a tevékenység. Ma már egész Európa, sőt mondhatnám az egész világ arra törekszik, hogy a fekete kőolajból minél több fehérárut, motorhajtó anyagot, petrolkémiai terméket állítson elő, és még kisebb mértékben használja fel ezeket csupán energetikai, hőenergiatermelési célokra. Ezen fejlesztés alátámasztására lépnek be a kőolajiparba a kutatási feladatok.

A szénhidrogénipar vegyipari kutatásának a feladatát nálunk alapvetően a Szénhidrogénipari Kutató Fejlesztő Intézet látja el, amely a folyó év elején a Nagynyomású Kísérleti Intézetből, a Kőolaj- és Földgázbányászati Kutató Laboratóriumból és a Gáztechnikai Készülékeket Vizsgáló Állomásból — mind a három régebben a kőolajiparon belül működő önálló részleg volt — alakult ezek összevonásával. A múltban a kőolajfeldolgozó ipar területén tevékenykedő Nagynyomású Kísérleti Intézet működése nem terjedt ki és nem is terjedhetett ki a kőolajipar vegyipari tevékenységének egész területére.

Ezért a kutatásokba már hosszú idő óta belefolytak más kutatóhelyek is, az akadémiai kutatóintézetek közül elsősorban a Központi Kémiai Kutató Intézet és az Izotóp Intézet. A kőolajbányászat kémiai-fizikai kutatásainak a fejlesztését szolgálja a miskolci MTA Kőolajbányászati Kutató Laboratórium, az egyetemi tanszékek közül a veszprémi Vegyipari Egyetem ásványolajfeldolgozó tanszéke, a budapesti Műszaki Egyetem kémiai technológiai és fizikai-kémiai tanszéke, a miskolci Nehézipari Egyetem néhány tanszéke és legrégebben — elsőként az ipari kutatóintézetek közül — a Magyar Ásványolaj- és Földgázkísérleti Intézet.

A kőolajipar petrolkémiai fejlesztési elképzeléseinek a megvalósításához és kialakításához komoly segítséget nyújtottak a Magyar Tudományos Akadémia munkabizottságai. Különösen a petrolkémiai munkabizottságot említem meg, ahol többször beszámolhattunk terveinkről, például az aromás szénhidrogének gyártásának a fejlesztéséről, s mindig hasznos és igen termékeny viták után folytathattuk munkánkat, esetenként módosítva elképzeléseinket az ott elhangzottakkal.

Az Országos Kőolaj- és Gázipari Trösztben, mint a magyar szénhidrogénipar összefogó szervezetében néhai Vajta László akadémikus kezdeményezésével, aki közel 30 esztendőn át a magyar kőolajfeldolgozó ipar szellemi vezetője volt, a sok kutatóhely munkájának az összehangolása céljából rendszeresen készülnek kutatási tématervek. Az elnöki beszámolóhoz kapcsolódva azt lehetne mondani, hogy kialakult az innováció tervezése.

Ez lényegében véve azt jelenti, hogy a nagyobb jelentőségű és időigényesebb fejlesztések igényeinek a felmerülésekor tématervet készítettek. A tématervben kitűzzük a konkrét célt — pl. egy nagyüzemi technológia

létesítését, vagy egy új termék létrehozását és gyártását —, számba vesszük a tudományos-gyakorlati hátteret, amelyet a kitűzött cél eléréséhez igénybe fogunk venni, felvázoljuk és meghatározzuk a cél eléréséhez szükséges különböző anyagi eszközöket, kijelöljük a döntési pontokat, és éves bontásban meghatározzuk a részlegek feladatait. A végzett munkát évente értékeljük, és ha kell, módosítjuk.

A tématervek területén belül kapcsolódnak be munkánkba a különböző kutatóhelyek. Például az olyan hagyományos kutatási témák, mint az MTA Központi Kémiai Kutató Intézet zeolit- és krakk katalizátor, xilol-izomerizációs és oxidációs kutatásai, a nemesfém katalizátorok vizsgálata, vagy az Izotóp Intézet reformálással kapcsolatos katalizátor kutatásai jól beilleszthetők a kutatás-fejlesztés folyamatába.

Ugyanez mondható el a Veszprémi Vegyipari Egyetem Ásványolaj Tanszékének, valamint a Magyar Ásványolaj- és Földgáz Kísérleti Intézetnek az adalékanyag kutatásairól, a Budapesti Műszaki Egyetem Kémiai Technológiai Tanszékének az aromás szénhidrogén- és egyéb kutatásairól, a MÁFKI-nál évtizedekre is visszanyúló földgáz-, bitumen-, paraffin- és cerezin-kutatások eredményeiről, a legutóbbi időben pedig a harmadlagos kőolajtermeléshez szükséges vegyszerek kutatásáról.

A kőolajfeldolgozó ipar és az ehhez kapcsolódó petrolkémiai technológiák az úgynevezett nagy technológiák közé tartoznak. A hazai ipari háttér lehetőségei nemigen engedik meg ezek eredménnyel kecsegtető kutatásainak a versenyképes folytatását. Szeretném aláhúzni, hogy nem a hazai kutatás szellemi potenciájával van probléma, hanem elsősorban a kellő ipari háttér hiányáról, tehát — és itt csatlakozom az elnöki beszámolóhoz — itt is szükség van licenc-vásárlásokra, de ugyanakkor szükség van kutatómunkára is, mert új, hazánkban még nem alkalmazott technológiák fogadásának az előkészítése kutatóintézeteink munkája nélkül elképzelhetetlen. A kutatói tapasztalatok alapján a műszakilag és gazdaságilag legalkalmasabb technológia kiválasztása, az ajánlatok műszaki-tudományos értékelése, a katalizátorok minősítése, az üzem indításában való szakértői részvétel mind olyan tevékenység, amely elengedhetetlen és jelentős szerepet játszik az új technológiák bevezetésének a sikerében.

Az említett tevékenység logikus és szükségszerű folytatása a megvásárolt technológiák továbbfejlesztése. Az ilyen fejlesztő kutatásra igen jó példa a Nagynyomású Kísérleti Intézetben mintegy 15 éve folyó katalitikus benzinreformálási kutatás. A NAKI és a kőolajfeldolgozó üzemek jó együttműködése jelentős, forintban is jól mérhető eredményeket hozott, és a hazai benzinreformáló üzemek igen jó eredményt értek el mind a szovjet, mind a tőkés szállítású katalizátorok alkalmazása terén. A megvásárolt és a szállítóktól átvett ismeretanyagot a hazai kutatóintézetek segítségével továbbfejlesztettük, mintegy hozzáadott know-how-t valósítottunk meg, és ezzel

elértük, hogy — mind a szovjet, mind a nyugati szakemberek véleménye szerint — a KGST-államok között hazánkban működnek a legmegfelelőbben a katalitikus benzinreformáló üzemek.

A nagy technológiák fogadására való felkészülés mellett lehetséges a hazai kutatástól bizonyos eredeti eredmények átvétele is. Így a kőolajfeldolgozó ipar termék-diverzifikálási törekvései folytán megvalósuló kis volumenű, de nagy értékű termékek — elsősorban növényvédőszer- és gyógyszer-intermedierek, valamint alapanyagok — vonatkozásában eredményes hazai kutatások folytak és folynak.

Elnézést kérek, hogy mindig a szénhidrogéniparhoz tartozó kutatóintézet eredményeiről beszélek — vehetnék más példát is —, de ez a munkaterületem. Például a Nagynyomású Kísérleti Intézet kutatásai alapján a péti gyártelepen megépült egy évi 3000 t kapacitású N-izopropil-anilin és egy év 1000 t kapacitású di-normál-propil-amin kísérleti üzem, amely eredményesen működik és a növényvédőszer-ipart ellátja ezekkel az anyagokkal.

A hatodik ötéves tervben igen nagy koncentráltságú beruházást szeretnénk megvalósítani a kőolajfeldolgozó ipar területén. Fluid-katalitikus krakk üzemcsoport létesítését tervezzük, amely fűtőolaj-alapanyagból motorhajtó anyagokat gyárt. Ezzel kapcsolatban is szeretnénk támaszkodni a hazai kutatóintézetek kutatására. Különösen a hazai zeolit krakk katalizátorok kutatása érdekelne.

Sorolhatnám tovább a fejlesztési céljainkat kidolgozó tématerveink részleteit, de engedjék meg, hogy időkímélés céljából ettől most eltekintsek! Véleményünk szerint a különböző típusú kutatóhelyek logikai sorrendben kapcsolódó együttműködése jelentős mértékben meggyorsíthatja egy-egy kutatási téma eredményes befejezését. Az akadémiai kutatóintézetek, az egyetemi kutatóhelyek, az ipari kutatóintézetek és a vállalati kutatólaboratóriumok kapcsolódása a munkánkhoz, gondosan ügyelve arra, hogy mindenki azt csinálja, amire a legalkalmasabb, megsokszorozhatja az ipari kutatás eredményét.

Poros Tamás
a Budapesti Vegyiművek igazgatója

1975-ben — 5 évvel ezelőtt — az a megtiszteltetés érte vállalatunkat, hogy a Műszaki Kémiai Bizottság meglátogatott bennünket, és nálunk tartotta egyik ülését. Ezen az ülésen nekem is módom volt felszólalni. Akkor az volt a legfőbb mondanivalóm, hogy fejlesztésünk dinamizmusát saját szellemi kapacitásunk mellett csak a külső kapacitás minél szélesebb körű igénybevételével biztosíthatjuk. Hozzátettem azt is, hogy sajnos ez nem áll kellőképpen rendelkezésünkre. Fejlődésünknek ma még inkább meghatározó tényezője ez, és a helyzet még nem sokat változott.

Mivel budapesti üzem vagyunk, fejlődésünket csakis a termelési szerkezet átalakítása biztosíthatja, nevezetesen a termékváltás és a gyártási technológiák intenzifikálása. A vállalati önállóság 12 éve alatt nagy beruházások nélkül stratégiai profilunkat, a növényvédő szerek, azok intermedierei és a speciális műtrágyák gyártását 45%-ról 80%-ra növeltük háromszoros termelésfelfutás mellett, ami azt jelenti, hogy ez a profil mintegy ötszörösére nőtt mennyiségileg.

Nyilvánvaló, hogy ez a kutatómunka eredményeinek a felhasználása nélkül nem lett volna lehetséges. Ennek a fejlesztésnek az volt az alapja, hogy a 60-as években kidolgoztuk azt a vállalati politikát, miszerint a nagyüzemi mezőgazdaság kemizálása felé kell fordulnunk. Ez biztos piac volt, és segítséget jelentett az a magas színvonalú mezőgazdasági kutató-kísérleti, oktató és szakigazgatási apparátus, amely az országban rendelkezésre állt, s amely biztos irányítója és ösztönzője volt a mi termelési struktúránk fejlesztésének.

A biológiai aktív anyagok fejlesztése, termelése nagyon sok — 10—15 — tudományág fejlődésétől függ. Ezek befolyásolják, ösztönzik, bizonyos mértékig korlátozzák a fejlesztést. Ez a körülmény adta a vállalati politikánk másik alapját, miszerint szélesítenünk kell szellemi kapacitásunkat. Ennek 3 forrása volt.

Egyik volt a meglevő kapacitás jobb felhasználása, a kutatómunka koncentrálása a fejlődő profilra és a termelésben dolgozó mérnökök átirányítása a kutató-fejlesztő munkára.

A másik forrás volt a saját szellemi kapacitás bővítése. Új biológiai állomást, szerves kutatólaboratóriumot és kísérleti üzemeket létesítettünk. Jelenleg 50 felsőfokú képzettségű kutatónk dolgozik, ezek közül 41 laboratóriumban. Az innovációs lánc befejezésén további 38 felsőfokú képzettségű műszaki tervező, beruházó, közgazdász, marketing-szakember, szervező és pszichológus dolgozik.

Talán még nem általános, de mi már évek óta személyiségvizsgálat alapján irányítjuk mérnökeinket kutató vagy termelő munkára, és nagyon jó tapasztalataink vannak ezen a téren. Ezeket a számokat nem dicsekvésként mondom el, hanem annak érzékeltetésére, hogy ez nem elegendő.

Végül a harmadik forrás — mivel a vállalat belső adottságai korlátozva vannak — a külső szellemi kapacitás szélesítése. Ez még nem sikerült kellőképpen. Ennek egy sor objektív akadálya van. Objektívnak nevezem az irigységgel, sovinizmussal és egyéb rosszal terhelt emberi alaptermészetet is.

A mostani időszakban — ami vállalatunkat és a növényvédőszer-ipart illeti — még nagyobb jelentősége van a kutatásnak, a műszaki fejlesztésnek. A mezőgazdaság növényvédőszer felvételének növekedése csökkenő tendenciát mutat. Nagyobb követelményekkel lépnek fel a hatékonyság tekintetében, tehát jobb használati értékű termékeket kell adnunk, és rendkívüli módon nő

a humán és környezetvédelmi követelmények rendszere, végül a hazai és külföldi vállalatok versenye is erősödik, tehát csak lényegesen nagyobb szellemi kapacitással állhatjuk meg a helyünket.

Mi úgy értékeljük a helyzetet, hogy a kémiai kutatás terén saját szellemi kapacitásunknak mintegy 100 százalékát kellene igénybe vennünk; jelenleg csak 5—10 százalékát tudjuk igénybe venni. A mezőgazdasági hatékonyság és a környezetvédelmi kutatás terén a háromszorosát vesszük igénybe saját kapacitásunknak.

Néhány szót a gátló okokról és talán a megoldási javaslatokról. Nem mondok újakat, de talán még nem általánosak ezek. Megvalósításuk gyümölcsözőbbé tenné az ipar és a kutatóhelyek kapcsolatát.

Egyetértek azzal, amit Holló akadémikus mondott, hogy elsősorban a témaválasztáson múlik a megoldás. Nem megoldás, hogy a vállalatok csak a kiegészítő kutatásokat, a kevés sikerrel kecsegtető feladatokat adják oda, és az sem megoldás, hogy a kutatóintézetek egy-egy kutatási eredménnyel házalnak a vállalatoknál — mint ahogy erre is van példa. A kutatási témáknak a kutatóintézeteknél egyszerre kell megszületniük a vállalatok fejlesztési elgondolásaival.

A következő szervezeti, formai és anyagi érdekeltségi megoldásokra gondolok a kapcsolat fejlesztése érdekében: A kutatóintézetek és a vállalatok éljenek együtt a vállalati stratégia kidolgozásában. Létesítsenek közös tervezési teameket, kutatás-fejlesztési teameket, vegyenek részt a vállalatok vezetői, igazgatói testületeiben, főként műszaki vezető testületeiben. Azt hiszem, az sem lett volna felesleges, ha a minisztérium a növényvédőszer-ipar és a gyógyszeripar nagy központi fejlesztési programjának kidolgozásában Kémiai Tudományok Osztályát jobban bevonta volna.

Fel lehetne újítani azt a régi gyakorlatot — bár lehet, hogy csak mi maradtunk ki —, amely szerint az ipari vezetők tagjai voltak a kutatóintézetek tudományos tanácsának. Ez növelné, szélesítené a kapcsolatot.

Szélesíteni kell a kapcsolatot a konkrét fejlesztési teamek tekintetében, amelyekben a tudományos intézetek kutatási eredményei, laboratóriumi eljárásai és az üzemi megvalósítás technikai lehetőségei hamarabb kerülnének közel egymáshoz, mint most. Egy-egy kutatóintézet eredményének megvalósítása terén gyakran technikai problémák adódnak, és így a vállalatnak sokszor szinte újra kell kezdenie a munkát.

Többször felajánlottuk, hogy szívesen kiküldjük fiatal vegyészeinket a kutatóintézetekbe, akár a mi munkánkról, akár más munkáról van szó, de nem vették igénybe. Az sem lenne haszontalan, ha a kutatóintézetek mérnökei jönnének hozzánk.

A kölcsönös információs kapcsolatokat ki kellene építeni, de ez már abból is adódik, ha az elmondott formában szélesedik a kapcsolat. Rengeteg a kiadvány, a publikáció, a publikációkról szóló információ, és még ezeket

az információkat sem tudja egy vállalatvezető elolvasni. Elsősorban arra gondolok, hogy a vállalatok gazdasági és műszaki vezetőit kellene jobban informálni arról, hogy milyen kutatási eredmények vannak, mert nem lehet kívánni, hogy ezt nyomon kövessék. Rábukkanva egy-egy eredményre most is ösztönözni tudom munkatársaimat már azzal a kérdéssel is, hogy „ismeritek-e, használjátok-e?". A vállalati vezetők kevésbé soviniszták, de segítségre van szükségük, hogy a munkatársak sovinizmusát leküzdjék. Milyen jó lenne a tudomány és a gyakorlat összekapcsolásán munkálkodni úgy, hogy a vállalat már az alapkutatási eredményekről információt kapna a vele azonos profilú intézettől.

Szeretném aláhúzni, hogy mindezzel nem a központi kutatás-fejlesztési apparátus szélesítésére gondolok, nem is a mostanában divatos kutatás-fejlesztési társulásokra, vagy újabb információs kiadványokra, dokumentációs irodákra. Félő, hogy ezek előbb-utóbb öncélúvá válnak. A kutatóintézetek és a vállalatok közvetlen együttélésére, együtt-gondolkodáson alapuló kapcsolataira van szükség.

Kell valamit beszélni az anyagiakról is. Az 5—10 százalékos külső kémiai kutatás igénybevétele a műszaki fejlesztésre rendelkezésünkre álló összegnek 20—30 százalékát viszi el. Ugyanilyen arányban viszi el a mezőgazdaságilag kapcsolatos kutatás is. Kicsit költséges ez a kapcsolat. A vállalat nem bírja el ezeket a kutatásokat.

Volna néhány javaslatom. Elsősorban az államnak nem kellene a kutatóintézeteket és a tanszékeket annyira megadóztatnia, és főként adómentességben kellene részesítenie azokat a kutatásokat, amelyek realizálódnak. Ez eléggé ellenőrizhető.

A mi műszaki fejlesztési alapunknak, amely mindössze 2 és fél százaléka az árbevételnek, és kb. 3 és fél százaléka növényvédőszer profilunknak, 30 százalékát központi célokra viszik el. Jó lenne itt is még célra-irányozottabban visszaadni az intézeteknek ezt a pénzt, ha az iparral együttműködve, realizálható eredményeket produkálnak.

Nyilvánvaló, hogy a kutatóintézetben dolgozók személyi jövedelmének biztosítását is szolgálják a magas szerződési díjak. A megoldást elsősorban az ésszerű adóztatáson keresztül lehetne biztosítani, és akkor a dolgozóknak, a kutatási eredményt elérőknek is megmaradna a jövedelme. De azt is meg lehetne vizsgálni, hogy arányosak-e ezek a jövedelmek, mert a túlzott dotálás éppen olyan káros, mint az alul-dotálás. Meg lehetne vizsgálni, hogy a kutatás bérköltségei hogyan alakulnak a különböző területeken. Nálunk a kutatási költségeknek mintegy 10 százaléka megy személyi jövedelmekre.

Olyan megoldási javaslat is van, hogy szélesíteni kellene az olyan szerződések körét, melyeknél csak akkor kelljen fizetni, ha realizálás megtörténik. Ilyen módon az ezeken a munkákon dolgozók személyi jövedelmét is jobban lehetne biztosítani.

Az iparral való kapcsolat szélesítése talán módosítaná az alap-, az alapozó és alkalmazott kutatások arányát a kutatóintézeteknél, tanszékeknél, de gyümölcsöző együttműködés esetén az előbbiek színvonala is fejleszthető volna.

Úgy gondolom, hogy ezek a szervezeti és érdekeltségi megoldások biztosíthatnák a gyakorlat és a tudomány kapcsolatának parancsolóan szükséges szélesítését. Végül elnézést kérek, hogy nem a nehéziparról beszéltem, — bár erre szólt a felkérésem, de mi könnyű- és középiparra váltunk.

SZÁNTÓ ANDRÁS
kémiai tudományok kandidátusa, a Nehézvegyipari Kutatóintézet igazgatója

Osztályelnökünk beszámolója az elmúlt években végzett munkánkról nagyon sok érdekes adatot, értékes gondolatot tartalmazott. Egyetértek azzal — amit elnökünk is kiemelt —, hogy a vegyipar igen gyors fejlődése mögött minden esetben valamilyen kutatói tevékenység áll, bár felsőszintű gazdasági vezetőink erről gyakran megfeledkeznek.

Szeretnék példákat hozni arra, hogy nem az a legfontosabb hajtóerő a vegyiparban, hogy mennyit fordítunk beruházásra, hanem az, hogy mennyit fordítunk kutatásra. A magam részéről növényvédőszer-kutatással foglalkozom. Mivel ez szorosan kapcsolódik a gyógyszerkutatáshoz, engedjék meg, hogy egy-két példát említsek a két ágazattal kapcsolatban.

Mi kapcsolja össze ezt a két ágazatot? Elsősorban az a speciális vonás a vegyiparon belül, hogy ezeken a területeken a legritkább esetben lehet gyártási vagy termék-licencet vásárolni. Így a hazai növényvédőszeriparban és a gyógyszeriparban gyártott termékek előállításához szükséges technológiák az engedélyeztetéssel összefüggő biológiai és orvostudományi vizsgálatok a hazai kutatás produktumai. Azt hiszem, a növényvédőszer-iparban és a gyógyszeriparban dolgozó kollégáim ezzel egyetértenek.

Hogy a kutatás mit produkált, arra jellemző, hogy 1970-ben ennek a két ágazatnak a termelési értéke együttesen 8 és 1/2 milliárd volt összehasonlító árakon, 1980-ban pedig 29,2 milliárd. Ez azt jelenti, hogy az 1970. évhez képest 1980-ban a két ágazat 20 milliárd forinttal termelt többet. Mivel licencvásárlás alig volt, ez a 20 milliárdos növekmény nyugodtan írható a hazai kutatók javára (1. táblázat).

A magyar növényvédőszer-ipar — amint az 1. táblázatból kitűnik — 1970-ben 0,9 milliárdot termelt, 1980-ban pedig 8,2 milliárdot, termelési értéke tehát majdnem annyi, mint a két ágazatnak 1970-ben együttesen volt. Arról nem tudok, hogy a növényvédőszer-iparban — ahol pedig hallatlanul gyors a felfutás — az elmúlt években jelentős lincencvásárlásra került volna sor, tehát a termelési értéknövekedés valamennyi forintja mögött a kutatók

1. táblázat

A gyógyszer- és növényvédőszer-ipar fejlődése 1970—80 között (milliárd Ft)

	1970	1975	1980
Gyógyszer	7,6	13,6	21,0
Növényvédőszer	0,9	4,6	8,2
Összesen	8,5	18,2	29,2

tevékenysége áll. Azt hiszem tehát, hogy nekünk vegyészeknek, kémikusoknak nem kell szégyenkeznünk akkor, amikor a kutatás és a gyakorlat kapcsolatáról van szó.

Néhány konkrét példa: A Budapesti Vegyiművek fejlesztette ki a Buvinolt, amelyet nyugodtan lehet Magyarországon új növényvédőszernek nevezni. Ez nagy sikerű termék volt. A Budapesti Vegyiművek szervezte a kutatást, ő finanszírozta, akadémiai és egyetemi kutatóhelyek vettek részt a kutatásban, és ezeknek a kutatóknak a produktuma benne van a fenti összegben, illetve termelésnövekedésben.

Az 1970-es évek elejének két nagysikerű terméke a Fundazol és a Gramoxon volt. Mindkét termék gyártási technológiáját szabadalmazott eljárásokkal vállalati, akadémiai és ipari kutatóintézeti kollektívák dolgozták ki. Ebből a hazai igények kielégítésén túl tőkés és szocialista exportot is tudunk ma már lebonyolítani.

Az 1970-es évek végének két sikeres terméke az acetoklór és az Eptam, amely a magyar—szovjet agrokémiai egyezmény egyik kulcsterméke lett, és várhatóan 10 ezer tonna feletti mennyiséget fog az Észak-Magyarországi Vegyiművek termelni. A kutatást az Észak-Magyarországi Vegyiművek szervezésében több kutatóintézet végezte, többek között igen komoly szerepet játszott benne a Központi Kémiai Kutató Intézet, elsősorban kinetikai mérésekkel, de ezen túlmenően a gyártáshoz szükséges intermedierek minőségi paramétereinek meghatározásában is.

Az acetoklór kifejlesztését a Nehézvegyipari Kutató Intézet kezdte meg, az OMFB és a NIM finanszírozta, majd a későbbi szakaszában kapcsolódott be a kutatói tevékenységbe a Nitrokémia.

Kutatásaink eredményeként már az elmúlt évben több mint ezer m^3 termék került a piacra, és érdekességként jegyezném meg azt, hogy a gyártás első évében a vállalati tiszta nyereség többszöröse volt a kutatásra fordított költségeknek.

Folytathatnám a példákat tovább. Valamennyi azt bizonyítaná, hogy az ágazatban elért kiugró eredmények mögött kémikus kutatóink százai állnak, függetlenül attól, hogy vállalati kutatóhelyen, ipari kutatóintézetbe

vagy a Magyar Tudományos Akadémia kutatóintézeteiben dolgoznak-e. A felsorolt eredmények éppen a kutatás és a gyakorlat szoros kapcsolatát és gazdaságosságát támasztják alá.

Engedjék meg, hogy a következő táblázatban bemutassam: mennyire gazdaságos a kémiai kutatás hazánkban (2. táblázat).

Itt van feltüntetve a NEVIKI eddigi fennállása alatt kidolgozott technológiákkal a vállalati termelési érték, a vállalati nyereség, a nettó devizahozam, a kutatási költség ötéves periódusokban, az átlaglétszám és a kutatással létrehozott bruttó nemzeti termék Ft/Ft-ban. Külön felhívom a figyelmet az 1974 és 1979 közötti csökkenésre, mert erre a tényre a későbbiek során még vissza szeretnék térni, hogy mi ennek az oka. Nem a tudomány és a gyakorlat közötti kapcsolat szorosabbá tétele.

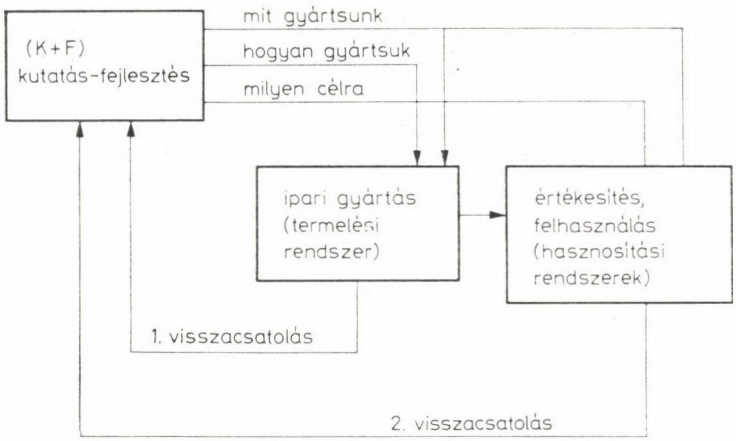
Véleményünk szerint az a soron következő feladatunk, hogy megszervezzük a kutatás, fejlesztés, termelés, értékesítés egész rendszerét. Növelnünk kell az innovációs rendszerben való részvételi készségünket valamennyi részletterületen annak érdekében, hogy magasabb szinten és gyorsabban tudjunk a tudomány vonaláról reagálni, s magasabb szinten és gyorsabban tudjuk kielégíteni a tudománnyal szemben felmerülő újabb igényt.

A magyar növényvédőszer-ipar ugyanis időközben felnőtt oda, hogy lassan konkurrense lesz a nagy nyugati monopóliumoknak. Mivel e monopóliumok a szabadalmi törvények adta kereteken belül készítik termékeiket, majdnem lehetetlen ma már eljárás-szabadalmakkal biztosítani újabb termékekre a hazai gyártás lehetőségét. Ha növényvédőszer-iparunk tartani akarja az eddigi fejlődési ütemet, akkor az eljáráscentrikus kutatásról a termékcentrikus kutatásra kell átállnia. Ez pedig az eddigieknél sokkal nehezebb feladatot jelent. Ebben az esetben ugyanis már arról van szó, hogy valami teljesen új terméket találunk, és azt áruvá fejlesztjük. Ezt szeretném még egy kicsit kibővíteni, teljesen egyetértve azzal, amit osztályelnökünk az innovációról mondott. Teljesen egyetértek azzal, hogy az innováció folyamata nem fejeződik be egy szabadalom megadásakor, hanem a termék piacra hozatalával

2. táblázat

A NEVIKI-ben kidolgozott technológiai kutatási eredmények ipari hasznosítása az Intézet fennállása óta

	Új termékek termelési értéke eFt	Vállalati nyereség eFt	Nettó deviza hozam e$	Kutatási költség eFt	Átlag létszám fő	Kutatással létrehozott BNT Ft
1949—54	1 900	—	—	44 988	220	0,05
1955—59	19 000	—	—	41 688	201	0,50
1960—64	476 581	52 327	8 695	78 944	289	6,04
1965—69	1 327 114	368 865	18 327	108 897	253	12,19
1970—74	3 451 301	778 034	36 342	157 704	347	21,88
1974—79	5 076 760	1 215 773	32 804	341 006	482	14,89



1. ábra

fejeződik be. Most azzal szeretném ezt kibővíteni, hogy a növényvédőszerek esetében még ekkor sem fejeződik be az innovációs folyamat. Egy növényvédőszer-ipari termék bevezetése után nem szabad befejezni a kutató-fejlesztő munkát! Éppen ellenkezőleg, a nyugati tapasztalatok alapján fokozni és koncentrálni kell annak érdekében, hogy egyrészt időben megszüntessük vagy megelőzzük a tömeges felhasználás miatt keletkező nemkívánatos hatásokat és elváltozásokat, másrészt módosítva vagy továbbfejlesztve a terméket, újabb felhasználási területeken keressük meg az alkalmazást gátló okokat.

Továbbfejlesztéssel újabb kultúrákra lehet kiterjeszteni a felhasználási területet. Enélkül ugyanis egy-egy termék mind kevésbé lesz az idők folyamán korszerű és jól értékesíthető, mert állandóan csökken a termék piacon maradásának az esélye.

Annak alapján, amit elmondtam, az a véleményem, hogy a gyógyszer- és növényvédőszer-iparban állandósult ipari innovációra van szükség. Ezt sematikusan a következő ábrán mutatom be (1. ábra). Nem azért, mintha nem lenne ismert, hanem csak annak illusztrálására, hogy korábban eljáráscentrikus kutatást folytattunk, a K+F egyetlen információt szolgáltatott az innovációs rendszerben: azt, hogy hogyan gyártunk. Amikor teljesen új termék kifejlesztéséről van szó, akkor már olyan adatra is szükség van, hogy mit gyártunk, és milyen célra gyártjuk azt a terméket.

Lényegesen megnehezült tehát a feladatunk. Hadd utaljak itt vissza a 2. táblázat utolsó kockájára, ahol csökkent az a bizonyos Ft/Ft érték! Ennek az az oka, hogy a NIM és az OMFB támogatásával a NEVIKI felkészült az új növényvédőszer-kutatásra. Ez azt jelenti, hogy 1977 közepe táján megkezdtük az Intézetben az új vegyületek kutatását. Vegyületkutatásban azonban csak nagyon hosszú átfutási idővel várható eredmény. Az egységnyi

kutatási költségre jutó nemzeti terméknövekedés tehát majd csak valamikor 8 év múlva fog jelentkezni, de költségeink már most nőttek, ezért csökkent ebben a periódusban az Intézet kutatóinál az adatszám.

A kutatás — és ezt szeretném aláhúzni — nagyon drága ma, amikor valami újat kell produkálni. Amit mondtam, abban az a lényeg, hogy ez drága gazdasági tevékenység, mert — véleményem szerint — a kutatás csak gazdasági tevékenységként igaz, bár sok esetben saját belső törvényszerűségeinknek engedelmeskedő tevékenységként kell kezelnünk mind a gyakorlat, mind a kutatás oldaláról. Ha a gyakorlat oldaláról ezt elfogadják, akkor nem fordulhat elő, hogy egyes kutatók számára a sikerélmény a gyakorlatban megvalósított eljárás helyett egy öncélú disszertáció lesz. Azt hiszem, ezen a területen mindinkább javulás érhető el.

Hogy miért drága a növényvédőszer esetében ez a gazdasági tevékenység, azt a következő táblázaton láthatjuk (3. táblázat). Ez a táblázat időrendi sorrendben mutatja a növényvédőszer-kutatás költségigényét. Az első sorban a szintetizált molekulák száma látható, és az abból várhatóan esélyes sorban hozza a termékek számát. Ez az 1975-ös adat ma nem sokkal ment feljebb. A mostani adatok szerint mintha csökkenne valami miatt a molekulák száma. Ez azonban nem jelent semmit, mert a költség 16—18 millió dollár körül van a különböző irodalmi források szerint. A molekulák száma viszont most 8—10 000 között van.

3. táblázat

Az Intézetben kidolgozott gyártástechnológiák és szabadalmak alapján 1979. évben iparilag gyártott termékek gazdasági eredménye

Termék megnevezése	Termelési érték eFt	Vállalati eredmény eFt	Nettó devizahozam e$	Export értékesítés eFt
Aktinit PK	300 511,—	+ 73 688	1 375	
Propazin	33 317,—	+ 7 586		
Aktikon PK	67 150,—	+ 18 010	247	
Dikonirt D	18 604,—	— 1 665		
MG 02 50 EC	290 173,—	+ 57 013		
Satrin	22 504,—	+ 3 934		
Sazin	55 752,—	+ 8 009		
Zeaposz—10 belf.	40 407,—	+ 7 803		
Zeaposz—10 exp. D.	20 998,—	— 4 649		16 051
Zeaposz—10 exp. T.	10 214,—	+ 1 665	459	8 565
Ipam 20	1 397,—	+ 202		
Rideon 80 WP	143 488,—	nincs adat		44 000
Adol 80 WP	99 031,—	nncs adat		
Redentin	8 320,—	nincs adat		
Molfilit	908,—	— 93		
Kriolit	71 548,—	nincs adat	1 536	53 446
Katesil	10 321,—	nincs adat		
Összesen	1 194 643,—	+171 503	3 617	122 062

4. táblázat

Ciba—Geigy konszern kutatási és beruházási költségeinek alakulása (millió Sfr)

	1976	1977	1978
K + F költségek	726	760	762
Beruházások	679	640	554

Lehet, hogy talán túl sokat időztem ennél a gondolatnál, hogy ez drága tevékenység. A NEVIKI május 1-ig összesen 113 kutatási szerződést kötött meg. A szerződések összege kb. 110 millió forint. Várható még 10—15 millió forint értékű szerződés. Eddig 59 vállalattal van szerződéses kapcsolatunk, nagyon komoly problémákra, — napi problémákra is. Én azonban azt hiszem, hogy ebben az új helyzetben, amely a növényvédőszer-ipart erősebben érinti, az egész innovációs rendszer szervezéséről van szó. Azt hiszem, ebben az egész folyamatban az a lényeg, hogy az innovációs rendszer valamennyi eleme megfeleljen, mert enélkül nem tudunk eredményt produkálni.

Még egy adatot szeretnék a kutatással és a beruházással kapcsolatban bemutatni (4. táblázat). Méghozzá a Ciba—Geigy adatait. Ez a cég gyógyszerek forgalmazásával, gyártásával foglalkozik. Ezen a táblázaton a Külkereskedelmi Minisztériumból kapott tájékoztatás szerint a konszern 1976—77—78. évi K+F költségei és beruházási költségei szerepelnek. Mint látható, egy ilyen multinacionális cégnél, ahol a termelési érték ezekben az években 3 milliárd dollár felett volt — tehát egy tisztességes volument jelentő, nagy cégnél — a kutatási költségek minden évben konzekvensen lényegesen magasabbak a beruházásra fordított költségeknél. Azt hiszem — és ismétlem —, hogy néha felsőbbszintű gazdasági vezetőink a jelentőségénél nagyobb gondot fordítanak beruházásokra, semmint kutatásra, holott kutatás képes produkálni az új eredményt. A beruházás csak a meglevő eredmény gyakorlati megvalósítását teszi lehetővé. Azt hiszem, a gyógyszeripar ittlevő vezetői egyetértenek velem abban, hogy gyógyszeriparunkat nem a beruházók és nem a kémikusok, hanem kölcsönösen a kutatók sora tette naggyá. Közülük ma nem egy az Akadémia tagja.

Amikor a kutatás helyzetéről, szerepéről, kapcsolatairól beszélünk — véleményem szerint —, erről senkinek sem szabad megfeledkeznie.

HOZZÁSZÓLÁSOK

PUNGOR ERNŐ
az MTA rendes tagja

Nagyon sok helyen elhangzik, hogy a magyar kutatóbázis nagy-e vagy kicsiny, és ezt a kérdést igen komolyan kell vennünk. A magyar kutatóbázis összlétszáma — tehát nemcsak a kutatóké, hanem az összes dolgozóé — ma 86 000 körül mozog. Ez egy közepesen fejlett országban — a nemzetközi összehasonlítás alapján — normális. Nem tudok tehát egyetérteni azzal a véleménnyel, hogy nagy a létszám.

Annál inkább problematikus, hogy hogyan van felhasználva. A magyar kutatásirányítás — ahogy HORVÁTH GYULA kollégánk is mondotta — nagyon sok hibával működik. Ezeknek kiküszöbölése nélkül nem tudjuk a kutatóbázist az ország tudomány- és gazdaságpolitikájának megfelelően kihasználni.

Az Akadémia több osztálya foglalkozott ezzel a kérdéssel az elmúlt években. Ott pontosan az az elv alakult ki, amelyet HORVÁTH GYULA és POROS TAMÁS is említett, hogy a célkutatást annak kell kézben tartania, aki megvalósítja a kutatás eredményét. Abban voltak viták — és óriási félelem jelentkezett, nem a műszaki és természettudományos osztályok részéről —, hogy mi lesz az anyagi támogatással. Az Akadémia vezetősége itt megállt, nem merte ezt a kérdést tovább „ragozni", de ezt a kérdést elő kell venni, és az ország jelenlegi gazdaságpolitikájának megfelelően megoldani.

POROS TAMÁS említette, hogy az ipari vezetők legyenek tagjai a kutatóintézetek tudományos tanácsának. Én megfordítanám a kérdést: az ipari intézményeknél kell létrehozni tudományos tanácsokat, amelyek révén az ipari vezetők megismernék a tudomány véleményét. Ezt már többször javasoltam. Jó lenne, ha az ipar, éspedig a fejlődő ipar vezetői ezt figyelembe vennék.

Felmerült a kérdés, hogy a kutatók kis blokkban, vagy nagy blokkban kutassanak-e? Többször hangoztattam már, hogy adekvát kutatási szisztémát kell teremteni — a témának megfelelően. Van eset, amikor egy kutató munkája a jobb — gondolok az új témák felvetésére —, de amikor a kutatás realizálásáról van szó, akkor már valamilyen csoportnak kell dolgoznia. Nem lehet az ipari célkutatásokban mereven alkalmaznunk azt a stratégiát, amelyet jelenleg alkalmazunk, mert nem igaz, hogy ha egymás mellett, párhuzamosan

dolgozik száz vagy ezer kiváló koponya, az biztosítja az ipar számára a megfelelő eredményt.

A beszámolóval kapcsolatban szeretném még megemlíteni, hogy lemaradt a termikus elemzési munkabizottság anyaga. Ez a munkabizottság egy kicsit párhuzamosan dolgozott a szilárdtest kémiai munkabizottsággal. A termikus analitikai munkabizottságnak volt a beszámolási időszakban egy nemzetközi konferenciája, volt több hazai megmozdulása. Felmerült már, hogy a kettőt össze kellene vonni, — valószínűleg ezért maradt ki a beszámolóból ennek a munkabizottságnak a tevékenysége.

NAGY FERENC
az MTA levelező tagja

Tisztelt Osztályülés! Az elnöki beszámolóban láttunk egy elemzést a minősítettek kor szerinti megoszlásáról. Érdeklődéssel figyeltem ezt, mert Szabó akadémikus felkérésére — a múltban — kétszer is csináltam ilyen jellegű elemzést és hasonló megállapításokat tettünk a fizikai-kémia területén is. Valóban a doktorok és a kandidátusok kor szerinti eloszlása a védés szempontjából az elmúlt 15—20 év alatt eltolódott a magasabb életkor felé.

Egy dolgot azonban itt figyelembe kell venni. Nevezetesen azt, hogy csak az lehet doktor, aki kandidátus, tehát ha a kandidátusi fokozat megszerzése időben eltolódik, akkor óhatatlanul odébb tolódik a doktori fokozat elérésének az ideje is. Az én korosztályom esetében és még utána is éveken át a kandidátusok zömét az aspiránsok adták, akiket fiatal korban, közvetlenül az egyetem elvégzése után vettek fel. Az egyetemet 22 éves — és nem 24 éves — korban, a katonaság után végeztük el, mint manapság. Ma alig vesznek fel aspiránst — és azokat sem közvetlenül az egyetem elvégzése után —, és ezt igen nagy problémának látom. Mint a TMB-szakbizottság egyik tagja azt tapasztalom, hogy a kandidátusság lassan életművé válik.

A megoldást a kandidátusoknál kellene keresni, pl. lejjebb kellene szállítani a mércét. Végeredményben a kandidátus, szó szerint értelmezve várományost jelent. Néha túl sokat várunk attól a szerencsétlen kandidátustól. Ez is összefügg az időtényezővel.

Néhány szót a scientometriáról. Ragyogó, érdekes, gondolatébresztő példákat láttunk az osztályelnök beszámolójában. Nekem két gondolatom támadt ezzel kapcsolatban.

A szokásos folyamat az, hogy először mérünk, azután minősítünk. Ez utóbbihoz azonban norma kell. Itt a mérésre láttunk példát. A mérési módszeren lehet vitatkozni, de ennél jobbat más sem igen tud.

A következő lépés azonban hiányzik, nevezetesen az, hogy a minősítéshez normát találjunk, mert összehasonlítani csak az azonos kategóriába tartozó

dolgokat lehet. Ha veszek pl. egy magyar kémiai folyóiratot és egy amerikait, akkor minden mérés nélkül is tudom, hogy az utóbbira sokkal többet hivatkoznak. Tehát meg kellene állapítani az egyes kategóriákhoz tartozó normákat, és ezek alapján minősíteni.

A másik, ami eszembe jutott az, hogy mindennek a titka a jó arány. Nehogy az jöjjön ki a scientometriából, hogy támogatni csak az eredményeket kell. Az anyagi eszközök zömét valóban az eredményes kutatások további dotálására kell fordítani, de mi lesz az új téma-ötletek támogatásával, amelyeknek nincs még eredménye? Úgy vélem, hogy az anyagi eszközöknek valamennyi százalékát olyan témák támogatására kell fordítani, amelyek mögött még nincs eredmény, mert különben úgy járunk, mint az a gyár, amely úgy véli, hogy azt kell termelnie jövőre is, amiből tavaly a legtöbbet adtak el. A gyárnak nyilvánvalóan új dolgok gyártását is el kell kezdenie. Főleg a fiatalokkal szemben lenne igazságtalanság, ha csak az eredményre adnánk pénzt. Az új témaötletekre is kell pénzt adni, még akkor is, ha ez kockázatot jelent.

Még egy gondolatot szeretnék felvetni. Többen beszéltek — Holló akadémikus is — a kutatás és az ipar kapcsolatáról. Kiderült, hogy a laboratóriumi petrolkémiai eljárás esetében a laboratóriumi kísérlet és az üzemi megvalósítás közötti lépések nemcsak elvileg mások, mint egy gyógyszer esetében, de a méretváltások is más nagyságrendbe esnek, mind műszakilag, mind gazdaságilag.

Itt tehát hasonló dolog merül fel, mint scientometria alkalmazásánál: a kutatás ipari hatékonyságát valóban mérni kell, de a minősítéshez norma is kell! Ez a saját tapasztalatom szerint igen lényeges probléma, mert csak így tudjuk reálisan megítélni az egyes tudományágak ipari hasznosságát.

Tapasztalatom szerint a kutatás és az ipar kapcsolata vonatkozásában az egyik leglényegesebb probléma az emberi kapcsolat. Olyan szerepet tölt ez be — hogy példával éljek —, mint egy gép esetében az olaj. A gép jó, az áttételek működőképesek, de csikorognak a fogaskerekek, ha hiányzik a kenőanyag. Nyilvánvaló, hogy a gazdasági kényszer az első, mert ennek érvényesülését segítik vagy akadályozzák az emberi kapcsolatok.

Úgy érzem, hogy ezen jó emberi kapcsolatok kialakításában, ill. bővítésében többet tehetne az osztály, az osztály bizottságai és munkabizottságai. A múltban is egyes bizottságok — a műszaki kémiai, a petrolkémiai és mások — üléseiket a gyárakban, intézetekben tartották. Erre nagyobb gondot kellene fordítani a többi munkabizottságnak is. Hasznos lenne ez mind a munkabizottsági, mind az ipari kollégák szempontjából, mivel így jobban megismernék egymást, ami egyik feltétele a jobb emberi kapcsolatok kialakulásának.

CSIKÓS REZSŐ
a Magyar Ásványolaj- és Földgázkísérleti Intézet igazgatója

Engedjék meg, hogy én is mondja egy idézetet. A múlt évben Bukarestben volt a X. Petroleum Világkongresszus. Ezek a jelentős világrendezvények a szerves-kémiai alapanyagok és a motorhajtóanyagok szempontjából meghatározzák a következő időszak feladatait. A világkongresszus elnöke azzal kezdte, hogy Moszkvában, Tokióban és Bukarestben a világkongresszusoknak volt egy jelszava, amely a következőképpen hangzik: „A szénhidrogének az emberiség jólétét szolgálják."

Ez a jelszó ma is érvényes, és téves az a nézet, hogy a szénhidrogének szerepe a közeljövőben csökkenni fog. Csökkenni fog a szénhidrogéneknek, mint energiahordozóknak a szerepe, de növekedni fog a jelentősége, mint szerves alapanyagnak, mert hasonló alapanyagok előállítása más úton sokkal nagyobb költségekkel járna má. Amikor új irányzatok jelennek meg, akkor ezt figyelembe kell venni. Ez a hatás minden valószínűség szerint Magyarországon is érvényesülni fog.

A másik témakör a hatékonyság mérésével kapcsolatos. Nagyon tetszettek a bemutatott adatok, de az elnöki beszámoló is hozzátette, hogy ezeket más szempontok együttes figyelembevételével kell alkalmazni. Az ipari kutatóintézeteknél nyilvánvalóan — legalábbis részben — mások a szempontok, mint az akadémiai intézeteknél. Az adatokat sokféleképpen lehet értelmezni, különösen akkor, ha például fel lettek volna tüntetve a szabadalmak, a realizálások, az olyan értékek, mint a többletjövedelem, többletnyereség is.

Intézetünkben a közelmúltban végeztünk olyan felmérést, amely szerint a sikeresen befejezett témáknak 14%-a valósult meg. A nemzetközi statisztika azt mutatja, hogy ha 100 témából 5 már megvalósul, akkor sikeresen működik az a kutatási egység. Ezek szerint a mi Intézetünk sikeres.

A beszámolási időszakban volt olyan témánk is, hogy egy 535 000 t/év kapacitású komplett üzem kidolgozását, licenc-, garancia- és technológiai adatszolgáltatását is vállaltuk, amire eddig nem volt példa. Ez azt mutatja, hogy a magyar kutatás — és az ipari kutatás is — az elmúlt időszakban rendkívül nagyot lépett előre.

Tudnék további példákat mondani a mi területünkre, a műanyagfeldolgozó ipar és szerves kémia területére is. Itt van például a harmadlagos olajbányászatnál használatos segédanyag gyártástechnológiájának kidolgozása. Kísérleti eredményeink alapján előkészítés alatt van egy 10 000 t/év kapacitású üzemnek a hazai létesítése, amely világviszonylatban is az élvonalba tartozik. Vagy például a metil-tercier-butiléter szintézisét és felhasználását a világon első három szervezet között dolgoztuk ki. Nem az intézeten múlott, hogy Magyarországon még ma sincs ilyen üzem, Európában és az Egyesült Államokban pedig gombamódra szaporodnak az ilyen kapacitások.

Ha ezeket figyelembe vesszük, akkor mindenképpen helyes, hogy valamilyen módon megpróbáljuk mérni a hatékonyságot. Ez a hatékonyság és tulajdonképpen az innovációs folyamat is változik. Hogy ezen változás kedvező irányú legyen, ezt kívánják azzal a nemrég megjelent rendelettel elősegíteni, amely ún. kutatási-fejlesztési-termelési társulásokat kíván létrehozni, hogy ezáltal végig egységes felfogásban és szemlélettel irányítsák az innovációs folyamatot.

KISS LÁSZLÓ
a kémiai tudományok doktora, tanszékvezető egyetemi tanár

Az osztályelnöki beszámolóban részletesen szó volt arról, hogy a kutatás eredményességét hogyan lehet megítélni. Erre láttunk egy táblázatot, amelyik az akadémiai intézetekre és az ipari kutatóintézetekre vonatkozik. Az osztályelnök megjegyezte, hogy az egyetemekről nincsenek hasonló adataink, így ezzel nem is foglalkozott. Ennek ellenére a hétfői elnöki megnyitóban szót volt az egyetemek kutatásáról.

A Népszabadságban erről a következő olvasható: „Az elnök hangsúloyzta, hogy ez a munka nem választható el az egyetemi kutatások fejlesztésétől. Az utóbbi években az egyetemek mind több segítséget kaptak kutatásfejlesztő munkájukhoz, ez azonban mégsem tükröződik az egyetemi kutatások színvonalának és az oktatói állások presztizsének a növekedésében."

Ez az értékelés azt sugallja, hogy az egyetemi kutatások nem állnak a tőlük elvárható szinten. Hogy mit lehet elvárni, azt nehéz megállapítani, de rendelkezésünkre állnak olyan statisztikai adatok (VIGH J.: Felsőoktatási Szemle, **29,** 129, 1980), amelyeket semmiképpen sem lehet figyelmen kívül hagyni az egyetemi kutatások eredményességének a megítéléseéor.

Ezen adatok szerint országosan a kutatók 35,9%-a van egyetemen. Ha 1/2-del vesszük egy oktatónak az értékét, akkor ez csak 21,8%. (Közbeszólás: Harmadával!) Ez a statisztika 0,5-tel veszi. Ezzel szemben a kutatói segédszemélyzetnek csak 7,4%-a dolgozik egyetemen, illetve főiskolán. A pénzügyi ráfordításnak viszont csak 8,6%-át kapja ez a 35,9%.

Ennek ellenére tudományos fokozattal rendelkezik az oktatók 39%-a, tehát a tudományosan minősítetteknek a kutatókénál nagyobb százaléka dolgozik egyetemen. Ezen belül az akadémiai tagok 46%-a, a tudományok doktorainak 36%-a és a tudományok kandidátusainak 38%-a dolgozik az egyetemeken.

A továbbiakból kiderül az, hogy ezek a kedvezőtlen körülmények között munkálkodó egyetemi dolgozók produkálják a tudományos közlemények 58%-át. Ebből a könyveknek 52%-át, a folyóirat-cikkeknek 50,7%-át és így tovább. Ezek az adatok az egyetemi kutatás eredményességét bizonyítják.

Ha figyelembe vesszük továbbá osztályelnökünknek azt a megállapítását, amely szerint a kutatás eredményessége és a fokozatok között egyértelmű kapcsolat van, akkor úgy vélem, helytelen az olyan ítélet vagy értékelés, amelyből arra lehetne következtetni, hogy az egyetemi kutatómunka nem elég magas színvonalon folyik. Úgy vélem, fenti adatok összhangban vannak azzal, amit az osztályelnök az amerikai egyetemekkel kapcsolatban állapított meg, nevezetesen, hogy a kutatók létszámához képest sokkal nagyobb az egyetemi kutatók produktivitása. Úgy gondolom, hogy ez hazánkban is érvényes, és érdemes volna ezt figyelembe venni.

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981 p. 47—117

A HAZAI VEGYÉSZ- ÉS VEGYÉSZMÉRNÖK-KÉPZÉS

BEVEZETŐ

BECK MIHÁLY
osztályelnök

A Kémiai Tudományok Osztálya az elmúlt két év folyamán a vegyész- és vegyészmérnök-képző intézményekben osztályüléseket tartott, amelyeken megvizsgálta az ott folyó képzést és kisebb mértékben az ott folyó kémiai kutatásokat.

Ezek az osztályülések azt célozták, hogy az Osztály szerezzen teljes képet a hazai felsőfokú vegyész és vegyészmérnök-képzésről, és a kép alapján próbálja eldönteni azt, hogy vajon minden a lehető legjobban történik-e ezen a téren vagy pedig esetleg van még mód a javításra.

Természetesen van mód és az a kötelességünk, hogy megvizsgáljuk — most már összehasonlító módon —, hogy milyen keretek között folyik a vegyész- és vegyészmérnök-képzés Magyarországon és milyen célszerű javaslatokat lehet tenni az illetékes főhatóságoknak annak érdekében, hogy a szükségleteknek jobban feleljen meg a képzés.

Annak érdekében, hogy hatékony legyen az osztályülés, először a vegyész- és vegyészmérnök-képzés szerkezetéről és kereteiről hangzik el beszámoló, ezután a képzés problémáival és feladataival ismerkedünk meg, majd ezt követőleg kerül sor a vitára. Majd a felkért hozzászólók mondják el tapasztalataikat elsősorban a tekintetben, hogy milyen tapasztalatokat szereztek a vegyészek és a vegyészmérnökök képzettségéről és arról, hogy ez a képzettség mennyire alkalmas a feladatok ellátására, ezután pedig remélhetőleg széles körű vitára kerül sor.

Végül az Osztály nem ma, de valószínűleg még ebben a hónapban sorra kerülő ülésén fogja megfogalmazni a vita alapján azokat a javaslatokat, amelyeket az illetékes főhatóságokhoz — elsősorban természetesen az Oktatási Minisztériumhoz — fog felterjeszteni, remélve azt, hogy ezek a javaslatok meghallgatásra találnak.

A HAZAI VEGYÉSZ- ÉS VEGYÉSZMÉRNÖK-KÉPZÉS SZERKEZETE ÉS KERETEI

SZEBÉNYI IMRE
a kémiai tudományok doktora
(*BME Kémiai Technológia Tanszék*)

A kémia egyetemi oktatásának, a vegyészek és vegyészmérnökök kiképzésének nagy hagyományai vannak hazánkban. Első kémia tanszékünket 1763-ban alapították a Selmecbányai Bányászati Akadémián, ahol a világon először laboratóriumi gyakorlati képzésben is részesültek a hallgatók. A francia forradalom idején innen vette át ezt az oktatási módszert a párizsi École Polytechnique, ahogy azt a főiskola alapításáról szóló törvényjavaslat előterjesztője a FOURCROY a neves kémikus 1794-ben a konventben javasolta. 1769-ben szerveztek közös tanszéket a kémiának és a növénytannak a Nagyszombati Egyetemen, amely 1777-ben Budára, majd Pestre települt át.

A műszaki felsőoktatásban a vegyészmérnökök (1907-ig vegyészek) kiképzése az 1863/64 tanévre nyúlik vissza, amikor a József Polytechnikum műszaki osztályán már külön tanterv alapján képezték a mérnököket, a gépészmérnököket és a vegyészeket. 1871-ben létesítették a Vegyészmérnöki Kart. Az egyetemeken Budapesten, Debrecenben, Pécsett és Szegeden a két világháború között kémikusokat is képeztek. A tudományegyetemeken 1946-ban megvalósult a szervezett okleveles vegyészképzés a kémia szakos tanárképzés mellett. A Veszprémi Vegyipari Egyetem 1949. évi alapítása, valamint az Eötvös Loránd Tudományegyetemen, a József Attila Tudományegyetemen és a Kossuth Lajos Tudományegyetemen létrehozott, illetve önállóvá vált természettudományi karok jelentős állomásai a hazai vegyész- és vegyészmérnökképzés fejlődésének.

Az egyetemi képzést, különösen az elmúlt három évtizedben, sokszor reformálták, szerkezetét, tanterveit korszerűsítették, sokszor meg sem várva az előző oktatási reform hatását, értékelését, amelyet a pedagógia megkövetelt volna. A vegyipar, valamint a népgazdaság kemizálásának fejlődéséből eredő, változó ipari igényeket akarta felsőoktatásunk minőségileg és mennyiségileg egyaránt kielégíteni ezekkel a reformokkal. A műszaki tudományos fejlődés, a világgazdasági korszakváltás felismerése vezette egyetemeinket a felsőoktatásnak arra az útjára, mely nem elégedett meg a tantárgyak, a tananyagok korszerűsítésével, hanem az oktatás struktúráját is többször változtatta.

Mai osztályülésünknek nem tárgya, s így nem lehet feladatom ismertetni a hazai vegyész- és vegyészmérnök-képzés történetét, fejlődését, a változások okait, a tantervi megoldások előnyeit és hátrányait, hanem az Osztálynak az elmúlt két évben az egyetemeken tartott ülései, látogatásai és tapasztalatai alapján mutatom be a jelenlegi képzés helyzetét, szerkezetét.

A *vegyészképzés* öt éves egyfokozatú, a *vegyészmérnök-képzés* két fokozatú. Három éves képzési idővel *vegyész üzemmérnököket*, további két, összesen öt éves kiképzési idővel *okleveles vegyészmérnököket képez*. A műszaki felsőoktatásban ehhez szervezett továbbképzés, *szakmérnökképzés* is járul, munka melletti estilevelező formában, további két éves kiképzési idővel.

A tudományegyetemek vegyész szakainak tanterveit az 1—3., az ELTE kémia-fizika szakos tanárainak tantervét a 4., a Veszprémi Vegyipari Egyetem tantervét az 5—6., a BME Vegyészmérnöki Karának tantervét a 7—8. táblázatokban mutatom be.

Alap- és szakirányú képzés

Hazánkban mind a vegyész-, mind a vegyészmérnök-képzésben jelentős szerepe van a szakosítás nélküli alapképzésnek. Ennek keretében az általános és szervetlen kémia, szerves kémia, fizikai kémia, analitikai kémia, valamint a matematika, fizika és más természettudományi, illetve a vegyészmérnök hallgatók műszaki alaptárgyakat is tanulnak. Nagy különbséget a vegyész- és vegyészmérnök-képzés között a kémiai alaptárgyakat illetően nem találunk. Például a kvantumkémia című tárgy egy félév heti két órás előadással a 7. félévben éppúgy szerepel a Kossuth Lajos Tudományegyetem vegyész szakának, mint a Budapesti Műszaki Egyetem vegyészmérnök képzésének tantervében.

A kémiai technológia oktatása a tudományegyetemeken nem szakosított, a vegyészmérnök-képző intézményeknél az oktatás jellege miatt jelenleg részben szakirányok, ágazatok szerint folyik. Erősen szakosított volt a technológiai oktatás 1948 és 1955 között, bár a vegyészmérnök-képzés akkor sem volt mélyen specializált. Az első két évi egységes alapképzés után csak a harmadik és a negyedik évben volt szakosított a képzés. (Egyes szocialista országokban szakosított vegyészmérnöki karok működtek és működnek.) Ezt az *iparági (szervetlen, szerves, mezőgazdasági és élelmiszeripari) szakosítást* az 1955. évi reform megszüntette, s jelenleg a tudományos és műszaki fejlődés igényeinek megfelelő *interdiszciplináris* szakok vannak (szervező vegyészmérnök, biológus mérnök), s minimális szakosítást az ágazatok jelentenek. Fontos szerepe van a specializációnak a továbbképzés terén, amelyre még visszatérek.

A tudományos technikai fejlődés hatására az 1970-es években bevezetett határterületi képzés szakjai közül a *szervező vegyészmérnöki* és a *biológusmérnöki* szakok oktatási célkitűzéseit az alábbiakban foglalhatom össze:

A *biológusmérnök-képzés célja* olyan egyetemi szintű szakemberek képzése, akik a vegyészmérnöki és biológiai tudományok érintkezési területére eső, elsősorban környezetvédelmi, vízgazdálkodási, gyógyszeripari, agrobiológiai, talajtani és más rokon területek műszaki-biológiai problémáinak a megoldására képesek. E szakemberek a matematikai, fizikai alaptudáson túl kémiából, biológiából és ezek műszeres technológiai vonatkozásaiból rendelkeznek megfelelően elmélyült, alapos képzettséggel.

A *szervező vegyészmérnökök képzésének célja* olyan szakemberek képzése, akik megfelelő gyakorlat után képesek a vegyipari rendszerek működésével, tervezésével, szabályozásával, fejlesztésével és átfogó irányításával kapcsolatos műszaki-szervezési feladatok ellátására. Ezen belül az ipar szakterületeinek megfelelően részt tudnak venni a laboratóriumi vizsgálatoktól az ipari megvalósításig terjedő vegyipari kutatás és fejlesztés hatékony megvalósításában és megszervezésében.

A Veszprémi Vegyipari Egyetem szervező vegyészmérnök-képzés tantervét a 9., a BME Vegyészmérnöki Kara biológus-mérnök szakának tantervét a 10. táblázatban, a BME és a VVE szakosítási rendjét a 11. és 12. táblázatokban mutatom be.

A *tudományegyetemeken* jelenleg az Eötvös Loránd Tudományegyetemen *gyógyszerkutatási* és *magkémiai* szakirányokban folyik képzés, amely az összóraszám 20%-át teszi ki és 4 féléven át tart.

A Kossuth Lajos Tudományegyetemen a *klinikai* és *mezőgazdasági kémiai* szakterületeken három féléven át heti 4 órás a szakirányú képzés.

A József Attila Tudományegyetemen a *gyógyszerkémia* és a *katalízis* szakirányokban terveznek speciális képzést szervezni.

A hallgatók számára a szakok, ágazatok és szakirányokon túlmenően érdeklődésüknek megfelelően lehetőség van a választható kötelező, kritérium és fakultatív tárgyak tanulására is. Az Eötvös Loránd Tudományegyetemen 50, a József Attila Tudományegyetemen 25, a Kossuth Lajos Tudományegyetemen 20—25, a Veszprémi Vegyipari Egyetemen 12, a Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Karán 32 kritérium és 100 választható kötelező tárgy biztosítja a hallgatók speciális kollégiumokkal kapcsolatos igényeinek kielégítését. A kritérium tárgyaknak ezen túlmenően alapvető jelentőségük van a kétfokozatú képzésnél a második fokozatba történő irányításnál is.

A kétfokozatú vegyészmérnökképzés

A magyar műszaki felsőoktatás a hatvanas évek végére két szintűvé vált. Öt éves időtartammal *okleveles mérnököket* képez, akik a kutatás, tervezés, műszaki fejlesztés feladatait irányító szinten képesek ellátni, és akik alkalmasak a tudományos gondolkodást igénylő alkotó tevékenységre is. Három év alatt képezi ki az *üzemmérnököket*, akik a napi termeléssel és termelésirányí-

tással kapcsolatos feladatokat végzik, valamint a tervezés, fejlesztés, eljárások kidolgozása terén részfeladatok elvégzésére alkalmasak.

A hazai műszaki felsőoktatásban a vegyipar területén — a vegyipari gépész és élelmiszeripari szakokat kivéve — nem alakult ki a felsőfokú technikumi hálózat a hatvanas években. Ezért az 1967—68-as években az a kérdés merült fel, hogy a vegyész üzemmérnökök képzése erre a célra létesítendő új főiskolákon, a vegyészmérnök-képző intézményekben szervezendő főiskolai karokon vagy a vegyészmérnök-képző intézményekben kétfokozatú képzési rendszerben valósuljon-e meg. Pedagógiai és gazdasági előnyöket felismerve került sor 1969 szeptemberében a *kétfokozatú vegyészmérnök-képzés* bevezetésére Veszprémben és Budapesten. A pedagógiai előny főleg abban látszott, hogy az okleveles vegyészmérnökképzés színvonala a kétfokozatú képzés megszervezésével még növelhető. A gazdasági előny kézenfekvő volt, hiszen új főiskola vagy főiskolák beruházási költségei helyett lényegesen kisebb költséggel színvonalas vegyész üzemmérnökképzés valósítható meg a műszaki egyetemeken. Így mindkét fokozaton biztosíthatónak látszott a végző hallgatók magas színvonalú, s a végzendő feladatokhoz igazodó képzése, valamint az egy helyre koncentrált és egymáshoz kapcsolódó oktatás, mint a népgazdaság számára legfontosabb megoldás.

A kétfokozatú oktatási rendszerben hallgatóink 3 évi eredményes tanulás esetén vegyész üzemmérnöki diplomát szereznek, s akik a követelményeknek megfelelnek, további 2 éves képzés után okleveles vegyészmérnökök lehetnek.

A kétfokozatú graduális képzés egyik legnehezebb kérdése a *hallgatók fokozatokra történő irányítása*, mert a hallgatóság mintegy 90—95%-a okleveles vegyészmérnök akar lenni, a lehetősége pedig csak a hallgatók 60—65%-ának van meg. Az úgynevezett „pályatükör" hiánya miatt, amely alapján eldönthető lenne, hogy egy hallgató inkább vegyész üzemmérnöknek vagy inkább okleveles vegyészmérnöknek alkalmas-e, irányítási elveinket és gyakorlatunkat úgy alakítottuk ki, hogy azok az alábbi tényezőkön alapulnak:

— kritérium tárgyak teljesítése (Veszprémi Vegyipari Egyetemen 2 tárgy, Budapesti Műszaki Egyetemen 5 tárgy);
— a hallgatók 2., 3., 4. és 5. félévekben nyújtott tanulmányi eredményeinek átlaga;
— a hallgatót az első, második és harmadik tanévben oktató tanszéki kollektívák egyesített véleménye;
— az ifjúsági szervezet nyilvánosság előtt kialakított álláspontja.

A hallgatók irányításának elősegítésére és az inkább elméleti beállítottságú hallgatók számára az üzemmérnökképzés során felvehető választható, a hallgatók által önként vállalt ún. *kritérium tárgy rendszert* alakítottunk ki, mind Veszprémben, mind Budapesten.

Alapvető célja a kritériumtárgyak létrehozásának az volt, hogy az okleveles mérnökképzést mind szakmai, mind személyi vonatkozásban megala-

pozza és elősegítse már az üzemmérnökképzés idején. E tárgyak előadásai és gyakorlatai kiegészítik és továbbfejlesztik az első fokozaton megszerezhető alaptárgyi ismereteket.

Felvételi pontszámok

Oktatásunkban jelentős szerepe van leendő hallgatóink felkészültségének, tehetségének, amelyet részben jelez a felvételinél elért, illetve a középiskolából hozott pontszám.

A jelenlegi felvételi vizsga írásbeli és szóbeli tárgyai (matematika és fizika) között a vegyészmérnök hallgatóknál sajnos a kémia nem szerepel, s így a jelentkezők kémiai tudása nem befolyásolhatja, nem segítheti elő a felvételt. (A szakközépiskolákból jövő hallgatók fizika tárgy szóbeli vizsgája helyett kémiai technológiából vizsgázhatnak. A vegyész és kémia tanár hallgatóknál kémiából csak szóbeli felvételi vizsga van.) A kémiának a felvételi vizsga tárgyai közötti hiánya, illetve részbeni hiánya károsan hat a középiskolai kémia oktatásra is, s részben ennek tulajdonítható, hogy a tanulók érdeklődése a kémia tárgyat illetően a középfokú oktatásban nem kielégítő. Reméljük, a felsőoktatási felvételi vizsgák és a felvételi eljárás tervezett továbbfejlesztése segít e kérdés megoldásában.

Tájékoztatni szeretném az Osztályt és kedves vendégeinket, hogy az elmúlt három évben milyen *alsó ponthatárral* kerültek hallgatóink egyetemeinkre a vegyész és vegyészmérnöki szakokra:

	1977	1978	1979
BME	15	15	15
ELTE	17	18	18
JATE	16	16,5	16
KLTE	11	13	16
VVE	12,5	13	13

A *tanári szakoknál* az alsó ponthatárok így alakultak:

		1977	1978	1979
ELTE	kémia-fizika	14	—	—
	biológia-kémia	16	18	18
JATE	biológia-kémia	17	17	17
	kémia-fizika	13,5	13,5	16,5
KLTE	kémia-fizika	14,5	—	13
	matematika-kémia	—	11	13
	biológia-kémia	13	15,5	17

Szelekció kérdése

A változó beiskolázási létszámok miatt nem egy-egy tanév felvett és végzett hallgatói létszámát vizsgáltam, hanem azt, hogy a kezdő évfolyamból öt év múlva, ill. a kétfokozatú vegyészmérnök-képzésnél 3, illetve 5 év múlva hányan szerezték meg oklevelüket.

Az egyetemek létszámadatai az alábbiakat mutatják:

Vegyész hallgatók	ELTE	JATE	KLTE
I. évfolyam létszáma 1972-ben	34	31	47
Végzettek létszáma 1977-ben	32	23	44
I. évfolyam létszáma 1973-ban	31	22	37
Végzettek létszáma 1978-ban	32	21	32
I. évfolyam létszáma 1974-ben	26	29	39
Végzettek létszáma 1979-ben	27	29	33

Vegyészmérnök hallgatók	BME	VVE
I. évfolyam létszáma 1972-ben	210	166
Végzett üzemmérnökök száma 1975-ben	73	50
Végzett okleveles mérnökök száma 1977-ben	123	70
összesen végzett	196	120
I. évfolyam létszáma 1973-ban	230	186
Végzett üzemmérnökök száma 1976-ban	53	78
Végzett okleveles mérnökök száma 1978-ban	102	90
összesen végzett	155	168
I. évfolyam létszáma 1974-ben	220	201
Végzett üzemmérnökök száma 1977-ben	58	76
Végzett okleveles mérnökök száma 1979-ben	114	94
összesen végzett	172	170

Esti-levelező tagozatú képzés

A vegyészmérnök-képzés terén a nappali tagozatú képzés mellett Budapesten esti-levelező, Veszprémben levelező oktatás folyik. Kémia szakos tanárokat is képeznek levelező tagozaton. Az esti-levelező formájú vegyészmérnök-képzés kétfokozatú, az üzemmérnökök képzési ideje 4, az okleveles vegyészmérnököké további 2, tehát összesen 6 év.

Az ebben az oktatási formában résztvevők száma az elmúlt 30 évben csökkent. Létszámuk azonban nem elhanyagolható, jóllehet végzésük után nem új munkavállalóként jelennek meg a népgazdaság egyes munkahelyein,

hanem többségük változatlan munkahelyen, sőt egy részük azonos munkakörben dolgozik tovább magasabb színvonalon ellátva feladatait.

A Budapesti Műszaki Egyetemen a vegyész üzemmérnöki fokozaton évfolyamonként átlagosan 40 fő tanul, az okleveles vegyészmérnöki fokozaton 75 fő, amelynek a fele olyan nappali tagozaton végzett üzemmérnök, aki legalább két évi munka után az esti-levelező formában kíván vegyészmérnöki oklevelet szerezni. A Veszprémi Vegyipari Egyetemen az első fokozaton átlagosan évfolyamonként 45, a második fokozaton 35 levelező tagozatú hallgató van, közülük 20 olyan, aki a nappali tagozaton szerzett vegyész üzemmérnöki oklevelet.

Ezért a kétfokozatú képzésnél külön vizsgálandó az I. évre, tehát az üzemmérnöki fokozatra felveendők száma, tudása, rátermettsége, a képzés színvonala, és külön, hogy milyen létszámban biztosítsunk továbbtanulási lehetőséget az üzemmérnökök számára a második fokozaton. Látható, hogy a második fokozaton továbbtanulók fele vagy több mint a fele a nappali tagozaton végzett üzemmérnök, s ezek nagy része azért nem tanult tovább a nappali tagozat vegyészmérnöki fokozatán, mert elsősorban egyetemi tanulmányainak nem kellő eredményessége miatt nem tanulhatott tovább. Sajnos még mindig nem megoldott az üzemmérnökök szervezett, újabb diploma megszerzését is biztosító továbbképzése. Üzemmérnöki oklevéllel a szakmérnöki szakokra, sőt a gazdasági mérnöki szakra sem vehető fel hallgató, s mindez azt eredményezi, hogy üzemmérnökeink nem kis számban esti-levelező tagozaton vegyészmérnöki oklevelet kívánnak szerezni, mert más nemcsak tudást, hanem újabb oklevelet is adó továbbképzési lehetőségük nincsen.

Továbbképzés

Az egyetemeknek az oktatáson és kutatáson kívül fontos feladata a továbbképzés. E területen fontos szerepe van az 1939-ben alapított Mérnök Továbbképző Intézetnek is, amely nemcsak a mérnökök, hanem a vegyészek továbbképzését is biztosítja tanfolyamain és kiadványaival. A továbbképzésnek különös jelentősége van hazánkban, ahol a specialisták képzését főleg a továbbképzés biztosítja.

A szervezett továbbképzés fontos állomása az 1960-ban létesített *szakmérnökképzés*, munka melletti 2 éves képzés. A Veszprémi Vegyipari Egyetem és a Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Karának szakmérnöki szakjait a 13. és 14. táblázatokban mutatom be. Ehhez járul még a Budapesti Műszaki Egyetemen a Vegyipari gazdasági mérnökképzés is.

A szakmérnökképzésnek előnyös hatása van a graduális képzés színvonalának fejlődésére is. Számos új tananyagrész először a szakmérnökképzésben kerül előadásra, majd ezt követően oktatják a mérnökképzés tárgyaiban.

A szakmérnökképzésben résztvevők számadatait az alábbi létszámadatokkal jellemezhetem:

	1977	1978	1979
Budapest Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Kara	242	241	264
Veszprémi Vegyipari Egyetem	133	158	109
Összesen	375	399	373

Megemlítem, hogy az okleveles mérnökökön kívül vegyészek, kémia szakos tanárok, sőt más természettudományi területek (pl. fizikusok, geológusok) részéről is érdeklődés nyilvánul meg a szakmérnökképzés iránt és számosan kérik felvételüket. Mind Veszprémben, mind Budapesten az egyik legnagyobb létszámú tanfolyam a környezetvédelmi szakmérnöki szak.

Végül engedjék meg, hogy a 15. táblázatban bemutassam az egyes vegyész- és vegyészmérnök-képző intézményeknél az oktatók, kutatók, műszaki és adminisztratív tanszéki személyzet létszámadatait a mintegy 200 akadémiai állományú tanszéki dolgozó nélkül.

Az adatokkal kapcsolatban meg kell jegyezni, hogy ez az egyetemi személyzet a tanár szakok, sőt a fizikus, biológus, meteorológus hallgatók kémia oktatását, az ELTE-n és a JATE-n a gyógyszerészek oktatását is ellátja. Az ELTE oktatói a Marx Károly Közgazdaságtudományi Egyetemen folyó kémia-áruismeret tanári szak oktatását is végzik. A Budapesti Műszaki Egyetemen a tanszemélyzet a vegyészmérnök hallgatókon kívül az egyes mérnöki karokon kémiát, műszaki kémiát, kémia technológiát, a vegyipari gépészmérnök hallgatóknak fizikai kémiát, vegyipari és élelmiszeripari szaktechnológiákat is oktat.

A fenti adatokkal kívántam bemutatni a hazai vegyész- és vegyészmérnök-képzés jelenlegi helyzetét és szerkezetét.

Végül köszönetet szeretnék mondani Árva Péter rektorhelyettesnek, Csapó Zoltán egyetemi főtitkárnak, Makleit Sándor egyetemi tanár, tanszékcsoportvezetőnek, Medzihradszky Kálmán egyetemi tanár, szakbizottsági elnöknek, Meisel Tibor egyetemi docens, bizottsági elnöknek és Vincze Irén dékánhelyettesnek, akik az egyetemek tanterveit és az oktatás helyzetének vizsgálatához szükséges adatokat készséggel rendelkezésemre bocsátották.

TÁBLÁZATOK

SZEBÉNYI IMRE: *A hazai vegyész- és vegyészmérnökképzés szerkezete és keretei* című előadáshoz

1. táblázat

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem vegyész szakának tanterve

	Heti óraszámok az adott félévben									
	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.
Politikai gazdaságtan	3+0	2+0	—	—	—	—	—	—	—	—
Filozófia	—	—	2+0	2+0	2+0	—	—	—	—	—
Tudományos szocializmus	—	—	—	—	2+0	3+0	—	—	—	—
A magyar munkásmozg. története	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—	—
Marxizmus—leninizmus spec. koll.	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—
Orosz nyelv	0+4	0+2	0+2	—	—	—	—	—	—	—
Angol nyelv	—	—	—	0+4	0+2	0+2	—	—	—	—
Honvédelmi ismeretek	1+0	1+0	1+0	—	1+0	1+0	1+0	—	—	—
Testnevelés	2+0	2+0	2+0	2+0	—	—	—	—	—	—
Alapozó tárgyak:										
Általános kémia	6+0	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Alapfokú kémiai laboratórium	1+6	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Matematika	4+4	3+2	—	—	—	—	—	—	—	—
Számítástechnika	0+2	0+2	—	—	—	—	—	—	—	—
Fizika	—	6+0	4+0	—	—	—	—	—	—	—
Fizikai laboratórium	—	—	0+5	—	—	—	—	—	—	—
Általános fenomenológiai és elméleti tárgyak:										
Fizikai kémia	—	—	5+0	3+0	—	—	—	—	—	—
Fizikai kémiai laboratórium	—	—	—	1+4	0+8	—	—	—	—	—
Kolloidika I.	—	—	—	—	3+0	—	—	—	—	—
Kolloidika laboratórium	—	—	—	—	—	0+7	—	—	—	—
Kolloidika II.	—	—	—	—	—	—	3+0	—	—	—
Kémiai számítástechnika	—	—	0+1	0+1	—	—	—	—	—	—
Elméleti kémia és metodikai alk.	—	—	2+2	4+0	—	—	—	—	—	—
Magkémia	—	—	—	—	2+0	—	—	—	—	—
Magkémiai gyakorlat	—	—	—	—	—	0+2	—	—	—	—
Kémiai krisztallográfia	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—
Kémiai kibernetika	—	—	—	—	—	—	—	2+0	2+0	—
Metrológia	—	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—

Anyagismereti szisztematikus tárgyak:										
Szervetlen kémia I.	—	4+0	—	—	—	—	—	—	—	—
Szervetlen kémia labor I.	—	0+6	—	—	—	—	—	—	—	—
Ásványi nyersanyagok	—	—	2+0	—	—	—	—	—	—	—
Szervetlen kémia II.	—	—	—	—	—	2+0	1+0	—	—	—
Szervetlen kémia labor II.	—	—	—	—	—	—	1+5	—	—	—
Szerves kémia	—	4+0	4+0	3+0	—	—	—	—	—	—
Szerves kémiai laboratórium	—	—	—	—	0+8	0+8	—	—	—	—
Elméleti szerves kémia	—	—	—	—	—	4+0	—	—	—	—
Alkalmazott kémiai tárgak:										
Analitika I.	—	—	2+0	1+0	—	—	—	—	—	—
Analitika laboratórium I.	—	—	—	1+6	0+6	—	—	—	—	—
Analitika II.	—	—	—	—	—	4+0	—	—	—	—
Analitika laboratórium II.	—	—	—	—	—	—	0+6	—	—	—
Műveletek és készülékek	—	—	—	3+1	—	—	—	—	—	—
Kémiai technológia	—	—	—	—	2+0	2+0	—	—	—	—
Technológiai laboratórium	—	—	—	—	—	—	0+6	—	—	—
Makromolekulás kém. techn.	—	—	—	—	—	—	—	3+0	—	—
Munkavédelem	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—
Specializációs és választható tárgyak:										
Egy fizikai kémiai koll. (1)	—	—	—	—	—	—	—	3+0	—	—
Egy interdiszciplináris k. (2)	—	—	—	—	—	—	—	3+0	—	—
Egy módszertani koll. (3)	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2+0
Négy, heti 2 órás spec. koll.	—	—	—	—	—	—	—	—	4+0	4+0
Speciális gyakorlat	—	—	—	—	—	—	0+8	0+16	—	—
Szaklaboratórium	—	—	—	—	—	—	—	—	0+20	0+20
Elméleti óraszámok összege	15	20	22	17	12	16	8	17	8	6
Gyakorlati óraszámok összege	18	14	12	18	24	19	25	16	20	20
Óraszámok együtt	33	34	34	35	36	35	33	33	28	26

Megjegyzések (1) Reakciókinetika, Statisztikus mechanika vagy Elektrokémia
(2) Biokémia vagy Geokémia. A szakbizottság engedélyével más heti 2—4 órás tárgy is felvehető
(3) Vegyiüzemi ismeretek vagy A kémia fejlődése és módszertana

Szigorlatok: 2. félév végén: Politikai gazdaságtan, Matematika. 5. félév végén: Filozófia, Fizikai kémia. 6. félév végén: Szerves kémia. 7. félév végén: Analitikai kémia vagy Kémiai technológia. 8. félév végén: Szervetlen kémia.

2. táblázat

József Attila Tudományegyetem vegyész szakának tanterve

Félév	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.
Politikai gazdaságtan	2+0	3+0	—	—	—	—	—	—	—	—
Dial. és tört. mater.	—	—	3+0	3+0	—	—	—	—	—	—
Tud. szocializmus	—	—	—	—	2+0	3+0	—	—	—	—
A magyar munk. m. tört.	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—	—
Marxizmus—leninizmus spec. kollégium	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—
Orosz nyelv	0+2	0+2	0+2	0+2	—	—	—	—	—	—
Második idegen nyelv	—	—	—	—	0+2	0+2	0+2	0+2	—	—
Matematika	4+3	3+2	3+3	—	—	—	—	—	—	—
Számítástechnika és számítógépi alkalm.	—	—	—	2+2	—	—	—	—	—	—
Kísérleti fizika	4+2	3+5	0+5	—	—	—	—	—	—	—
A kémia alapjai										
Kémiai alapismeretek	4+8	4+6	0+6	—	—	—	—	—	—	—
Fiz. kém./Kém. sztat.	—	4+1	0+6	—	—	—	—	—	—	—
Fiz. kém./Reakc. kin. I.	—	—	3+1	0+6	—	—	—	—	—	—
Szerves kémia										
A szerves kém. alapjai	—	—	4+1	3+7	0+8	—	—	—	—	—
Elm. szerves kémia	—	—	—	—	2+0	2+0	—	—	—	—
Term. szerv. v. kémiája	—	—	—	—	—	—	3+1	—	—	—
Fizikai kémia										
Elektrokémia	—	—	—	2+1	—	—	—	—	—	—
Stat. termodinamika	—	—	—	—	2+1	—	—	—	—	—
Reakciókinetika II.	—	—	—	—	—	2+1	—	—	—	—
Kémiai technológia										
Vegyip. gépek és kész.	—	—	—	—	3+0	—	—	—	—	—
Vegyip. eljárások	—	—	—	—	3+0	3+0	—	0+8	—	—
Vegyip. műveletek	—	—	—	—	—	2+2	2+2	—	—	—
Radiokémia	—	—	—	—	2+1	0+4	—	—	—	—

Kolloidkémia										
Határfel. jelenségek	—	—	—	—	—	3+1	0+5	—	—	—
Polimerek	—	—	—	—	—	—	4+0	0+5	—	—
Szervetlen kémia	—	—	—	—	—	—	3+5	—	—	—
Analitikai kémia	—	—	—	3+6	3+6	0+6	—	—	—	—
Szerkezetvizsg. módsz.	—	—	—	—	—	—	2+0	2+3	—	—
Ásványi nyersanyagok										
Geokémia	—	2+0	—	—	—	—	—	—	—	—
Alkalm. ásványtan	—	—	—	—	—	—	—	—	2+1	—
Üzemi alapismeretek	—	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—
Biokémia	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—
Munkavédelem	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2+0
Speciál kollégium	—	—	—	—	—	—	—	2+0	4+0	2+0
Szaklaboratórium	—	—	—	—	—	—	—	—	0+20	0+20
Testnevelés	0+2	0+2	0+2	0+2	—	—	—	—	—	—
Honvédelmi ism.*	1+0	0+1	2+0	1+0	1+0	0+1	—	—	—	—
Szervezési ismeretek	—	—	—	—	2+0	—	—	—	—	—
Biokémiai lab. gyak.	—	—	—	—	—	—	—	0+3	—	—
Szaklab. előkész. gyak.	—	—	—	—	—	—	—	0+8	—	—
Heti összes óraszám	15+17	19+19	15+26	14+26	20+18	15+17	16+15	8+29	8+21	4+20
	32	38	41	40	38	32	31	37	29	24
Kollokvium	3	5	2	4	4	5	3	2	3	2
Záróvizsga		1		1		1		2		
Szigorlat			1	1	1		2	1		
Összesen	3	6	3	6	5	6	5	5	3	2
Gyakorlati jegy	5	4	5	4	3	4	5	2	—	—
Beszámoló	1	1	1	1	4	1	1	1	—	—

Szigorlatok: 1. Matematika a 3. félév végén
2. Dial. és tört. materializmus a 4. félév végén
3. A kémia alapjai (Fizikai kémia/Kémiai sztatika és Fizikai kémia/Reakciókinetika I.) az 5. félév végén
4. Szerves kémia a 7. félév végén
5. Szervetlen kémia a 7. félév végén
6. Kémiai technológia (Vegyipari eljárások és Vegyipari műveletek) a 8. félév végén vagy Analitikai kémia a 8. félév végén.

Külső szakmai gyakorlatok rendje: 1. A 6. félév után 1 hét üzemlátogatás — 2. A 8. félév után 6 hét üzemi gyakorlat

Évközi szakmai gyakorlat: A 8. félévben 1 hét üzemlátogatás

* 2 óra tartalék idő.

3. táblázat

Kossuth Lajos Tudományegyetem

Félév	1.	2.	3.	4.
Politikai gazdaságtan	2+0	3+0	—	—
Filozófia	—	—	3+0	3+0
Tudományos szocializmus	—	—	—	—
Magyar munkásmozg. története	—	—	—	—
Marxizmus-Leninizmus spec. koll.	—	—	—	—
Általános kémia	4+3+6	—	—	—
Fizikai kémia	—	3+3+0	3+3+0	0+0+6
Szervetlen kémia	—	4+2+8	0+0+5	—
Analitika	—	—	—	2+2+6
Szerves kémia	—	—	4+1+0	3+0+0
Sztereok. és mechan.	—	—	—	—
Kolloidika	—	—	—	—
Magkémia				
Vegyip. gépek. segédm.	—	—	0+4+0	—
Vegyip. műv. készül.	—	—	—	2+3+0
Kémia technológia	—	—	—	—
Kvantumkémia	—	—	—	—
Szerk. vizsg. mód.	—	—	—	—
Reakciókinetika	—	—	—	—
V. ip. üzemi ism. munkav.	—	—	—	—
Biokémia	—	—	—	—
Számítástechnika	—	—	0+1+0	0+2+0
Spec. gyakorlatok	—	—	—	—
Szakma világnéz. kér.	—	—	—	—
Kutatás módszertana	—	—	—	—
Speciális kollégiumok				
Matematika	4+4+0	3+3+0	—	—
Fizika	—	3+2+0	3+2+2	0+0+4
Alkalmazott fiz.	—	—	2+0+0	—
Kristálytan	2+2+0	—	—	—
Szerv. ismeretek	—	—	—	—
Orosz nyelv	0+2	0+2	0+2	0+2
Második idegen nyelv	—	—	—	—
Diplomamunka				
Elméleti órák száma	12	16	15	10
Gyakorlati órák száma	17	20	20	25
Óraszám összesen	29	36	35	35
Testnevelés	0+2	0+2	0+2	0+2
Honvédelmi ismeretek	—	0+1	0+2	0+1
Gyakorlati jegyek száma	3	4	5	5
Kollokviumok száma	3	3	5	2
Záróvizsgák száma	—	—	—	2
Szigorlatok száma	—	2	—	1
Összes vizsgaszám	3	5	5	5
Külső gyakorlatok	—	—	—	—

vegyész szakának tanterve

5.	6.	7.	8.	9.	10.
—	—	—	—	—	—
—	—	—	—	—	—
2+0	3+0	—	—	—	—
—	—	2+0	—	—	—
—	—	—	2+0	—	—
—	—	—	—	—	—
0+0+6	—	—	—	—	—
—	—	—	2+0+0	—	—
2+0+0	0+0+7	—	—	—	—
3+0+8	0+0+12	—	—	—	—
—	—	—	2+0+0	—	—
2+2+0	2+1+0	0+0+7	—	—	—
		2+0+0	0+0+4	—	—
—	—	—	—	—	—
—	—	—	—	—	—
2+1+0	2+1+0	0+0+8	—	—	—
—	—	2+0+0	—	—	—
—	—	2+1+0	2+1+0	—	—
—	—	2+1+1	—	—	—
—	—	—	—	2+0+0	—
—	—	—	—	2+1+0	—
—	—	—	—	—	—
—	—	0+0+4	0+0+8	—	—
—	—	—	—	2+0+0	—
—	—	—	2+0+0	—	—
		2+0+0	2+0+0	2+0+0	2+0+0
—	—	—	—	—	—
—	—	—	—	—	—
—	—	—	—	—	—
—	—	—	—	—	—
—	—	—	—	2+0	—
—	—	—	—	—	—
0+2	0+2	0+2	0+2	—	—
				0+0+20	0+0+24
11	7	12	12	10	2
19	23	24	15	21	24
30	30	36	27	31	26
—	—	—	—	—	—
0+1	—	0+1	0+1	—	—
4	3	4	3	1	1
3	3	6	5	4	1
—	1	—	1	—	—
1	1	—	—	—	—
4	5	6	6	4	1
—	4 hét	—	6 hét	—	—

4. táblázat

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem kémia-fizika szakos tanárok tanterve

Félév	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.
Kötött elhelyezésű általános tárgyak										
Orosz nyelv	0+2	0+2	0+2	0+2	—	—	—	—	—	—
Második idegen nyelv	—	—	—	—	0+2	0+2	0+2	0+2	—	—
Politikai gazdaságtan	3+0	2+0	—	—	—	—	—	—	—	—
Filozófia	—	—	2+0	2+0	2+0	—	—	—	—	—
Tudományos szocializmus	—	—	—	—	2+0	3+0	—	—	—	—
A magyar munkásmozg. tört.	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—	—
Marxista spec. kollégium	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—
Testnevelés	0+2	0+2	0+2	0+2	—	—	—	—	—	—
Honvédelmi ismeretek	1+0	1+0	1+0	—	1+0	1+0	1+0	—	—	—
Általános lélektan	—	2+0	2+0	—	—	—	—	—	—	—
Pedagógia	—	—	—	—	2+X/a	2+X/b	2+0	—	—	—
Nyári nevelési gyakorlat	—	—	—	—	—	X/c	—	—	—	—
Gyakorlóiskolai munka	—	—	—	—	—	—	—	—	0+12	0+12
Számítástechnika	—	2+2	—	—	—	—	—	—	—	—
Oktatástechnika	—	—	—	—	—	—	0+2	—	—	—
Állampolgári ismeretek	—	—	—	—	—	2+0	—	—	—	—
Heti óraszám összesen	5	10	6	4	8	9	8	4	12	12
Kollokviumok száma	—	1	—	—	1	—	1	1	—	—
Záróvizsgák száma	—	—	1	1	—	1	—	1	—	—
Szigorlatok száma	—	1	—	—	—	—	1	—	—	—
Szaktárgyak										
Matematika	4+4	4+3	3+2	—	—	2+0	—	—	—	—
Általános kémia	5+5	—	—	—	—	—	—	—	—	—
Szervetlen kémia	—	5+6	—	—	—	—	—	—	—	—
Analitikai kémia	—	—	3+6	1+6	—	—	—	—	—	—
Fizikai kémia	—	—	3+0	3+0	0+6	—	—	—	—	—
Szerves kémia	—	—	3+0	3+0	0+5	0+5	—	—	—	—
Kolloidika	—	—	—	—	1+1	0+2	—	—	—	—

Kémiai technológia	—	—	—	—	—	—	3+0	2+3	—	—
Elméleti kémia	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—
Geokémia	—	—	—	—	—	0+2	—	—	—	—
A kémia tanítása	—	—	—	—	—	—	1+3	1+3	—	—
Kémiai számítások	—	—	—	—	0+1	0+1	—	—	—	—
A kémia története	—	—	—	—	—	—	—	—	—	2+0
Speciális kollégium	—	—	—	—	—	—	—	—	2+0*	2+0**
Szaklaboratórium	—	—	—	—	—	—	—	—	0+8	—
Kísérleti fizika	3+2	3+2	4+2	4+2	—	—	—	—	—	—
Termodinamika	—	—	—	—	2+2	—	—	—	—	—
Atomfizika	—	—	—	—	—	3+0	—	—	—	—
Molekulafizika	—	—	—	—	—	—	3+0	—	—	—
Anyagszerkezet	—	—	—	—	—	—	—	3+0	—	—
Elektronika	—	—	—	—	2+0	—	—	—	—	—
Elméleti mechanika	—	—	—	4+2	—	—	—	—	—	—
Elektrodinamika	—	—	—	—	4+2	—	—	—	—	—
Kvantummechanika	—	—	—	—	—	4+2	—	—	—	—
Statisztikus fizika	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—	—
Magfizika	—	—	—	—	—	—	—	3+2	—	—
Elemi fizika	—	—	—	—	—	—	0+2	0+2	—	—
A fizika tanítás	—	—	—	—	—	—	0+2	0+2	—	—
Fizika labor	0+2	0+2	0+4	0+4	—	0+4	0+4	—	—	—
Demonstrációs labor	—	—	—	—	—	—	0+3	0+3	—	—
Csillagászat	—	—	—	—	—	—	—	2+0	—	—
Elméleti órák száma	12	12	16	15	9	9	9	13	2	4
Gyakorlati órák száma	13	13	14	14	17	16	14	13	8	0
Szaktárgyi órák összesen	25	25	30	29	26	25	23	26	10	4
Ált. tárgyak óraszáma	5	10	6	4	8	9	8	4	12	12
Óraszám összesen	30	35	36	33	34	34	31	30	24	16
Gyakorlati jegyek száma	6	6	6	5	7	7	7	5	1	1
Kollokviumok száma	3	3	5	3	4	3	4	4	1	1
Záróvizsgák száma	—	—	1	2	—	1	—	1	—	—
Szigorlatok száma	—	2	—	1	2	1	1	1	—	—
Vizsgák száma összesen	3	5	6	6	6	5	5	6	1	1

Megjegyzések: X/a a félév során 20 óra; X/b a félév során 20 óra; X/c 2 hét a 6. félév után.
* Választható természetes anyagok kémiája vagy biokémia tárgykörből.
** Választható fizikából vagy kémiából.

5. táblázat

Veszprémi Vegyipari Egyetem

Félév	1.	2.
Matematika	4+4+0 K	2+2+0 K
Gépi számítástechnika	—	—
		KL
Szervetlen kémia	3+5+0 KA	2+0+8 GY
Szerves kémia	—	5+0+0 K
Nyersanyagtan	—	—
Kémiai analízis	—	—
Fizika	2+1+0 K	3+2+0 K
Fizikai kémia	—	—
Vegyipari művelettan	—	—
		K
Gépelemek	3+3+0 A	1+3+0GY
Gépek üzemtana	—	—
Vegyipari automatizálás	—	—
Választható kémiai technológia	—	—
Szervetlen kémiai technológia*	—	—
Ásványolaj-, szén- és petrolkémiai technológia*	—	—
Szilikátkémiai technológia*	—	—
Üzemgazdaságtan	—	—
Munkavédelem	—	—
Filozófia	—	—
		A
Politikai gazdaságtan	2+2+0 K	2+2+0 SZ
Tudományos szocializmus	—	—
Magyar Munkásmozgalom története	—	—
Orosz nyelv	0+2+0 GY	0+2+0 GY
Második nyelv	—	—
Testnevelés	0+2+0 A	0+2+0 A
Szakirodalmi ismeretek	—	—
Honvédelmi ismeretek	A	A
Szakdolgozat	—	—
Kritériumtárgyak		
Vegyészmérnöki tudomány alapjai Matematika	—	—
Heti óraszám — Kritériumtárgyak nélkül	14+19+0 33	15+13+8 36
Heti óraszám — Kritériumtárgyakkal együtt	14+13+6 33	15+13+8 36
Félévi számonkérések	4K 1GY 4A	1SZ 5K 3GY 1L 3A
Vizsgaszám (ÁV, SZ, K, Z)	4	6

Szigorlatok: Politikai gazdaságtan
Szervetlen kémia
Gépek üzemtana

Államvizsga: Választható kémiai technológia
Vegyipari művelettan

Nehézvegyipari szak vegyész üzemmérnökképzésének tanterve

3.	4.	5.	6.
—	—	—	—
—	2+1+0 K	—	—
SZ	—	—	—
0+0+8 L	—	—	—
2+0+0 K	—	—	—
—	3+0+4 KL	0+0+5 L	—
0+0+3 L	—	—	—
K			
4+4+0 GY	0+0+6 L	—	—
—	4+2+0 K	—	0+0+4 L
—	—	—	—
		L	
4+2+0 K	4+2+0 K	0+0+4 SZ	—
—	—	2+2+0 K	—
—	4+0+0 K	0+3+0 GY	3+0+4 AL
—	—	2+2+0 K	0+0+4 L
—	—	2+2+0 K	0+0+4 L
—	—	2+2+0 K	0+0+4 L
2+2+0 K	—	—	—
—	—	—	2+0+0 K
2+2+0 K	—	—	—
—	—	—	—
—	—	2+2+0 K	—
—	—	—	2+0+0 K
0+2+0 GY	0+2+0 Z	—	—
—	—	0+3+0 GY	0+3+0 GY
0+1+0 A	0+1+0 A	0+1+0 A	0+1+0 A
—	A	—	—
A	A	A	A
—	—	—	0+0+5 A
—	—	—	2+0+0 K
		2+2+0 K	2+2+0 K
14+13+11	17+8+10	18+15+9	7+4+21
38	35	32	32
14+13+11	17+8+10	10+17+9	11+6+21
38	35	36	38
1SZ 5K	1Z 5K	1SZ 4+1K	1ÁV 1+2K
2GY 2L	2L 3A	2GY 2L	1GY 4L
2A		2A	4A
6	6	5+1	2+2

Megjegyzés: A *-gal jelölt tantárgyak közül a „Választható kémiai technológia" c. tantárgy jellegétől függően — két tárgyat kell a hallgatóknak a leckekönyvükbe felvenniök. Ennélfogva a tanterv táblázat összesítő soraiban is csak két technológiai tárgy adatai szerepelnek.

6. táblázat

Veszprémi Vegyipari Egyetem
Nehézvegyipari szak okleveles vegyészmérnöki fokozat tanterve

	7.	8.	9.	10.
Matematika	3+3+0 A	2+2+0 SZA	—	—
Anyagszerkezetei ismeretek	3+0+0 A	3+0+0 K	—	—
Anyagszerkezetei vizsgálatok	4+0+0 K	1+0+6 LA	—	—
Anyagszerkezeti vizsgálatok (választható)	—	—	0+0+9 SZL	—
Fizika és elektronika	4+0+0 K	2+0+3 KL	—	—
Fizikai kémia	4+3+0 K	—	—	—
Vegyipari folyamattan	—	2+2+0 A	2+2+0 K	—
Vegyipari energiagazdálkodás	—	—	2+0+0 K	—
Vegyigyár	—	—	2+2+0 K	—
Ágazati tárgyak:				
Petrolkémiai technológia	6+0+0 K	4+3+0 K	0+0+4 L	—
Radiokémiai technológia	6+0+0 K	4+0+3 KL	0+0+4 L	—
Szervetlen kémiai technológia	3+3+0 K	5+2+0 K	0+0+4 L	—
Szilikátkémiai technológia	6+0+0 K	5+2+0 K	0+0+4 L	—
Gazdasági rendszerek irányítása és szervezése	—	—	4+2+0 K	—
Marxizmus—Leninizmus speciális kollégium	0+2+0 K	—	—	—
Második idegen nyelv	0+3+0 GY	0+3+0 Z	—	—
Honvédelmi ismeretek	—	A	—	—
Diplomamunka	—	—	0+0+6 A	0+0+36 A
Heti óraszám ágazatonként:				
Petrolkémiai technológia	24+11+0	14+10+9	10+6+19	0+0+36
Radiokémiai technológia	24+11+0	14+7+12	10+6+19	0+0+36
Szervetlen kémiai technológia	21+14+0	15+9+9	10+6+19	0+0+36
Szilikátkémiai technológia	24+11+0	15+5+9	10+6+19	0+0+36
Heti óraszám összesen	35	33	35	36
Félévi számonkérések	5K 1GY 2A	1SZ 3K 1Z 2L, ill. 3L* 4A	1SZ 4K 2L 1A	1ÁV 1A
Vizsgaszám (ÁV, SZ, K, Z)	5	5	5	1

Szigorlatok: Matematika
Anyagszerkezeti vizsgálatok
Államvizsga: Ágazati tárgy
Vegyipari folyamattan

ÁV — államvizsga
SZ — szigorlat
K — kollokvium
Z — záróvizsga
GY — gyakorlati jegy
L — laboratóriumi gyakorlati jegy
A — aláírás

* Laboratóriumi gyakorlati jegyek száma a Radiokémiai technológiai ágazat választása esetén.

Megjegyzés: A táblázat a Nehézvegyipari szak Technológiai ágazatainak tantervét mutatja be. A szak Vegyipari rendszermérnöki és folyamatszabályozási ágazatán a képzés ettől eltérő.

7. táblázat

Budapesti Műszaki Egyetem vegyész üzemmérnökképzés tanterve

Tantárgyak	1.	2.	3.	4.	5.	6.
	félévek					
1. Politikai gazdaságtan	2+2+0v	2+2+0v				
2. Filozófia			1+1+0v	1+1+0v		
3. Tudományos szocializmus					2+2+0v	1+1+0v
4. Matematika	4+0+5vg	2+0+3vg				
5. Gépi számítástechnika	2+0+1g	0+0+1g				
6. Fizika		3+0+2vg	3+0+3vg			
7. Fizikai kémia			3+0+2vg	3+0+5vg		
8. Általános és szervetlen kémia	4+0+2vg	2+0+0v				
9. Kémia gyakorlat	0+0+8g	0+0+7g				
10. Szerves kémia		5+1+0v	2+0+8vg			
11. Kémiai analízis				3+0+0a	0+0+7vg	
12. Biokémia				2+0+0v		
13. Makromolekulák kémiája				2+0+0v		
14. Gépelemek, géptan	3+0+2vg	1+0+4g				
15. Vegyipari elektronika és elektrotechnika			2+0+0v	0+0+2g		
16. Vegyipari műszerezés					2+0+1g	
17. Szabályozástechnika alapjai						2+0+1g
18. Általános kémiai technológia				3+0+3vg		
19. Vegyipari műveletek					3+0+1vg	3+0+3vg
20. Szerves vegyipari alapfolyamatok					2+0+4vg	
21. Biomérnöki műveletek és alapfolyamatok					2+0+4vg	
22. Vegyigyárak üzemeltetése és szervezése						2+0+0a
23. Vállalati rendszer és gazdaságtan						2+2+0v
24. Munkavédelem			2+0+0v			
25. Bevezetés az iparági technológiába				1+0+0a	1+0+0v	
26. Ágazati technológiák						össz. 13vvg
27. Orosz nyelv	0+2+0g	0+2+0g	0+2+0g	0+2+0(v)		
28. Testnevelés	0+0+2a	0+0+2a	0+0+2a	0+0+2a		
29. Honvédelmi ismeretek	0+0+1a	0+0+1a		0+0+1a		0+0+1a
30. Szakdolgozat						0+0+6gs
Heti órák	15+4+21	15+5+20	13+3+15	15+3+13	12+2+17	15+3+19
Vizsgák	4	4+1	6	5(6)	6	5+1
Kritérium tárgyak vagy				min 3	min 3	
Üzemmérnöki választható (ágazati) tárgyak			max	max 9	max 9	max 3
Üzemlátogatás		+	+	+	+	+

Szigorlat: Politikai gazdaságtanból.
Államvizsga: két, ágazatonként kijelölt tárgyból.

8. táblázat

Budapesti Műszaki Egyetem
Szerves és biológiai vegyipari szak okleveles vegyészmérnökképzés
II. fokozat tanterve

Tantárgyak	7.	8.	9.	10.
	félévek			
Politikai gazdaságtan	1+1+0v			
Filozófia		1+1+0v		
Fizikai kémia	2+0+4vg			
Kolloidika és reológia	2+0+1vg			
Kvantumkémia	2+0+0v			
Kristálytan, kristálykémia		2+0+1vg		
Szerves kémia		4+0+7vg		
Kémiai analízis	0+0+6g			
Méréselmélet és műszertechnika			2+0+1vg	
Vegyipari szabályozástechnika			2+0+1vg	
Kémiai technológiai kibernetika	2+0+0a	0+0+2vg		
Vegyipari műveletek	3+0+0v	0+0+4g		
Radiokémia	2+0+2vg			
Ágazati tárgyak			össz. 10vg	
Tervezési gyakorlat			0+0+4g	
Vállalati rendszer és gazdaságtan		1+1+0v		
Szervezés			2+2+0v	
Műszaki pszichológia				2+0+0v*
Népgazdaság kemizálása				2+0+0v*
Választott nyelv	0+4+0g	0+4+0(v)		
Honvédelmi ismeretek	0+0+1a		0+0+1a	
Diplomamunka			0+0+4a	0+0+32as
Heti órák	14+5+14	8+6+14	9+2+18	2+0+32
Vizsgák	6	5(6)	4	1+1
Választható tárgyak (kötelező)	6	6	6	4

* Az egyik tárgy felvétele kötelező, a másik választható.
Államvizsga: Vegyipari műveletekből és ágazatonként egy kijelölt technológiai tárgyból.

9. táblázat

Veszprémi Vegyipari Egyetem okleveles szervező vegyészmérnök-képzés

II. fokozat tanterve

Sor szám	Tantárgyak	Félévek			
		7.	8.	9.	10.
1.	Operációkutatás matematikai alapjai	3+3+0 K	2+2+0 ASZ		
2.	Numerikus és gépi matematika	4+2+4 KGY			
3.	Vegyipari rendszerek	2+2+0 K	4+2+0 K	0+0+5 L	
4.	Vegyipari energiagazdálkodás			2+2+0 K	
5.	Nehézvegyipari technológia	3+3+0 K			
6.	Népgazdasági és vállalati tervezés		3+2+0 K	2+3+0 ASZ	
7.	Vállalati információrendszerek elemzése		2+2+0 K		
8.	Vállalatvezetés és szervezés			4+2+0 K	
9.	Döntéselmélet és módszertana			3+3+0 K	
10.	Műszaki fejlesztés és beruházások szervezése			2+2+0 K	
11.	Marxizmus—leninizmus speciális kollégium	0+2+0 K			
12.	Jogi ismeretek		2+0+0 K		
13.	Választható technológia tárgy		0+2+5 GYL		
14.	Választható szervezési tárgy			0+3+0 K	
15.	Második idegen nyelv	0+3+0 GY	0+3+0 Z		
16.	Honvédelmi ismeretek		A		
17.	Diplomadolgozat			0+0+3 A	0+0+36 A
	Heti óraszámok	12+15+4 31	13+13+5 31	13+15+8 36	0+0+36 36

Szigorlatok: Operációkutatás matematikai alapjai (1.)
Népgazdasági és vállalati tervezés (6.)
Államvizsga: Vegyipari rendszerek (3.)
Vállalatvezetés és szervezés (8.)
Szervezési tárgy választhatóan (10., 14.)

10. táblázat

Budapesti Műszaki Egyetem
Biológus-mérnök szak II. fokozat tanterve

Tantárgyak	7.	8.	9.	10.
	félévek			
Politikai gazdaságtan	1+1+0v			
Filozófia		1+1+0v		
Biokémia és molekuláris biológia	4+0+4vg	0+0+3g		
Biológiai ipari műveletek		2+0+0a	0+0+6vg	
Biológiai kísérleti módszerek	2+0+0v	0+0+4g	0+0+4g	
Ökológia és környezetvédelem alapjai	4+0+0v			
Mikrobiológia	2+0+0a	0+0+3vg		
Radokémia	2+0+2ag			
Populációs biológia		3+0+0v		
Ágazati tárgyak		2+0+7vg	9+0+7vvvg	
		(6+0+3vg)	(4+0+12vvvg)	
Ágazati választható tárgyak				4+0+0vv
Vállalati rendszer és gazdaságtan		1+1+0v		
Szervezés			2+2+0v	
Választott nyelv	0+4+0g	0+4+0(v)		
Honvédelmi ismeretek	0+0+1a		0+0+1a	
Diplomamunka			0+0+4a	0+0+32as
Heti órák	15+5+8	9+6+17	11+2+22	4+0+32
		(13+6+13)	(6+2+27)	
Vizsgák	4	5(6)	4(5)	2
Választható tárgyak I.	6(vv)	—	3(v)	—
Választható tárgyak II.	2	3	—	4v

Államvizsga: Biokémia és molekuláris biologia, valamint egy, ágazatként kijelölt tárgy.

11. táblázat

Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Kar oktatásának szerkezete

Szerves és biológiai vegyipari szak

I. fokozat üzemmérnökképzés
Általános és szerves vegyipari ágazat
Műanyagipari ágazat
Gyógyszeripari ágazat
Könnyűipari ágazat
Biológiai és élelmiszeripari ágazat

II. fokozat okleveles mérnökképzés
Szerves szintetikus vegyipari ágazat
Műanyagipari ágazat
Gyógyszeripari ágazat
Könnyűipari ágazat
Biológiai és élelmiszeripari ágazat

Biológus-mérnök szak

II. fokozat okleveles mérnökképzés
Környezetvédelmi ágazat
Egészségvédelmi ágazat

Szervező vegyészmérnöki szak

II. fokozat okleveles mérnökképzés
ágazati oktatás nélkül

12. táblázat

Veszprémi Vegyipari Egyetem oktatásának szerkezete

Nehézvegyipari szak

I. fokozat üzemmérnökképzés
ágazati oktatás nélkül

II. fokozat okleveles mérnökképzés
Petrolkémiai technológiai ágazat
Radiokémiai technológiai ágazat
Szervetlen kémiai technológiai ágazat
Szilikátkémiai technológiai ágazat
Vegyipari rendszermérnöki és folyamatszabályozási ágazat

Szervező vegyészmérnöki szak
I. fokozat üzemmérnökképzés
II. fokozat okleveles mérnökképzés

Agrárkémiai szak
Közös képzés a Keszthelyi Agrártudományi Egyetemmel.

13. táblázat

BME Vegyészmérnöki Kar szakmérnökképzése

Szak	*Ágazat, szakirány*
1. Alkalmazott radiokémiai	—
2. Analitikai kémiai	Automatikus elemzési Műszeres analitikai Szerkezetkutatási
3. Élelmiszerkémiai	Cukoripari Élelmiszerminősítő
4. Gyógyszer és növényvédőszer kémiai	Gyógyszervegyészeti Növényvédőszer vegyész
5. Kémiai technológiai	Ipari katalitikus Kenéstechnikai Mikrotechnológiai
6. Korróziós	—
7. Környezetvédelmi	Vízminőségvédelmi Levegőtisztaságvédelmi Zajcsökkentési Talajvédelmi
8. Mérnökbiológus	—
9. Műanyagtechnológiai	Feldolgozási és alkalmazási I. (vegyészm. részére) Feldolgozási és alkalmazási II. (nem vegyészm. részére)
10. Szál és rostkémiai	—
11. Vegyipari műveleti	Műveleti Kémiai technológiai irányítástechnikai

14. táblázat

Veszprémi Vegyipari Egyetem szakmérnöki szakok

1. Cement- és mészipari szak
2. Elektrokerámiai szak
3. Épületkerámiai szak
4. Korróziós szak
5. Környezetvédelmi szak
6. Mezőgazdasági korróziós szak
7. Műszeres analitikai szak
8. Nitrogénipari szak
9. Petrolkémiai szak
10. Vegyipari rendszertechnikai szak
11. Vegyipari szervező szak

15. táblázat

Kémiai tanszékek létszámadatai
(MTA állományú dolgozók nélkül)

	Professzor	Docens	Adjunktus és tanársegéd	Kutató	Műszaki és adm. személyzet
BME	15,5	43	184	36,5	274
ELTE	20	26	68	23	131
JATE	7	15	49	22	93
KLTE	5	14	35,5	9	93,5
VVE	15	30	128	7	138

Megjegyzés: A táblázat a tudományegyetemeknél csak a kémiai tanszékcsoporthoz tartozó vegyész tanszékek létszámadatait tartalmazza.

AZ EGYETEMI VEGYÉSZ- ÉS VEGYÉSZMÉRNÖK-KÉPZÉS PROBLÉMÁI ÉS FELADATAI

SZABÓ ZOLTÁN
az MTA rendes tagja

Az a tény, hogy az Osztály az elmúlt években meglátogatta a vegyészképzéssel foglalkozó egyetemeket, arra mutatott, hogy meg akart bizonyosodni arról, hogy a kémia oktatása hogyan, milyen szinten történik, milyen személyi és tárgyi problémákkal kapcsolatos, hol van olyan helyi kezdeményezés, ami másutt is alkalmazható lenne, illetve, hol van olyan hiányosság, aminek megszüntetése szükséges, amire az illetékesek figyelmét fel kell hívni. Azt hiszem, hogy ezeknek a látogatásoknak a legfőbb tanulságait SZEBÉNYI kollégánk jól összefoglalta, de ha az egyetemek képviselői óhajtanak kiegészítést tenni, arra most is nyílik lehetőség.

Ezekre az információkra építve lenne az én feladatom a kémiaoktatás problémáját áttekinteni. Természetes, hogy ez az oktatás is az egyetembe lévén beágyazva nem független az egyetemi tevékenység általános problémáitól. Ezért szükséges hogy, előbb az egyetem helyzetéről tegyek néhány megjegyzést és csak azután vegyem szemügyre a kémia szakterületét.

Az utóbbi időben — annak megfelelően, hogy az egyetemek tevékenysége világszerte válságban van — számos tanulmány, cikk, stb. jelent meg az egyetem eszméjével és működésével kapcsolatban. Ebből az inflatorikus tüneményből két dolgot — úgy vélem — biztosan meg lehet állapítani: mindenki talált valami kifogásolnivalót és senki sem valami jó módszert a hibák kiküszöbölésére. Én is szeretném azonnal eloszlatni azt az illúziót, hogy az előadásomban most mindent helyére teszek és az illetékeseknek már csak a végrehajtás marad hátra. Csak azokra a szükségszerű lépésekre szeretnék rámutatni, amelyek szinte már fojtogatják az egyetem életét és így benne a bennünket most érdeklő vegyészképzést is.

A mai egyetem világszerte nemcsak csillagászati távolságban van a történelem legtökéletesebb egyetemétől, az athéni iskolától, hanem legfontosabb jelenlegi tevékenységében, a diplomák kiállításának adminisztratív feladata mellett, az oktatás már csak szükséges előfeltételként szerepel. A befogadóképességet meghaladó hallgatói létszám, a korszerű oktatáshoz és egyben kutatáshoz elengedhetetlen szükséges eszközök és anyagok pénzügyi fedezetének előteremtése megbontotta az oktató-, kutató- és nevelőmunka hármas

összhangját és az egyébként kívánatos — mert gyakorlati élettel kapcsolatos — szerződéses munkák számának sok helyen egészségtelen, több okból is alig korlátozható túlburjánzása, sőt a megbízások elnyeréséért való küzdelem következett be. Világos, hogy a felsőbb hatóságaink felfigyeltek erre a jelenségre és szeretnék a helyzetet ellenőrzésük alá vonni. Ez viszont a hallgatók tanulmányi rendjének, fegyelmének mindig szükséges figyelemmel kísérése mellett ma már alig elviselhető adminisztrációs túlterhelést idézett elő, különösen, ha figyelembe vesszük, hogy az érdemleges egyetemi munkától vonja el az erőket.

Megfontolandónak tartom, hogy az évente előforduló egy-két szabálytalanság miatt érdemes-e ezzel a kibúvómentesnek látszó, de csak látszó, időt és papírt tékozló rendszerrel a többi becsületesen dolgozót megterhelni?

Ugyancsak általános egyetemi oktatáspolitikai megállapítás, hogy a tudományok gyorsütemű fejlődése napról napra szaporítja az ismeretanyagot, és még a jelenlegi 4—5—6 évre felemelt tanulmányi idő sem engedi meg azt, hogy az oktatásban időfecsérlésnek minősíthető részletekkel foglalkozzunk. Ezen kívül tisztában kell lennünk azzal, hogy mind a társadalmi, mind a természettudományos és műszaki életünk ma már annyira differenciálódott, hogy semmiféle egyetemi oktatás sem lenne képes a diplomájával bármilyen munkahelyre is teljesen kész szakembereket odaállítani. Ezért tehát az oktatás során a tudományok minél mélyebb és szolídabb alapját kell megteremteni, amire az alkalmazásokat jelentő ismeretek útmutató váza lesz felépíthető. Viszont az is tény, hogy a tudományok gyorsütemű fejlődése, nemcsak az ismeretanyagot szaporítja napról napra, hanem újabb és általánosabb összefüggéseket is megállapít. Ennek következtében egy tegnap még fontos és ezért méltán megkövetelt részlet a nagyobb összefüggések ismeretében ma már jelentőségét veszítheti az oktatásban, mert csak egy egyedi, egy időtrabló, az egészben a ballaszt szerepét betöltő ténnyé válik. Ezért kell jól szelektálni és megállapítani, hogy mi az, ami az alapképzéshez szükséges, mi az ami elhagyható adat, és *helyette már a módszer sajátítandó el, a tudományos gondolkodás módszere.* Ezt közvetíteni a fiatalság felé a legfőbb feladat. Ezért az egyetemi oktatásban minimálisra kell redukálni a lexikális tartalmat és *maximálisra kell fokozni a tudományos gondolkodás kifejlesztését*, a problémalátás és a probléma kezelésének, megoldásának képességét. Csak ezen az alapon elindulva tudunk olyan szakembereket nevelni, akik az életben is legjobban megállják a helyüket, mert érzékük van az új összefüggések megállapításához. Az élet változó problémái ritkán igazán sablonosak és két jelenség a valóságban sohasem teljesen azonos és egyformán kezelhető. Az intézkedések mindig megkívánnak bizonyos válogatást, új logikai ítéletet.

Az egyik legnagyobb hiba, ami az egyetemi oktatásban, ill. oktatáspolitikában elkövethető az, hogy alacsonyabb színvonalon, de nagyobb létszámban képezünk ki

szakembereket. Szem előtt kell tartanunk azt, hogy egy teljes értékű diploma, még közgazdasági szempontból is többet ér, mint két olyan diploma, amelynek a tudományos fedezete az előbbinek csak 50—50%-át tenné ki. Ennek a gondolatnak a matematikai kifejezése a következő — matematikában nem, de az életben annál inkább igaz — tétel: $1 > 0{,}5 + 0{,}5$. A gyengébb képesítésű szakemberek mindig, pénzben is kifejezhető, kárt okoznak a nemzetük életében.

Az oktatómunkánk több lépésből áll: az előadás, a gyakorlat és a számonkérés lépéseiből. Sokoldalúan kell elemezni ezeket a feladatokat, hogy a problémát minden részletében megismerjük és ezután a célhoz vezető legjobb utat kiválasszuk.

Az egyetemi oktatás legfontosabb részét még ma is az előadások teszik ki. A jelenleg alkalmazott előadási módszerekkel szemben az a kifogás emelhető, hogy azok, a hallgatókat az órákon való passzív részvételre csábítják, az előadókat pedig a tananyag nagy terjedelme miatt esetleg a tankönyvek, vagy jegyzetek tartalmának gyors és lélektelen recitálására késztetik. Ezért merült fel az a javaslat, hogy a hagyományos, a prelegáló jellegű előadások mellett kapjanak nagyobb teret a szemináriumszerű foglalkozások, amelyek kétségtelenül alkalmasabbak a hallgatók öntevékenységének ösztönzésére. A szemináriumi foglalkozások nagyobb arányú elterjedését azonban sokszor olyan objektív tényezők gátolják, mint tanteremhiány, az oktatószemélyzet nagy elfoglaltsága, és a hallgatóság nagy száma. Nem lehet eredményes szemináriumi foglalkozást tartani 100 résztvevővel.

Meg kell keresnünk nemcsak az oktatásnak, hanem a vizsgáztatásnak is a legjobb, legeredményesebb és legemberibb módozatait, és el kell érnünk azt, hogy hallgatóink beszámolói a valódi és maradandó tudásukat tükrözzék, ne pedig csak egy kampányszerű felkészülés múlandó, mert átmeneti ismeretanyagát. Ez azt jelenti tehát, hogy a tanult anyag számonkérése nem korlátozódhat kizárólag csak a vizsgaidőszak napjaira, hanem a folyamatos tanulás általánossá válását kell előmozdítanunk az évközben végrehajtott ellenőrzésekkel, legyenek ezek akár előadás közben feltett, de nemcsak szónoki kérdések, hanem akár demonstrációk, vagy egyéb teszt-szerű próbák. A vizsgáztatónak sokszor kell egyéni módszereket alkalmazni véleményének kialakításánál. Éppen ezért, ha a helyes ítélet megalkotásában bármilyen módszer segít, azt igénybe kell venni. Számos helyen alkalmazásban vannak már a vizsgáztató-gépek, legtöbbször a multiple choice alapján, vagy olyan írásbeli demonstráció, ahol egy óra alatt a hallgatóknak mintegy 24—30 kérdésre kell egy-két sorban választ adniuk. De nem szabad a számonkérésnél semmiféle ellenőrző módszert mechanikusan alkalmazni, éspedig szellemében mechanikusan. A vizsgáztató-gépek akár feleletválogatósak, akár mások, csak részadatokat szolgáltatnak a hallgató megítéléséhez, elősegíthetik, de *sohasem helyettesíthetik a személyes szóbeli vizsgáztatást.* Ezt szem előtt kell tartanunk,

mert nincs nagyobb veszély — és semmiből sem támadhat nagyobb kár —, mintha a részigazságot teljes igazságnak fogjuk fel és úgy kezeljük.

Ezek előrebocsátása után térek rá a kémiaoktatás sajátos problematikájára, illetve a vele kapcsolatos feladatok összefoglalására:

A vegyész- és vegyészmérnök-képzés céljai a háború utáni években alakultak ki és kerültek profilírozva megfogalmazásra. Az idő azonban sokat közelített a két képzés között, amihez jelentősen hozzájárult az is, hogy a gyakorlatban a munkahelyek nem voltak mindig összhangban a diploma minőségével. Ez a körülmény hozza magával azt, hogy következő fejtegetéseimben nem válik mindig szét a kétféle képzéssel kapcsolatos mondanivalóm, bár kétségtelenül és szükségszerűen a képzések különböző ismeretűek.

Az első lépés természetesen a beiskolázás. A beiskolázásnak tulajdonképpen a nulladik lépcsője az, ami a középiskolában történik, ami a felvételi vizsgákhoz az „élő anyagot" szállítja. Azt a terméketlen vitát, hogy ki felelős a hiányosan képzett emberanyagért, én már régen kettévágtam. Az egyetemeken múlik, hogy jó tanárokat küldjön ki a középiskolákba és csak akkor várhatja, hogy kellően felkészült hallgatókat kap vissza.

Tudjuk, hogy a felvételi vizsgáztatók feladata nem könnyű. A bizottság tagjai, ha jól dolgoznak, nehéz és áldozatos munkát végeznek, akiknek még pszichológiai emberismerettel és lelkiismeretes vizsgáztató rutinnal is kell rendelkezniük. Munkájuk csak legjobb lehet, de sohasem tökéletesen jó. Ezért az első számú szelekció felelősségét sem szabad teljesen rájuk hárítani. Egy alkalmassági, intelligencia teszt hosszabb időt vesz igénybe. De egyben arra is kell gondolni, hogy az emberek életútjáról van szó. Ezért indítványoztam már másfél évtizeddel előbb, hogy mintegy 20—30%-kal több hallgatót kell felvenni, mint a tervnek megfelelő keretszám, majd szorgos vizsgálatokkal és az arraszorulóknak a szükséges segítség megadásával, az év végén szigorú rostavizsgát kell végrehajtani. A kirostált egyén számára még egy év vesztesége után is messze előnyösebb 19 éves korában pályát változtatni, mint 5—6 évi bukdácsolás után olyan diplomához jutni, ami neki is, a népgazdaságnak is csak teher, arról nem is szólva, hogy a tehetségtelen hallgatók tovább cipelése bűn a többi jó tanulóval szemben, akiknél éppen ezen gyengébbek miatt nem lehet az indokoltan magasabb színvonalon oktatni. A mostani helyzet sokszor azt példázná, mintha homokot öntenénk egy csapágyba.

A lemorzsolódás fétisizálása sok kárt okozott az egyetemek életében. Hangsúlyoztam, hogy oktatnunk csak racionálisan és intenzíven, vizsgáztatni csak lelkiismeretesen szabad, nem pedig olyan módszerekkel, amelyekről több kötetes legendagyűjteményt lehetne összeállítani. Használjunk a lemorzsolódás szó helyett más kifejezést, szelekciót, kigyomlálást és akkor az egészséges életösztönünkkel maradunk összhangban.

Ma 1980-t írunk és nem 1948—55 közötti időket. Az akkor égetően szükséges esti és levelező tanfolyamok *eredeti méretekben* való tovább foly-

tatása ma már számos okból nem indokolt. Viszont oktatáspolitikánk humanitárius jellegéből következik, hogy azok számára, akik önhibájukon kívül nem vehettek részt nappali képzésben, adjuk meg a lehetőséget hivatásuk kiteljesedésére.

Ezt a lehetőséget csak a valóban *kiválóak számára* szabad megnyitnunk. Nem jelenthet ez egy könnyebb utat a tehetségtelenek, az ügyeskedők számára a diploma megszerzéséhez.

Sok szó esik a Műszaki Egyetemen bevezetett kétlépcsős kiképzésről, amire az Eötvös Egyetem Vegyész-szakja is már sok évvel ezelőtt javaslatot tett. Elismerem, hogy vannak kifogásolható momentumok ebben a képzésben, de az előnyök — amire itt most nem szeretnék sok szót vesztegetni — annyival nagyobbak, hogy a hibákat kell kiküszöbölni, nem pedig az egész gondolatot elejteni. Már csak humanitárius szempontból sem!

A beiskolázási kiválasztással kapcsolatban kell még egy sajnálatos körülményre rámutatni és ez a vegyész keretszámok elosztása az öt egyetem között. Hazánk évtizedeken keresztül erején felül is ruházott be felsőoktatási intézményekbe, de egyenetlenül használja ki őket. A jelentkezések aztán így vezetnek el egyenlőtlen kiválasztási esélyekhez és hátrányos kibocsátásokhoz.

El kell hogy gondolkoztasson ezzel kapcsolatban az a kimutatás, amit SZEBÉNYI kolléga a felvételi pontszámok *alsó határáról* közölt.

Nem hiszem, hogy a Műszaki Egyetemek keretszámaiból bizonyos hányadnak szétosztása a tudományegyetemek vegyész-szakjaira zavarokat okozna az ágazati képzés vonalán, mivel egyes ágazatok hallgató nélkül, vagy kevés hallgatóval maradnának. Mindenki hangsúlyozza a túlkorai specializálódás hátrányait a kisország hazánkban. Éppen ezért egy egészségtelen szisztéma miatt nem szabad egy még egészségtelenebb helyzetet teremteni. Örüljünk, ha le tudjuk rakni és meg tudjuk tartani a szolid alapokat. Gondolkozzunk a postgraduális képzés módozatain. Ezzel tudunk nem a világszinvonalhoz, hanem több, a jó egyetemek színvonalához felzárkózni.

A második szelekciónak az előadott tananyagra kell vonatkoznia. Ez is egy általános egyetemi probléma, ezért szóltam már előzőleg is róla és mutattam rá, hogy mindig újabb és általánosabb összefüggéseket produkál a tudományos fejlődés. Ezek ismeretében át lehet és át kell csoportosítani azokat a számszerű adatokat, amelyek pl. a félévszázad előtti kémia lexikális jellegét jelentették. Az általános törvények és bizonyos adatok — a kémikusoknak anyagismeretre van szükségük — kombinációja már nagy részben deduktív tudománnyá tehetik az előadandó és bevésendő tananyagot. Ez más szóval azt jelenti, hogy a régi egyedi adatok helyett, olyanokat kell a vegyésznek emlékezetben tartani, amelyek sokkal több esetben felhasználhatók, mint a régiek. Különösen érvényes ez a megállapítás az ún. alapozó tudományágakra, a szervetlen, szerves és fizikai-kémiára. Ez utóbbival kapcsolatban pedig meg vagyok győződve, hogy az évszázad végére ez már nagy részben

kémiai-fizika lesz, ami a mikroszkopikus paraméterekből építi fel a makroszkopikus sajátságokat. Itt kell érintenem az integráció problémáját. Sajnos ezen a téren se jutottunk tovább a jámbor óhajok emlegetésénél. Sok esetben még az egyes tudományág felépítése sem integrált és így még kevésbé várható, hogy az integráció interdiszciplináris legyen. Az eddigi kísérletekből az is megállapítható, hogy integrált oktatás csak az anyag különböző mozgásformáinak alapján építhető fel. Ennek különleges előfeltételei:

1. A magasabb rendű mozgásforma nem lehet ellentétben az alacsonyabb rendűvel, sőt azt *magában* foglalja.
2. Az integrálandó tudományágaknak sem szabad nagyon eltérő fejlettségi fokúnak lenni.
3. Ez egyben azt is jelenti, hogy csak ekkor lesznek homogenizálhatók, tehát csak ekkor tehetők konzisztens megállapítások.
4. A 3. pont elvi követelményéhez még az a gyakorlati követelmény járul, hogy a „nyelvük" is azonos legyen, tehát egy-egy fogalom megjelölése mindenik mozgásformában ugyanazt a tartalmat fedje.
5. Az integrálás módszere mindig kettős: először analízis, tehát a különbségek megállapítása és aztán a szintézis, a megállapítások beépítése a megfelelő helyre.
6. Itt rá lehet mutatni, hogy még az exakt természettudományokban is egy bizonyos fokon a gondolkodás nemcsak tudományos-logikai, hanem művészeti elemeket (pl. szimmetria, stb.) is tartalmazhat.
7. Végül az integrált oktatás maga csak féleredmény, logikus váz, kontúr, amelyet tény anyaggal kell kitölteni: tehát szükség van egy olvasókönyvre, amelyből a tanuló a felvázolt elemek, törvények tartalmának illusztrációját megkaphatja. Ennek a lépésnek parallel, de mégis elkülönítve kell megvalósulnia.

Akármilyen jól is legyen a tanterv felépítve, a keretek tartalommal való megtöltése az előadáson múlik. Ezért a jó oktatás a jó oktató kiválasztásán múlik, aki ezt a szelekciót a legjobban, mert legnagyobb anyag áttekintésével és biztos kézzel tudja végrehajtani. Más szóval, az egyetemi oktatónak uralkodnia kell szaktudománya területén és rendelkeznie kell azzal a képességgel, hogy a lényegest a lényegtelentől elválasztva, a lehető legkoncentráltabb formában tudja továbbadni. Ez a kritérium sajnos nagyon általános és az elven kívül nincs semmi más alkalmas mérce arra vonatkozóan, hogy mik a jó oktatás jellemzői és ennek megfelelően nagyon nehéz kiválasztani a megjavításához szükséges eszközöket is. Harmadik tételként tehát azt kell kimondanunk, hogy a korszerű egyetemi oktatás az előadandó anyag szelektálásának már nem is tudománya, hanem művészete.

Az egyetemről kikerült diplomások egyéni beállítottsága, munka- és életkörülményei ritkán olyanok, hogy az illető követni tudja a szakterülete fejlődését. És ha nem teszi ezt, akkor napról napra veszít értékéből és végül

még jó, ha kárt nem okoz. Mivel az egyetemen oktatott tananyag még alig mondható minden esetben korszerűen szelektáltnak és ezért az *időt álló alapok nem elég erősek*, a továbbképzés kulcskérdéssé vált. Azt mondják, hogy az igazgyöngysort viselni kell, különben megvakulnak a szemek. Ma továbbképzés nélkül és főképpen a továbbképzésben résztvettek erkölcsi és *anyagi* megbecsülése nélkül minden, még oly magasszintű tanácskozás és javaslat a közoktatás területén homokba fut.

Az oktatás korszerűsítésének egyébként egyik legfontosabb területe a modern, helyes didaktikával megírt tankönyvek kibocsátása. A hallgatóság vizsgára való előkészítéséhez hozzátartozik a rendszeres felvilágosítás a vizsgakövetelményekről. A hallgatóknak pontosan ismerniök kell, hogy mely anyagrészeket, tételeket kell részletesen és precízen tudni, melyek azok, amelyben elegendő vázlatos áttekintéssel rendelkezni.

Még a jó egyetemi előadások és a megfelelő tansegédletek mellett is mindig maradhatnak a tananyagban — nemcsak a többség, hanem a jó hallgatók számára is — homályos, vagy nem teljesen megértett részletek. Ki kell küszöbölnünk ezeket. A kollégiumi órák, szemináriumi előadások alatt kiderülnek a hiányosságok és megszüntethetők. Ezeken vissza lehet és kell térni az athéni iskola dialógusaihoz, amelyek egyben a hallgatók öntevékenységét is ösztönzik. Ezeken lehetőség nyílik az egyes tudományok alapvető szellemének, spiritjének, kidomborítására és az előadókészség, a feleletek helyes stílusának, a szakkifejezések és tudományos fogalmak helyes használatának megismerésére. A szemináriumi előadások programjai adjanak lehetőséget formális módosítás nélkül is a tananyag korszerűsítésére, legyenek tehát rugalmasan megfogalmazottak.

Nem régen örömmel olvastam egy MTA—OM jelentésben az oktatás minőségének hangsúlyozásáról. Ma már szabad leírni az „értelmiségi elit" követelményét. Lehet ezt a követelményt a „minőség becsvágyát" figyelmen kívül hagyni, amikor a külkereskedelmi tényezők ezt kegyetlen módszerrel tudatosítják a népgazdaságunkban? Én azt hiszem, hogy ez még előbb való a szellemi életünkben, az oktatási és intézkedési politikánkban.

Amikor mintegy három évtizeddel ezelőtt a tudományegyetemi vegyészképzés kialakult, fennállt az alap- és alkalmazott tudományok közelítőleg helyes aránya. Ami azóta történt, hozott bizonyos irányokban bővülést — nézetem szerint igen helyesen, ha pl. a magkémiára gondolunk — és rengeteg küzdelmet az egyes tárgyak óraszámaiért, de alig lépett előre, hogy a ma követelményeinek jobban megfelelő szakembereket bocsásson ki. Ez alatt azt értem, hogy ma olyan nagy fogadó, felhasználó területek alakultak ki, amelyek kezdetben egyáltalán nem léteztek. Ilyenek pl. az agrárvegyészet, klinikai, orvosi kémiai vizsgálatok, környezetvédelmi feladatok.

Sietek itt megjegyezni, hogy amikor ezekre a speciális területekre gondolok, akkor egy pillanatra sem adtam fel az alapvető tudományokban való

mélyreható képzés követelményét. De még sincs ellentét a két képzési út között. Jelenleg is a 6—7. félévig a hallgatók megkapják az alaptudományi ismereteket, sőt az alkalmazott diszciplínák túlnyomórészét is. Ezután speciál kollégiumok és a szaklabor tölti ki a tanulmányi kereteket. A szakosodás jelenleg részben az alap-, részben az alkalmazott-tudományok szerint történik. Ez a szakosodás azonban nem elég éles, határozott. Pl. egy analitikai kémiai szakot választó hallgató a területén zömmel fizikai-kémiát, aztán vagy a szervetlen, vagy szerves kémiai ismereteit gyarapítja tovább. Ehhez hasonló korreláció variánsokat lehetne még jó néhányat említeni. Más szóval a jelenlegi szakosodás eléggé átfedő, hogy ne is mondjam elmosódott és alig célorientált. Úgy vélem, hogy ezt az utolsó másfélévet lehetne nagyobb mértékben profilírozni. De ha figyelembe vesszük azt, hogy pl. a VVE a szervezett műszaki-doktor-képzéssel a tanulmányi időt 14 félévben írja elő és ezt a tudományegyetemek is átvehetnék, akkor a postgraduális képzés régen vajúdó problémája is nyugvó pontra jutna.

Persze ez a népgazdasági orientáció az egyes egyetemeken belül autarch módon nem valósítható meg, pedig végre ez hozzásegíthetne ahhoz a régen felvetett, de mind ez ideig meg nem valósult gyakorlathoz, hogy a hallgatók, ha már nem is különböző városokban levő egyetemeken is hallgassanak 1—2 félévet, de legalább ugyanabban a városban (annak vonzási körzetében) keressék fel a másik felsőoktatási intézményt is, amelyen ez a célorientált szakosodás megszerezhető. Félévszázaddal ezelőtt az akkori tudományegyetemi hallgatók számos műegyetemi előadást vettek fel az indexükbe, néhányat kötelezően (Rados, Kürschák, Smodits), vagy egyéni érdeklődésből (Szarvasy Imre, Sigmond Elek, stb.). És ez az érdeklődés nem volt egyirányu utca. Sok műegyetemi hallgató jött át Pestre a tudományegyetemre. Nem is szólván arról, hogy az akkor még egységes Pázmány Egyetem karai között is élénk kapcsolat uralkodott. Akkor még nem volt meg a mostani kiterjedt kutatóintézeti hálózat. Én csak örömmel tudom regisztrálni, amikor tehetséges hallgatóink közül egyesek ilyen intézményekben készítik el ma diplomadolgozatukat.

Lehet a vegyészképzés irányát adminisztratív úton is megszabni, de még eredményesebb, ha ezt az előzőekben vázolt többletet a fiatalok egyéni érdeklődésből szerzik meg. Azt hiszem, hogy inkább alábecsülöm a valóságot, ha úgy ítélem meg, hogy legalább egy harmada a hallgatóságnak ma is képes volna és kedvet érezne egy ilyen tudományos, oktatási kirándulásra. Előadásom elején kiemeltem a „minőség becsvágyát", mi hajtóerő és egyben szellemi gazdagodásunk alapja is. Találják meg az állami vezetők a módját, hogy ez ne csak jámbor óhaj, üres elképzelés maradjon.

Legközelebbi feladatok, csak felsorolás-szerűen, a következők:

1. Meg kell erősíteni a tanszékeket, hogy csak a tudományok doktora lehessen vezetőprofesszor. Nem lehet figyelmen kívül hagyni az ELTE névadójának

Eötvös Lorándnak, azt a megállapítását, hogy jó oktató csak az lehet, aki jó kutató is. Már egy futólagos áttekintés szembetűnően elénk tárja, hogy ahol a tanszékvezető valóban aktív kutató is, ott a minősítettek száma mind doktori, mind kandidátusi szinten nagy. Egy kandidátus által vezetett tanszéken a minősítettek száma csekély és azok sem haladnak tovább. Ha egy kandidátus professzor 5 év alatt a rendelkezésére álló szellemi és anyagi kapacitással nem képes a tudományok doktora fokozatot elérni, akkor az Eötvös axióma szerint kérdésessé válik a vezető képessége is.

2. Revideálni kell a kémiaoktatással kapcsolatos egyetemi tankönyveket és a nem eléggé modern felfogásúakat újabbal kell helyettesíteni. Szimultán kell figyelni a középiskolai tankönyvekre is, ahol még rosszabb a helyzet.
3. Mivel, úgy látszik, azzal már majd mindenki egyetért, hogy az első 3 évben az alapozó tudományágak tökéletes elsajátítására kell törekedni, nincs értelme annak, hogy pl. ugyanazt a bevezető szervetlen kémiát, de más szakágakat is, külön-külön adják elő a különböző szakos hallgatóknak. Ezzel ugyan néhány oktató feladata megszűnik, de éppen ezek — ezen tehermentesítésük után — áttérhetnek a tutorial feladatukra, a kiscsoportos oktatás intenzív művelésére. Éppen az alapozó tudományágak fontosságaiból következik, hogy ezt magának a professzornak kell előadnia. Ha megvalósul egy tantárgynak az egységes előadása a különböző szakosak számára, akkor ezek a hallgatók a legilletékesebbtől kell, hogy ezt megkapják. Sajnos a „venia legendi" fogalma eltűnt az egyetemek mostani szókincséből.
4. Ha a 3. pont megvalósul, akkor szinkron fog haladni az előadáshoz kapcsolódó laborgyakorlat is: meg lehet közelíteni a nyílt laboratórium rendszerét, de legalább be lehet azokat forgószínpadszerűen rendezni.
5. Azt a sokszor hangoztatott elvet, hogy meg kell erősíteni az egyetemi kutatásokat, több irányban lehet megvalósítani. Racionálisabb beosztással (l. előző pont!) a kutatásokat termelékenyebbé lehet tenni. Ezt a támogatást annál is inkább érdemes megadni, mert az egyetemen folyó kutatások már színhelyüknél és adott kapcsolataiknál fogva is sokkal inkább interdiszciplinárisak, mint a kutatóintézeti, pláne ipari kutatóintézeti, legtöbbször célkutatások.

T. hallgatóság! Bizonyára vannak Önök között olyanok, akik előtt fejtegetéseim egy része már ismeretes volt. Valóban sokszor elmondtam már egyes szempontokat különböző alkalmakkor. De ez az ismétlődés érthető. Az utolsó húsz évben sokszor kellett az egyetemi oktatással foglalkoznom. Mindig igyekeztem a problémák gyökeréig eljutni, viszont az ezzel kapcsolatos viták csekély eredménye keltett bennem jószándékú türelmetlenséget. Ennek tulajdonítható, ha egyszer-másszor élesebben fogalmaztam. Mégis túltett rajtam hónapokkal ezelőtt egy újságcikk a Népszavában. A Marx Károly Közgazdaságtudományi Egyetem egyik intézetvezetője írt az egyetem fele-

lősségéről. Sajnos, nem tudom, hogy ez a cikk milyen reakciót váltott ki, ha egyáltalán kiváltott, de reménykedem abban, hogy az impulzusok abban az irányban összegeződnek, hogy egyszer mégis elindulunk a megoldás felé. Már egy 50%-os eredmény is nagyon sokat jelentene.

FELKÉRT HOZZÁSZÓLÓK

JOBST KÁZMÉR
egyetemi tanár, az orvostudományok doktora (Pécsi Orvostudományi Egyetem)

Köszönöm, hogy az orvosi laboratóriumok részéről hozzászólhatok a vegyészképzéshez: milyen igény jelentkezik ma irántuk. A vegyészek közismerten egyre jelentősebb szerepet játszanak a hazai orvosi laboratóriumokban is. A specializálódás folytán toxikológiai, immunkémiai, hormon, in vitro radioizotóp, véralvadás terület mellett legnagyobb számmal a rutin kórházi/klinikai (nem gyári!) analitikai, diagnosztikai laboratóriumokban dolgoznak. Ez utóbbi területet lassan nálunk is klinikai kémiának nevezik. Szűkebb területem lévén, hozzászólásom e szemszögből közelíti a vegyészképzést.

A klinikai kémia a kórkép feltárására, a kezelés ellenőrzésére alkalmas kémiai analízisek kidolgozásával és kivitelezésével, közvetve a beteg ember kemizmusával foglalkozik. A diszciplína a szerves kémia, biokémia, élettan — kórélettan ismeretanyagára épít; módszertana alkalmazott analitikai kémia. Ez lehetővé teszi a betegségek alapján képező anyagcserefolyamatok megismerését és a különböző testnedvek/biológiai minták vizsgálata révén azok helyes értelmezését, a kóros felismerését.

A klinikai kémia jelentőségére mutat, hogy a diagnosztikus vizsgálatok több mint 50%-a kémiai, melyek egy részével a biológia-centrikusan nevelt orvos diplomások szakszerűen már alig birkóznak meg. Ezért van égető szükség vegyészekre az orvosi laboratóriumokban, ami a klinikai-kémia színvonalas hazai fejlesztésének egyik sarkalatos pontja. A vegyészképzés során ezért lényeges volna, ha a hallgató vázlatos áttekintést kapna a biokémia súlyponti fejezeteiből: a fehérje, lipid, szénhidrát anyagcseréről, oxido-redukciós rendszerekről, a biokémia egyéb humán vonatkozású fejezeteiből. Erre alapozva megismerné a kémiai zavarokhoz vezető betegségek kóroktanát, ha ismert, a molekuláris kémia magyarázatát. Célszerű volna a hallgató analitikai kémiai ismereteire építve bemutatni, hogy a klinikai kémia a gyakorlatban az előbbiek okát, az összefüggéseket „kevert" minták analízisével tárja fel. Ehhez azonban ismerni kell egyrészt a zavaró hatásokat és kiküszöbölésük útját, másrészt az előbb már megismert biológiai-biokémiai rendszert, melyből a vizsgálati minta származik, a szóbajövő fő anyagcsere termékeket, mint

esetleges vizsgálati komponenst. A néhol már műszercentrikus képzés helyett a probléma-orientált oktatást helyezném előtérbe és felhívnám a figyelmet, hogy pl. a vér/vizelet nátrium meghatározásra ma a klinikai kémia a lángatomabszorbciós fotométert, ionszelektív elektródos mérőműszert, sőt automata analizátorokat használ. Ugyanakkor speciális feladatokra az ESR épp annyira elfogadott, mint a zsírsavak elválasztására a ma legfejlettebb kromatográfiás rendszer. A hallgató a bemutatott példákon át látná, hogy a klinikai kémia a legkorszerűbb ismert módszertannal igyekszik feladatát megoldani, rendkívül flexibilisen vált át, veszi át az újat, — ugyanakkor súlyt helyez az önálló probléma megoldására (pl. új gyógyszer mellékhatásainak laboratóriumi jele és lehetséges oka).

Fontos, hogy az oktatásban utalás történjék az egyes laboratóriumi paraméterek információs értékére; ismerje meg a hallgató, hogy azok milyen anyagcsere folyamatra adnak felvilágosítást. Enélkül (és valamelyes orvosi terminológia ismerete nélkül) a biológiai problémák megértése és a véleménycsere nehézségbe ütközik.

Mivel Magyarországon biokémikus képzés nincs (talán hozzájuk állna a klinikai kémia legközelebb), az általános vegyészképzés befejező szakaszában kellene egy félévben heti 4 óra elmélet és ezt követően heti 4 óra gyakorlat keretében oktatni, és felhívni a hallgató figyelmét, hogy van klinikai kémia/biokémia is; más országokban főleg vegyészek művelik, ezért az oktatásnak, a sok egyéb speciális terület mellett, a hazai 300 klinikai laboratórium nem elhanyagolható vegyész-igényét is számításba kell vennie. Az óraszám véleményem szerint elég ahhoz, hogy az arra érzékenyeket e szakterülettel „fertőzze", áttekintést adjon a klinikai-kémiai gyakorlatban jelentős anyagcsere komponensekről, a heterogén biológiai minták analitikájáról és módszertanáról, a még megoldandó problémák sokrétűségéről, azok igen eltérő műszerigényéről, a szakterület fejlesztési irányáról.

A hazai kórházi-klinikai laboratóriumok hálásan vennék, ha mód volna rá, hogy e kollégium beiktatásával a vegyészek látókörét túlterhelés nélkül biokémiai, klinikai-kémiai irányba is szélesíthetnék.

KURUCZ JÓZSEFNÉ
vezérigazgató-helyettes (Növényolajipari és Mosószergyártó Vállalat)

Mindenekelőtt kérem, nézzék el nekem, hogy hozzászólásomat, amelyben a hazai vegyész- és vegyészmérnök-képzés problémáiról elsősorban az ipar és az ipari kutatás igényeinek oldaláról kívánok szólni, egy látszólag teljesen személyes vonatkozású gondolatsorral vezetem be.

Középiskoláimat vegyipari technikumban végeztem. Egyetemi tanulmányaimat közel kétéves technikusi gyakorlat előzte meg, amelyet részben

laboratóriumban, részben üzemben folytattam a vegyiparban. A vegyészmérnöki diploma megszerzése után közvetlenül egyetemi oktatóként kezdtem dolgozni, majd a több mint tízéves egyetemi oktatói és kutatói munka folytatásaként évekig olyan kutatóintézetben dolgoztam, amelynek kutatási profilja az egyetemen művelt kutatási területemmel egybeesett.

A körülmények úgy hozták, hogy a folytatásra már az iparban került sor. A műszaki fejlesztés előkészítésével foglalkozó ipari kutatóból a megvalósítás nehézségeivel küszködő immár sem nem oktató, sem nem kutató, sem nem mérnök, sem nem közgazdász és tervező, hanem mindezeknek valamiféle ötvözete lett a feladatoknak megfelelően.

Tudom, semmi újat nem mondok azzal, ha tapasztalataimra hivatkozva olyan következtetésre jutok, hogy a ma szakembereivel szemben támasztott követelmények általában és minden területen rendkívül sokoldalúak. Közismert ugyanakkor az is, hogy a polihisztorok kora lejárt.

De mi akkor a megoldás? Mire és hogyan készítse fel a képzés a ma generációját? Úgy érzem, hogy az osztályülés erre a kérdésre akar választ találni és valamilyen stratégiát kialakítani.

A legfontosabb az egyes képzési lépcsőknek tudatos és átgondolt egymásra épülése. Az, hogy a középiskola át tudja adni a stafétabotot a felsőoktatásnak, az pedig a szakembert képző területnek — legyen az kutatás, ipar, stb. —, illetve vele párhuzamosan a postgraduális képzésnek. A botot átvevő, tehát az ipar és a gyakorlat pedig kész legyen arra, hogy azt a lehető leggyorsabban átvegye, a versenyzők felgyorsulása ne vegyen túl hosszú időt igénybe. Minthogy a célegyenest a szakembert alkalmazó területen, az ott folyó alkotó tevékenység jelenti, ezért az alkotó tevékenység az, amiből ki kell indulni az egyes stációkkal szembeni igények megfogalmazásakor.

Elismerve azt, hogy a szakemberek életútja az egyetemi tanulmányok befejezését követően sok nem befolyásolható tényezőtől függ, mégis a staféta utolsó lépcsőjétől, a gyakorlati élettől — legyen az kutatás vagy ipar, vagy éppenséggel klinikai-kémiai gyakorlat — el kell várni, hogy differenciálja a rendelkezésre álló szakember-anyagot a feladatok diktálta igényekhez és lehetőségekhez, az egyén adottságaihoz és ambícióihoz igazodva. Gondolok itt arra, hogy lesz olyan, akiből üzemi mérnök lesz vegyészmérnöki diplomával, lesz, akiből laboratóriumvezető ugyancsak vegyészmérnöki diplomával, vagy vegyészdiplomával vegyészmérnöki munkakörbe kerül, de lesz, akiből gyártásfejlesztőt, gyártmányfejlesztőt, beruházót akarunk csinálni — és ahogy Szabó professzor mondotta —, végigmehetünk a szivárvány összes színein.

Ha a gyakorlati élet ezt a feladatát jól oldja meg, akkor ez többszörös haszonnal jár. Az első haszon, hogy korrigálja a beiskolázás és a munkába állás között eltelt időszakban a népgazdaság adott területének igényeiben bekövetkezett változások hatását, növelve ezzel a képzés gazdaságosságát. Az egyik helyen többlet lesz, a másik helyen hiány, ez a mostani helyzet.

Nem vagyunk könnyű gazdasági helyzetben. Ilyenkor az alkalmazkodás létkérdés. Emberekkel dolgozunk. Nekünk kell őket a gyakorlathoz alkalmazkodtatni. A mai hallgatókat pedig a felsőoktatásnak úgy kell felkészíteni, hogy minden időben rendelkezésre álljon egy szakember-állomány, és az úgy legyen használható, ahogy azt az igények megkövetelik.

A másik dolog, ami hasznot jelent, hogy ez az ipari differenciálás biztosíthatja megfelelő színvonalon a szakember-ellátottságot. Végül pedig — de nem utolsósorban — az egyén számára megadja a habitusának legjobban megfelelő alkotó tevékenység lehetőségét.

Mi szükséges most már ahhoz a vegyész- és vegyészmérnök-képzés területén, hogy a gyakorlati élet az egyént a célnak és önmagának is megfelelő helyre állítsa? Mindenekelőtt tematikájában célirányosan felépített, sokoldalú, tartalmában permanensen megújuló olyan alapképzés — az „alap"-ot kétszer is aláhúzom — mind az alap-, mind pedig az alkalmazott tudományokban, amely már az egyetemi stúdiumok közben is lehetővé teszi azt, hogy az egyén képességeinek, érdeklődésének megfelelően önállóan is képezze magát, nézzen utána a dolgoknak, tanuljon, közben gondolkozzék, keressen problémákat.

Azt hiszem, az utóbbi igény felkeltését az oktatás lényeges részének kell tekintenünk, mert ez később önálló, kezdeményező, a váratlan nehézségekkel szemben nem megtorpanó, alkotó tevékenység kibontakozását kell hogy eredményezze.

Szeretném érzékeltetni, hogy nem az a kérdés — vagy nem az az első kérdés — a gyakorlati élet vonatkozásában, hogy vegyészeket vagy vegyészmérnököket képezünk-e. Kell ez is, kell az is.

Az iparban is rengeteg példa mutatja, hogy a képzési forma nem szükségképpen határozza meg a későbbi tevékenységi területet. Sokan vegyészekként kerültek ki, és kiváló mérnökök lettek belőlük, — mások mérnökökként kerültek ki, és kutatóvegyészek lettek belőlük. Egy azonban azonos volt mindegyiknél: az alapképzés jó volt, az ember öntevékeny volt, megtalálta megfelelő feladatát ott, ahol azt kedvvel csinálta, alkotó kedvvel, akarta csinálni. Azt nem tudom megmondani, hogy hány vegyész és hány vegyészmérnök kell, de úgy érzem, hogy a tudás, és a tudás minőségének a kérdése az, ami ezt az ellentmondást fel tudja oldani.

Második követelményünkként szükségesnek tartom kiemelni a célirányos szemlélet kialakítását. Ez az előzővel nincs ellentmondásban. Tudom, hogy ez igen általános fogalom, és így magyarázatra szorul. A gyakorlati élet szempontjából rendkívül fontos, hogy már a kezdő szakember képes legyen arra, hogy munkáját mások munkájával összefüggésben nézze és lássa, tudását bele tudja helyezni, értékesíteni, alkalmazni tudja a körülmények adta lehetőségek között.

Amikor újra és újra elolvastam, hogy miről is szeretnék beszélni, ezt

a körülmények adta lehetőséget többször is aláhúztam, függetlenül attól, hogy vegyészről vagy vegyészmérnökről van szó. Az egyetemi képzésnek módot kell találnia arra, hogy a hallgatót — ezen vagy azon az úton — szemléletében felkészítse, és tudatosan készítse fel erre a feladatra. Számos lehetőséget teremthet arra, hogy a hallgató kapjon gyakorlati feladatokat, és esetleg részese legyen a realizálás munkájának is.

Sokáig töprengtem azon, hogy elmondjam-e itt a tisztelt Osztályülés előtt, hogy a mi vállalatunknak jutott az a szerencse, hogy az egyik nagy élelmiszeripari beruházásunknak a tulajdonosa legyen. Ötödéves műegyetemi hallgatók a martfűi növényolajgyár több üzemének terveit készítették el, — olyan kutatásokba kapcsolódtak be, melyekre a döntések előkészítéséhez volt szükség.

Nem egy olyan hallgató, aki így vagy úgy odakerült gyakorlatra a vállalathoz, bekapcsolódott a konkrét vállalati műszaki fejlesztési problémák egyes részfeladatainak a megoldásába. Nem hiszem, hogy akármilyen módon is felmérhető lenne ennek nevelő, gazdasági szemléletformáló hatása. Azt hiszem, erre nincs mérce, hacsak az nem, hogy ezeknek a hallgatóknak legalább 80%-a különböző beosztásokban ma is az iparban, vezető beosztásban dolgozik. Úgy hiszem, ezzel a fajta üzemi gyakorlattal az egyetemi oktatás is csak gazdagodott.

Remélem, nem tűnik ellentmondásnak, ha az alapképzés fontosságának a hangsúlyozását követően aláhúzom a szemléletkialakítás, az alapvető szakterületre való felkészítés, a képzés utolsó szakaszának fontosságát. Bizonyos területek a gyakorlati életben is speciális szemléletet kívánnak. Úgy hiszem, másfajta szemléletet kell kapnia annak, akit a nehézvegyipar számára képezünk ki, és másfajtát annak, aki természetes szerves anyagokkal fog foglalkozni. Még itt is tud differenciálni az ipar, még itt is tud kiegyenlíteni, ha az alapképzés jó, de ilyenkor meghosszabbodik a felgyorsulási idő. Azt hiszem, nem lehetünk olyan szegények, hogy erre szükség legyen. Szakirányú szemléletet tehát a stúdiumok utolsó idejében — véleményünk szerint — mindenképpen adni kell.

Végül harmadik követelményként szeretném kiemelni a posztgraduális képzés fontosságát, úgy is, mint a gyakorlati élet igényét az alma materrel szemben, a gyakorlati élet differenciáló funkciójának a betöltése érdekében. Ez a differenciáló funkció, amiről már az előbb is több szó esett, elképzelhetetlen e nélkül a posztgraduális képzés nélkül, hozzávéve azt is, hogy igazán nagy eredményeket akkor várhatunk, ha ez az igényekhez igazodó feladatokat szab, elősegíti a tudományos eredmények realizálásának a meggyorsítását, és egyben lehetővé teszi a gyakorlati szakemberek magas színvonalú továbbképzését.

MÉSZÁROS ZOLTÁN
kutatási igazgató, a kémiai tudományok kandidátusa (CHINOIN Gyógyszergyár)

Mindenekelőtt nagyon köszönöm a megtisztelő felkérést, hogy szóljak ezen a helyen.

A bevezető két előadást és a korreferátumokat hallgatva — nem kevésbé Beck Mihály akadémikus délelőtti előadásakor — azon gondolkoztam, hogy vajon érdemes-e még itt hozzászólni, mert azt hiszem, már minden lényeges dolgot hallottunk, de talán azért mindenki másképp mondja ugyanazt.

Gondolom, talán ez is volt a célja a hozzászólók felkérésének, bár úgy érzem, a mai napra egy kicsit túl sokan jutottunk a gyógyszer- és növényvédőszer-iparból. Ez külön megtiszteltetés, köszönöm.

Megkísérlem nagyon röviden összefoglalni, amit ezzel a problémával kapcsolatban el tudok mondani, tulajdonképpen kettős minőségben: egy kicsit az egyetem, és egy kicsit az ipar oldaláról.

Nagy örömmel hallottam itt, az Akadémián az „innováció" szót. Korábban ezt a szót ebben az épületben nem hallottam. (Derültség.) Különösen mivel az elnöki és a főtitkári beszámolóban is előfordult, úgy kell éreznünk, hogy ezt itt is komolyan veszik.

Két évvel ezelőtt ugyanitt jogászok és közgazdászok tartottak egy ankétot, annak ez volt a címe: Innováció és adaptáció. Nagy élvezettel hallgattuk ezt néhányan végig. Amikor most azt kellene megmondanunk, hogy a vegyészektől és a vegyészmérnököktől mit várunk az iparban, akkor rögtön az vetődik fel az emberben, hogy olyan megoldást kellene találni, hogy az iparban — legalábbis a vegyiparban és a gyógyszeriparban — olyan vegyészek és vegyészmérnökök legyenek, akik képesek adaptálni és innoválni mindazt, amit a tudomány előteremt.

Tudom, hogy ez túl tág megfogalmazás. De SCHUSTERnek, az első kémikus akadémikusnak a követői nem nagyon maradtak a „kaptafánál", ha a lombikot kaptafának lehet tekinteni.

Összeírtam, hogy csak a vegyipar és a gyógyszeripar területén miféle munkaköröket töltenek be a kémikusok jelenleg: experimentális szerves és szervetlen kémikus, analitikus, technológus, fejlesztő mérnök, termelésirányító vagy vezető mérnök, közgazdász-mérnök, környezetvédő, gyógyszerkémikus, agorkémikus, elméleti szerves kémikus, kvantumkémikus. Külön szakma lett a QSAR-művelő, a farmakokinetikus, kutatásszervezők, project-menedzserek, product-menedzserek, informátorok, szabadalmi-ügyvivők, beruházók, tervezők, külkereskedő menedzserek, általában a marketing szakemberek. Akiket felsoroltam, azok eredetileg kémikusok. A klinikai kémiát és sok mást ki is hagytam.

Érdekes módon a világ gyógyszeriparában a legkiemelkedőbb vezetők között nagyon sok olyat ismertem meg, aki biokémikusnak vallja magát,

névjegyén is ez áll, s ha az ember megkérdezi, kiderül, hogy eredetileg kémikus volt. Tehát kémikusból lett biokémikus.

Én még fordítva sohasem láttam. Úgy tűnik, hogy a mi szakmánk olyan, mint az alagút, amelyet két oldalról fúrnak. Például a gyógyszerkutatásban sokkal nagyobb alkalmazkodó készséget várnak el a kémikustól. A partnerek kevésbé tudnak alkalmazkodni, tisztelet a kivételnek!

Nagyon gondolatébresztő volt számomra a délelőtti elnöki beszámolóban — mert ezt még nem hallottam így megfogalmazni, ahogy BECK akadémikus kifejezte —, hogy az innováció a kizsákmányolás új formája kezd lenni. Nem tudom, szabad-e ezt úgy értenem, hogy az innovációhoz való értés kezd a kizsákmányolás valamilyen új formája (eszköze) lenni.

Egy példát mondok erre. Mi kémikusok, akik az iparban dolgozunk, úgy érezzük, hogy a kémiát az élet fantasztikusan leértékeli. Ha valaki, mondjuk Nyugat-Európában vagy az Egyesült Államokban vesz egy doboz Papaverin tablettát, azért fizet 1 dollárt, — abban a papaverin értéke másfél cent. A többi mind rárakódás: orvos, biológia, propaganda, formatervezés és még ezer szakmát fel lehetne sorolni.

Ha nem a papaverint veszem, hanem egy „tegnap" felfedezett új molekulát, mondjuk a CIMETIDINT vagy TAGAMET-et — ez most a sztár, mindenki ezt keresi —, ott 1 dollárból 10 cent esik az új hatóanyagra, de még ez is csak 10 százalék. A magyar gyógyszeripar tőkés exportjának 90 százaléka gyógyszeralapanyag, ne tessék elfelejteni! Mi okozza hát a kémia leértékelődését? Nem lehet kimondani, hogy most már csak specialitást exportáljunk, mert ez nem olyan egyszerű.

Csak arra akartam ezzel rámutatni, hogy az innovációhoz értés egy szakma kellene hogy legyen, éspedig a menedzser-szakma valamilyen formája. Ennek nyomai az oktatásban nálunk gyakorlatilag nincsenek meg. Nem tudok róla, hogy kiküldöttek volna egy magyar kémikust mondjuk Fontainebleau-ba. Amerikában vannak ilyen iskolák, ahol ezeket a menedzsereket képezik. Ezt valamilyen módon meg kellene oldani, mert ha nem oldjuk meg, akkor lábon fogjuk eladni az eredményeinket, és a leértékelés sokkal nagyobb lesz, mint ha búzát adnánk el lábon.

SZABÓ akadémikus használt egy olyan kifejezést, hogy nem lehet nagyobb hibát elkövetni, mint alacsony színvonalon nagy létszámot képezni. Ezzel maximálisan egyetértek, de akkor azt is mondhatnám, hogy óriási hiba átlagosan 45 négyzetméteres lakásokat építeni Magyarországon, és amennyire tudom, még az elkövetkezendő 20 évben is legfeljebb 52 vagy 53 négyzetméterre emelik ezt fel. Mindenki tudja, hogy ez elveti a magvát egy újabb igénynek, de ezt kell csinálni, mert most nincs másra lehetőségünk.

Oda akarok kilyukadni, hogy szerintem a vegyészképzésben nem követtünk el mennyiségi hibát. Az a véleményem, hogy eddig nagyobb baj nem történt. Most valóban úgy érzem, hogy itt is kimerültek az extenzív lehető-

ségek tartalékai, de ezzel nem azt mondom, hogy a képzés eddig rossz volt. Egy kicsit úgy tűnik, mintha ennek a napnak a hangvétele szerint rossz lett volna.

Az én évfolyamtársaimnak a fele disszidált. Ott kint mind nagy emberek, pedig — amennyire emlékszem — volt közöttük olyan is, akiből itt üzemvezető sem lett volna. Most nem laboratóriumban dolgozik — nem engedték hozzányúlni a lombikhoz, mert ügyetlen volt —, de megtalálta a sok szakma közül azt, ahol megfelel. Tehát valahogyan mégiscsak a szemléletünkben van a hiba, ha kiképzett emberek nem találják meg a helyüket. Akkor is ki kell jelenteni ezt, ha az iparnak magára kell vállalnia ezért a felelősséget.

Nem javasolom eddigi tevékenységünk túlságos ostorozását, ami nem azt jelenti, hogy elégedettek lehetünk.

Hadd szóljak pár szót a felvételi rendszerről. Én már legalább 15 éve attól félek, hogy ha még pár évig csináljuk ezt a felvételi rendszert a kémikusok körében, akkor feltaláló a mi szakmánkban biztosan nem lesz, mert 15 éve egyfolytában csak a jó tanulókat vesszük fel, és nem azokat, akiket érdekel a kémia. Az igazán vérbeli kémikusok sokszor el sem jutnak a felvételi vizsgáit, mert olyan gyenge az átlaguk, vagy megbuktak pl. történelemből. (Derültség.) Ezt a felvételi rendszert tehát meg kell változtatni.

Mi úgy felvételiztünk annak idején, hogy a mindannyiunk által tisztelt és nagyra becsült VARGA JÓZSEF tartott nekünk egy előadást, amit nekünk jegyzetelni kellett. Azután valaki elolvasta a jegyzetünket és azt nézte, hogy az egyfolytában két óra hosszat tartott előadást ki hogyan appercipiálta. Azután jöttek a tesztek. Ez 1948-ban volt. Nem tudom, nem kellene-e visszatérni ehhez.

Én egyértelműen azon a véleményen vagyok, hogy nincs túlképzés kémikusokban. Szerintem egyszerűen hiány van. Tessék visszagondolni, mennyi gyógyszeripari szakmát soroltam fel, pedig egyet-kettőt ki is hagytam.

Szerintem nincs túlképzés, az viszont igaz, hogy ha komolyan vesszük — márpedig szeretném hinni, hogy komolyan vesszük —, amit SZABÓ akadémikus a minőségi becsvágyról mondott, akkor tényleg kell valamilyen új hajtóerőt keresnünk, amibe a jövőben belekapaszkodhatunk. De ugyanakkor szemléletváltozásra is szükség van. Nem tartható fenn az, hogy például ma az ipar egy okleveles vegyészmérnököt kevesebbért vesz fel, mint egy segédmunkást! Nem elég a minőség hajtóereje. A mai társadalomban a fiataloknak bizonyos célok eléréséhez anyagi eszközökre is szükségük van. A mi korosztályunknál még nem volt szempont, hogy valaki autóra gyűjtött volna, mert akkoriban Magyarországon nem is volt autó. Most van mire gyűjteni, tehát a mai, lényegesen gazdagabb társadalomban anyagi hajtóerőre is szükség van. Különben az a kutatómérnök nem marad ott azért a pénzért. — Most van egy új rendelet a mellékfoglalkozásokról és a másodállásokról. Ez nagy „lehetőség", mert a kutató vegyészmérnök délután 4 óra után a saját vállalatánál fizikai segéd-

munkát vállalhat, és akkor kiegészítheti havi fizetését. (Derültség.) Kutatómunkát ugyanis csak másik vállalatnál vállalhat. Tudom, hogy ez az igényoldalról való megfogalmazás talán disszonánsnak tűnik, de az életben ez a helyzet. Ezek nagyon lényeges kérdések.

A kétfokozatos képzésről az a véleményem, hogy a maga idejében rendkívül hasznos volt, amikor az volt a probléma, hogy a régi típusú technikusokat hogyan lehet a gyárakban magasabb végzettségűekkel helyettesíteni. Szerintem valahogy úgy kellene ezt a fajta képzést megítélni, hogy a mór megtette kötelességét, a mór mehet . . .

Én az egyfajta képzés mellett szállok síkra, s ezzel kapcsolatban egyetértek azokkal, akik azt mondották, hogy nagyon magas színvonalú alapképzésre van szükség. A két lépcsőt úgy helyeslem hogy a második lépcső a posztgraduális képzés legyen — akár szervezett doktorálásként, akár más formában —, de azt az anomáliát meg kell szüntetni, ami nálunk is megvan, hogy azt a hároméves mérnököt, aki természetesen mérnök úrnak szólíttatja magát, kb. 20 százalékkal több fizetésért vesszük fel a termelésirányításba, mint az ötéves okleveles mérnököt a kutatásba. Ez biztosan nem jó. Így is kevesen vannak, akik nem akarnak továbbmenni. Akik maradnak, azok nem mennek túl a jó szakmunkásból kiképződött csoportvezető, vagy a jó laboráns szintjén.

Az ipar felelőssége rendkívül nagy abban, hogy partnerei tudjanak lenni az egyetemeknek a posztgraduális képzés valamilyen közös megszervezésében. Szabó akadémikus utalt az athéni iskolára. Jó partnerek között tényleg megvalósíthatók az athéni iskola módszerei, de lényeges, hogy ez jó alapképzésre legyen felépítve.

Utolsó megjegyzésem: szerintem kötelezővé kellene tenni a vegyészek nyelvtanulását, és ezt nagyon szigorúan kellene venni. Évtizedek óta figyeljük, hogy — tisztelet a kivételnek — nem tudnak nyelveket. Legnagyobb részük elfelejtette az oroszból, amit a középiskolában tanult, egy második nyelvet pedig nem tanul meg, bár az egyetemen hivatalosan van nyelvoktatás. Akármilyen büszkék vagyunk a magyar nyelvre, mégsem tekinthető internacionális nyelvnek, — nyelvtudás nélkül pedig ma a szakmában nem lehet boldogulni.

Nagy Bálint
főosztályvezető (Mezőgazdasági és Élelmezésügyi Minisztérium)

Mindenekelőtt szeretném megköszönni, hogy megtiszteltek a felszólalási lehetőséggel.

Azt gondolom, akkor fogom fel a szerepemet helyesen, ha nem akarok tanácsot adni egy ilyen magas színvonalú hallgatóságnak arra, hogy képezzenek ki vegyészeket. Szerény szerepem abban kell kimerüljön, hogy egyrészt

elmondjam egy határterületen dolgozó vezető embernek a tapasztalatait, aki kétszeresen felhasználója a vegyipar termékeinek, másrészt a várható kutatási és technológiai változásokról, — vagyis a mit-ről és a hogyan-ról szóljak.

Az eddigi tapasztalatok alapján meg kell mondanom, hogy azokkal értek egyet, akik azt mondják, hogy nem kell vesszővel vernünk a hátunkat. Nálam 120 analitikus kémikus dolgozik. Ezek átlagos életkora 37 év. Nekem az elmúlt 20 év eredményei alapján az a tapasztalatom, hogy ha a fiatal kémikus analitikust megfelelő helyre állítjuk, és ellátjuk megfelelő műszerekkel, akkor nagyon gyorsan tud alkalmazkodni a feladatokhoz. Azt mondhatom, egy kicsit magam is büszke vagyok rá, hogy 38 éves osztályvezetőnk jelenleg az Európai Növényvédőszer-analitikai Bizottság tagja. Egy évben elég sok időt tölt ma már szaktanácsadással, sőt időközben nem egy olyan módszert adtunk már Európának, amely egyetemes analitikai módszerré vált a növényvédőszer-maradék vizsgálatban.

Ugyanezt tudom mondani a szerves kémikusokról is. A nagy külföldi monopóliumok szakembereivel folytatott beszélgetésekből tudom, hogy nagyon tartanak a magyar szerves kémikusoktól, ami egyértelműen azt igazolja, hogy a magyar szerves kémikus, ha egy kicsit megszorítják, és van rá lehetősége, akkor tud innoválni, sőt rendkívül gyorsan tud innoválni. Ha egy monopólium vezető szakembereivel beszélek, akkor azt tapasztalom, hogy — érdekes módon — csak Dél-Koreától félnek még ennyire.

A kémikusokkal kapcsolatban tehát pozitív a tapasztalatom. Őszintén sajnálom, hogy — bár az időt rendkívül érettnek tartom erre, annak ellenére, hogy a mezőgazdaság egyre inkább az alkalmazott kémia területévé válik — nem látok olyan integrálódást sem az oktatásban, sem a gyakorlatban, amely hosszú távon kaput nyitna a kémiai tudományok mezőgazdasági alkalmazása előtt. Egy másik ülésen ugyanebben a teremben megbeszéltük már, hogy annak ellenére, hogy az alkalmazott kémia területe lettünk, nincs koordináció a területek között, ezért Magyarországon ma az agrár felsőoktatási intézményeink jelentős részében nincs például biokémiai tanszék, miközben a biokémia kb. 5 éven belül igazán alkalmazott területté válik.

Ennyit nagyon röviden arról, amit én mint a szomszéd terület vezetője eddigi tapasztalataim alapján elmondhatok. Most néhány szót szeretnék szólni a jövőről, a mezőgazdasági tudományok és a technológia fejlődésének a jövőjéről. Sajnos nem a magyar kutatás, hanem a világ kutatásainak az eredményeit figyelembe véve.

Ott kell kezdenem — és azt gondolom, hogy a bevezető előadásnak is abban volt igaza, amikor elégedetlenkedett az oktatással —, hogy a technológiai fejlődés, mint az egész mezőgazdasági termelés is, fordulóponton van. Az Akadémián nagyon magas szintről hangzott el ezelőtt néhány hónappal a mezőgazdasági osztály ülésén egy olyan határozott igény, hogy a mezőgazdaságnak mint a magyar népgazdaság alapvető ágazatának az ezred-

fordulóig — tehát 20 év alatt — feltétlenül meg kell kétszereznie termelését ahhoz, hogy exportját a népgazdaság mérlegének rendbehozatala érdekében meg tudja háromszorozni.

Ma ugyanennek az embernek a szájából hallottam, hogy miközben alapvető feladat a hatékonyság és a minőség növelése ezen a területen, továbbra sem mondhatunk le a mennyiségről, s ezt olyan körülmények között kell emelnünk, amikor meg kell változtatnunk a technológiai fejlődés irányát. Amikor a mezőgazdaság első energetikai anallzisét végrehajtottuk, megdöbbenve tapasztaltuk, hogy az összenergia — tehát az összes importenergia —, amelyet egységnyi kitermelt energiára fordítottunk, rohamosan nőtt az elmúlt időszakban, és a mezőgazdaságban elsősorban az folyékony energia olyan nagyságrendűvé vált, ami hosszú távon, a technikai fejlődésnek ebben a struktúrájában semmilyen körülmények között sem viselhető el.

Ennek következtében egyik alapvető feladatunk, hogy megváltoztassuk az energiafelhasználás struktúráját mennyiségében is és összetételében is. Ezért nem viselhetjük el például, hogy — a műtrágyákról beszélve, amelyek hozzám tartoznak — 14—15 kg-mal állítsunk elő 1 q terméket. El kell érnünk, mégpedig 5 éven belül — és ilyen célt tűztünk is magunk elé —, hogy a talaj termékenységének a csökkenése nélkül 6,5 kg komplex anyagból állítsunk elő 1 q gabonát. Ez egyáltalában nem irreális. Ehhez nagyon sok mindent kell tudni, egyebek között például jól kellene ismerni a növény fiziológiáját.

Ezenkívül meg kell változtatni a tartósítás és a feldolgozás módszerét.

A mezőgazdaságban ebben a pillanatban felhasznált szénhidrogén — a teljes szénhidrogén-termelésnek mintegy 30%-a — szárításra megy. Ezért az az álláspontunk, hogy a szárítást más energiaformára kell áthelyezni, és nem szabad semmit olajjal szárítani. Ezért az a véleményünk, hogy a tartósítás fermentatív útjának óriási lehetősége van. Ennek a feldolgozásában, egyáltalában a biomasszának mint energiaformának vagy nyersanyagformának a felhasználásában a világon folyó kutatás egyértelműen a fermentációs kémia rendkívül gyors fejlődésére utal. Én mint egyik alapvető igényt a mi területünkről, a fermentációs kémia megerősítését tartom a legfontosabbnak az oktatáson belül, egyáltalában a hozzánk jövő vegyészeknél.

A másik probléma a mikroanalitika kérdése. Nem egy anyag van a kezünkben ebben a pillanatban, amelyet úgy használunk, hogy 20 g-ot teszünk 100 l vízbe. Nekünk ezt az anyagot úgy kell beengednünk a mezőgazdasági termelésbe ilyen hihetetlenül nagy biológiai aktivitással, hogy azt 7—8 nappal a kezelés után, nagyon sokszor szisztematikus hatás mellett, az analitikusnak meg kell találnia.

Az utóbbi időben olyan anyagok kerültek a kezünkbe, amelyek önmagukban semmiféle toxikus hatást nem fejtenek ki magára a kórokozóra, hanem a plazmába felszívódva olyan anyagok képződését váltják ki, amelyek aztán

előidézik magát a kívánt hatást. Egyértelmű tehát, hogy ez is, a másik oldal is, a fiziológia és a biokémia a jövő szakembereinek a megerősítését igényli.

Ezt a paksamétát azért hoztam ide, mert fel akarok belőle olvasni néhány témát az egyik nagyon fejlett nyugati állam állami-kutatási programjából. Ennek egyik főcíme a következő: „A fotoszintézisre és a respirációs működésre vonatkozó fiziológiai és genetikai mechanizmusok kutatása." Ebben szó van a fotoszintézist fenntartó mechanizmus hullámzásáról, a fiziológiás és genetikus tényezők elemzéséről a fotoszintézisben és az elemző mechanizmusról a fotorespirációkban.

Eszerint a fiziológiának mint alkalmazott kémiának olyan termelőeszközzé válása várható a következő 20 évben, ami alapvetően meg fogja változtatni — és meg is kell hogy változtassa — az akkor dolgozó szakember ismeretstruktúráját.

Ezért összefoglalóan a fizikokémia, a biokémia és a fermentációs kémia oktatásának a megjavítását javaslom.

Befejezésül még egy dologra szeretném felhívni a figyelmet. Itt ma tényleg sok szó esett az innovációról. Alapos elemzés után meg kell azonban mondanom — és higgyék el nekem, hogy a mi területünkön, amely a fegyvergyártással és az atomkutatással együtt stratégiai terület lett —, egyre fokozottabban megy végbe a multinacionális monopóliumok diverzifikációja.

Eddig azt hittem, hogy ez a mezőgazdasági termelés hihetetlenül gyors koncentrációjával fog történni. Ma egyértelműen az a felismerés, hogy nem így fognak diverzifikálni, hanem úgy, hogy a növényt 4 emeletnyi fitotronba zárva óriási mennyiségű fiziológiai és funkcionális vizsgálatokat végeznek a legmodernebb műszerparkkal és komputerrel. Ennek következtében egy teljesen új termelési fázissal fognak diverzifikálni a mezőgazdaság felé. Felméréseink egyértelműen azt bizonyítják, hogy a biokémiai fiziológiai kutatásban dolgozó legnagyobb nevek az állami kutatás területéről egyre nagyobb tömegben mennek át az anyagi érdekeltség következtében a monopóliumok kezébe.

Ennek következtében a mi adaptációs lehetőségeink ugyanúgy szűkülnek, ahogy az állami kutatás csökken, mert a kutatások eredményeiből katonai jellegű titokőrzés mellett abban a pillanatban tőkét fognak kovácsolni, mihelyt termelésben alkalmazható eredményekhez jutnak. Ez azt jelenti, hogy az a folyamatos adaptáció, amelyet eddig végeztünk, sajnos csökkenni fog. Ezért én azt szeretném javasolni, hogy a magyar szakemberek — különösképpen a kémikusok — adaptáló készségének a fokozása érdekében az általános alapképzést rendkívül gyorsan növeljék meg, mert az a tapasztalatunk, hogy az tudja jól adaptálni az új ismereteket, aki jól tudja az elméleti kémiát az adott területen.

Sajnos, a felvételi vizsga rendszere nálunk is rossz, és mi is azzal „büszkélkedhetünk", hogy nem a tehetséget, hanem a képzettséget értékeljük. Nálunk is volt olyan negatív szelekció, mint amilyenről itt hallottunk. Ezért

az a véleményem, hogy a tehetség vizsgálatának a bevezetése a felvételi anyagba — vagy egyáltalán a vizsgáztatásba — égetően fontos feladat. Én nem látok más lehetőséget, mint azt, hogy az Akadémiának kell ezt valamilyen módon elérnie.

Ha Horthyéknak 1939-ben vagy 1942-ben volt arra eszük, hogy nem azt kérdezték tőlünk, hogy ki kicsoda, és nem reakciókat kérdeztek tőlünk, hanem megfelelő tesztekkel a tehetségünket vizsgálták, — akkor ezt egy szocialista államban nekünk is meg kellene tennünk.

ZÁDOR GYÖRGY
a Budapesti Vegyiművek igazgatóhelyettese,
a Vegyipari Dolgozók Szakszervezetének alelnöke

Köszönöm szépen, hogy megtiszteltek azzal a lehetőséggel, hogy ott felszólalhatok, és ismertethetem szakszervezetünknek a mérnökképzéssel kapcsolatban kialakult véleményét.

Mi 1979-ben egy elég nagyméretű reprezentatív felmérést végeztünk a vegyiparban levő diplomások körében, nevezetesen a gyárakba kiküldött kérdőíveken 2100 diplomás adott választ, az érdekeltek 28 százaléka. Ezért itt néhány vitatott kérdésben a közvéleményre tudok hivatkozni.

Előljáróban meg kell mondanom, hogy a megkérdezettek a képzést általában, kétharmad részben — fiatalok és öregek — jónak, megfelelőnek tartják, de felvetnek egy-két problémát is. Ilyen például az üzemmérnökképzés, amelyről itt is többször volt szó. A megkérdezettek 50 százaléka nem látja az üzemmérnökök helyét a vállalatoknál. Ebben a kérdésben vannak előítéletek is. Ilyen előítélet az, hogy az egyetemen a tanulmányi idő alatt a hallgatók között minősítenek, és a gyengéket bocsátják ki üzemmérnöknek.

A képzést jónak tartjuk, de meg kell találni a helyét. Én a budapesti és a veszprémi modellnél sokkal jobbnak tartom a keszthelyi modellt, ahol az elején megmondják a hallgatónak, hogy üzemmérnök lesz-e vagy okleveles mérnök. Ez sokkal tisztességesebb: mert vagy vállalja, vagy nem vállalja. Nem tesszük ki az illetőt annak, hogy évek múlva kelljen mondania: nem ezt akartam. Egészen más, ha ez így megy a köztudatba. Még akkor is helyesebb ez az eljárás, ha a jelentkezők 95 százaléka okleveles akar lenni, és nincs annyi hely. Akkor mondják azt: oda nem tudom felvenni, de itt még van hely, ide felveszem, — vállalja vagy nem vállalja? Ha üzemmérnök, két évvel hamarabb keres, mint az okleveles mérnök, néha jobban is dotálják, — esetleg a dupláját is megkeresi, és nincs eleve előítélettel tálalva a vállalatok felé. Ez nagyon lényeges kérdés.

Előbb azonban el kell dönteni azt a kérdést, hogy szükség van-e üzemmérnökökre, mert az is felmerült, hogy nincs rájuk szükség. Azt hiszem, ez nem teljesen végiggondolt vélemény. Ma nagyon fejlett technológiákat kell

esetleg bevezetni az üzemekben, amelyekhez nem feltétlenül kell ötéves képzés, de jól megalapozott képzés kell, úgyhogy szükség van üzemmérnökökre, s erre még további érveket is fel lehet hozni.

A másik dolog, hogy elnökségünk álláspontja szerint vegyészmérnökökben nincs túlképzés, szükség van annyi vegyészmérnökre, amennyi most van. Ezt alátámasztja az az információ, amelyet a mai napon kaptunk a minisztérium személyzeti főosztályáról. Eszerint a következő öt esztendőben a vegyiparban 800 fő van nyugdíjközelben. Azt hiszem, nem kell tovább érvelni, hogy szükség van ilyen mértékű vegyészmérnök-képzésre.

Elhangzott, hogy mi legyen inkább: mérnökképzés vagy kutatóképzés. Személyes véleményem és tapasztalatom szerint nekünk kell a mérnök is. Rengeteg helyre kell mérnök. Az országos előírások szerint bizonyos posztokat mérnöki diplomával kell betölteni, ilyen például a főosztályvezetői poszt és még egy csomó, — tehát kell a mérnök. Az egyetemi képzés ne járjon olyan igényekkel, hogy a diplomást csak az elégítse ki, ha tudománnyal foglalkozik.

Megnéztem az egyetemek mostani tematikáját. Mindenesetre lényegesen jobbak, mint a 10—15 évvel ezelőttiek, de véleményem szerint még mindig túl sok a részletkérdés. A sajátos feladatok ellátását szolgálja a szakmérnökképzés — azért van a posztgraduális képzés —, és maguknak az üzemeknek is tanítani kell az embereiket. Nem létezik olyan egyetem, mely minden technológiára megfelelő képzést tudjon adni, tehát feltétlenül az általános vegyészmérnök-képzésre helyezném a súlyt. Aki tovább akar menni — nagyon egyetértek a 14 féléves egyetemi doktori képzéssel —, az célozza meg ezt, vegyen fel még tárgyakat, esetleg már a negyedik vagy ötödik évtől kezdve több szabadságot lehetne adni a tárgyak felvételében.

Végül nagyon nagy szükség volna a mai helyzetben arra, hogy az üzembe kerülő embereknek legyen gazdaságossági szemléletük. De nem lehet külön tanítani a kutatást, külön az üzemet és külön a gazdaságosságot. A gazdaságosságot minden tárgynál tanítani kell. Abszurd dolog, hogy ha valamilyen anyagnak van 67 százalék kihozatala és megkérdezem, hogy mi van a 33 százalék differenciával, akkor azt mondja az illető, hogy kiöntötte a maradékot. A leglehetetlenebb helyzetek állnak elő. Néha az 5 százalék hulladék vagy melléktermék nagyobb gondot okoz, mint az egész szintézis.

Még egy észrevétel: külföldi tapasztalatok alapján megszívlelendőnek tartanám, hogy eljárás-technikai ismeretek is szerepeljenek a mérnökképzésben. Ez nálunk is nagyon lényeges lenne. Tudom, vannak intézetek, amelyek ezzel foglalkoznak, de ez nagyon kevés, pedig ez nagyon fontos volna a kutatás és a folyamatos üzemesítés kapcsolata szempontjából. Itt hiányérzetünk van, mert erre nincs megfelelő képzés.

Végül egy utolsó megjegyzésem lenne: akik tömegpszichológiával foglalkoznak, figyelembe kellene venniük, hogy ne kelljen 150 percet itt ülnie a hallgatóságnak. (Derültség).

HOZZÁSZÓLÁSOK

PUNGOR ERNŐ
z MTA rendes tagja

Szeretném az elején hangsúlyozni, hogy magánvéleményt mondok, nehogy valaki összekösse a karral, amelynek pillanatnyilag vezetője vagyok.

Az oktatás kérdése a legizgalmasabb kérdések egyike, ezen múlik a jövő oktatás és kutatás is.

Igen sokat beszéltünk a vegyész- és vegyészmérnök-képzésről, de nagyon keveset szóltunk a tanárképzésről, pedig a hatékony tanárképzés nélkül nem várható, hogy majd megfelelő kémikusokat kapjunk.

Kérdés, hogy mit oktassunk és hogyan oktassunk. Azt hiszem, ennek megvitatása volt a legfontosabb célja a mai ülésnek, de ez egy kicsit elsikkadt.

Nagyon örültem NAGY BÁLINT hozzászólásának a MÉM részéről, mert abban volt egy olyan igény, amely a magyar kutatók, a magyar oktatók részére feladatokat jelent. Ha ezt a kérdést nem oldjuk meg, akkor nem lesz miből kutatnunk és oktatnunk. Világosan tudnunk kell, hogy igen nagy mértékben a mezőgazdaságból kell élnünk. Ezt mindig szem előtt kell tartanunk.

Nagyon értékes előadások hangzottak el, de jobban örültem volna, ha nagyobb mértékben lett volna kiemelve, hogy mi az, amit el fognak várni tőlünk a következő időszakban.

Elhangzottak megjegyzések a kétfokozatos képzésről: jó-e vagy nem jó. Nagyon nehéz vitatkozni erről a kérdésről, mert benne élünk egy olyan térségben, amely az ónémet oktatási rendszerhez szokott hozzá. Azért nem mondtam úgy, hogy német, mert a nyugatnémetek átalakították oktatásukat ugyancsak több fokozatúra. Az ő tapasztalatukat természetesen még nem látjuk, mert nemrégen csinálták ezt.

Azt hiszem, legalább annyi szól e rendszer mellett, mint amennyi ellene. Az 50% legalább annyira nem szignifikáns, mint a 66% a kiképzés jóságára.

A felvetett kérdések közül az egyik legizgalmasabb a társadalmi megbecsüléssel képzett embereink problémája. Az Akadémiának egyszer végre már a kormányzat tudomására kell hoznia azt, hogy a közvéleményt irritálni fogja a Magyar Televíziónak egy olyan közlése, mely szerint egyes büntetett előéletűek havi 8—9000 Ft-ot keresnek, végzett hallgatóinkat pedig 2700,—

Ft-tal vesszük fel. Amikor műszaki-tudományos forradalomról beszélünk, akkor figyelembe kell azt venni, hogy azoknak a szakembereknek, akik ezt végrehajtják, kell egy társadalmi megbecsülés is, különben csak beszélünk erről a forradalomról. Vannak lelkes emberek, akik ettől függetlenül csinálják a dolgokat, de itt nem egypár lelkes emberre, hanem egész hadseregre van szükség, hogy az ország jelenlegi gazdasági életéből olyanba menjen át, amilyent elvárnak tőlünk.

Másik megjegyzésem az, hogyha megjelennek ezek az anyagok papíron is, akkor célszerű néhány dolgot pontosabban megfogalmazni. Azt hiszem, félreérthető esetleg SZABÓ akadémikus előadásában a KK-ra tett megjegyzés. Abból úgy tűnik, hogy tanszékeink egy része futkos ipari megbízatások után. Merem állítani, mint a BME vegyészmérnöki kar dékánja, hogy a mi karunkra nézve ez nem érvényes. Bennünket olyan tömegben keresnek meg az ipartól, hogy az igények egy részét visszautasítjuk. Az ipari kutatások jelentős része egybeesik a mi kutatási irányvonalunkkal. Ezekről nemzetközileg elismert közlemények jönnek elég szép számban. Nem volna jó tehát olyan fogalmazás, amely bármilyen formában félreérthető lenne.

Van még egy dolog, amihez célszerű volna valamilyen megjegyzést hozzáfűzni. Összeadtam a Szebényi-féle táblázatokon, hogy a műszaki egyetemeken 871-en vannak alkalmazva a kémián belül, ezzel szemben 611-en vannak a TTK-kon. SZABÓ akadémikus szerint a már beépített szellemi és anyagi erők arányában kellene elosztani a hallgatóságot. Ez utóbbit is összeadtam. A műszaki egyetemeken 260-an vannak egy évfolyamon belül. A tudományegyetemeken 80 vegyész van egy évfolyamon, ehhez jön a tanárképzés, ez összesen 240, ha jók az adataim. Az arány tehát 240 : 260. Nem szeretném, ha SZABÓ akadémikus referátumából az derülne ki, hogy a szakemberképzés iránti igény esetleg a tanárképzés rovására megy. Ezt célszerű volna tisztábban megfogalmazni, és a megfelelő háttérrel együtt megadni.

A kiscsoportos képzés nem újdonság. A vegyészmérnöki karon hosszú évek óta kiscsoportos képzés folyik, 6—8-as csoportokban. Ez természetesen óriási oktatói igényt jelent. Oktatóink leterhelése ennek következtében nem 8 vagy 12 óra, hanem jóval több, de megcsináltuk, mert az a véleményünk, hogy másképp nem lehet korszerűen oktatni. Ez tehát megoldott dolog.

A nyitottlabor-rendszerre is vannak példák. Azt hiszem, hogy amikor ez a hozzászólás nyomtatásba kerül, jó volna ezt lábjegyzetben megemlíteni, nehogy félreértse bárki is, aki a referátumot olvassa. Főképp az lenne veszélyes, ha ezt olyan valaki olvasná, aki nincs a vegyész- és vegyészmérnök körökben tisztában a való helyzettel.

Egész mai ülésünkkel — a délelőttivel és a mostanival — kapcsolatban azt szeretném mondani, hogy nagyon örülök a problémafelvetésnek, mert a kutatás, az oktatás helyét diszkutáljuk. Sajnos minden korszakban voltak flagellánsok, — most is vannak. Nemzetközi tapasztalatom alapján azonban

az a véleményem, hogy a magyar kémiai tudomány nem átlagszinten van az egész ország helyzetéhez képest, hanem sokkal jobb helyzetben van, tehát nincs okunk arra, hogy ostorozzuk magunkat.

Arra okunk van, hogy munkánkat még továbbfejlesszük. Lehetünk mi magasabb szinten is, de arról szó sincs, hogy szégyellnünk kellene a helyzetünket. Most nemcsak a hazai helyzetről, hanem a nemzetközi életben elfoglalt helyünkről is beszélek.

Az oktatás területével kapcsolatban az a véleményem, hogy a mi képzett hallgatóink minden nehézség közepette jól meg tudják állni a helyüket. Van különbség a kétféle képzés között. Aki a TTK-n és a műszaki egyetemen is tanított, az meg tudja állapítani, hogy van különbség a kettő között, és kell is, hogy különbség legyen, éspedig lényeges különbség, mert ha nem volna, akkor valamelyikre nincs szükség.

Nekem tehát az a véleményem, hogy ezt a különbséget nem csökkenteni, hanem fokozni kell abba az irányba, amelyik az ország életében állandóan újabb és újabb igényként jelentkezik. Fel lehetne sorakoztatni még például a nem-kémiai ipar igényeit is, és így tovább, amelyeknek a kielégítésére ma Magyarországon még nincs, vagy alig van képzés.

Van módunk olyan elméleti képzéseket még tovább telepíteni a TTK-ra, amelyek iránt állandóan nőnek a társadalmi igények, és nem volna helyes csak formailag közelíteni ehhez a kérdéshez. A műszaki egyetemeken pedig tovább kell erősíteni a megfelelő alapképzést követő művelettani, korszerű képzési irányokat, amelyekhez jelenlegi helyzetünkben sem vagyunk kellőképpen felszerelve — mert ez komoly felszerelést igényel —, és ha valaki azt akarná, hogy ezt a TTK-ban is megcsináljuk, az ország gazdasági ereje ezt nem bírná el.

Biacs Péter
főosztályvezető-helyettes, a kémiai tudományok kandidátusa (Oktatási Minisztérium)

Az Oktatási Minisztérium részéről örömmel tapasztaljuk, hogy — több más hasonló megnyilvánulása mellett — az oktatás, a képzés, a továbbképzés problémakörében is erősödött az Akadémiának az a közéleti tevékenysége, amely — a XII. Pártkongresszus határozatát is figyelembe véve — a tudomány társadalmi erővé válását szolgálja.

A minisztériumnak mint irányító főhatóságnak rendkívül értékes tapasztalatot jelent egy ilyen helyzetfelmérés. Ez az értékelés a maga tudományos igényességével elősegítheti a tisztánlátást, a magyar felsőoktatás fejlesztési igényeivel kapcsolatos világos, közérthető megfogalmazást.

A magyar vegyész- és vegyészmérnök-képzés problémájának a felvetése jól tükrözi azt a helyzetet, amely ma hazánkban a kémia és a vegyészet kérdésének műszaki vonatkozásai tekintetében kialakult. A népgazdaság minden

ága igényli ma a kémiai alapképzettségű szakembereket, és egyáltalában nem meglepő, hogy a vegyészeket és a vegyészmérnököket ma már nagyobb számban alkalmazza a vegyipartól távol eső terület, mint maguknak a hagyományos kémiai iparágaknak a műhelyei.

Kémiai anyagismeretünk ma már lehetővé teszi azt, hogy a vegyészet a mindennapok körébe kerüljön. A nem fémes szerkezetű anyagok széles körű elterjedésével, a háztartási vegyiparral vagy a szilárdtest-fizikával kapcsolatban is szükség van vegyészetre. A közoktatásban éppúgy, mint a felsőoktatásban szükség van vegyészeti anyagismereti tanulmányokra az élet minden területén.

A mezőgazdaság kemizálásának a versenyképessége érdekében, valamint az első hozzászóló által említett fontos egészségügyi, klinikai, laboratóriumi vonatkozások miatt az a meggyőződésünk, hogy ma már olyan tudományágak, mint a biológia és annak alkalmazott területei nem nélkülözhetik a kémiai alapismereteket, sőt ma már nem is fejlődhetnek azok nélkül. Ugyanakkor az elmúlt időszakban kétségkívül tapasztaltuk, hogy a kémia a magfizika irányába fejlődik bizonyos vonatkozásokban. Ezt tükrözik — többek között — a középiskolában a tárgyak új oktatási anyagai is.

Abban a vitában, hogy felsőoktatási intézményeink hogyan látják el képzési feladataikat, és milyen irányban fejlődnek tovább, megítélésem szerint jelenlegi gazdasági helyzetünk körülményei között nem nélkülözhetjük azokat a megfontolásokat sem, hogy egy ilyen széles körű feladat megfogalmazása esetén, mint amilyen most a vegyészettel és a vegyészmérnöki tudományokkal kapcsolatban elhangzott, a népgazdaság igényeinek megfelelő vegyész- és vegyészmérnök-képzés csak szigorú munkamegosztásban képzelhető el. Ennek feltételeit a már meglevő anyagi, társadalmi, szellemi bázisokra kell alapoznunk, hiszen — néhány kivételtől eltekintve — nem várható, hogy újabb beruházással, fejlesztéssel nagyobb előrelépéseket lehetne tenni ezen a területen.

A műszaki-kémiai tudomány területén a vegyészmérnök-képző intézetek, intézmények technológiai és műveleti tanszékeire kell támaszkodni, hiszen hagyományosan ezek technikai háttere mint adottság, tehát a műszaki karok vagy éppen a kutató- és egyéb intézetek megléte biztosítja ennek a képzésnek a fennmaradását és súlypontilag itt tartását.

Nem valószínű — és ezt nemzetközi tapasztalataink is megerősítik —, hogy a tudományegyetemeken folyó természettudományos képzés és így a vegyészképzés kiépítéséhez a jövőben olyan széles műszaki hátteret lehetne kialakítani, amely a technikai kémia oktatását biztosíthatná. Az intézmények közötti együttműködéssel természetesen a jövőben is sok mindent megoldhatunk, hiszen erre az elhangzottak példát is adtak.

Erre jó példa a közelmúltban bevezetett és most már az első mérnököket kibocsátó biológusmérnök-képzés, amely éppen a műszaki egyetem kémikusainak és az Eötvös Loránd Tudományegyetem biológusainak az együtt-

működésével működik. Nem vagyok benne biztos, hogy éppen ezt a megoldást kellett hogy válasszuk, és az első kibocsátott mérnökökkel kapcsolatos visszaigazolások azt mutatják, hogy ennek a képzésnek a mérnöki oldala még további javításokat igényel.

Ugyanakkor a népgazdaság, a tudományos élet területei egyaránt igénylik, hogy például az egészségügy vagy a mezőgazdaság területén, ahol arra éppen a biológus tanszékcsoportok közreműködésével jobb, megalapozottabb lehetőség kínálkozik, szakirányokat és szakágazatokat fejlesszünk ki.

Kétségtelen, hogy inkább posztgraduális képzéssel hozható ez létre, de bizonyos vonatkozásokban már a szokásos képzés során is megvalósíthatók a szakirányok. A klinikai-laboratóriumi vizsgálatok analitikai feladatainak ellátásához a biológusok közreműködése, vagy éppen — amint itt az előbb el is hangzott — a fizikusok közreműködése adja meg a megfelelő, nagyon jó képzési hátteret.

Hazai adottságaink ma ezt a lehetőséget kínálják fel a vegyész- és vegyészmérnök-képzés problémáinak és feladatainak megoldásában.

Nem hallgathatom el azonban azt sem, hogy ma kevés szó esett a nemzetközi kitekintésről, hogy tudniillik más országokban — eltérő adottságaik ellenére — hasonló kép alakul ki.

Két példát említek. Olaszországban a vegyészek és a vegyészmérnökök egymáshoz viszonyított aránya a képzés során 1 : 3, tehát a vegyészmérnök-képzés van túlsúlyban, bár hozzá kell tenni, hogy még kb. 0,1 arányú ún. ipari kémikusképzés is folyik a természettudományi karokon. Igaz, hogy itt ismételten felmerült a több műszaki kémiai ismeret szükségessége.

A másik az NSZK példája, ahol történtek már bizonyos lépések új képzési formák bevezetésére. Itt ma 24 ezer vegyész dolgozik, ebből 11 ezer a vegyiparban, és ezeknek csak kétharmada kapott tanulmányai során technikai kémiai ismereteket, és ez nagyon kevésnek bizonyul. Ezért vált szükségessé, hogy az említett létszám mellett sorra kialakítsák a főiskolai képzést. Ma már innen 8—10 ezer főiskolát végzett mérnök kerül ki, tehát az a bizonyos hároméves képzést kapott mérnök, aki a vegyipari műveletekben és a technológiák területén járatos, de emellett anyagismereti képzettsége révén közreműködhet infrastrukturális feladatok ellátásában is.

Milyen következtetéseket vonhatunk le ezek után a hazai és a nemzetközi helyzetképből? Szükségesnek látszik az, hogy az Oktatási Minisztérium a vegyész- és vegyészmérnök-képzés problémáinak feltárására és a fejlődés irányának megszabására közös működtetésű szakbizottságot hozzon létre. A MÉM területén a kutatási bizottságokat olvasztották be a megfelelő akadémiai munkabizottságba. Mi ezt nem tehetjük meg, nekünk képzési, oktatási szakbizottságaink vannak, de örömmel vesszük, ha kölcsönösen delegálunk egymáshoz tagokat, mint ahogy eddig is volt erre példa. A közeljövőben megtesszük a lépéseket egy közös vegyész- és vegyészmérnök-képzési szakbizottság

létrehozására. Ennek a szakbizottságnak nemcsak az lesz a feladata, hogy megállapítsa, mi a közös a két oktatási, képzési irányban, hanem talán még fontosabb feladata a különbözőségek megállapítása.

Remélhetőleg olyan illetékességet tudunk a magunk számára biztosítani, hogy az ő javaslataiktól függővé téve — és természetesen figyelembe véve a Kémiai Tudományok Osztályának álláspontját — tudjuk eldönteni, hogy milyen irányba fejlesszük tovább a vegyész- és vegyészmérnök-képzést.

Az elmondottakból világosan kiderül, hogy a probléma egyik megoldási lehetőségét a továbbképzés biztosítja. Nagyon köszönöm a Vegyipari Szakszervezet alelnökének a felszólalását, elismeréssel hallottuk állásfoglalásukat, ismerjük az anyagukat is, azt is, ami megjelent a Vegyipari Dolgozók Lapjában. Nagy örömmel könyveltük el, hogy a megoldás kulcsát ők is a továbbképzésben látják. Ezzel mi nagyon egyetértünk. Csak a továbbképzés és a posztgraduális képzés tudja biztosítani a szakirányokban jelentkező új igények rugalmas kielégítését.

Álláspontunk szerint egyetemeinknek és főiskoláinknak ma már az oktatás és a kutatás mellett harmadik — ugyanolyan súlyponti feladata — a továbbképzés.

Nem elég gondolkodni a továbbképzésen, hanem határozott lépéseket is kell tenni azért, hogy például a tudományegyetemek tanterveiből hiányzó szervezett továbbképzés megvalósuljon. Nagyon szeretnénk, ha több tanniakarás jelentkeznék, és a szakmérnök-képzéshez hasonlóan kialakulna a vegyész-szakképzés is. Itt tudnánk kielégíteni a biokémikus-képzés iránti igényeket is, mert most biokémikussá csak válik valaki, — ilyen képzés Magyarországon nincs. Ez sürgetően szükséges, de azért az sem mellékes — és itt megint a Vegyipari Szakszervezetre hivatkozom —, hogy a most már igen nagy számban kiképzett vegyész-üzemmérnökök számára is tegyük lehetővé a posztgraduális képzést.

Elhangzott itt a Keszthelyi Agrártudományi Egyetem példája. A növényvédelmi üzemmérnök-képzés létszáma a felére csökkent és jövőre már megszüntetik, tehát nem vált be, hogy ugyanazon az egyetemen egymás mellett folyjék az üzemmérnök-képzés és az okleveles mérnökképzés. Majd a közös vegyész- és vegyészmérnök-képzési bizottság meg fogja vizsgálni, hogy mi a teendő a növényvédelmi és agrárkémikus képzésben.

Még egy megállapítást mondok, amely a posztgraduális képzés fontosságát húzza alá. Oktatási intézményeink igen gyakran élnek azzal a lehetőséggel, hogy megkérdezik végzett hallgatóikat öt év után, tíz év után, vagy még később, hogy mit tapasztaltak, hogyan látják, mit adott nekik az egyetem és a főiskola.

Öt év után a megkérdezettek azt mondják, hogy sajnos, nagyon kevés gyakorlati ismeretet adott az egyetem és a főiskola. Tíz év után az elméleti ismeretek megalapozottságának a hiányát róják fel, nemegyszer szemre-

hányásként. Tizenöt év után szinte egyöntetűen úgy nyilatkoznak, hogy bár kaptak volna többet gazdasági, vezetési ismeretekből, — húsz év után pedig körülbelül úgy nyilatkoznak, mint az előttem szóló Mészáros kollégám. (Derültség és taps.)

VAJDA MIKLÓS
tudományos főmunkatárs, a kémiai tudományok kandidátusa
(Központi Kémiai Kutatóintézet)

Két kérdésről szeretnék röviden szólni. Az egyik, hogy a mi szakmánknak van egy olyan része, amelyről nem volt szó, ez pedig a mesterségbeli rész, kezdve a labortechnikától, folytatva a műhelytechnikáig. Az az érzésem, hogy ez a terület ma nagyon erősen háttérben van, pedig még most is éppen úgy szükség van arra, amit WEYGAND „Experimentier-Kunst"-nak nevezett, csak ma méréstechnikának kell nevezni. Ez a terület folyamatosan visszaszorul az oktatásban.

A másik kérdés JOBST KÁZMÉR hozzászólásával kapcsolatos. Nagyon szép az a szempont, hogy gazdaságunk számára kell képezni, de ahogy az Agrártudományi Egyetem intézményeiben a biológust kisebb súlyúnak tekintik, mint az állatorvost, ugyanúgy az Orvostudományi Egyetem intézményeiben és az egészségügyi intézményekben a vegyészt másodrangú értelmiséginek kezelik az orvoshoz képest, — például laboratóriumvezető nem lehet vegyész, csak orvos lehet. Ez annyiban indokolt, hogy a diagnózis felállításához az orvos tud hozzászólni, de a kémiai analízis helyességéhez hozzászólni az orvos vajmi ritkán tud.

VARSÁNYI GYÖRGY
tanszékvezető egyetemi tanár (BME), a kémiai tudományok doktora

A SZEBÉNYI IMRE által összeállított anyag könyvtáram értékes darabja lesz, de azért meg kell jegyeznem, hogy ezek a tantervek önmagukban nem alkalmasak arra, hogy megítélhessük a különböző képzések hasonlóságait és különbözőségeit. Többek között azért sem, mert ugyanazon címszó alatt ugyanazon tárgyban rendkívül különböző tematikák fordulnak elő.

Szó esett itt az alapképzés erősítéséről is. Az alapképzés nemcsak azáltal erősödhetik, hogy emelkedik a tantervben az alapképzésre biztosított tantárgyak óraszáma, hanem erősödhetik teljesen változatlan tanterv mellett is. Hivatkozom Szabó akadémikusnak arra a rendkívül fontos megállapítására, hogy az oktatás integrációja felé kell haladnunk.

Ez rendkívül fontos dolog, és hozzátehetem még azt is, hogy erre irányuló igyekezetünkkel sikerül talán némi károkat helyrehozni, amelyeket különböző intézkedések okoztak a felsőoktatásban. Hallottunk ugyanis a mai napon nagyon dicséretre méltó véleményeket a képzés céljáról, a szükségletekről,

az alapképzés erősítéséről, de nem hallottam véleményt arról, hogy a vizsgákat számra kell mérni a félévek után, az ösztöndíjakat darabszámra mért vizsgák alapján kell megítélni. Pedig ez arra indítja az ifjúságot, hogy szükségszerűen dezintegráljon, hogy mozaikszerűen lássa az oktatást, hogy az egyes tárgyakat ne fontosságuk szerint nézze, hanem aszerint, hogy melyik „fizet jól". Emellett, ha egy utóvizsga ugyanannyit ér, mint egy rendes időben letett vizsga, ezzel elismerjük azt, hogy a hallgatónak nem szükséges a tanulmányi idő alatt foglalkoznia tanulmányaival, hanem elég, ha utána egy terjedelmes jegyzetet a maga különös adottságával „megeszik", és ezáltal biztosítjuk számára az elfelejtés minél nagyobb hatásosságát. Kb. 15 évvel ezelőtt publikáltam azt a mondást, azóta szállóigévé vált, hogy a hallgatóság azelőtt egyetemi tanulmányokat folytatott, ma eleget tesz a vizsgakövetelményeknek. (Derültség.) Azt hiszem tehát, hogy ezen a téren nagyon sok tennivalónk van.

Végezetül szeretném megemlíteni, hogy tegnap megtartott kari tanácsülésünk felhatalmazást adott egy kezdeményezésre, amelynek lényege az, hogy egy bizonyos problémakört, például kísérletképpen a kémiai termodinamikát olyan módon dolgozzunk fel, hogy része legyen az általános kémia, a fiziko-kémia, a vegyipari műveletek és szerves vegyipari alapfolyamatok című tárgyak anyagának. Azt akarjuk ezzel elérni, hogy a tárgyakat közelebb hozzuk egymáshoz, és a hallgatók szemléletét változtassuk meg oly módon, hogy lássák a műszaki és a természettudományok egységét. (Taps)

RÁTOSI ERNŐ
igazgató (Dunai Kőolajipari Vállalat)

Azzal szeretném kezdeni, hogy igen nagy érdeklődéssel hallgattam a vitát, mint egy nagyvállalatnak a vezetője, aki nagyon sok mérnök és vegyészmérnök kollégával dolgozom együtt.

Engedjék meg hogy ismertessem, hogy vállalatunknál, ahol mintegy 40 milliárdos termelési értéket hozunk létre, 13 milliárd állóeszközzel gazdálkodunk, és 3000 emberrel dolgozunk, ezen az állományon belül hogyan alakul a mérnökök, a vegyészmérnökök — ezen belül az üzemmérnökök és az ötéves mérnökök — száma.

A 3000 ember között vállalatunknál — az üzemmérnököket is beleértve — 327 felsőfokú végzettségű szakember van. Ezek közül 223-an részesültek ötéves képzésben, 104-en pedig üzemmérnökök. A vegyészmérnökök és a vegyész üzemmérnökök között az arány az ötéves vegyészmérnökök irányába tolódik el. A 223 felsőfokú — tehát ötéves — végzettségű szakember között 111 vegyészmérnök van, a 104 üzemmérnök közül viszont csak 24 vegyész üzemmérnök. Ez azt mutatja, hogy a vállalatunknál az építésben, a tervezésben, a technológiák kialakításában nagyobb számban vesznek részt vegyészmérnökök, mint egyéb mérnökök, akik inkább az üzemeltetésen dolgoznak.

Hadd mondjam el ezekkel a számokkal kapcsolatban, hogy mi úgy érezzük, hogy ez az arány jó. Nincsenek olyan gondjaink, hogy mit kezdjünk a vegyész üzemmérnökökkel. Ezek a vegyész üzemmérnökök nagyon jól megtalálták a helyüket üzemvezetőhelyettesként, — a legjobbak esetleg üzemvezetőként. Ez a nagyüzem több milliárdos értéket hoz létre. Ez nagy felelősséggel jár, de nem teszünk különbséget, és ezen a ponton egy kicsit vitába szállok ZÁDOR kollégával, aki azt mondta, hogy az üzemmérnököket már az elején megkülönböztetéssel fogadjuk. Nálunk nem fogadjuk őket megkülönböztetéssel! Megállják a helyüket! Aki ambíciózus és jól végzi a munkáját, lehetőséget kap arra, hogy továbbképezze magát, és a második fokozatot is elvégezze. Ha lenne olyan továbbképzés is ezen a területen, amelyik esetleg egy másik irányba vezetne, vagy lenne posztgraduális képzés ezen a területen, az még kedvezőbb lenne.

Hadd szóljak most valamit a vegyészmérnök-képzés színvonaláról! Engedjék meg, hogy azt mondjam: a jelenleg kikerülő vegyészmérnökök és vegyész üzemmérnökök nagyon jól képzettek! Legyen szabad ezzel kapcsolatban ne csak az én véleményemet elmondanom, hanem azoknak a külföldi szakembereknek a véleményét is, akikkel együtt dolgozunk egy-egy üzembehelyezésnél, egy-egy technológia-átvételnél. Ezek a külföldi szakemberek — Keletről és Nyugatról egyaránt — nagyon jó véleménnyel vannak fiatal mérnökeink munkájáról és szakmai színvonaláról.

Hadd szóljak a legutóbbi esetről, mert ez nem lényegtelen! Az Union Carbide cégtől vásároltunk licencet és know-how-t egy berendezés technológiájának a megváltoztatására. Az az 5 amerikai szakember, aki ezzel kapcsolatban itt volt, nemcsak udvariasságból fejezte ki nagy elismerését, hanem amikor hazaértek, vezetőjük levelet írt, és kifejtette azt, hogy mi, vezetők bizony az ott lenn dolgozó üzemmérnökök és mérnökök iránt nagy elismeréssel kell hogy legyünk.

Még egy példát mondok el ezzel kapcsolatban. Nem kis büszkeséggel mondhatom el, hogy ezt a technológiát Százhalombattán, a DKV-nál másfél-két hét alatt bevezettük, és egy nagy külföldi petrolkémiai kombináthoz tőlünk mentek ki szakemberek az üzembehelyezést elvégezni. Ezzel azt szeretném alátámasztani, hogy nem hiszem, hogy aggódnunk kellene a vegyészmérnök-képzés színvonalát illetően.

Azt hiszem, hogy a mi esetünkben, ahol nagy petrolkémiai folyamatok mennek végbe, egyértelműen vegyészmérnökre van szükség. Az előbb elfelejtettem mondani, hogy amíg 110 vegyészmérnökünk van, és ezen felül még az előbb említett 25 üzemmérnök, addig vegyészünk mindössze 5 van.

Mit várunk mi? Azt mondhatnám, hogy tulajdonképpen ugyanazt, amit eddig. A mi területünkön olyanok a feladatok, hogy általában meglevő technológiákat kell vásárolnunk. Olyan kidolgozott technológiáknak, mint a krakk-technológia, vagy egyéb ehhez hasonló technológiák hazai kutatásáról nyilván

nem lehet szó. Ezeket át kell venni. Azt várjuk, hogy mérnökeink képesek legyenek e technológiák megismerésére, másrészt az átvételre, és meg tudják határozni, hogy mit kell és mit érdemes csinálni.

Éppen ezért nagyon lényeges ezeknek az átvett technológiáknak az itthoni megtervezése, kultúrált és magas színvonalú üzemeltetése, amiről mondtam is példát. Nagyon lényeges — és az utóbbi időben a leglényegesebb —, hogy a meglevő technológiai folyamatokat magas szinten elemezzék. Az elemzések egyrészt műszakiak, másrészt gazdaságiak. Ezeknek az elemzéseknek az alapján találunk megoldást a célszerű változtatásokra.

Ehhez eddig is nagy segítséget nyujtottak a kutatóintézetek. A jövőben azt várjuk a kutató- és tervezőintézetektől, hogy ha mi egy gondolatot megragadunk, azt segítsenek megvalósítani, vagy éppen annak feltárásában legyenek segítségünkre, hogy mire van szükségünk.

Nagyon lényeges, hogy aki ezen a területen dolgozik, műszakilag és gazdaságilag tudjon elemezni, és ehhez a szükséges folyóiratokat is tudja olvasni nyelvileg is, meg műszakilag is. Itt az elsőt húzom alá: a nyelvet. Már több fórumon vettem részt, ahol mérnökképzésről esett szó, és mindig elhangzott a nyelvtanulás, illetve a fiatal mérnökök nyelvtudásának a fontossága. Amikor a mérnökök kikerülnek az egyetemről, és odajönnek hozzánk, mi is megkérdezzük tőlük, hogy milyen idegen nyelven beszélnek. A válasz általában az, hogy ezt vagy azt a nyelvet tanulta. Aztán, amikor felmerül a nyelvismeret szükségessége, gyakorlatilag csődöt mondanak. Márpedig ezekhez a korszerű technológiákhoz, amelyeket a jövőben is építeni és üzemeltetni akarunk, nyelvismeret nélkül nem két lábon járó mérnök a mérnök! Elnézést kérek, hogy ezt a megfogalmazást használom!

Hadd mondjam el ehhez még azt is, hogy azok, akik külföldön tanulnak, és ezt követően kerülnek hozzánk, a *harmadik* nyelvet jobban tudják, mint azok, akiket a mi egyetemeinken képezünk!

ZÁDOR ERIKA

újságíró (Magyar Hírlap), a kémiai tudományok kandidátusa

Elnézést kérek, hogy feltartom az ülést, és én is szót kérek, de olyan dologról szeretnék beszélni, amelyről eddig még nem esett szó a vegyészképzés tárgyalása során: a nők helyzetéről, arról, hogy milyen arányban vannak nők a hallgatók között. Nem tudom, hogy azért nem beszéltek-e erről, mert egyáltalában eszébe sem jutott senkinek, vagy azért, mert nem tartották illendőnek megemlíteni. Azt nem tudom pontosan, hogy a hallgatók között milyen arányban vannak nők — úgy gondolom, legalább a hallgatók fele —, de ha itt körülnézek a tisztelt hallgatóság között, kevés nőt találok.

Miről is van szó? A felvételi rendszer olyan — ezt MÉSZÁROS doktor is említette —, hogy a jól tanuló lányoknak kedvez inkább, mint a fiúknak,

akik el sem jutnak a felvételiig. A másik, amit SZABÓ akadémikus említett, hogy rosszak a tanárok. A tanároknál kontraszelekció van, ezért a kémiai oktatás olyan gyenge, hogy sokkal könnyebb a matematikát, a fizikát még népszerűsíteni is, mint a kémiát, mert ha valaki azt látja, hogy kémia, akkor undorral félredobja az újságot, olyan mélyen belenevelték, hogy ő utálja a kémiát.

Ez a két-három fokozatú képzés tovább rontja a helyzetet. Azok a bizonyos tárgyak, amelyek alapján szétválogatják a hallgatókat, megint az eredményezik, hogy a lányok — akik sokkal szorgalmasabban tanulnak — bentmaradnak, tehát azok, akik kiesnek és üzemmérnökök lesznek, megint csak a fiúk közül kerülnek ki. Már csak azért is, mert üzemmérnöknek lány nem megy. (Közbeszólás.) Mennek, mennek, de mégis inkább a fiúkból lesznek az üzemmérnökök.

Tehát a legalaposabb képzést végül is a lányok kapják. Aztán elkezdenek dolgozni. Természetesen nem mondom azt, hogy a lányok képességei elmaradnak a fiúkéitól, — ilyen feltevés még vita tárgyát sem képezheti. Az viszont tény, hogy amikor a lányok kijönnek az egyetemről, majd szülnek 2—3 gyermeket, és 6—8 évi kimaradnak a munkából. Tehát végeredményben arról van szó, hogy a legalaposabban kiképzett vegyészek vesznek részt a legkevésbé a munkában. Ennek elkerülése érdekében sokkal több fiút kellene bevonni a vegyészképzésbe.

Azt mondom, amit SZABÓ akadémikus is mondott: csakis az lehet a megoldás, hogy jó tanárok menjenek a középiskolákba, akik felkeltik a fiúk érdeklődését, hogy egészséges arányban jelentkezzenek erre a szakra, mert Magyarországon sokkal nagyobb a vegyiparnak a súlya annál, semmint ennyire el lehetne nőiesíteni ezt a szakmát.

A másik megjegyzésem a nyelvekkel kapcsolatos. SZABÓ akadémikus említette a tankönyveket, hogy jó tankönyvekre van szükség. Azt hiszem, a világon sehol máshol nem írnak annyi jegyzetet, annyi „mankót", mint Magyarországon. Én egyetemen sohasem tanítottam, de több egyetemen tanultam, vagy posztgraduális képzésen vettem részt. A Szovjetunióban például nem egy tankönyvet ajánlanak. Jegyzet nem is létezik. Az év elején a professzor felsorol 6—8 könyvet, és mindenki kiválasztja azt, amelyik neki a legkedvesebb. A könyveket nem kell megvenniük a diákoknak, egy speciális könyvtárból egész évre kikölcsönözhetik.

Hollandiában — ahol 14 millió embernek nem érdemes külön könyveket kiadni — tényleg csak az alaptankönyvek és a középiskolai tankönyvek vannak meg holland nyelven, a többi angolul, németül vagy franciául. Így aztán nincs olyan probléma, hogy kikerül a hallgató az egyetemről, és nem tud nyelveket, mert idegen nyelvek tudása nélkül el sem képes végezni az egyetemi tanulmányait.

VÁLASZ A HOZZÁSZÓLÁSOKRA

SZEBÉNYI IMRE
a kémiai tudományok doktora

A vegyész- és vegyészmérnök-képzés szerkezetére vonatkozó néhány megjegyzésre szeretnék reflektálni.

Az első a kétfokozatú oktatás kérdése. Nagy örömmel hallottuk ZÁDOR GYÖRGYtől, hogy üzemmérnökökre az iparnak szüksége van. Képzésükkel kapcsolatban felvetette azt a javaslatot, hogy már az egyetemi felvételi alkalmával döntsük el: okleveles mérnök vagy üzemmérnöki fokozatra kerül-e a hallgató.

A kétfokozatú képzésre Magyarországon és külföldön is több oktatási modellt ismerünk (egymásra épülő, párhuzamos, elágazásos). A ZÁDOR GYÖRGY által javasolt megoldás a párhuzamos modell, amelyet hazánkban Sopronban vezettek be a Faipari Mérnöki Karon. Kérdés, hogyan döntsük el ebben az esetben már a felvételinél, hogy kik legyenek okleveles mérnökök és kik üzemmérnökök? Amennyiben a felvételi pontszámok alapján történne a döntés, akkor valahol 16 pont felett lesznek azok, akik az okleveles mérnöki fokozaton tanulhatnak, s esetleg 11—12 pontig kell lemennünk azoknál, akiket üzemmérnök hallgatóknak veszünk fel.

A közvéleményben a mostanihoz hasonló vélemény alakulna ki, azaz ahogyan ZÁDOR GYÖRGY is jellemezte, az üzemmérnököket tekintik gyengébbeknek. A különbség az lenne, hogy a javaslat megvalósulása esetén nem a 3 évi tanulás eredménye alapján, hanem a kisebb felvételi pontszám miatt vélekednének így. Esetleg a mainál kedvezőtlenebb helyzetbe kerülnének a párhuzamos kétfokozatú modell bevezetése esetén. Jelenleg ugyanis minden hallgatónak megvan a lehetősége, hogy három év alatt bizonyítsa tudását, s ennek alapján történik a döntés. Ez jobb tanulásra serkenti a hallgatóságot. Ha már a felvételinél eldől, hogy melyik fokozaton tanul a hallgató, ez a lehetőség megszűnik.

Legyen szabad tájékoztatásul elmondanom, hogy amikor a hatvanas évek végén a kétfokozatú rendszert egyes egyetemeken kezdtük kidolgozni, több modellel is kísérleteztünk. A Kertészeti Egyetem első javaslata az volt, hogy másfél év után irányítja a hallgatókat a fokozatokra. A Budapesti Műszaki Egyetem Vegyészmérnöki Karán két év után, a Veszprémi Vegyipari

Egyetemen három év után irányították a hallgatókat. Jelenleg mind a három egyetemen teljes egymásra épülő rendszer szerint folyik az oktatás. Ezeket szíveskedjenek figyelembe venni, amikor arról a kérdésről van szó, hogy párhuzamos, elágazásos vagy egymásra épülő modellt vezessünk-e be.

A másik probléma a felvétel kérdése. Teljes mértékben egyetértek MÉSZÁROS ZOLTÁNnal és NAGY BÁLINTtal, viszont a felszólalók remélem, velem értenek egyet abban, hogy ez rendkívül bonyolult kérdés, mert nagyon nehéz nemcsak a képzettséget, hanem a tehetséget is vizsgálni. Előadásomban említettem, hogy készül a felvételi reformja. Reméljük, hogy ennek során nemcsak a kémiának mint felvételi tárgynak a kérdése fog megoldódni, hanem részben tesztekkel, részben más módszerekkel sikerül a rátermettséget, sőt talán a kémia szeretetét is figyelembe venni a felvételi vizsgánál.

Csatlakozom azok véleményéhez, akik szerint az új speciális igényeket elsősorban a posztgraduális képzéssel célszerű kielégíteni. Az új igényeket ne úgy igyekezzünk megoldani, hogy további ágazatokat hozunk létre a graduális képzésben.

Végül megemlítem, hogy a terveket csak mint terveket lehet összemérni, de nem lehet ennek alapján pontosan összehasonlítani az oktatás tartalmát. Nem lehet azért, mert egyrészt még a tantárgycímek sem fedik az egyes karokon ugyanazt a tartalmat, másrészt a tananyag szerencsére állandóan fejlődik, és ez a fejlődés, amelyet valamennyien szívügyünknek tekintünk, és amelynek állandó korszerűsítő folyamatnak kell lennie, csak részben tükröződik a tantárgyak címeiben.

Végezetül szeretném megköszönni az értékes megjegyzéseket, javaslatokat és ismételten megköszönöm figyelmüket.

SZABÓ ZOLTÁN
az MTA rendes tagja

Sürgönystílusban szeretnék válaszolni az észrevételekre.

MÉSZÁROS igazgató azt mondotta, hogy alacsonyabb fokon nem lehet, vagy nem szabad, vagy nem jó képezni. Meg kell mondanom, hogy ez nem egészen azonos. Akit ezt a kívánalmat először megfogalmazta — meg kellett volna neveznem a MONTEDISON egyik menedzserét — azt mondta, hogy nem sok vegyészre van szükségünk, hanem kevésre, de azok nagyon magasan legyenek képezve, mert hiszen a vegyészi feladatok egy részét az automatizált gyárakban már technikusok fogják ellátni, de a tervezéshez, a döntésekhez a mai átlagosan képzett vegyész nem fog megfelelni.

A másik dolog az egyetemi felvételek kérdése. Én nagyon szeretem magam erről úgy kifejezni — mert így tudom a legrövidebben —, hogy felvételi rendszerünk, ha nagyon lelkiismeretesen végzi a bizottság a munkáját, akkor is

csak a legjobb lehet, de jó sohasem. Ezt klasszikus tömörséggel támasztotta alá Nagy főosztályvezető, aki azt mondotta, hogy mi nem tehetséget veszünk fel, hanem képzettséget. Ma valóban az a helyzet, hogy ha a leglelkiismeretesebb felvételeztető folytatja is le a felvételi vizsgát, akkor is csak a képzettséget tudjuk megállapítani.

Hallottunk itt túlképzésről. Amikor ennek az ülésnek a profilját kialakítottuk, akkor egy nagyon felelős személyiség: a Borsodi Vegyikombinát vezérigazgatója mondotta, hogy van túlképzés. Ha egy ilyen tekintély mondja, akkor ezt figyelembe kell venni.

Anyagi megbecsülés. Azt hiszem, nagyon sok professzor kollégám nem kapja meg azt, amit a feleségem unokaöccse, aki 15 évvel ezelőtt végezte el a Műszaki Egyetemen a vegyészmérnöki szakot és most az egyik gyógyszergyárban 8000 forint alapfizetést kap, azután jön még a többi. Hol itt az anyagi megbecsülés?

Nagyon sok szó esett a kétfokozatos képzésről. Külföldön már nagyon sok helyen megvan, sőt van MA, BSc és DSc fokozat, tehát háromfokozatú képzés van. Ezért mondtam előadásomban, hogy ha van kifogás, akkor utána kell nézni, hogy hol van a hiba, csak ne öntsük ki a gyereket is a fürdővízzel együtt.

Örömmel hallottam Zádor Györgynek azt a megjegyzését, hogy képzésünk jó. Egyetértek ezzel és csatlakozom Pungor kollégámnak azon megjegyzéséhez is, hogy nem kell szégyenkeznünk a Magyarországon kiképzett vegyészek, illetve vegyészmérnökök miatt. Viszont nagyon gyenge emberek is kapnak diplomát. Ezek az emberek esetleg nagyon hosszú időre elfoglalnak egy munkahelyet, egy munkakört.

Felmerült az, hogy az üzemmérnökök nem kapják meg — bár meg lehetne és meg kellene kapniuk — a megfelelő megbecsülést. Ez csak egy rossz tálalás következménye, de ebből nem következik, hogy itt akár a rendszer rossz, akár pedig jóvátehetetlen hibák vannak.

Az az egy biztos, hogy öt év után mi még sehova sem tudunk egy kész embert odaállítani, ezután kell jönnie a továbbképzésnek. Nekünk konvertibilis vegyészeket kell képeznünk ez alatt az öt év alatt bizonyos színezésekkel — ezen azt értem, hogy inkább tudományos, vagy gyakorlati, vagy környezetvédelmi stb. irányban —, tehát nem a mostani szakoknak megfelelő szakosodásban.

Nagyon jó volt az a megjegyzés — én is így látom —, hogy még mindig nagyon hiányzik kémiaoktatásunkban a gazdasági szemlélet.

A Műszaki Egyetem vegyészmérnöki kara kényelmes, jó helyzetben van, ha nem kell neki megbízások után futkosnia. Én nem tudtam itt taxatíve felsorolni, hogy kik azok, akiknek nem kell futkosniok, de egyebet sem hallok az utóbbi 3—4 esztendőben, mint hogy a kutatóintézeteknek — a Központi Kémiai Kutatóintézetnek is — mennyi megbízásos munkát kell vállalniok,

hogy egyáltalában fenn tudják tartani az üzemüket. (Közbeszólás: Szívesen csináljuk!)

Szeretnék még megjegyezni valamit. Azt hiszem, én letettem a garast a kiscsoportos oktatás mellett. Sajnos hallottam már egypár megjegyzést arra vonatkozóan, hogy a hallgatók panaszkodnak, hogy nem vált be mindenütt ez a kiscsoportos oktatás, vagy legalábbis nem úgy vált be, ahogy be kellett volna válnia. Ezt az mutatja, hogy abban a bizonyos kiscsoportos oktatásban sem tanulták meg azt, amit meg kellett volna tanulniok.

Én sem szégyellem az általam kibocsátott vegyészeket. Akinek én jó jegyet adtam, akit munkatársamul vettem — több mint 2 évtizedes tapasztalatból mondom —, az ha kijutott személyes vagy nem személyes összeköttetés révén külföldre, ott is szívesen látott munkatárs lett. Egy félsornyi megjegyzés volt az előadásomban arra vonatkozóan, hogy a vegyészi és a vegyészmérnöki profil, illetve képzés a második világháború után elég szélesen szétvált, aztán kezdett közeledni egymáshoz, és végül ott tartunk, hogy kétségtelenül szükségesnek látjuk, hogy ez a megkülönböztetés meg is maradjon. Az 50-es években kezdett csökkenni a különbség a kétféle képzés között. Amikor a tudományegyetemeken nemkívánatos mértékben technologizálni akarták a kémia oktatását, és akkor láttuk ennek a következményeit.

Nagyon tetszett az, amit többen szóvá tettek a posztgraduális képzésről és továbbképzésről. Ezt intézményesen kell megoldani. Amikor én összekötő voltam továbbképzés terén a Műegyetem és az ELTE között, úgy láttam, hogy ez az a rendszer, melybe mi kémikusok azonnal be tudunk kapcsolódni, — felesleges itt bármilyen más parallel szervezetet alkotni, hogy annak megint legyen x, y és z kulcsszámú alkalmazottja.

VAJDA kollégám hozzátette azt, hogy kevés a mesterségbeli képzés, a módszertan a fontos. Hogy lehetne elég jó a módszertan is, amikor a laboratóriumi gyakorlatnak monoton szűkül az óraszáma?

VARSÁNYI kollégám szóvá tette az integrációt. Az a baj, hogy azt a 7 pontban megfogalmazott kritériumot, amely az integrációt lehetővé teszi, nem vették figyelembe, amikor az integrált oktatásokat elindították, úgyhogy a legfőbb apostoloknak kellett ezen a téren a visszavonulást megfújniok. Azt hiszem, most már tanulhattunk egy kicsit saját baklövésünkből, és — megfelelő feltételek teljesülése esetén — újra el lehet kezdeni az integrációt.

Azt hittem, hogy ebben az előadásban, itt, az Akadémián nem kell kitérnem az egyetemi vizsgákra, a vizsgáztatás módjára. Nekem mindig az a véleményem, hogy az oktatásnak a vizsgáztatás éppen olyan része, mint az előadás vagy a laboratóriumi gyakorlat. Azt hittem, hogy amit a vizsgákról mondtam, az túl sok. Kiderült, hogy túl kevés volt.

ZÁDOR ERIKA a középiskolákról szólt. Valóban csak akkor lesz az egyetemen jó hallgatóság, ha a középiskolában jó lesz a tanítás. Számomra ez nem probléma. Például a tanszéken egy ragyogóan szép módszertani laboratóriumot

rendeztünk be. Azt lehet mondani, hogy ez ékköve az egész tanszéknek. Nagyon fontosnak tartom, hogy a tanárképzésnek ez az integráns része jól működjék.

Hadd mondjak valamit a könyvről! Az egyetemen jó, hogy van; vagy legalábbis nem rossz. Azt viszont nem tudom, hogy miért kell a középiskolában jóformán minden esztendőben más tankönyvet íratni. Ez a helyzet. Még meg sem jelent egy könyv, és máris olyan hibákat fedeznek fel benne, hogy nem tudják: azonnal a zúzdába küldjék-e, vagy mit csináljanak vele.

Említették Hollandiát. Egy kis országnak nem érdemes minden tárgyból tankönyvet kiadnia. Oda sem szabad azonban eljutnunk, ahova a hollandusok jutottak el 20 évvel ezelőtt, amikor felszólítás jött a kultuszminisztériumtól, hogy azért mégsem kell Hollandiában minden kémiai tárgyat angolul előadni, beszéljenek hollandul is.

Beck Mihály
osztályelnök

Rendkívül nagy erőfeszítésembe kerül, hogy az elnöki zárszó jogával vissza nem élve, ezekhez a rendkívül érdekes, értékes, vitára ingerlő megjegyzésekhez magam is ne fűzzek megjegyzést, de ellenállok ennek a kísértésnek.

Így most már csak az a tisztem, hogy megköszönjem az előadóknak és a hozzászólóknak az előadásokat és a hozzászólásokat, melyek rendkívüli mértékben segítették az Osztálynak abban, hogy olyan javaslatot tegyen az Oktatási Minisztériumnak, amely remélhetőleg előmozdítja a hazai felsőfokú vegyész- és vegyészmérnök-képzés ügyét.

FÜGGELÉK

A Kémiai Tudományok Osztálya 1980. június 18-i ülésén vitatta meg a hazai felsőfokú kémiaoktatás helyzetét, és a következő javaslatokat terjesztette a Művelődési Minisztérium elé:

1. Növelni kell az általános iskolai és még inkább a középfokú oktatás során az iskolából kikerültek természettudományos és humán műveltségét. A kémiaoktatás célja kettős: egyrészt megbízható kémiai alapismereteket nyújtani, melyre támaszkodva el lehet igazodni a mindennapi élet kémiai jelenségei között, másrészt felkelteni az érdeklődést a kémia iránt és megalapozni az e tudománnyal elmélyülten foglalkozni kívánók tudását. Ennek előfeltétele, hogy a kémiát megfelelően képzett tanárok oktassák célszerűen kialakított tantárgyak alapján, melyek lehetővé teszik az élményszerű oktatást laboratóriumi munkák segítségével is. Meg kell vizsgálni, hogy mely főiskolákon és egyetemeken, illetve szakokon szükséges a kémia felvételi tárgyként való bevezetése.

2. Megvizsgálandó, hogy a vegyészmérnök- és vegyész-képzés sajátos arculatának megfelelő képzésben melyek azok az újabban felmerülő, a kémia fejlődéséből és az új társadalmi igények folytán jelentkező feladatok, melyeket a két típusú képzés valamelyikével kell megoldani.

3. Mind a képzés színvonala, mind a hallgatóság nyelvismerete szempontjából kívánatos lenne, ha a felsőbb évfolyamok során az oktatás szerves részévé válna az idegen nyelvű szakirodalom.

A hallgatóság magasabb szintű nyelvismerete jó szolgálatot tehetne a magyar népgazdaság kielégítésének.

Ezzel összefüggésben felülvizsgálandónak tartjuk a jelenlegi jegyzetpolitikát és javasoljuk, hogy első sorban igényes hazai és külföldi szakkönyveket használjanak a képzésben.

4. Az azonos típusú egyetemeken a jelenleginél sokkal nagyobb mértékben kell biztosítani a szigorlati és különösképpen az államvizsga-követelmények megegyezését.

5. Feltétlenül szükségesnek tartja az Osztály, hogy a különböző szintekhez (üzemmérnöki, vegyészmérnöki, illetve vegyészi) a megfelelő poszt-

graduális képzést szervezzék meg. Szükséges — egyebek között a mai gazdasági helyzet megkövetelte nagyobb kutatási igényű gyártás feltételeinek biztosítására — az egyetemi doktorátussal egybekötött továbbképzési forma bővítése.

6. Az Osztály aggodalommal érzékeli, hogy egyes felsőoktatási intézményekben a vezető oktatók kinevezésénél nem kap kellő súlyt a kinevezendő személy szakmai felkészültsége és nemzetközi tudományos súlya. Ugyanakkor vegyészmérnök- és vegyész-képzéssel foglalkozó intézményeinkben jelentős számban vannak kimagasló szintű szakemberek. Ezért kívánatos lenne az egyetemi tanári, esetleg docensi kinevezések esetében az elbírálási — ezen belül a pályázati — rendszert megváltoztatni és a bírálók közé más egyetemek kiváló professzorait, esetleg tekintélyes külföldi egyetemi tanárait bevonni.

7. Jelenleg nagy a különbség a különböző egyetemek között a kvalifikált oktatók hányada tekintetében. Ezt a különbséget a minisztériumok és az egyetemek tervszerű, következetes káderpolitikájával lehet és kell csökkenteni. Figyelembe véve a két műszaki egyetemen és a három tudományegyetemen működő magas kvalifikációjú oktatók, továbbá egyes kutatási intézményekben dolgozó és oktatási tapasztalattal is bíró kutatók nagy számát, erre kell alapozni a más felsőoktatási intézmények vezető oktatóinak kiválasztását.

8. Szervezetileg is elő kell mozdítani az egy városban levő mind a tudományegyetemek, mind a műszaki egyetemek és más felsőoktatási intézmények (elsősorban az orvostudományi) közötti együttműködést.

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981 p. 117—163

A KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYA FELOLVASÓ ÜLÉSE SCHAY GÉZA AKADÉMIKUS 80. SZÜLETÉSNAPJA ALKALMÁBÓL

SCHAY GÉZA ÉS A BME FIZIKAI KÉMIAI TANSZÉKE

VARSÁNYI GYÖRGY
a kémiai tudományok doktora
(BME, Fizikai Kémiai Tanszék)

SCHAY GÉZÁT 1948-ban a műegyetem vegyészmérnöki karán a fizikai kémia előadására kérték fel. 1949-ben létrehozták az Ipari Elméleti Kémia Tanszéket, melynek vezetésével megbízták. 1951-ben a Kémiai Fizika Tanszékkel Fizikai Kémia néven egyesített tanszék vezetője lett, és ezt a feladatát 1965-ig látta el, amikor is a Központi Kémiai Kutatóintézet tudományos jelentőségét kiemelve, az intézet további erősítése céljából, az akadémia Schay Géza teljes munkaerejét és tudományos tevékenységét az intézet igazgatójaként óhajtotta igénybe venni.

A tanszék, illetve elődje vezetőjeként tehát 16 éven keresztül irányított heterogén kinetikai, adszorpciós, gázkromatográfiai és elméleti termodinamikai kutatásokat.

A tanszék személyi állományának felfutási időszakában, SCHAY GÉZA régebbi reakciókinetikai kutatásai folytatásaképpen, a tanszék kutatási programjában is lényeges szerepet kaptak a reakciókinetikai vizsgálatok. Elsősorban a heterogén katalízis mind elméletileg, mind gyakorlatilag fontos jelenségeire irányult a kutatás. Ezt azonban, a korszerű szinten folytatandó vizsgálatok érdekében meg kellett előznie az adszorpciós jelenségek beható tanulmányozásának. Ez hozta magával számos elméleti kérdés tisztázásának lehetőségét. Míg a Langmuir-adszorpciós izoterma szokásos levezetése az adszorbens felületén lokalizált adszorpciós centrumok föltételezéséből indult ki, SCHAY GÉZA a statisztikus mechanika alkalmazásával bebizonyította, hogy teljesen hasonló alakú összefüggés levezetése mozgékony adszorbeált fázis föltevése mellett is lehetséges. Ennek a munkának egy későbbi folyománya az elegyadszorpció statisztikus elméletének vizsgálata, amely egyedül a komponensmolekulák felületigényének figyelembevételével az egyedi izotermák ismeretében lehetővé teszi az elegy-izotermák kiszámítását. Munkatársaival az adszorpciós hő többféle kiszámításának, valamint áramló rendszerben az adszorpció mérésének módszerét dolgozta ki. Tevékenysége főleg három tématerület művelésére hatott serkentőleg:

a) *Reakciókinetika.* Az adszorpció folyamatos mérőmódszerét kezdetben fizikai adszorpció mérésére használták, később megfelelő modelleket találtak a kemiszorpció tanulmányozására is. Az első idők e fő kutatási iránya mellett a reakciókinetikai csoport tagjai sok munkát fejtettek ki más területeken is. Vizsgálták uranil ion megkötődését ioncserélő gyantákon, radioaktív izotópos nyomjelzéses módszert alkalmaztak a kromatográfiás vizsgálatokhoz, és abban az időben, amikor Magyarországon kromatográfiás berendezéseket nem lehetett kapni, saját problémáik megoldására kromatográfokat építettek. Megpróbálkoztak katalizátorok alkalmazásával kromatográfiás detektorokban is.

A tulajdonképpeni és nagyobbméretű reakciókinetikai témák 1966 körül indultak, de ezeknek kidolgozásában a korábbi idők tapasztalatait és eredményeit maximálisan fel tudták használni. Ilyen témák: Metán levegős katalitikus bontása hordozós nikkelkatalizátoron, mint a város gáz gyártásának fontos reakciója. Oxidáló katalizátorok előállítása: Fémhordozós palládiumkatalizátort állítottak elő, majd a zománchuzalgyártás technológiájában az oldószerelégetés új rendszerét vezették be és alkalmazását oldották meg. Az eljárás azon a felismerésen alapszik, hogy a gázfilm-diffúziós tartományban lejátszódó gyors reakció folyamán sok esetben nincs szükség töltetes katalizátorágyra, hanem elég csőreaktor falára rögzíteni a katalizátort. Eljárást dolgoztak ki kipufogógázok éghető komponenseinek utólagos elégetésére. 1968-ban szénhidrogének vízgőzös bontásával kezdtek foglalkozni. Bebizonyították, hogy alumínium-oxidhordozós nikkelkatalizátoron a szénhidrogének a vízgőzzel először szén-dioxiddá és hidrogénné alakulnak, majd ezek a komponensek metánná reagálnak. Mellékreakcióban szén-monoxid keletkezik. Ezek alapján sikerült szelektív hidrogéntermelő katalizátort, és az addig használtnál nagyobb aktivitású stabilis, metánt termelő katalizátort előállítani. Hordozós fémkatalizátorok aktív felületét határozták meg gáztitrálásos módszerrel. Megállapították, hogy a felület meghatározására a hidrogénes readukciót követő szén-monoxid adszorpció a legalkalmasabb. Benzol oxidációját tanulmányozták vanádium-molibdén-oxid tartalmú katalizátorokon. Matematikai programot készítettek a reaktorcsőben végbemenő katalitikus folyamat számítására. Kromatográfiás mérésekkel adszorpciósebességet és felületi diffúziót tanulmányoztak.

b) *Folyadékadszorpció.* A folyadékadszorpciós kutatások 1954-ben kezdődtek meg. Egyrészt nedvesítési hőket mértek különböző adszorbenseken, benzol, víz és etanol folyadékokkal. A mikrokalorimetriás mérőrendszer kialakítása mellett a vizsgálatok eredményei tájékoztattak a szennyezők hatásáról, és a módszert relatív felületmeghatározásra is fel lehetett használni. NAGY LAJOS 1955-ben kezdte el SCHAY GÉZA irányításával az elegyadszorpciós vizsgálatokat. A szabad folyadékfelszíni adszorpció kutatásainak legismertebb eredményei: 1. Kimutatták, hogy a szabadfelszíni adszorpció is ugyanazon öt alap-

izotermatípusra vezethető vissza, mint a szilárd-folyadék fázisú elegyadszorpció. 2. Sikerrel alkalmazták a grafikus felületmeghatározási módszert a szabadfelszíni izotermákra is. 3. Bebizonyították, hogy a folyadékelegyadszorpciók közös tualjdonsága a kiszorításos jelleg, és *ez* a legjelentősebb különbség a gáz- és folyadékelegyadszorpció között. A szilárd-folyadék határfelületi elegyadszorpció legismertebb eredményei: 1. Különböző adszorbenstípusokhoz, felületmeghatározás céljából, sikerült a legmegfelelőbb elegypárt megadni. 2. Két új felületmeghatározási módszert dolgoztak ki (a lineáris egyéni izoterma és az általánosított Langmuir—Everett-módszer). 3. Az egyensúly beállásának kinetikai vizsgálata póruseloszlás meghatározására adott lehetőséget. 4. Elegyadszorpció-mérésekkel az adszorbens felületét minőségileg is sikerült jellemezni.

A folyadékadszorpciós vizsgálatok köre 1964-től ionadszorpciós vizsgálatokkal bővült. Germániumon és germánium-oxidon alkálifém, jodid, cink és lantán ionok adszorpcióját vizsgálták, és ezzel hozzájárultak a félvezetőgyártás egyik alapproblémájának, a felületi szerkezet megismerésének megoldásához.

c) *Termodinamika.* Az irreverzibilis termodinamikai kutatások Gyarmati István aspirantúrájával kezdődtek 1956-ban, aki disszertációjában a termosztatika és a modern termodinamika egységes axiomatikus rendszerét dolgozta ki. Ennek az időszaknak további eredménye az Onsager-féle reciprocitási relációk levezetése fenomenologikus módszerekkel és interpretálása makroszkopikus elvek segítségével. 1960 után az elmélet alapjainak további kidolgozása mellett az alkalmazások is a kutatási programba kerültek és számos eredményt produkáltak. Az energiadisszipáció Onsager-féle elvét új reprezentációban fogalmazták meg, mely az eredetinél termékenyebb integrálelv alapját képezte. Az alkalmazások közül a diffúziós és termodiffúziós folyamatok, továbbá termogalvánelemek elméleti és kísérleti vizsgálata említhető, végül elektrokinetikus jelenségek értelmezése. Oláh Károly a reakciókinetika egységes termodinamikai elméletét fejlesztette tovább. Újabban a „termokinetika" elméletét fejtette ki, melyben a csereáramsűrűségek képviselik az alapegyenleteket, az intenzitásmennyiségek függvényében. A fenomenológiai együtthatókat az intenzitásparaméterek szerinti deriváltak szolgáltatják. Az elmélet az egyensúlytól távoli jelenségek leírására alkalmas.

A felsorolt eredmények nem a Fizikai Kémia Tanszék kutatómunkájának ismertetését jelentik, hiszen nem kerültek említésre fontos és széleskörű kutatások. Azokat igyekeztem kiemelni, melyek Schay Géza kezdeményezésére és többé-kevésbé intenzív részvételével indultak, és folytatódtak akkor is, miután működését a tanszékről a kutatóintézetbe helyezte át.

Oktatóként hatalmas szerepe volt a fizikai kémia modernizálásában és benne a mérnöki irány kidomborításában. Bár a tárgy anyaga az utolsó tizenöt évben is lényeges didaktikai változásokon, valamint újabb és gyakor-

lati irányú fejezetek beiktatásán ment át, az igényes tárgyalásmód, a természettudományos szemlélet kiemelése SCHAY GÉZA oktatási tevékenységének irányvonalát követi.

SCHAY GÉZA sohasem erőszakolta rá munkatársaira saját tudományos érdeklődésének tárgyát. Azzal nevelt, hogy szigorú kritikai szemléletet ültetett át a környezetében dolgozókba. Kiváló lényegmegragadó érzékénél fogva olyan témákba is tevékenyen tudott bekapcsolódni, melyek addigi működésétől távol álltak, és fel tudta hívni azoknak a munkatársaknak is a figyelmét az elméletben vagy a kísérleti módszerben megbújó fogyatékosságokra, akik az illető tématerületen egyébként otthonosan mozogtak. Jelképesnek érzem, ahogyan az előadások szünetében a folyosón fel-alá sétálgatva, lépteit a társaságában levő fiatal tanársegéd lépteihez igazította. Szerénységét tükrözi az a sokszor hallott, félig tréfás mondása egy váratlanul felmerült és előtte fölvetett ellentmondásos probléma hallatán, hogy: „Nehéz dolog az a tudomány!" KÁRMÁN TÓDOR egy magánbeszélgetés alkalmával megjegyezte, hogy utóbbi időkben kémiával kezd foglalkozni, mert — úgymond — „a kémia túl nehéz a kémikusoknak". SCHAY GÉZA olyan kémikus ma is, akinek kedvenc mondása ellenére sem nehéz a kémia, és ezt az egészséges önbizalmat igyekezett egész eddigi működése alatt környezetébe is átültetni.

SCHAY GÉZA ÉS A KÖZPONTI KÉMIAI KUTATÓ INTÉZET

HOLLÓ JÁNOS
az MTA rendes tagja
(MTA Központi Kémiai Kutató Intézet)

A Magyar Népköztársaság Minisztertanácsa 1952-ben hozott egyik határozata leszögezte: „Hazánkban nincs olyan kémiai kutatóintézet, mely a nagyobb felszerelést igénylő kutatások elvégzését is lehetővé tenné. Halaszthatatlanul szükséges tehát, népgazdaságunk fejlesztése érdekében, az MTA elnöke által tett javaslatnak megfelelően, a Központi Kémiai Kutató Intézet létesítése, melynek először fizikai-kémiai és szerveskémiai osztálya kerül felállításra."

Az Intézet léterhozásában kiemelkedő szerepe volt SCHAY GÉZA akadémikusnak. Őt bízták meg az igazgatói teendők ellátásával is. Az intézetalapító igazgató nagy tudása, tekintélye, irányítókészsége és embersége garanciát nyújtott arra, hogy a tervezett intézet kiemelkedő nívójú tudományos műhely legyen.

Az MTA KKKI megalapításának célja az volt, hogy a kémia tudományának hazai viszonylatában egy olyan központi bázisát teremtse meg, amely alapkutatási tevékenységével mind új természettudományos megállapításokhoz járul hozzá, mind pedig — mivel a kémia alkalmazott tudomány is — a népgazdaság fejlődéséhez is, továbbá elősegíti a kémiai kultúra hazai terjesztését.

Az Intézet munkája ténylegesen 1954-ben indult meg a reakciókinetika és katalízis, a makromolekuláris kémia, a szerves reakciók mechanizmusának felderítése és az anyagszerkezet-kutatás területén. A kutatások legfőbb célja kezdettől fogva: a kémiai szerkezet és a reakcióképessége összefüggésének vizsgálata volt.

A SCHAY akadémikus által az intézet alapításakor közvetlenül irányított kutatások: a gázkromatográfiás folyamatok elméletének kifejlesztése nemzetközi elismerést váltottak ki. SCHAY GÉZA akkori munkája is, úgyis mint tudományos vezető és mint tudós egyaránt példát mutatott az intézet minden kutatójának módszerességből, szakmaszeretetből. 1960-ban megjelent monográfiája foglalta össze addigi tevékenységét. Ezek után, felismerve a probléma alapkutatási, valamint ipari lehetőségeit és jelentőségét, indította el az intézetben a szénhidrogénkémiában jelentős kontaktkatalízis kutatáso-

kat. Így vetette meg az alapjait az intézet mai tematikájában is fontos kutatási irányt jelentő szénhidrogénkémiai, reakciókinetikai, adszorpciós és katalízis kutatásoknak.

SCHAY GÉZA egész munkásságával iskolateremtő egyéniség. Az Intézet jelenlegi tudományos vezetői és kutatói közül sokan élvezték azt a ritka előnyt, amit mellőle, a széleslátókörű, élesszemű kritikus mellől való indulás adhat. Mint első igazgatónak, rendkívül nehéz volt a dolga, hiszen az intézet kutatói akkor még részben a Műanyagipari Kutató Intézetben, részben egyetemi tanszékeken szétszórva dolgoztak és olyan új kutatási területeken kellett elindítani a munkát, amelynek egyáltalán nem, vagy alig voltak hagyományai Magyarországon. Ilyenek a radiokémiai és radioanalitikai kutatások, a szénhidrogének izomerizációs és krakkreakcióinak vizsgálata, a folyadékfázisú kontakt katalitikus reakciók tanulmányozása, a polimerizációkinetikai kutatások és a spektroszkópiai, valamint diffrakciós szerkezetkutatások. A nehézségek ellenére olyan alkotói közösséget sikerült létrehoznia, amelynek hangulatát ma az akkori alapító tagok gyakran nagy nosztalgiával emlegetik. Hála SCHAY GÉZA körültekintő vezetésének, rövid időn belül sikerült úrrá lenni azokon a nehézségeken is, melyeket az Intézet életében az 1956-os események jelentettek, mikor is a vezető kutatók közül többen külföldre távoztak, s emiatt egyes témákban bizonyos teljesen újra kellett szervezni a munkát.

SCHAY GÉZA 1967-ig irányította az intézetet. Nyugdíjba vonulása nem jelentette sem azt, hogy elszakadt volna szeretett intézetétől, sem pedig azt, hogy abbahagyta volna munkáját. Minden nap bejár az Intézetbe, rendszeresen részt vesz mind a négy tudományos testületnek, mind pedig az Igazgató Tanácsnak ülésein. Hozzászólásaiban széleslátókörű tudásával, lényeglátó logikájával segíti a helyes tudományos következtetések levonását, s valami csodálatos érzékkel veszi észre a kísérleti és elméleti munka apróbb-nagyobb következetlenségeit, a hipotézisben levő rejtett hibákat. Mindezt olyan atyai derűvel, egyszerű közvetlenséggel teszi, ami a tanácskozások formális feszélyezettségét feloldja és alkotó vitára alkalmassá teszi.

Munkabírása szinte hihetetlen. Tevékenysége nélkülözhetetlen számunkra, hiszen ő lektorálja az Intézet kutatói által publikálni szándékozott tudományos dolgozatokat. Személye igaz garancia arra — és megnyugvás számunkra —, hogy a közleményeink eddigi szakmai színvonalát tovább is tartani tudjuk.

SCHAY GÉZA azon kevesek közé tartozik, akinek kizárólag csak barátai, tisztelői vannak. Úgyis mint alkotó, úgyis mint szókimondó ember egyaránt köztiszteletben áll, példamutató egyénisége emiatt igaz köszeretnek örvend.

Kívánjuk, hogy a maihoz hasonló alkotóerőben, egészségben, bölcs derűvel ünnepelhessük őt még nagyon sokszor.

GUMIABRONCSOK MAGAS HŐMÉRSÉKLET MELLETTI VULKANIZÁLÁSÁNAK KÉRDÉSEI

SZŐR PÉTER
a kémiai tudományok doktora
(Taurus Gumiipari Vállalat)

SCHAY GÉZA akadémikus a gumiiparral még 1942-ben került kapcsolatba, mikor KLEIN PÁL az akkori Ruggyanta-árugyár vezérigazgatója abból a meggondolásból, hogy az addig tisztán tapasztalatokon alapuló gumigyártásnak megteremtse az elméleti alapjait is, a fiziko-mechanikai és textil laboratórium vezetőjévé hívta meg. Fő tevékenysége ebben az időben a vizsgálati módszerek, gumiipari textíliák, hevederek, ékszíjak, gumiabroncsoknál felhasznált textíliák konstrukciójának fejlesztése volt.

A felszabadulás után 1949-ben megbízást kapott a gumiipar kutatóbázisának megszervezésére. 1949. május 1-én alakult meg vezetése alatt a Gumiipari Központi Laboratórium. Ez volt az a mag, melyből később kialakult a Gumiipari Kutató Intézet.

A feladatok fő irányát, mivel ipari kutatóintézet volt, főleg az alkalmazott kutatás tette ki. A számos kezdeti feladatok közül ki kell emelnem a textíliák impregnálási módszereivel, a textil-gumi rendszerek fáradékonyságával foglalkozó témákat. Az alkalmazott kutatás mellett elméleti kutatás is beindult, ennek fő iránya a kaucsuk és gumi reológiai tulajdonságainak vizsgálatára terjedt ki. Mivel a gumiipar termelésének kb. 50%-át a gumiabroncs teszi ki, a kutatások főleg a gumiabroncs minőségének javítása érdekében történtek. Az intézet első nagyobb jelentőségű eredménye volt olyan impregnálási eljárás kidolgozása, mely lehetővé tette az eddigi pamutkord helyett a végtelen szálból készült és jobb minőségű műselyem kordok használatát. Ez az eljárás szabadalmaztatva is lett.

Az államosítás után, az 1950-es évek elején, amikor a gyár az anyavállalattól elszakadt, magára maradt, lényegében majdnem mindent elölről kellett kezdeni. A gumiabroncs minősége ekkor a mélypontján volt. SCHAY GÉZA akadémikus által indított irányvonal az ipart a mélypontból kihúzta. Ugyanezen az irányvonalon haladt tovább az Intézet akkor is, mikor 1955-ben sokrétű elfoglaltsága miatt az Intézet vezetését nem tudta vállalni. Őszinte hálánkat fejezzük ki azért az úttörő munkáért, amit a Magyar Gumiipar kutatásának elindítása terén végzett és így a mai kutatógárda neveléséhez is hozzájárult.

Későbbiekben a munkák részben a természetes kaucsuknak műkaucsukkal való kiváltására irányultak a minőség megtartása mellett, részben pedig olyan témák indultak be, melyek a termelés intenzifikálásának a növelését szolgálták. Ennek egyik területe volt a vulkanizálás intenzifikálásának, a vulkanizáló gépek jobb kihasználásának a kérdése. Ez főleg a vulkanizálási idő csökkentésével, azaz a sebességének a növelésével érhető el. A vulkanizálás, azaz a térhálósítás, melynek mértéke adja meg a vulkanizáltság fokát, lényegében a kaucsuk és a kén közt lejátszódó reakció. Ennek folyamata még a mai napig sem ismert teljes mértékben. A reakció sebesség két fő tényezőtől függ, a hőmérséklettől és a jelenlevő katalizátoroktól, amit a gumiiparban gyorsítóknak neveznek.

A gumiabroncs egy vastagfalú termék, mely különböző összetételű és így különböző vulkanizálási sebességi állandóval rendelkező rétegekből épül fel. Mivel vastagfalú termék, a termék belsejében a hőmérséklet nem azonos a vulkanizáló forma hőmérsékletével, hanem az a helynek és az időnek lesz függvénye. Ehhez járul még az, hogy rétegenként a sebességi állandó is változik. A termék vulkanizálási ciklus-idejét pedig úgy kell meghatározni, hogy a termék minden egyes pontja elérje a megfelelő vulkanizáltsági fokot. Ilyen analízishez szükséges ismernünk a hőmérséklet idő és hely szerinti függését, valamint a felhasznált keverékek vulkanizálásának, azaz térhálósodásának idő és hőmérséklet függését. Ezen két összefüggés ismeretében számítható, hogy a termék egyes pontjai milyen vulkanizáltsági fokot érnek el a technológiai körülményektől, azaz a vulkanizáló gépnél alkalmazott hőmérséklet és idő ciklusoktól függően. Ilyen analízissel lehet végül is a legoptimálisabb körülményeket beállítani.

Az analízis elvégzéséhez két feladatot kellett megoldani:

1. adaptálni kellett a hőmérséklet vezetés Fourier-féle parciális differenciál egyenlet megoldását gumiabroncs esetére, amely alapján számítható a gumiabroncs köpeny falának tetszés szerinti belső pontjában a hőmérséklet időbeli változása a vulkanizáló készülékben való felmelegítés, hőfoktartás és a készülékből való kivételt követő lehűlés munkaszakaszában. Az egyenletet az egyes munkaszakaszokra vonatkozó perem feltételek mellett megoldottuk, a számítási eredményeket beépített termoelemekkel végzett mérések segítségével ellenőriztük.

2. A feladat másik részét a keverékek reakciókinetikai vizsgálata tette ki. Ezen vizsgálatoknál az alábbi szempontokat kellett figyelembe venni:

a) technológiai okokból a vulkanizálás időbeli lefutásának egy indukciós periódussal kell rendelkeznie,

b) mivel a térhálósodás folyamata mellett láncszakadás, azaz degradálódás is lejátszódik, mely a termék fiziko-mechanikai tulajdonságait rontja, ennek hatása elhanyagolható maradjon.

Mint már említettem, a kénes vulkanizálás kémiai reakció-mechaniz-

musa pontosan minden részletében még nem ismert. De azt tudjuk, hogy térhálósodási reakció mellett lejátszódik egy degradálódási és egy térháló átrendeződési reakció is, melyek igen bonyolult komplex láncreakciók. Mint ipari kutató intézet, ezen folyamatok egzakt reakciókinetikai vizsgálatával nem foglalkoztunk. SCHEELE és munkatársai [1], akik behatóan foglalkoztak a vulkanizálás reakciókinetikai vizsgálatával, kimutatták, hogy a különböző láncreakciók bruttó eredményük szerint úgy viselkednek, mintha egységes elsőrendű kémiai reakciót alkotnának. A felvetett probléma megoldása szempontjából csak a bruttó eredmény, azaz a térhálósodásnak és degradálódásnak a mértéke volt érdekes számunkra, maga a részfolyamat nem, ezért a térhálósodás, a degradálódás és térháló átrendeződési folyamatok leírására formálisan külön-külön elsőrendű reakciót tételeztünk fel.

Mivel az anyag nyírómodulusza egyenes arányos a térhálópontok számával, a térhálósodás mértéke az alábbi kifejezéssel oldható meg, azaz

$$\xi = \frac{G(t) - G_0}{G_\infty - G_0}$$

ahol G_0 az indukciós periódus végét jelző t_0, $G(t)$ a t időpontban mért nyírómodulusz értéke és G_∞ az a nyírómodulusz érték, melyet az anyag akkor ér el, ha közben nem játszódik le térháló átrendeződés és degradálódás. Ilyen esetben igen nagy pontossággal érvényes az alábbi empirikus összefüggés,

$$\xi(t) = 1 - e^{-k(t-t_0)}$$

ahol k a vulkanizálás sebességére jellemző állandó. Ez voltaképpen egy elsőrendű kémiai reakció differenciál egyenletének a megoldása arra a kezdeti feltételre, hogy

$$\xi = 0, \quad \text{ha} \quad t = t_0.$$

Ez az elv csak akkor használható a térhálósodás menetének vizsgálatára, ha mérni tudjuk a modulusz változást a vulkanizálás folyamata alatt. Még SCHAY GÉZA akadémikus vezetése alatt elkezdett reológiai vizsgálatok vezettek egy olyan műszer konstrukciójának alapgondolatához, mellyel a modulusz és egy a relaxációs tulajdonságra jellemző paraméter mérhető folyamatosan a vulkanizálás alatt. Ez a műszer VUREMO név alatt szabadalmaztatva is lett 1961-ben. A reakció-kinetikai vizsgálatokat ezzel a készülékkel végeztük.

A magasabb hőmérsékleten (160 °C felett) felvett $\xi - t$ reakció izotermák analízisével szét tudtuk választani

a) egy nyírómoduluszt növelő folyamatot, melynek reakciósebességi állandója k_1,

b) egy degradációra jellemző, nyírómoduluszt csökkentő folyamatot, melynek sebességi állandója k_2,

c) egy térháló átrendeződésre jellemző, a nyírómodulusz csökkenését mérsékelő folyamatot, melynek sebességi állandója k_3.

Ezen három folyamatnak a bruttó egyenlete az alábbi [2], [3]:

$$\xi(t) = \frac{k_3}{k_2 + k_3} - e^{-k_1(t-t_0)} + \left[\frac{k_2}{k_2 + k_3}\right] e^{-(k_2+k_3)\,(t-t_0)}$$

Ezen egyenlet felhasználásával vizsgáltuk a felhasznált keverékek esetében a k_1, k_2, k_3 sebességi állandók hőmérséklet függését. Ezek ismeretében ki tudjuk számítani, hogy egy adott vulkanizálási ciklus-idő mellett a használt keverékek esetében a termék minden egyes pontja milyen mértékben van kivulkanizálva és milyen mértékű degradálási folyamat lépett fel. Ilyen számítások alapján kereshető ki a vulkanizáló gép legoptimálisabb hőmérséklet-idő programja.

Minden egyes új termék esetében a felhasznált keverékek összetételének, azok vulkanizálási programjának a beállításánál a fenti elv szerint járunk el.

IRODALOM

1. W. Scheele és társai: Rubber Chem. and Techn. **34.** 1360 (1961); Kautschuk und Gummi **15.** 488 (1962); **16.** 655 (1963); **17.** 679 (1964); **18.** 138 (1965)
2. Bielstein, G.: Transaction I. R. I. **36.** 29 (1960)
3. Bodrossy F., Boros T., Lengyel M., Spacsek K.: Műanyag és Gumi **16.** 196 (1979)

A SZORPCIÓ EGYENSÚLYA ÉS KINETIKÁJA EGYEDI ADSZORBENS SZEMCSÉKEN ÉS SZEMCSEHALMAZOKON

FEJES PÁL
a kémiai tudományok doktora

VARGA KÁROLY
a kémiai tudományok kandidátusa
(József Attila Tudományegyetem, Alkalmazott Kémiai Tanszék, Szeged)

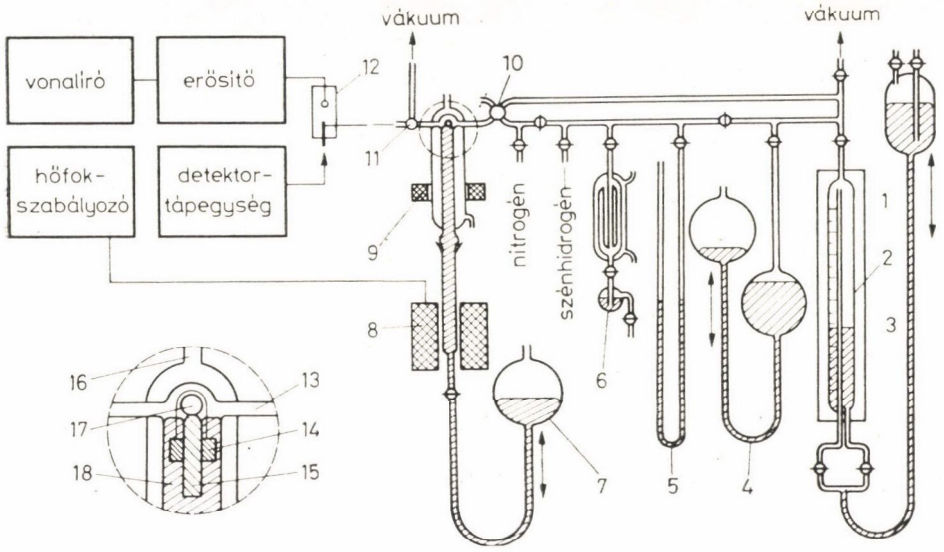
NÉMETH JENŐ
a kémiai tudományok doktora
(MTA Műszaki Kémiai Kutató Intézete, Veszprém)

Az adszorpciós elven működő elválasztási, dúsítási eljárások, különösen a zeolit alapú adszorbensek szélesebb körű elterjedése óta a petrolkémia területén is bevezetésre kerültek. (A Parex-eljárás például, melyet a VEB Leune Werke fejlesztett ki, paraffin szénhidrogének elkülönítésére szolgál kerozin párlatokból félfolytonos üzemű gőzadszorpció révén, a folytonos üzemű Molex-eljárással pedig a viszonylag nagy relatív molekulatömegű, szilárd paraffinokat nyernek ki n-pentános oldataikból.)

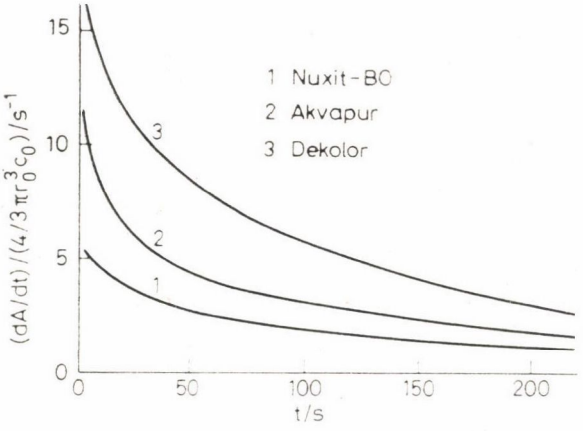
Az adszorpciós technológiák sem elvi, sem készülék-technikai vonatkozásban nem tudtak lépést tartani a növekvő igényekkel, és ez jelentős részben a szilárd fázis jelenlétéből, körülményes mozgathatóságából, más szóval lényegi nehézségekből fakad. Ami a tervezést és méretezést illeti, a legfontosabb információ az adszorpciós egyensúly ismerete és ennek függése a koncentrációtól és a hőmérséklettől. Ezek az adatok kereskedelmi forgalomba kerülő adszorbenseknél többnyire rendelkezésre állnak. Lényeges tervezési adat még a szorpció sebessége, melynek elméleti megközelítése mélyebb ismereteket követel meg a transzportjelenségekről és a szűkebb értelemben vett szorpció mechanizmusról.

A szorpció sebességének kísérleti vizsgálatára még szemcsés, porózus adszorbenseknél is számtalan módszert fejlesztettek ki. Vizsgálhatók egyedi szemcsék, ill. ezekből kialakított halmazok vagy rétegek; a szorpció előrehaladása követhető az adszorbátum tömegének mérésével, vagy a nyugvó, esetleg az áramló gázfázis valamilyen jellemző adatának meghatározásával, és még ezenkívül a közvetett módszerek igen széles skálája (mint pl. az elúciós vagy frontális kromatográfia, stb.) is rendelkezésre áll.

A porózus adszorbens szemcsében végbemenő transzport és szorpciós jelenségekről árulkodó kísérleti adatok feldolgozását és elméleti értelmezését a szorpció sebességének közvetlen mérése rendkívül megkönnyíti. Az 1. ábrán látható berendezés (melyet a KKKI-ben fejlesztettünk ki SCHAY GÉZA közreműködésével) a szorpció sebességének közvetlen vizsgálatára alkalmas [1]. Az adszorbens szemcse a mérés megkezdése előtt Hg felszíne alatt helyezkedik



1. ábra. A szorpciósebesség-mérő berendezés vázlata 1. nívóedény, 2. gázbüretta, 3. légtermosztát, 4. higanyos gázkeverő edények, 5. U-manométer, 6. McLeod manométer, 7. higanyos nívóedény, 8. kályha, 9. mágnes, 10. négyutas váltócsap, 11. háromutas csap, 12. lángionizációs detektor, 13. a gázáram útja a mérőcellában, 14. csavaranya, volframdrótból készült, ritka hálóval, 15. vascsavar, 16. temperáló köpeny, 17. adszorbens szemcse, 18. higany



2. ábra. Az izo-bután egyedi aktívszén-szemcséken mért differenciális szorpciósebesség görbéi. (A mérőberendezés az 1. ábrán látható, a kiértékelés adatai az I. táblázatban találhatók)

el; fölötte az adszorptívumot állandó (néhány %) koncentrációban tartalmazó gázelegy áramlik egy alkalmas detektorba (ez rendszerint lángionizációs detektor), amely az adszorptívum koncentrációját érzékeli és a detektorjelet erősítőn át regisztrálja. $t = 0$ időben a szemcse a Hg felszíne fölé emelhető, lejátszódik a szorpció ami a detektorjel csökkenésével követhető. Nem nehéz belátni, hogy a jelcsökkenés a pillanatnyi szorpciósebességgel arányos.

A szemcse telítődése, azaz az adszorpciós egyensúly beállta után, ugyanígy a deszorpció sebessége is mérhető.

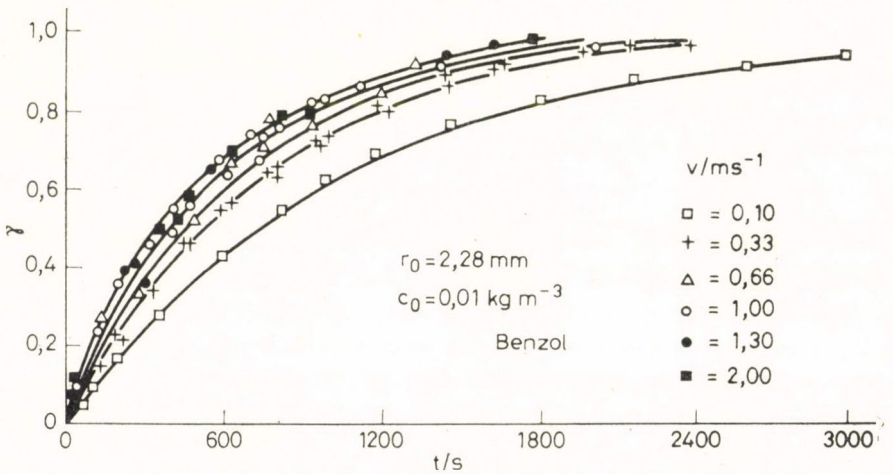
A 2. ábrán izo-bután szorpciójának sebessége látható néhány kereskedelmi forgalomban kapható aktívszén féleségen az idő függvényében [2].

Szemcsehalmazokon lejátszódó szorpció vizsgálatára az MTA Műszaki Kémiai Kutató Intézetében NÉMETH JENŐ és munkatársai szellemes módszert alkalmaztak: a szemcséket finom volframszálra fűzték fel, a szőlő fürtjén levő szemekhez hasonlóan, és torziós mérleggel mérték a tömeg-gyarapodást, amely a szorptívumot tartalmazó gáz átáramoltatásának következményeként létrejött [3]. Ez a módszer a szorbeált mennyiség időbeni változásának követésére alkalmas, tehát integrális adatokat szolgáltat.

Néhány eltérő áramlási sebességnél így meghatározott görbét benzol gőz szorpciójával kapcsolatban Nuxit BO típusú adszorbensen a 3. ábra mutat. Legyen szabad felhívni a figyelmet arra, hogy a szorptívumot tartalmazó gázelegy áramlási sebességét növelve a görbesereg egyetlen jól definiált határgörbéhez tart [4].

A szorpció mindkét módszernél áramló közegből történt és az adszorptívum valamilyen, elvben nem szorbeálódó inert gázban volt jelen. Ez a körülmény az áramlási sebesség változtatása révén módot ad a gázoldali transzport szerepének vizsgálatára. Továbbmenőleg, az így nyert adatok valóban alkalmasak adszorberek tervezésére, hiszen azokban a szorpció mindig valamilyen inert közeg jelenlétében megy végbe.

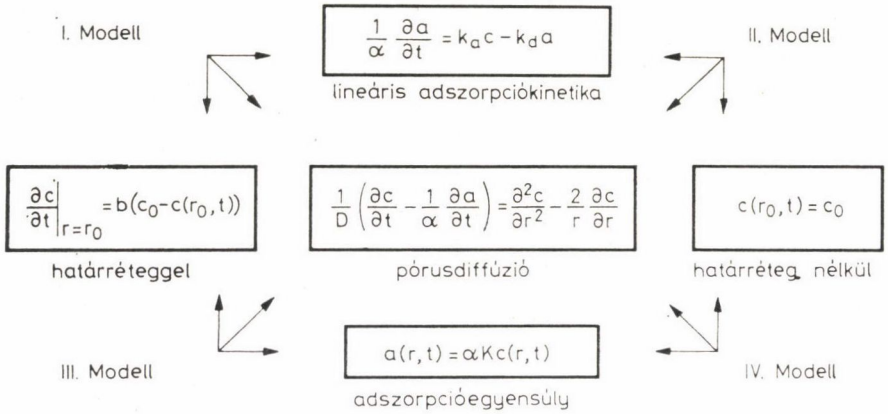
A porózus adszorbens szemcsén lejátszódó szorpció összetett jelenség, amely számos részfolyamatból áll. Elméleti vizsgálódásoknál többnyire a következőket szokás megkülönböztetni:



3. ábra. A benzol Nuxit—BO-n mért integrális szorpciósebesség görbéi a gázáramlási sebesség függvényében

1. gázoldali anyagátadás,
2. diffúziós transzport a szemcse pórusrendszerében (maga is összetett jelenség),
3. a szorpció a pórusok falán.

Ezek a részfolyamatok külön-külön és az eredő effektus maga is, alkalmas parciális differenciál-egyenletekkel leírható. Az egyenletek többnyire csak



4. ábra. Az egyetlen, gömb alakú adszorbens szemcsére felírt szorpciókinetikai modellek

egyszerűsítő feltevések bevezetésével oldhatók meg; aszerint, hogy ezek mire vonatkoznak, eltérő szorpciós modellek birtokába jutunk. Ezek közül vázlatosan a 4. ábrán mutatunk be néhányat. A középső parciális differenciál-egyenlet a diffúziós transzport eredményeként a gömbhéjba jutó adszorptívum megmaradási egyenlete. Legfelül a — rendkívül leegyszerűsített — szorpció sebességi egyenletet láthatjuk, amely elvben végtelen nagy ad- és deszorpció sebességnél a pillanatnyi egyensúlyt leíró izoterma egyenletbe megy át (alul); horizontális irányban a gázoldali anyagátadást leíró peremfeltétel látható (bal oldalon), amely igen egyszerű alakot ölt, ha a határréteg teljesen rásimul a szemcse felületére (jobb oldalon).

Az I. modell a feltüntetettek között a legbonyolultabb: a feltételezett effektusok mindegyikét tartalmazza. A IV. modell a legegyszerűbb: végtelen nagy gázoldali anyagátadást és azonnali szorpciós egyensúly beállását tételezi fel. Az egyenletek megoldásával kapcsolatos matematikai nehézségek a IV.-től az I. modell felé haladva hatványozottan növekszenek. Valamennyi itt tárgyalt modellt sikerült matematikailag megoldanunk [5]. Az egyszerűbb modellekre vonatkozó megoldások a legbonyolultabból alkalmas határátmenetek képzésével származtathatók le.

Mérve a szorpció sebességét, egyetlen szemcse esetén is csak integrális effektusok figyelhetők meg; nevezetesen

1. a t ideig a szemcsében elnyelődött adszorptívum mennyisége (ez a NÉMETH JENŐ és munkatársai által kidolgozott módszerrel mérhető):

$$A(t) = 4\pi \int_0^{r_0} r^2(\alpha c + a)\, dr,$$

2. $A(t)$-nek időbeni változása (ez viszont az általunk bevezetett módszerrel volt mérhető):

$$\frac{dA(t)}{dt} = 4\pi \int_0^{r_0} r^2 \left(\alpha \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t}\right) dr$$

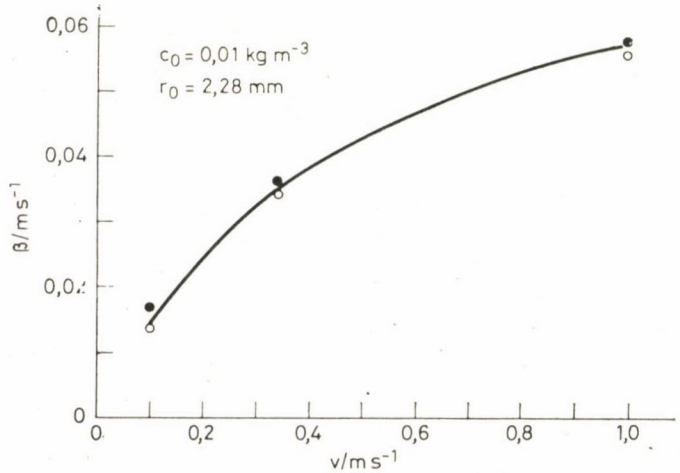
Csupán szemléltetés és nem részletes kifejtés céljából bemutatjuk az I. modellre vonatkozó szorpció sebességi egyenletet:

$$\frac{dA}{dt} 8\pi c_0 r_0 D \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\left(\frac{Ds_i + \alpha k_d}{k_a} + 1\right) e^{s_i Dt} - e^{-\alpha k_d t}}{\left(\frac{Ds_i + \alpha k_d}{k_a} + \frac{\alpha k_d}{Ds_i + \alpha k_d}\right)\left[\left(\frac{\mu_i}{br_0}\right)^2 + 1 - \frac{1}{br_0}\right]}$$

$$\mu_i \operatorname{ctg} \mu_i = 1 - br_0$$

$$s_i^2 + [(k_a + \alpha k_\alpha)/D + (\mu_i/r_0)^2]\, s_i + \alpha k_d (\mu_i/r_0)^2/D = 0$$

Számítógépes paraméter illesztő programok igénybevételével sikerült kiértékelni valamennyi kísérleti görbét [6]. Látható, hogy dA/dt kifejezése végtelen sor, melynek μ_i paramétere a határrétegben kialakuló transzporttól, az s_i paramétere pedig az adszorpció sebességétől függ. Ezen paraméterek



5. ábra. A benzol gázoldali anyagátadási együtthatójának függése a közeg áramlási sebességétől

1. táblázat

Az izo-bután egyetlen, gömb alakú szemcsén mért szorpciósebessége hazai gyártmányú aktívszeneken

Aktívszén	Nuxit–BO	Akvapur	Decolor
Fajl. felület: $F \cdot 10^{-5}/m^2\,kg^{-1}$	8,64	3,79	8,50
Porozitás: α	0,69	0,62	0,80
Átl. pórusátmérő/nm	2,6	6,8	4,6
Látszólagos sűrűség: ϱ/kg dm^{-3}	0,653	0,525	0,499
Szemcsesugár: r_0/mm	1,81	2,19	2,36
Gázkoncentráció: c_0/mmol m^{-3}	4,50	4,78	4,78
Lin. gázsebesség: v/m s^{-1}	0,064	0,067	0,067
Diffúziós együtth.: $D \cdot 10^6/m^2\,s^{-1}$	0,8	1,9	3,9
Adsz. sebességi áll.: $k_a \cdot 10^{-8}/s^{-1}$	2,4	2,2	2,0
Desz. sebességi áll.: $k_d \cdot 10^{-5}/s^{-1}$	1,8	0,6	1,1
Határréteg vastagsága: d/mm	1,1	0,4	0,5

a feltüntetett transzcendens, ill. másodfokú algebrai egyenletből számíthatók. A gyakorlati számítások tanúsága szerint 10 tag figyelembevételével kielégítő pontosság érhető el. A teljesség igénye nélkül, néhány érdekes adatra külön is felhívjuk a figyelmet.

Az 5. ábrán a benzol gázoldali anyagátadási együtthatójának függése látható a közeg áramlási sebességétől. β értéke határozottan nő v növekedésével.

A benzol Nuxit–BO-n mért differenciális jellegű szorpciósebesség-görbéiből meghatározott $D = 3{,}4 \cdot 10^{-6}\ m^2\,s^{-1}$ érték igen jól egyezik az integrális jellegű szorpciósebesség mérésekből származó $D = 4{,}0 \cdot 10^{-6}\ m^2\,s^{-1}$ diffúziós együttható értékkel [7].

Az 1. táblázat néhány kereskedelmi adszorbens és az izo-bután szorpció sebességi adatait foglalja össze. Nagyon érdekes, hogy a számítógépi kiértékelés (igen nagy hibával, természetesen) a szorpció sebességi állandóira is ad becslést.

Ezek az adatok igen lényegesek az adszorpciós rétegek viselkedésének, az ad- és deszorpciós frontok alakjának leírására, és ezzel méretezési feladatok megoldására. SCHAY GÉZA kromatográfiás munkássága révén éppen ezen a területen sikerült igen jelentős és elvileg is új eredményeket elérni.

Jelölések

a az adszorptívum koncentrációja a szemcsében, a látszólagos térfogatra vonatkoztatva

a_∞ a egyensúlyi értéke

A az egyetlen szemcse által szorbeált mennyiség

$b \equiv \beta/D = D_g/(d \cdot D)$

c az adszorptívum koncentrációja

c_0	az adszorptívum koncentrációja a gázfázisban
c_∞	c egyensúlyi értéke
d	az adszorbens szemcsét körülvevő határréteg vastagsága
D	belső (pórus-)diffúziós együttható
D_g	diffúziós együttható a gázfázisban
F	fajlagos felület
k_a	adszorpció sebességi együttható
k_d	deszorpció sebességi együttható
$K \equiv \alpha k_a/k_d$	a lineáris izoterma meredeksége
r	radiális koordináta
r_0	az adszorbens szemcse sugara
t	időkoordináta
v	lineáris gázáramlási sebesség
α	az adszorbens porozitása
$\nu(t) \equiv a(t)/a_\infty$	anyagátadási együttható
ϱ	látszólagos sűrűség

IRODALOM

1. Varga K.: Chromatographia **1.** 217 (1968)
2. Varga K., Fejes P.: Acta Chim. Acad. Sci. Hung. **74.** 417 (1972)
3. Baticz S.: Egyetemi doktori értekezés, Budapest (1972)
4. Németh J.: Az aktívszenes gőzadszorpció vizsgálata intenzív eljárású adszorberekben. Akadémiai doktori értekezés, Bp. (1978)
5. Varga K.: Acta Chim. Acad. Sci. Hung., **71.** 387 (1972)
6. Varga K.: Acta Chim. Acad. Sci. Hung., **73.** 411 (1972)
7. Varga K., Németh J., Fejes P.: Zbornik Seminara „Adsorpcia a sorpcné vlastnosti aktivneho uhlia", Nizke Tatry, Tale, 1979 (12. o.)

GÁZKROMATOGRÁFIAI KUTATÁSOK A BME FIZIKAI-KÉMIAI TANSZÉKÉN

OLÁH KÁROLY
a kémiai tudományok kandidátusa
(BME Fizikai-kémiai Tanszék)

Feladatom, hogy a rendelkezésemre álló helyen áttekintést adja azokról a gázkromatográfiás, vagy azzal kapcsolatos kutatásokról, melyek a BME Fizikai Kémia tanszéken folynak, eredményekről, melyek itt születtek.

A gázkromatográfiával SCHAY GÉZA professzor úr vezetésével már akkor foglalkoztunk a tanszéken, amikor ez a tudomány még csecsemőkorát élte.

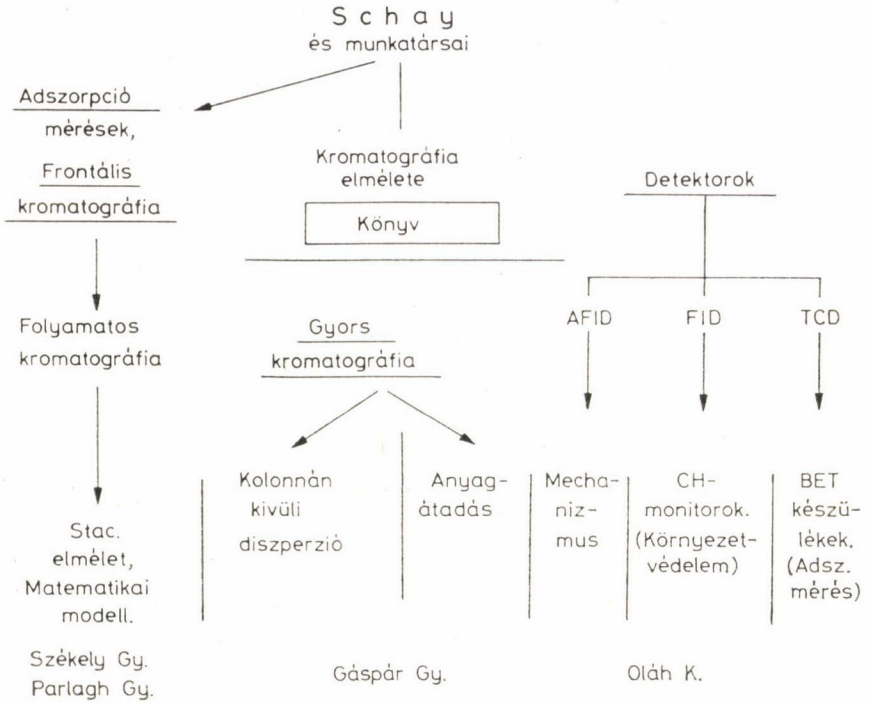
Talán legjobb, ha néhány mondatot abból a korreferátumból idézek, melyet SCHAY GÉZA az Akadémián 1960-ban olvasott fel.

„Ugyanitt (mármint a fizikai kémia tanszéken) kezdtünk gázok és gőzök adszorpciójával is foglalkozni, elméletileg tovább fejlesztettük a fizikai adszorpció statisztikus termodinamikáját, új dinamikus módszert dolgoztunk ki adszorpciós és oldékonysági izotermák meghatározására. Az új módszer a frontális gázkromatográfia felhasználása volt, nevezetesen annak felismerése alapján, hogy a kromatografáló oszlopból kiáramló gáz sebességének a megváltozását lehet regisztrálásra felhasználni. Ennek az eddig elhanyagolt effektusnak a tekintetbevételével az egész gázkromatográfiának új, átfogó matematikai elméletét is kidolgoztuk, részben a KKKI-ben. Ezek az eredmények monográfia alakjában megjelenés alatt vannak német nyelven."

Ez a monográfia 1960-ban jelent meg, először német, röviddel utána magyar nyelven. Ez a könyv a gázkromatográfia fizikai kémiai alapjainak olyan alapos összefoglalását tartalmazza, amit az azóta megjelent könyvtárnyi irodalomban is hiába keresünk. Ezt a monográfiát mindössze négy angol és három német nyelvű könyv előzte meg, tehát mindenképpen úttörő munkának tekinthető.

Az intenzív gázkromatográfiás kutatásra jellemző lehet, hogy csak az 1957-es évben, egyetlen évben hét publikáció jelent meg ebben a tárgykörben SCHAY GÉZA nevével. Ekkor még két-háromszáz körül volt az egész világon addig összesen megjelent gázkromatográfiás publikációk száma.

Ez volt az a kezdősebesség, mellyel a tanszék gázkromatográfiás tevékenységét SCHAY professzor úr elindította. Ez a kutatási terület azóta is, többfelé elágazva, folyt tovább és folyik ma is. Ezzel kapcsolatos eredményeinket szeretném röviden ismertetni (1. ábra).



1. ábra. **Gázkromatográfiás kutatások a BME Fizikai Kémiai Tanszéken**

Tovább folytak a mérések az adszorpciós, illetve abszorpciós egyensúlyi mérések frontális kromatográfiás technikájával. Ennek során merült fel később a folyamatos kromatográfiás elválasztás gondolata: mozgó „stacionárius" fázissal megállított front felhasználása folyamatos elválasztásra.

Ez a technika új problémákat is fölvetett, a várható jelenségeket elméletileg is tisztázni kellett. A kiindulás itt is a SCHAY GÉZA által kidolgozott frontális kromatográfiás elmélet volt, a differenciálegyenleteket azonban ki kellett egészíteni egy konvekciós jellegű taggal (2. ábra). Közben megnyíltak a lehetőségek a számítástechnika alkalmazására is, s ez lehetővé tette az egész matematikai modell új alapokra helyezését is. Nem volt már szükség azokra az egyszerűsítésekre, melyekkel a rokon műveletek (pl. desztilláció) éltek, így a HETP fogalmára sem. A kidolgozott program tetszőleges szorpciókinetikára kiterjeszthető és átvihető desztillációs és töltött abszorpciós kolonnák számítására is.

A gázkromatográfia másik fontos problémaköre a diszperzió, a csúcsok, zónák kiszélesedése. E téren elért eredményeink szintén kísérleti, konstrukciós és méréstechnikai problémákból ágaztak ki, s vezettek egy új, korszerű gázkromatográfiás technikához, az ultragyors gázkromatográfiához. Ilyen technikával készült kromatogramok elemzési ideje mindössze néhány másodperc.

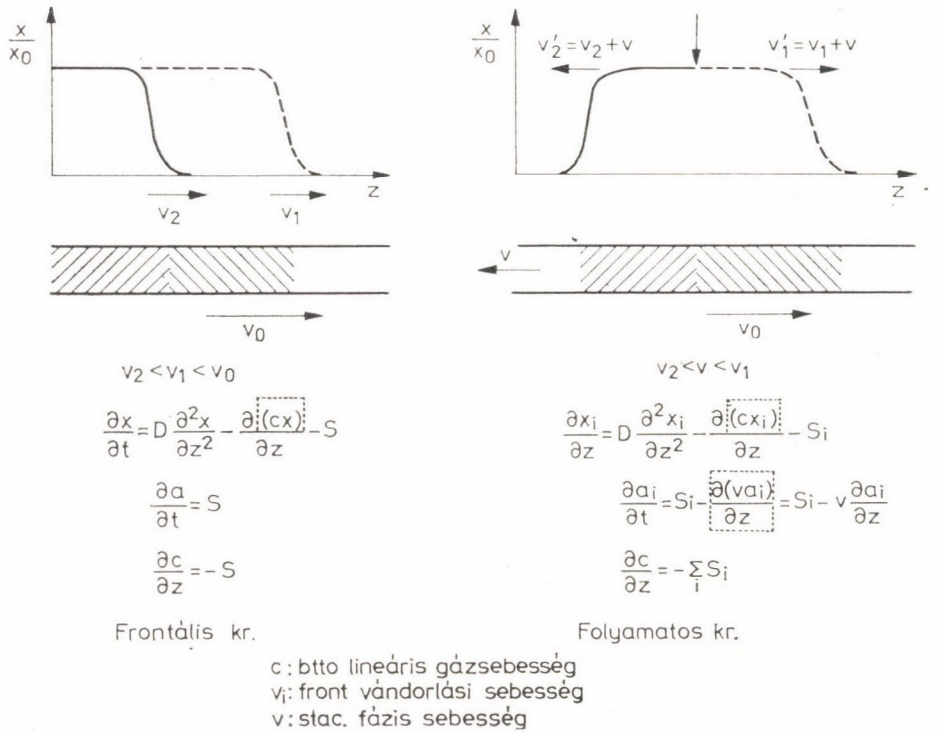
Itt, a hagyományos módszerekhez képest lényeges konstrukciós változtatásokat kellett eszközölni. Például, a mintát nem lehet a hagyományos módon bejuttatni, és a detektorjel gyors lefutását sem lehetett a hagyományos módon regisztrálni.

Mint ahogyan az lenni szokott, az új megoldások új elvi problémákat is hoztak. Kiderült, hogy a diszperziós problémák is újszerűen jelentkeznek, különös jelentőségre tesznek szert a kolonnán kívüli effektusok, s ezek a jól ismert van Deemter-féle elmélet kereteibe nem illeszthetők be. Szükség volt az egész rendszer metrológiai elemzésére, s ennek eredménye egy, a HETP kifejezésébe bevezetett, a sebesség négyzetével arányos tag.

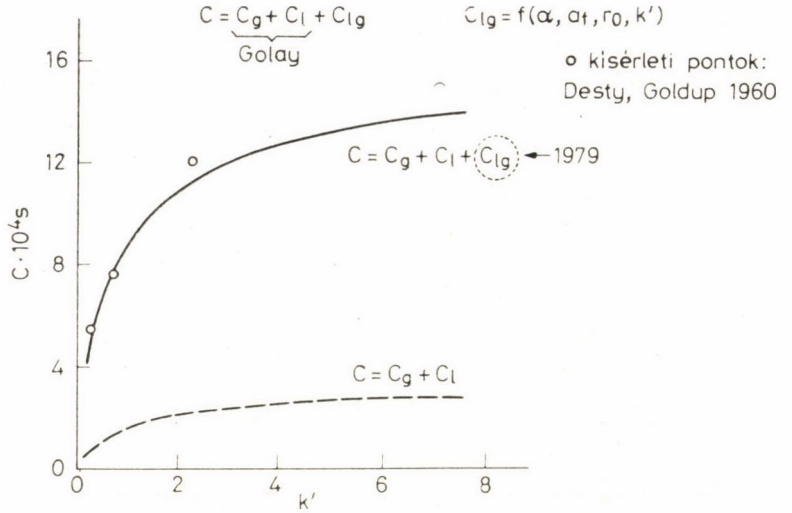
A gyors kromatográfia speciális, rövid és igen kis belső átmérőjű kolonnát, vékony folyadékfilmet és nagy lineáris gázsebességet igényelt. Kiderült, hogy ilyen körülmények között a kolonnán belüli diszperzió számításánál eddig alkalmazott elhanyagolások már nem alkalmazhatók.

Hadd idézzek megint SCHAY professzor úrtól. „A gázkromatográfia alapjai" című könyvben, a 108. oldalon ez olvasható:

„A diffúzió elhanyagolása csak akkor lehet indokolt, ha az anyagátmenet a rögzített fázisba és viszont jelentősen lassúbb, ez azonban egyértelmű azzal,



2. ábra. Frontális és folyamatos kromatográfiás módszerek számításának alapjául használt differenciálegyenletek



3 ábra. A Van Deemter egyenlet „C" állandója GOLAY szerint és a C_{2g} taggal kiegészítve (GÁSPÁR, 1979)

hogy a pillanatszerű egyensúlybeállás feltevését el kell ejtenünk. Ebben az esetben tehát egy megfelelő kinetikus kifejezést kell az egyenletrendszerbe bevinnünk. Figyelembe kell tehát venni vagy a diffúziót, vagy a szorpció kinetikáját, a valóságban persze mindkettőt egyidejűleg, de ez legtöbbször igen nagy matematikai nehézségekre vezet."

A kísérleti eredmények és az elméleti számítások közötti ellentéteket a szorpció kinetikáját is figyelembe vevő kiegészítéssel sikerült elhárítani. A probléma matematikailag valóban bonyolult, a végeredmény azonban egyszerűsíthető annyira, hogy a gyakorlatban is használható. Végeredményben a Golay-egyenlet C konstansát kell kibővíteni és a gáz-, illetve folyadékfázisú átadási tag mellett egy fázishatár-átadási tagot is figyelembe venni (3. ábra). Az ábrán C_g a gázfázisban, C_2 a folyadékfázisban végbemenő átadási folyamat konstansa. C_{2g} a folyadék-gáz fázishatár átadási folyamatának konstansa, mellyel a Golay-elmélet és a kísérletek közti eltérést jól sikerült áthidalni.

Kutatásaink harmadik ága a *detektorok* konstrukciójával alkalmazásival, kapcsolatos.

A *lángionizációs detektorral* szinte annak megszületése óta foglalkozunk, másfél évtized óta annak környezetvédelmi alkalmazásával, nevezetesen *szerves gőz monitorok* kifejlesztésével. Miután sorra sikerült több, az alkalmazás útjában álló, vagy azt nehezítő problémát megoldanunk (ilyenek: hordozható monitorokban is használható elektrolitos hidrogéngenerátor, újszerű, permeációs mintabeviteli mód, zéró levegő generátor kifejlesztése, a lángdetektor elektronikusan ellenőrzött működtetése), korszerű és Elkon S—215 néven sorozatgyártás előtt álló monitort fejlesztettünk ki.

Foglalkozunk egy másik, 1975 óta ismertté vált szelektív detektortípus vizsgálatával, a Kolb-féle rubidiumüveg-gyöngy detektorral. Sikerült fényt derítenünk ennek a detektornak a működési mechanizmusára, s erről a J. Chromatographic Science 1979. év szeptemberi számában megjelent közleményünkben számoltunk be.

Végül, a hagyományos hővezetőképességi detektor továbbfejlesztéséről is beszámolhatunk. Adszorpciós felületmérési célra vivőgázas BET készüléket fejlesztettünk ki. Ehhez azonban olyan detektorra volt szükség, mely az itt előforduló nagy összetételváltozások tartományában is lineáris, azonkívül nem veszélyeztetik a gázelegy hővezetőképességének nagymértékű változásai. Ezt úgy oldottuk meg, hogy a szálra nem állandó feszültséget, sem állandó fűtőáramot adunk, hanem azt állandó hőmérsékleten, vagy, ami ugyanaz, állandó ellenálláson tartjuk. Kiderült, hogy ilyen körülmények között teljes összetételtartományban lineáris detektort lehet készíteni nitrogén-hidrogén gázelegyre.

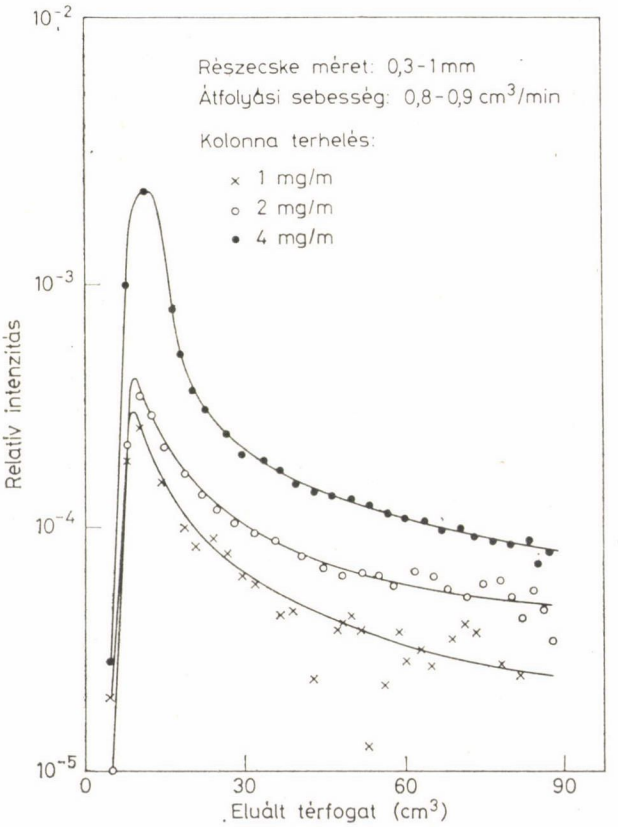
SZILÁRD-FOLYADÉK HATÁRFELÜLETI JELENSÉGEKKEL KAPCSOLATOS KUTATÁSOK

NAGY LAJOS GYÖRGY
a kémiai tudományok doktora
(Budapesti Műszaki Egyetem, Alkalmazott Kémia Tanszék)

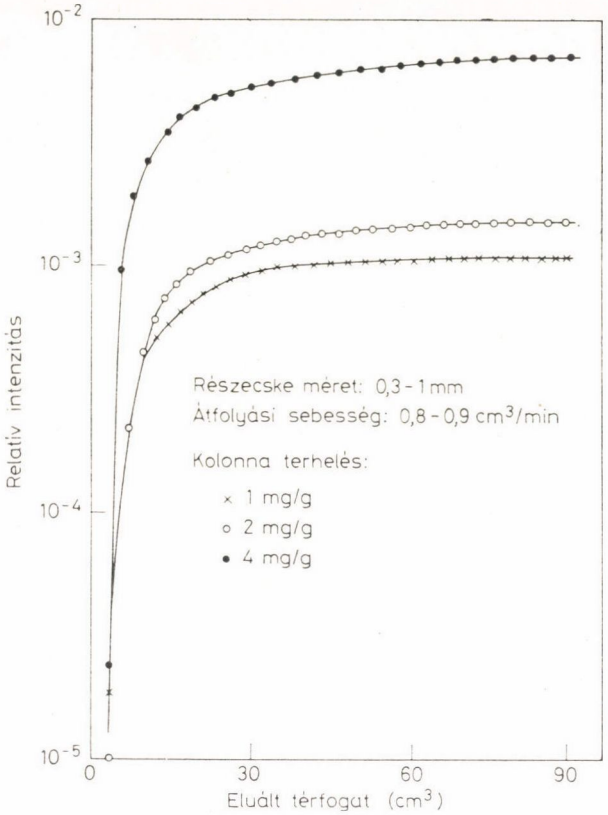
A szilárd-folyadék határfelületi jelenségekkel kapcsolatos kutatásaink újabb eredményei közül három olyanról készült a jelen összefoglaló, amely eredmények közvetlenül, vagy közvetve SCHAY GÉZA közreműködésével születtek.

Hidratált antimon-pentoxid (HAP) szelektív nátrium szorpciója [1]

Biológiai rendszerek esszenciális és toxikus nyomelemháztartásának felderítése, az egyes nyomelemek koncentrációjának, illetve a koncentráció

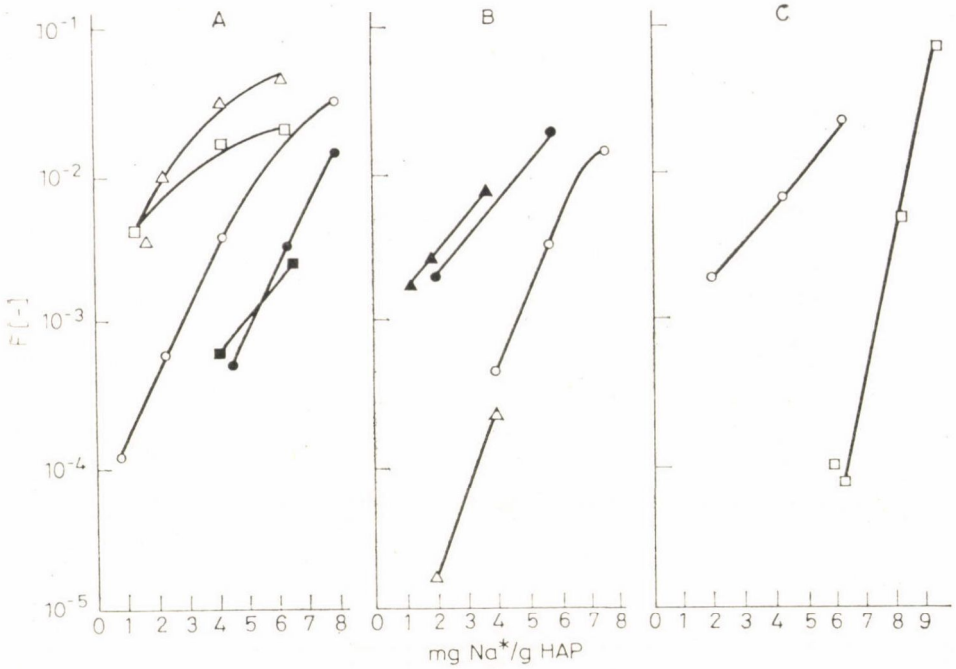


1. ábra. Differenciális elúciós görbe



2. ábra. Integrális elúciós görbe

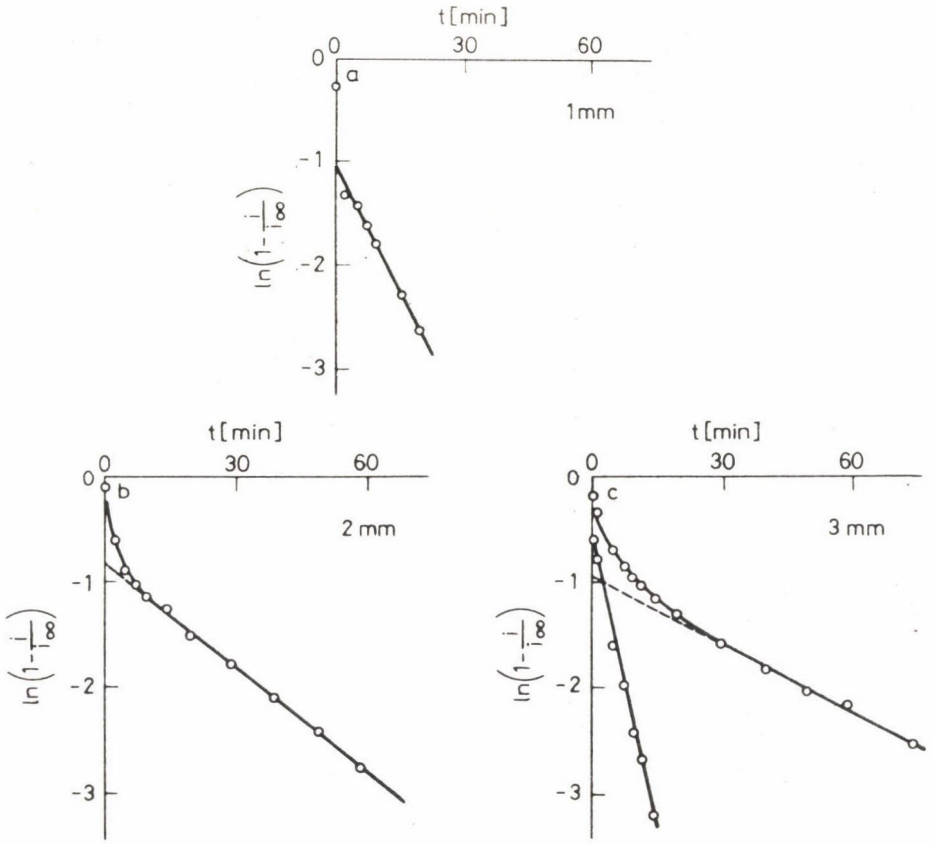
változás ismeretének fontossága köztudott. A nyomelemanalízis számos lehetséges módszere közül mi a roncsolásos neutron aktivációs analízist alkalmaztuk különböző eredetű vérminták nyomelemháztartásának, illetve esszenciális nyomelemek koncentrációjának meghatározására. Az adott módszer alkalmazhatósága azon múlik, hogy az aktiválás során keletkező — a nyomelemek aktivitásszintjét három-öt nagyságrenddel meghaladó — radioaktív nátriumot, káliumot, foszfort szelektíven el tudjuk távolítani úgy, hogy a szétválasztás során a nyomelemek aktivitás szintje gyakorlatilag változatlan maradjon. A nátrium eltávolítására a hidratált antimon-pentoxid a nagyszámú kísérlet során részben kiválóan megfelelt, részben használhatatlannak bizonyult, holott az alkalmazás és a HAP előállításának körülményei gyakorlatilag azonosak voltak. Munkánk során derivatográfiás, röntgendiffrakciós, IR-spektroszkópiai, szorptometriás, hogany poroziméteres és nyomjelzéses elúciós kromatográfiás módszerekkel minősítettük a HAP készítményeket és döntöttük el, hogy a HAP használható-e vagy sem. A felsorolt módszerek közül



3. ábra. Egy „jó" HAP preparátum szorpciós izotermája

a kromatográfiás módszer szolgáltatta a legegyértelműbb, legmegbízhatóbb adatokat.

A közvetlen mérésekből a differenciális elúciós görbét kapjuk (1. ábra). A differenciális elúciós görbe integrálja szolgáltatja a 2. ábrán bemutatott integrális elúciós görbét. Az integrális görbék aszimptótájának logaritmusát



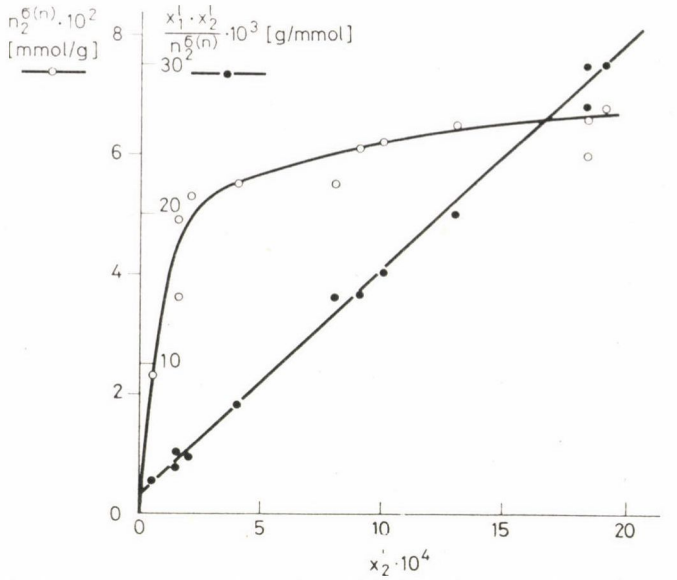
4. ábra. Etanol cseregörbék eltérő átlagos szemcse méretű aktív szénen

a kolonna terhelés függvényében ábrázolva a 3. ábrán szemléltetett szorpciós izotermákat kapjuk, amelyek érzékeny indikátorai a HAP készítmények „jóságának".

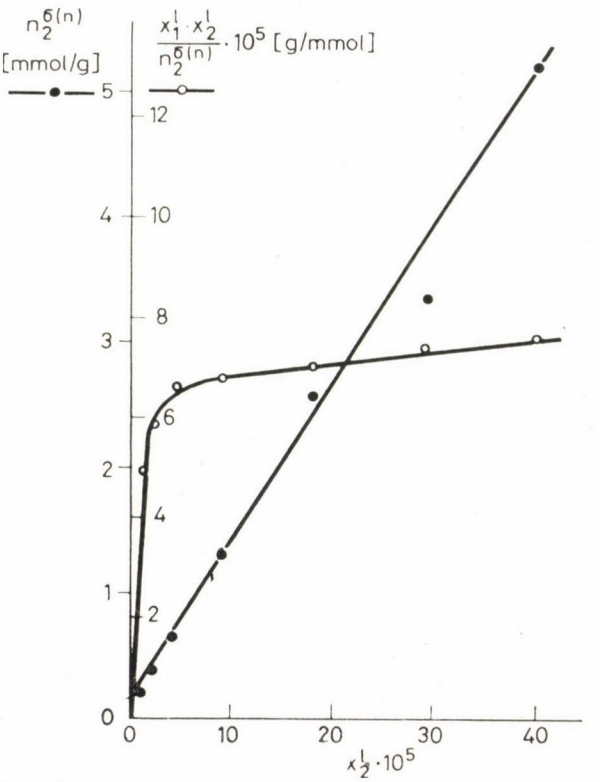
Pórusos rendszerek kinetikai jellemzése izotópmolekula-cserés módszerrel [2, 3]

Az izotopmolekula-csere kémiailag azonos, de egy adott elem izotóparányában eltérő komponens molekuláinak cseréje két vagy több fázis között. A jelenség kinetikai vizsgálatának eredményei hasznos felvilágosítást nyújtanak pórusos adszorbensek pórusrendszerének időbeli hozzáférhetőségéről, a hozzáférhetőséget befolyásoló tényezőkről, úm. a mikropórusok hatása, a szemcseméret befolyása. Méréseink jelentős részénél ^{14}C-vel jelzett etanolt használtunk. A módszer három konszekutív lépésből áll:

1. adszorpciós egyensúly beállítása jelzett folyadékkal (pl. jelzett etanol),



5. *ábra.* Sztearinsav (2) ciklohexánból (1) kormon (Spheron)



6. *ábra.* Benzoesav (2) vízből (1) aktív szénen (Nuxit Al III)

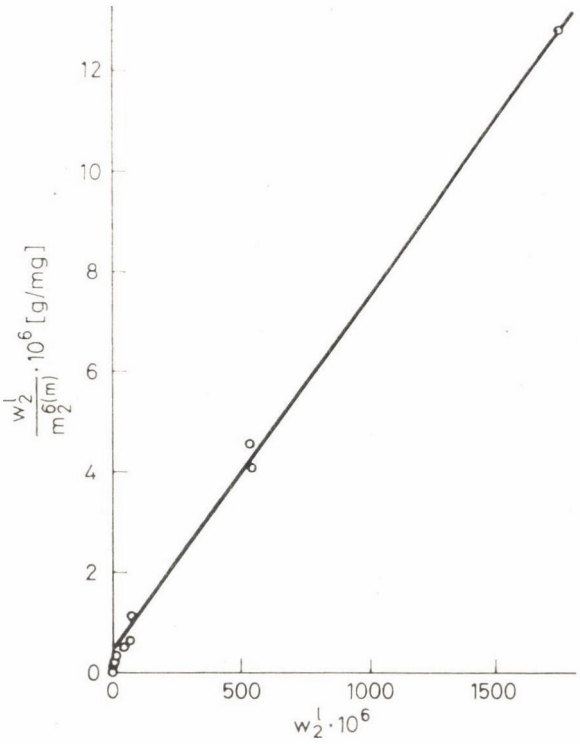
2. az egyensúlyi folyadékfázis kicserélése jelzetlen folyadékra (pl. jelzetlen etanolra),
3. a jelzett (pl. etanol) molekulák megjelenési sebességének mérése.

Azonos szerkezetű, de eltérő átlagos szemcseátmérőjű aktív szenek cseregörbéit szemlélteti a 4. ábra, ahol F a cserehányados: $F = \frac{I}{I_\infty}$, I az aktuális, I_∞ pedig az ún. telítési számlálási sebesség. A telítési számlálási sebességet a $\frac{dI}{dt} = 0$ szakaszban határozzuk meg.

Pórusos adszorbensek adszorpciós kapacitásának meghatározása híg oldatok adszorpciós izotermájának segítségével [4]

A szilárd-kétkomponensű folyadék határfelületre felírható anyagmérlegek segítségével az adszorpciós többlet, $n_2^{\sigma(n)}$ (specific reduced surface excess amount) az egyensúlyi móltört, x_2 függvényében a következő formában is megadható:

$$\frac{x_1 x_2}{n_2^{\sigma(n)}} = \frac{x_1}{(S-1)\, n_{1,0}^s} + \frac{S}{(S-1)\, n_{2,0}^s} X_2 \qquad (1)$$



7. ábra. Antracén (2) ciklohexánból (1) aktív szénen (Chemviron type CAL)

ahol S a szeparációs faktor és $n^s_{1,0}$ ill. $n^s_{2,0}$ a kérdéses tiszta komponens adszorpciós kapacitása az adszorbens tömegegységére vonatkoztatva:

$$S = \frac{n^s_2 x_1}{n^s_1 x_2} \tag{2}$$

$$\frac{n^s_1}{n^s_{1,0}} + \frac{n^s_2}{n^s_{2,0}} = 1 \tag{3}$$

Olyan rendszereknél, amelyekre az jellemző, hogy az egyik komponens (esetünkben a 2-es indexű) preferenciális adszorpciója igen jelentős, azaz $S \gg 1$, $\frac{S}{S-1} \approx 1$ és a kettes komponensre nézve igen híg oldat esetén $x_1 \approx 1$, azaz

$$\frac{x_1 x_2}{n_1^{\sigma(n)}} = \frac{1}{S n^s_{1,0}} + \frac{1}{n^s_{2,0}} x_2 \tag{4}$$

Adott rendszereknél tehát az $x_1 x_2 / n_1^{\sigma(n)}$ az x_2 függvényében ábrázolva egyenest ad. A (4) alapján az iránytangensből az $n^s_{2,0}$ jó közelítéssel számítható, ha a tengelymetszet/meredekség arány kisebb mint 10^{-2}. Az 5., a 6. és a 7. ábra a módszer alkalmazására mutat be három példát.

IRODALOM

1. Nagy, L. G., Török, G., Fóti, G.: Acta Chim. Acad. Sci. Hung. **101** (1—2), 17 (1979)
2. Nagy, L. G.: Period. Polytechn. Chem. Eng. **20.** 25 (1976)
3. Nagy, L. G., Fóti, G., Schay, G.: J. Colloid Interface Sci. **75.** 338 (1980)
4. Schay, G., Nagy, L. G., Fóti, G.: Acta Chim. Acad. Sci. Hung. **100** (1—4), 289 (1979)

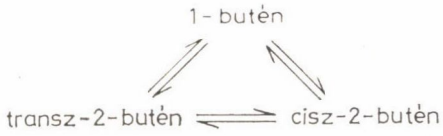
HETEROGÉN KATALITIKUS REAKCIÓK A PETROLKÉMIA TERÜLETÉN

KALLÓ DÉNES
a kémiai tudományok doktora
(MTA Központi Kémiai Kutató Intézete, Budapest)

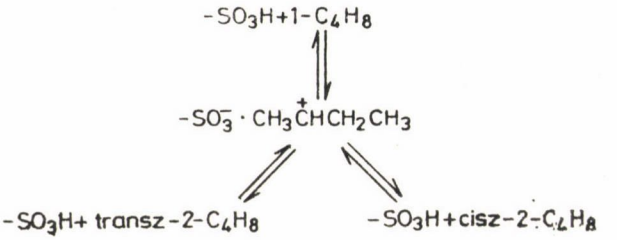
Néhány év ipari kutató munka után 1956-ban kezdtem el ösztöndíjas aspiranturámat SCHAY GÉZA akadémikus vezetésével az MTA Kémiai Kutató Intézetében. Az adszorpciós és kromatográfiás kutatások, azaz szilárd és fluidum határfelületeken lejátszódó jelenségek sorában mind az Intézetben, mind a BME Fizikai Kémiai Tanszékén az érdeklődés ekkor már a heterogén katalitikus reakciókra is kiterjedt.

Abban az időben a fejlett kőolajfeldolgozásnak a katalitikus krakkolás már szerves része volt. Éppen ezért irányult figyelmünk annak legelterjedtebb katalizátorára, az amorf aluminoszilikátok vizsgálatára. Ezek a katalizátorok textúrájukat tekintve az MTA Központi Kémiai Kutató Inetézetében, ill. a BME Fizikai Kémiai Tanszékén már korábban is tanulmányozott szilikagélek bizonyos fajtáihoz álltak közel, míg aktív alakulataik a bennük 10—15%-ban levő alumínium-oxid beépülése révén jönnek létre. Abból a felismerésből kiindulva, hogy ezek savas karakterű centrumok, melyek a krakkolás folyamán végbemenő átalakulások egész sorát katalizálják, célszerűbbnek tűnt e rendkívül bonyolult reakciórendszer helyett behatóbban vizsgálni egyes egyedi szénhidrogén-átalakulásokat.

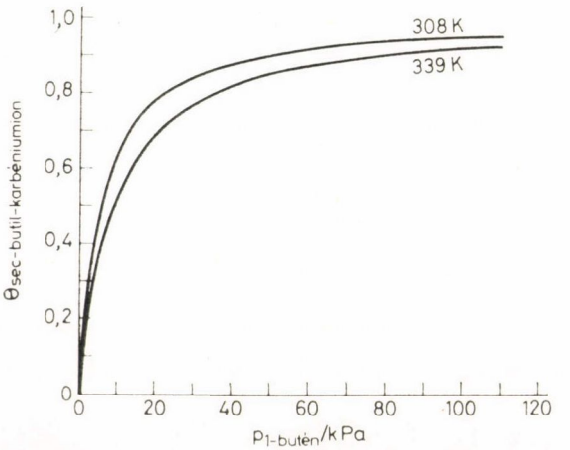
Reaktánsként *n*-butént választva a kettőskötés- és váz-izomerizációt, az oligomerizációt, a hidrogénátadást, ill. a széndepozitumok képződését tanulmányozhattuk egyrészt elkülönítetten, másrészt egymásra gyakorolt hatásaikon keresztül [1]. Ennek során — többek között — felismertük, hogy (1) a három *n*-butén-izomer egymásba történő átalakulása monomolekuláris, reverzibilis háromszögreakció (1. ábra) [2], (2) az oligomerizáció sebességmeghatározó lépése a termékdeszorpció, (3) a stacionárius állapotban a kemiszorbeált oligomer mellett jelentékeny mennyiségű fiziszorbeált oligomer



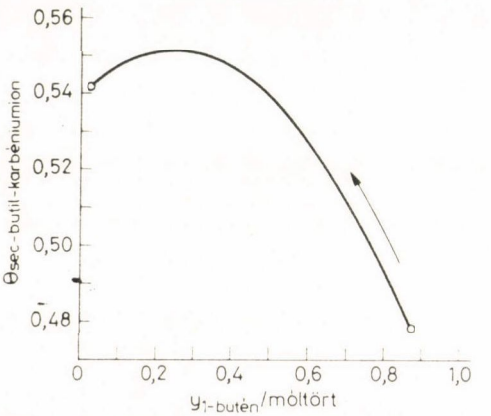
1. ábra. Az n-butén-izomerizáció fenomenologikus háromszögsémája



2. ábra. A közös felületi köztiterméken (sec-butil-karbéniumionon) át végbemenő n-butén-izomerizáció



3. ábra. A sec-butil-karbéniumion-borítottság az 1-butén-izomerizáció kezdetén a reaktáns nyomásának függvényében 308 és 339 K-en szulfonsavas ioncserélő műgyantán



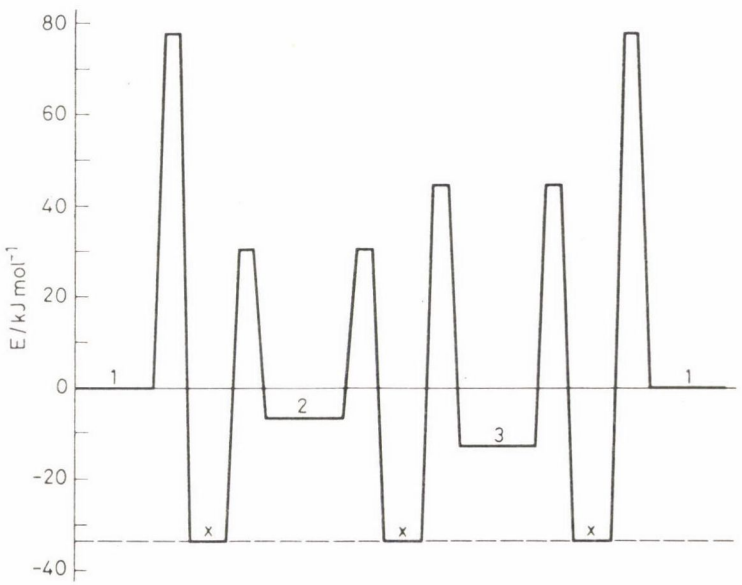
4. ábra. A sec-butil-karbéniumion-borítottság az 1-butén-izomerizációja folyamán 308 K-en, 4,0 kPa-on szulfonsavas ioncserélő műgyantán

borítja a katalizátor felületét, leszűkítve a pórusokat, csökkentve a Knudsen-diffúziós anyagtranszportot a szemcsék belsejében [3]. Mindezeket a folyamatokat kvantitatívan is értelmeztük és vizsgálatainkat alumínium-oxid-katalizátorra is kiterjesztettük [4].

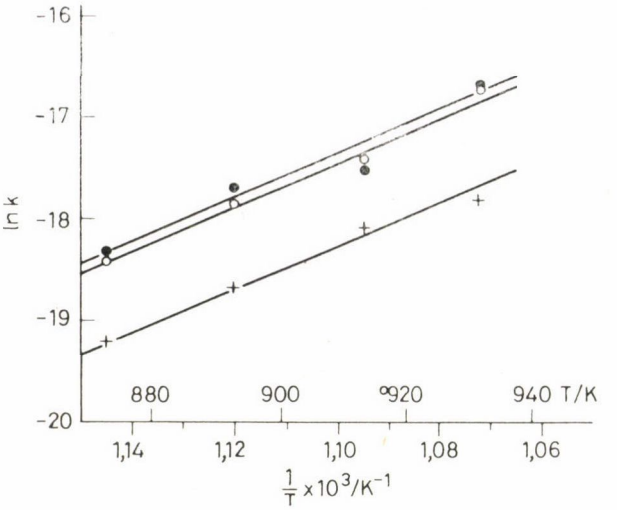
Hogy a heterogén savas katalízist egyértelműbben valósítsuk meg, olyan katalizátorra volt szükség, melyen jól definiált szerkezetű, lényegében azonos aktivitású centrumok foglalnak helyet. Így esett választásunk a savas ioncserélő műgyantákra, melyek közül kielégítő aktivitásúnak és — a reakció körülményei között — kielégítő stabilitásúnak bizonyult az Amberlyst 15. A szulfosav-csoportokat tartalmazó sztirol/divinil-benzol kopolimer 0,06—0,08 μm átmérőjű globuláiból álló katalizátor-szemcsén belül diffúziós gátlással nem kellett számolnunk.

Zárt, cirkulációs rendszerben vizsgálva az 1-butén izomerizációját kitűnt [5], hogy az 1-butén móltörtje gyorsabban csökken, ha a rendszerben a nyomás kisebb, mint ha a nyomás nagyobb. E látszólagos ellentmondás onnan adódott, hogy az átalakulás sebessége nem lineárisan nő az 1-butén nyomásával, hanem a növekedés ennél kisebb mértékű; ahhoz ui., hogy a zárt rendszerben a reaktáns nyomását pl. megkétszerezzük, a bemért mennyiséget is meg kell kétszereznünk, viszont a katalitikus átalakulás sebessége ezalatt kétszeresénél kisebb mértékben nő.

Mindez arra mutatott, hogy az *n*-butén-izomerizációt nem tekinthetjük a fenomenologikus háromszögséma szerint (1. ábra) egyszerűen elsőrendűnek,



5. ábra. Az energiaszintek (E) alakulása az n-butén-izomerizáció során szulfonsavas ioncserélő műgyantán (1: 1-butén, 2: cisz-2-butén, 3: transz-2-butén, X: sec-butil-karbéniumion az aktív alakulaton)



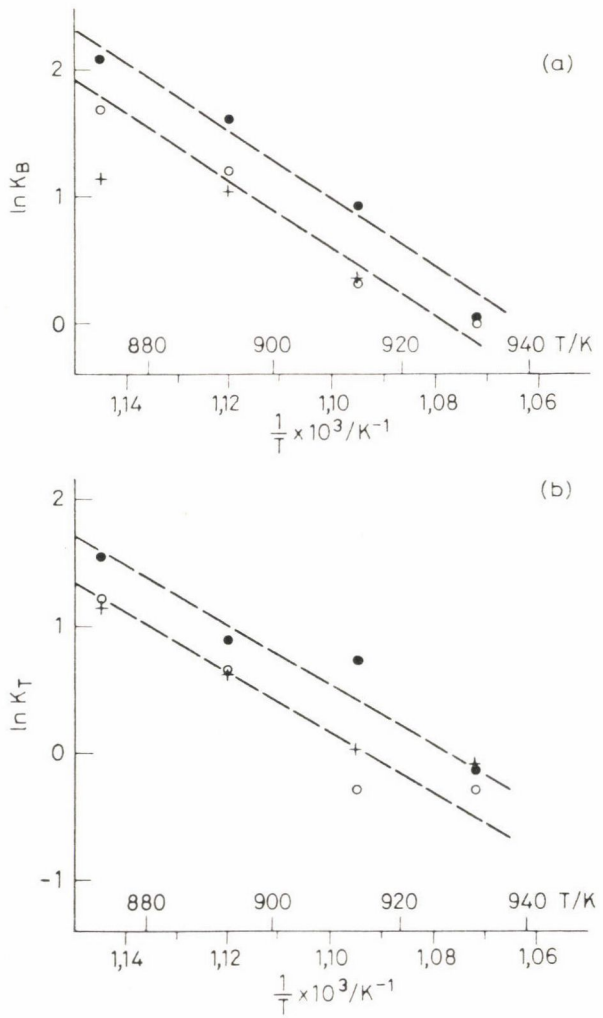
6. ábra. Toluol-hidrodemetilezéskor a sebességmeghatározó felületi reakció sebességi állandójának hőmérsékleti függése Arrhenius diagramban; +: K(Mg, Cs)-, ○: Mg(K, Ca)-, ●: La(K, Mg, Ca)-klinoptiloliton

számolnunk kell a reaktáns és a katalizátor közötti kölcsönhatással, a felületi borítottság változásával. Esetünkben helyesnek bizonyult az a „kémiailag" is kézenfekvő feltételezés, hogy a katalizátorral a kölcsönhatás eredményeképp mindhárom *n*-butén-izomerből ugyanaz a felületi köztitermék, a sec-butil-karbéniumion képződik az $-SO_3H$-csoportokon (2. ábra). A föltételezett mechanizmusra, azaz a közös felületi köztiterméken át végbemenő izomerizációra levezetett sebességi egyenletek helyesen írták le a kísérleti eredményeket és módot adtak az aktív alakulatok aktuális borítottságának, azaz a közös felületi köztitermék mindenkori mennyiségének kiszámítására is (3., 4. ábra) [5]. Az egyes ad- és deszorpciós sebességi állandók hőmérsékleti függéséből meghatározhattuk az egyes lépések aktiválási energiáit, melyeket a teljes átalakulási ciklusra ábrázolva megszerkeszthettük a három izomer katalitikus egymásbaalakulásának energiasémáját (5. ábra) [5].

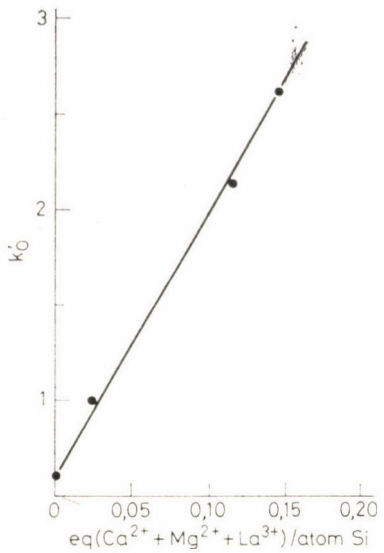
Kutatásaink ezt követően, a 60-as évek végétől a zeolitkatalízisre irányultak. A zeolitok ui. olyan kristályos aluminoszilikátok, melyek rácsában molekuláris méretű üregek és az ezeket összekötő csatornák szabályos térbeli rendszere áll elő a kristályszerkezet által meghatározott módon, így rajtuk, ill. bennük kellő stabilitású és — ami igen lényeges — diszkrét aktivitású centrumok számos változata alakítható ki. Idejekorán bekapcsolódtunk ezen a területen a világszerte egyre szélesebben kibontakozó kutatásokba. Munkánk eredményességéhez alapvetően hozzájárult az az egzakt, fizikai-kémiai szemléletmód az eredmények szigorú, kritikai értékelésekor, a mélyebb összefüggések feltárásakor, ami SCHAY akadémikus tudományos habitusának sajátja, kutatás-irányításának egyik meghatározó jellemzője.

A 60-as évek végétől, a 70-es évek elejétől fokozatosan bővült az MTA Központi Kémiai Kutató Intézetében a kutatóknak az az együttese, mely a zeolitokon lejátszódó katalitikus éa adszorpciós folyamatokkal foglalkozott. A közvetlen munkatársak csoportja 1974-ben önálló osztállyá alakult. A fejlődésnek ebben a szakaszában, valamint az utóbbi években elért eredményekről — távolról sem a teljesség igényével — szeretnék rövid áttekintést nyújtani.

1968-ban kezdtük el a toluol hidrodemetilezését tanulmányozni alkáli-, alkáliföldfém- és földfém-klinoptiloliton, ami egyben ennek a természetes hazai zeolitnak első, behatóbb vizsgálatát is jelentette [6]. A reakcióról megállapí-



7. ábra. Toluol-hidrodemetilezéskor a benzol (a) és a toluol (b) adszorpciós egyensúlyi állandójának, K_b-nek, ill. K_T-nek változása a hőmérséklettel; +: K(Mg, Ca)-, ○: Mg(K, Ca)-, ●: La(K, Mg, Ca)-klinoptiloliton



8. ábra. Klinoptiloliton toluol-hidrodemetilezéskor a relatív preexponenciális tényező (k_0') változása a többértékű kationok egyenértéknyi mennyiségének függvényében

tottuk, hogy az mindegyik katalizátoron a Rideal—Eley-mechanizmus szerint megy végbe és a sebességmeghatározó lépés az adszorbeált toluol reakciója a gázfázisból támadó hidrogénnel, amikor is adszorbeált benzol és gázfázisú metán képződik, s ez egyben a teljes átalakulás irreverzibilis lépése is. Nemcsak a reakció mechanizmusa azonos a különböző kationos formákba vitt katalizátoron, hanem a felületi reakció aktiválási energiája (6. ábra) és — a hibahatárokon belül — a toluol, valamint a benzol adszorpciós hője is (7. ábra). Az aktivitásbeli különbségek csupán az aktív centrumok számának különbsége miatt állnak elő. Az aktív centrumok száma pedig arányos (egy ún. remanens aktivitás fölött) a két- és háromértékű kationok egyenértéknyi mennyiségével, az egyes centrumok aktivitása azonban független a kationok egyéb minőségétől (8. ábra).

Ugyancsak az aromás-termelés szempontjából ipari fontosságúak xilolizomerizációs vizsgálataink [7]. Ennek során a xilol-izomerizációról kitűnt, hogy az o ⇄ m ⇄ p-xilol sor szerinti konszekutív, monomolekuláris, reverzibilis átalakulás a különböző H-zeolitokon. A sebességmeghatározó lépés itt is a felületi reakció, melynek során egy metilcsoport az aromás gyűrű mentén átcsúszik a szomszédos szénatomra. Legutóbbi vizsgálataink alapján, melyek Miklósy Éva disszertánsi munkájának is részét képezik, kitűnt, hogy a H-zeolitok közül a legaktívabbak és a legstabilisabbak a természetes hazai mordenit ezüst-formájának hidrogénes redukciójával kapott katalizátorok.

A *n*-butén-izomerizációs vizsgálatokat zeolitkatalizátorokon is folytattuk. Most már nemcsak egy sémát vettünk tekintetbe, hanem minden

szóbajöhető kinetikai esetet (9. ábra) [8, 9]. Ezekre levezetve a megfelelő kezdeti sebességi egyenleteket, végül is a Langmuir-típusú sebességi egyenletnek a következő általános formájához jutottunk:

$$r_{ij}^0 = \frac{a_{ij} p_i^0}{1 + b_i p_i^0}$$

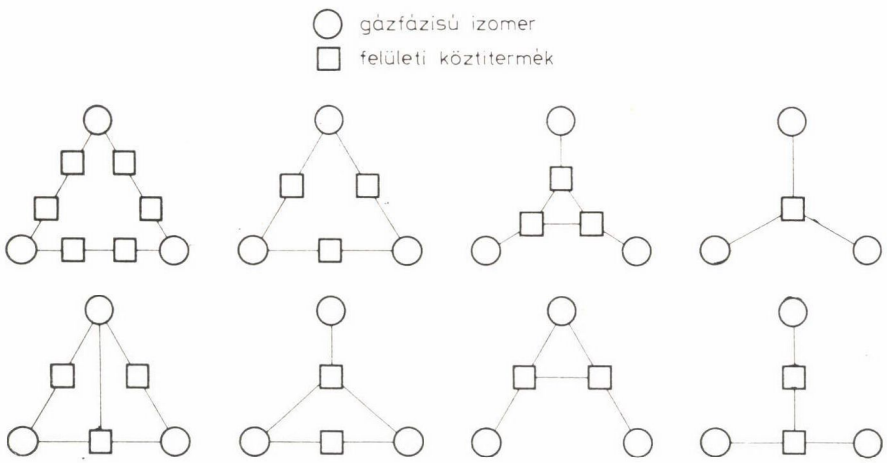
ahol r_{ij}^0 az $i \rightarrow j$ izomerizáció kezdeti sebessége, p_i^0 az i reaktáns nyomása, a_{ij} az illető átalakulásra, b_i az illető reaktánsra jellemző állandó. Ezek összetett állandók, melyek az egyes lépések k sebességi állandóját, valamint K egyensúlyi állandóját a következőképp foglalják magukban.

a_{ij} annyi tagból áll, ahány párhuzamosan képződő köztiterméken $(x, y, \ldots)$ át megy végbe az átalakulás:

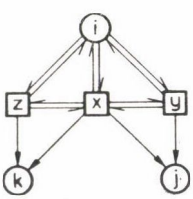
$$a_{ij} = (a_{ij})_x + (a_{ij})_y + \ldots ,$$

minden egyes tag két állandó szorzataként írható fel; így pl.

$$(a_{ij})_x = (k_{ij})_x (k_i)_x \ .$$



9. ábra. Az n-butén-izomerizáció alapvető átalakulási sémái [9] szerint



10. ábra. Az n-butén-izomerizáció során a kezdeti átalakulás általános sémája

A 10. ábrán látható séma szerint indexelve az egyes átalakulási lépések k, valamint K állandóját

$(k_{ji})_x = k_{xj}$, ha az átalakulás $i \rightarrow x \rightarrow j$ úton megy végbe,
$(k_{ij})_x = K_{xy} k_{yj}$ $i \rightarrow x \leftrightarrow y \rightarrow j$ út esetén, ill.
$(k_{ij})_x = k_{xy}$ $i \leftrightarrow x \rightarrow y \rightarrow j$ út esetén;
$(k_i)_x = k_{ix}(k_{xi} + k_{xj} + k_{xk} + K_{xy}k_{yj} + K_{xz}k_{zk})^{-1}$.

b_i annyi tagból áll, ahány köztitermék képződhet párhuzamosan az i reaktánsból:

$$b_i = (b_i)_x + (b_i)_y + (b_i)_z + \ldots$$

ahol pl.

$$(b_i)_x = k_{ix}(1 + K_{xy} + K_{xz})\,(k_{xi} + k_{xj} + k_{xk} + K_{xy}\,k_{yj} + K_{xz}k_{zk})^{-1}.$$

Az általános érvényűnek talált Langmuir-típusú sebességi egyenlet állandóinak így kapott kinetikai értelmezése lehetőséget ad arra, hogy az egyes lépésekre jellemző sebességi, ill. egyensúlyi állandók értelemszerű elhanyagolásával a legkülönbözőbb átalakulási sémák, többféle adszorbeált speciesz és ezek egymásba alakulása esetén megadhassuk az átalakulások kezdeti sebességét közvetlenül mérhető paraméterekkel, és ebből következtethetünk a mindenkori aktuális mechanizmusra [9, 10].

Mindennek szükségességét — elméleti kinetikai érdekességén túlmenően — az vetette föl, hogy a különböző zeolit-formákon (s egyéb katalizátorokon is) ennek a viszonylag egyszerű reakciónak eltérő a mechanizmusa, amit épp ezen átfogó kinetika segítségével sikerült kimutatnunk. Így megállapítottuk [10], hogy más a H-, az alkáliföldfém- és az átmenetifém-zeolitokon a reakció lejátszódása. Kitűnt ezekből, hogy a kétértékű fémionokat tartalmazó klinoptiloliton — az eddig ismert összes zeolittól eltérően — nem alakulnak ki Brönsted-savas hidroxilcsoportok ezeknek a kationoknak az erőterében a hidrátvíz savas disszociációja révén.

Ezt a felismerést megerősítették a metanol dimetiléterré történő dehidratálása során kapott eredményeink[11]: ez a Brönsted-savasságra érzékeny reakció a különbözőképpen előállított H-klinoptilolitokon 3 nagyságrenddel gyorsabban megy végbe mint a Ca- vagy Mg-formán.

Értékeltük ennek az irreverzibilis, elsőrendű bimolekuláris reakciónak a kinetikáját is, ami az irreverzibilis katalitikus átalakulások sebességi egyenleteinek szerkezetére nézve vezetett érdekes felismerésekhez [11]. Ebben a munkában nyújtott segítségért SCHAY GÉZA akadémikust külön köszönet illeti.

A kétértékű kationokat tartalmazó klinoptilolitnak azt a tulajdonságát, hogy ti. bennük nem generálódnak Brönsted-savas alakulatok, egy ugyancsak iparilag jelentős reakciónál, az acetilén acetaldehiddé történő hidratálásánál hasznosítottuk [12]: Brönsted-savas centrumok hiányában nem megy végbe

a termék acetaldehid aldolkondenzációja, ami az egyébként alkalmasnak talált Cd-zeolitkatalizátorok dezaktiválódásához vezet.

Mintegy 8 éve kezdtük el vizsgálni a zeolitokon végbemenő paraffinkrakkolás primer reakcióit. H-klinoptilolipton a propán két irányú bomlásáról, demetilezéséről és dehidrogénezéséről kitűnt [13], hogy az aktiválási energiák azonosak és függetlenek a katalizátor dehidroxileződésétől. A jelenséget azzal magyaráztuk, hogy e két átalakulás bevezető s egyben sebességmeghatározó lépése azonos. Azóta sikerült ezt a következtetést kinetikailag is ellentmondásmentesen értelmezni, ill. más, közvetlen kísérleti evidenciákkal alátámasztani, részleteiben pontosítani.

A kutatási eredményeknek ezzel a vázlatos áttekintésével csupán érzékeltetni akartam, hogy a petrolkémia területén milyen módon és milyen hozzáállással vizsgáltuk, ill. vizsgáljuk a katalitikus reakciókat. Ez a mód és ez a hozzállás az, amit mint tanítvány a több mint két évtizedes együttes munka során elsajátítani és munkatársaimnak továbbadni igyekeztem.

Mindnyájunk nevében és a magam nevében külön is őszinte köszönettel tartozom ezért SCHAY GÉZA akadémikusnak és 80. születésnapján kívánom, hogy még sok-sok éven át adjon friss iniciativákat, ügyeljen munkáinkra azzal a tudományos igényességgel, amit a változó kívánalmak kavalkádjában könnyen szem elől téveszthetünk.

IRODALOM

1. KALLÓ D.: n-Butén reakciók tanulmányozása aluminoszilikát katalizátoron, Kandidátusi értekezés, 1961
2. KALLÓ D., SCHAY G., NAGY F., HORÁNYI GY.: Magyar Kémiai Folyóirat **68.** 381 (1962)
3. KALLÓ D., SCHAY G.: Magyar Kémiai Folyóirat **68.** 389 (1962)
4. KALLÓ, D., SCHAY, G.: Acta Chim. (Budapest) **39.** 183 (1963)
5. KALLÓ, D., PRESZLER, I., SCHAY, G.: Acta Chim. (Budapest) **64.** 211 (1970)
6. PAPP, J., KALLÓ, D., SCHAY, G.: J. Catalysis **23.** 168 (1971)
7. PAPP, J., KALLÓ, D., SCHAY, G.: Vszeszojuznaja Konferencija po Mehanizmu Geterogenno-Kataliticseszkich Reakcij Moszkva, 1974. No. 46
8. KALLÓ, D., DETREKŐY, E., SCHAY, G.: Acta Chim. (Budapest) **72.** 189 (1972)
9. KALLÓ, D., DETREKŐY, E., SCHAY, G.: Acta Chim. (Budapest) **90.** 119 (1976)
10. KALLÓ, D., DETREKŐY, E., SCHAY, G.: Acta Chim. (Budapest) **94.** 19 (1977)
11. DETREKŐY, E., KALLÓ, D.: Acta Chim. (Budapest) **95.** 201 (1977)
12. DETREKŐY, E., ONYESTYÁK, GY., KALLÓ, D.: Reac. Kin. Cat. Letters (megjelenés alatt)
13. BEYER, H., KALLÓ, D., SCHAY, G.: Revue Roumaine de Chimie **16.** 1, 2. 29 (1972)

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981 p. 155–166

TRISZ (ETILÉN)-PLATINA ÉS HASONLÓ KOMPLEX VEGYÜLETEK: ÁLTALÁNOS REAGENSEK A DI- ÉS TRI-FÉM KARBÉNEK ÉS KARBINOK SZINTÉZISÉHEZ*

F. GORDON A. STONE

a Royal Society tagja
{*Department of Inorganic Chemistry, The University, Bristol*}

Érkezett 1980. január 5-én

Bevezetés

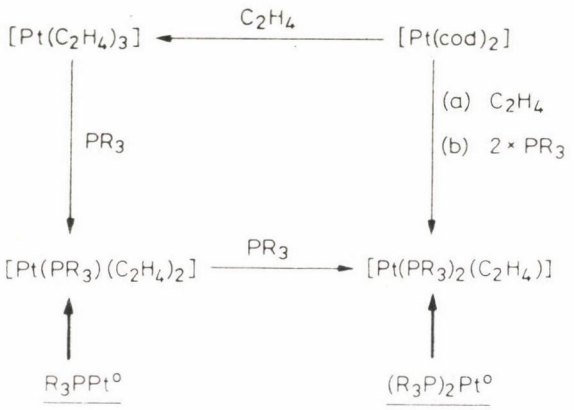
Míg a nikkel(0) (d^{10}) szerves kémiája főleg WILKE és munkatársai [1] kutatásainak eredményeként jól megalapozott, addig a platina(0) megfelelő szerves vegyületeinek tanulmányozására sokkal kevesebb figyelmet szenteltek. Ez az állapot azonban a $[Pt(cod)_2]$ (cod = ciklo-okta-1,5-dién) gyakorlatban is jól alkalmazható szintézisének [2] kidolgozásával és a $[Pt(C_2H_4)_3]$ előállításával folyamatos változáson megy át. A $[Pt(cod)_2]$ vegyületet egyébként MÜLLER és GÖSER [3] állította elő először. A bisz(ciklo-okta-1,5-dienil)-platina és a trisz(etilén)-platina vegyületekben a ligandumok nagyon labilisak, ily módon ez a két vegyület rendkívül reakcióképességet mutat számos szubsztrát molekula irányában. Jelen előadás keretében nem lenne célszerű az összes fejlődést részletezni, amely e területen végbement a trisz(etilén)-platina előállítása [4] óta, három speciális terület azonban mégis említést érdemel:

1. Reakció diénekkel és rokonvegyületekkel, amely platina tartalmú gyűrűrendszereket eredményez. Ezek a vegyületek fontos szerepet játszanak a diének katalitikus oligomerizációjában [5].
2. Az acetilén ligandum mono-, di- és triplatina komplexeinek szintézise. A di- és triplatina típusokban az acetilén molekulák vagy „négyoldalú" (tetrahedrane), vagy „ciklo-butén" (cyclo-butene) diplatina szerkezetűek [6].
3. Új, különböző magvú fém-karbonil fürtvegyületek képzése, amelyeket a platina a Fe, Os, Rh, Re és más fémekkel együttesen alkot [7].

Továbbá a $[Pt(cod)_2]$ és a $[Pt(C_2H_4)_3]$ tercierfoszfinokkal való reakciójában a trialkil-foszfint-platina vegyületeket eredményez. Ezek a vegyületek pl. a $[Pt(C_2H_4)_2(PMe_3)]$ vagy a $[Pt_2(\mu\text{-cod})(PEt_3)_4]$ [8,9] nagyon reakcióképesek

* A Magyar Tudományos Akadémián 1979. október 19-én elhangzott angol nyelvű előadás nyomán.

és számos területen hasznos prekurzornak bizonyultak (pl. hidroszililezési katalízis [10] és új platina-karborán vegyületek előállítása [11]). A $[Pt(C_2H_4)_2(PR_3)]$ és a $[Pt(C_2H_4)(PR_3)_2]$ molekulák különösen hasznos szintetikus reagensek, minthogy etilén elvesztéssel „$Pt(PR_3)$" és „$Pt(PR_3)_2$" képzésére hajlamosak (1. reakcióvázlat), amelyben a fém kevésbé „fedetlen" (naked), mint azokban a reakciókban, amelyekben a $[Pt(C_2H_4)_3]$ vesz részt, a molekula lényegében mint platina atom forrás funkcionál.



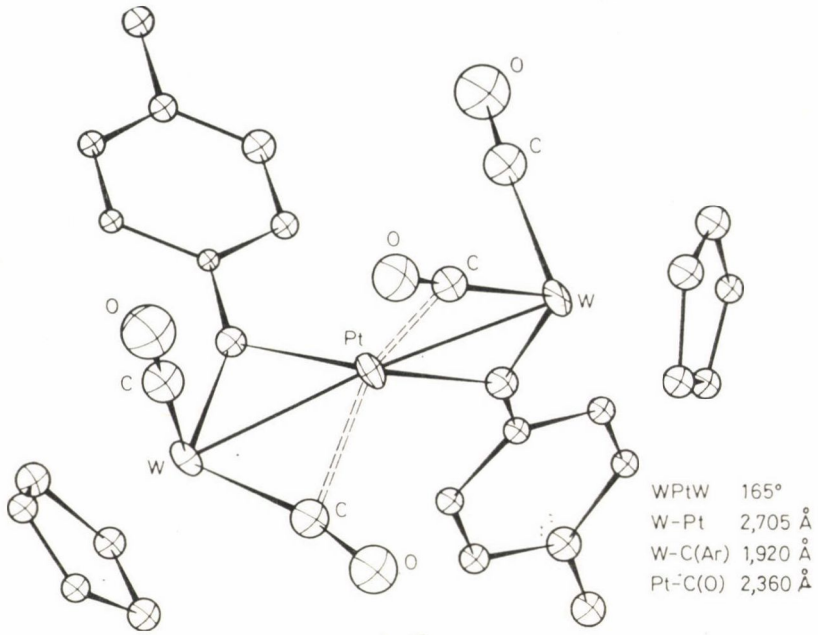
1. reakcióvázlat $Pt(PR_3)(C_2H_4)_2$ és $Pt(PR_3)_2(C_2H_4)$ szintézise

Újabban a „fedezetlen platina" kémiája kapcsolódik az átmeneti fém-karbén és -karbin komplexek körében tett korábbi felfedezésekhez. Az eddig kapott főbb eredményeket ismertetjük ebben az előadásban, mint a fémorganikus kémia egy új izgalmas területét. Annak érdekében, hogy ezt a munkát bemutassam, szükséges néhány fontos kutatásra hivatkoznom, amelyeket az egymagvú fém-karbén vagy -karbin vegyületek terén mások az utóbbi 15 évben végeztek el.

Fém-karbén és fém-karbin komplexek

A karbéneket, mint ligandumokat először az átmeneti fém kémiában ismerték fel [12]. E. O. Fischer és munkatársai [13] számos Cr, Mo, W, Mn és Re karbén karbonil komplexet állítottak elő, amelyek tipikus képviselője a $[W\{C(OMe)Ph\}(CO)_5]$ vegyület. A karbén szénatom ezekben a vegyületekben mint elektrofil centrum kapcsolódik a fématomhoz úgy, hogy a fém-szén kötés $M^{\delta-}—C^{\delta+}$ (M = Cr, W stb.) értelemben dipoláris. A Fischer iskola által előállított karbének szénatomjai hetero-atom helyettesítést is hordoznak (O, N vagy S). Ezt követően Casey és munkatársai [14], valamint Fischer csoportja [15] szintetizálta a $[W(CPh)(CO)_5]$ karbén komplexet, amelyben

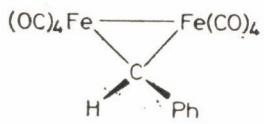
heteroatom nem kapcsolódik a fémhez kötött karbén szénatomhoz. Újabban a niobium és a tantál karbén és alkilidén vegyületei — köztük „metilén komplex" $[Ta(CH_2)(Me)(\eta\text{-}C_5H_5)_2]$ [16] — váltak ismertté. Ezekben a vegyületekben a fém-szén kötésnek szintén poláris karaktere van, azonban éppen az ellenkező értelemben ugyanis $M^{\delta+}—C^{\delta-}$ (M = Ta vagy Nb). Ennél fogva ezek a vegyületek közvetlen rokonságban vannak a P- és As-ilidekkel.



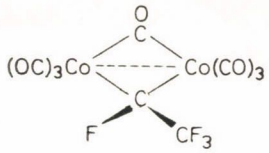
1. ábra

A fentiekben ismertetett összes fém-karbén vagy -alkilidén komplexben a kötés mindössze egy fémcentrumra szorítkozik. Ez igaz a FISCHER [13] és SCHROCK és munkatársai [16] által közölt $[W \equiv CPh(CO)_2(\eta\text{-}C_5H_5)]$ és $[Ta \equiv CPh(Cl)(PMe_3)_2(\eta—C_5Me_5)]$ típusú karbin- és alkilidén-fém vegyületekre is. FISCHER kezdeti munkáját követően számos átmeneti fémkomplexet írtak le, amelyekben a karbén, illetve a karbin ligandum két fémcentrumhoz kapcsolódik [17, 18]. Néhány példa ilyen két fém tartalmú komplexre, amelyekben azonos magvú fém-fém kötés van az (1—8) szerkezetű vegyületek esetében látható. Feltétlenül szükséges megjegyezni, hogy a fenti vegyületeket kutatómunkánk során előre nem várt eredményként készítettük el.

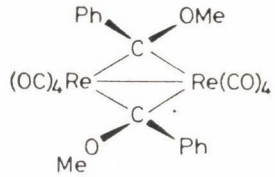
A fém-karbén komplexek jelentősége újabban még fokozódik, minthogy részt vesznek az olefin metatézis fontos folyamatában [27—29] és azt is feltételezik, hogy a Fischer—Tropsch-reakció fém-karbén komplex átmeneti terméken keresztül játszódik le [30]. Ez utóbbi esetben kétmagvú fémvegyület vesz részt a CO redukcióban.



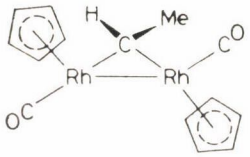
(1) [19]



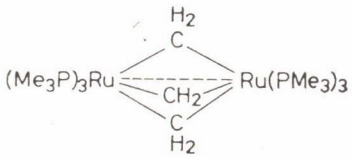
(2) [20]



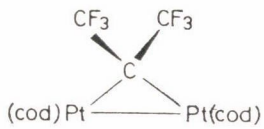
(3) [21]



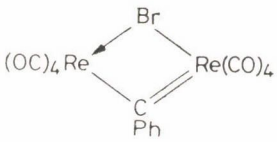
(4) [22]



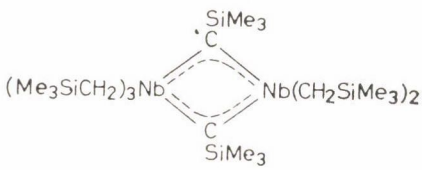
(5) [23]



(6) [24]



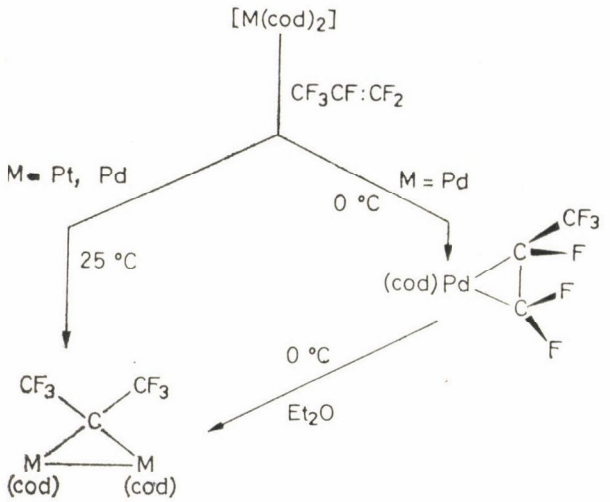
(7) [25]



(8) [26]

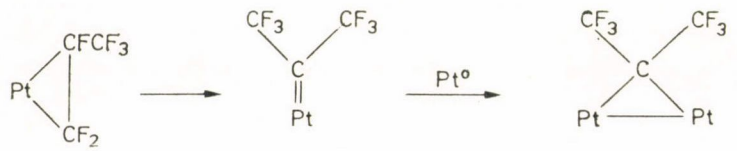
Platina(0) reakciója egymagvú fém-karbén komplexekkel

[Pt(cod)$_2$] és különböző fluor-olefinek reakcióját tanulmányozva $CF_3CF{=}CF_2$-ből nyertük a (6) komplexet hasonlóan a palládium analóg esetéhez [24) (2. reakcióvázlat). a [$Pt_2\{\mu$-$C(CF_3)_2\}(cod)_2$] (6) típusú vegyületek vé-

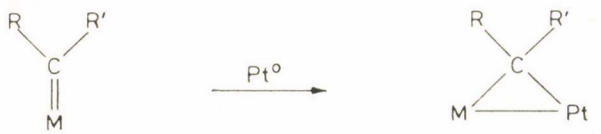


2. reakcióvázlat

letlen felfedezése a [Pt(cod)$_2$] és a $CF_3CF{=}CF_2$ reakciójában olyan mechanizmust tételez fel, amelyben a Pt^0 (pl. a [Pt(cod)] csoport) a fluor-olefin komplex átrendeződése folytán keletkezett ilid típusú átmeneti vegyületen támad:

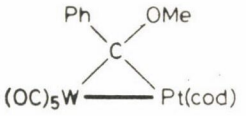


Amennyiben ez az elképzelés igaz, akkor valószínűnek látszik, hogy a „fedetlen" platina vegyületek is reagálhatnak az egymagvú fém-karbén molekulákkal, kétmagvú fémkomplexet képezve

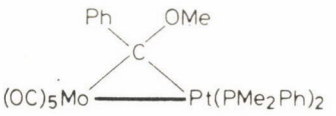


Az ilyen típusú reakciók termékei különböző magvú fém-fém kötéseket tartalmazhatnak és az így keletkező difém-ciklopropán szerkezetű vegyületek a kémia új ágát alkothatják.

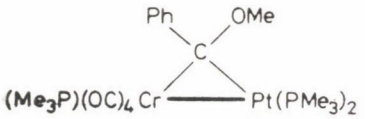
Ezeket az elveket a kísérletek bizonyították és a (9—12) vegyületeket úgy állítottuk elő, hogy Pt(0) komplexeket reagáltattunk különböző egymagvú fém-karbén komplex származékokkal [31]. Az alacsony oxidációs fokú nikkel vagy palládium vegyületek ugyanilyen módon adják a (13) és (14) komplexeket. Ezeknek a vegyületeknek a ^{13}CMR spektrumában a híd-kötésű



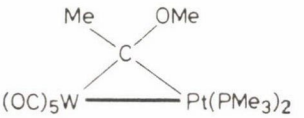
(9)



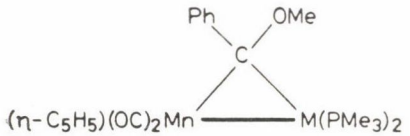
(10)



(11)

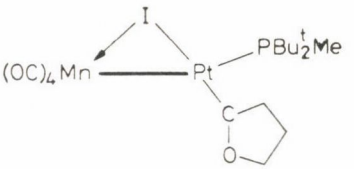


(12)

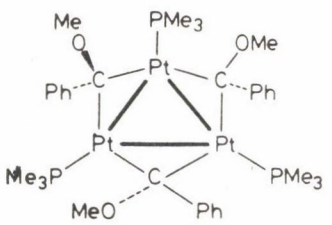


(13, M = Pd)

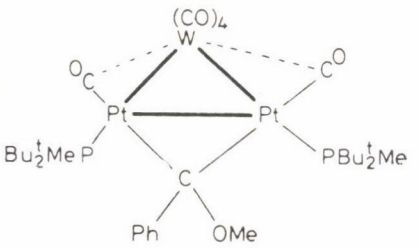
(14, M = Ni)



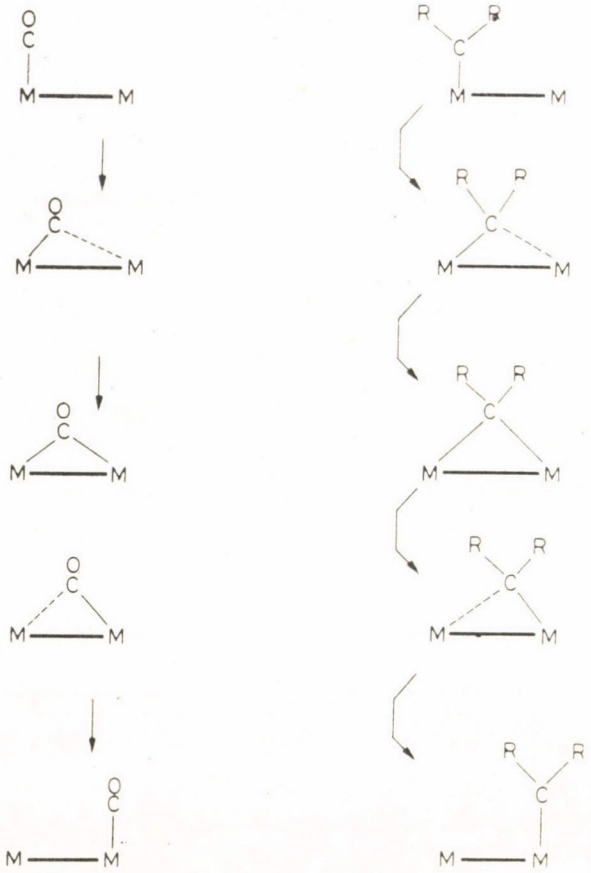
(15)



(16)



(17)



3. reakcióvázlat

szénatomok nagyon kis kémiai eltolódást mutatnak 190—300 ppm $SiMe_4$-hez képest. Így pl. (9) vegyületben ez az érték 197 ppm(J(PtC)1367, J(WC) 41 Hz).

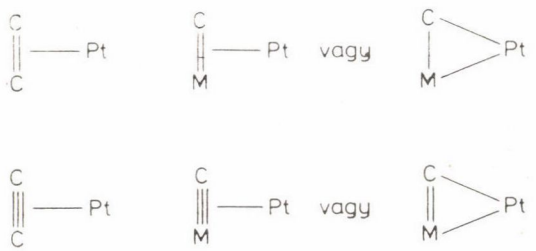
Bár a (9—14) képletekben a karbén csoportot mindkét fématomhoz szimmetrikus kötődésűnek tüntettük fel, nem volt bizonyított, hogy ez a feltételezés igaz. Röntgen diffrakciós vizsgálatok [32] valóban igazolták, hogy a $[(OC)_5\overline{W\{\mu-C(OMe)Ph\}}Pt(PMe_3)_2]$ vegyületben a kötött ligandum sokkal közelebb van a platinához, mint a wolframhoz. Így a W—μ-C távolság (2,48 Å) sokkal hosszabb, mint egy közönséges W—C σ-kötés (2,1—2,2 Å) [33]. Nagy valószínűség szerint az ilyen típusú vegyületekben a karbén ligandumnak a két fém szempontjából való elhelyezkedése függ magától a fémtől is, valamint egyéb jelenlevő ligandumtól is. A 3. reakcióvázlaton látható, hogy hasonló történik a karbonil- és az $R_2C=$ csoportokkal is [34]: a ligandumok az egyik fématomról a másikra vándorolnak, miközben félhíd-kötéssel és szimmetrikus hídkötés-

sel kötődnek. Megfelelő Röntgen diffrakciós vizsgálat fog dönteni a szerkezeti lehetőségek között. Érdemes megfontolni, hogy a $[Pt(C_2H_4)_2(PBu^t_2Me)]$ reakciója $[Mn(C{-}O{-}CH_2{-}CH_2{-}CH_2)(I)(CO)_4]$ vegyülettel (15) szerkezetet eredményezi, amelyben a gyűrűs karbén $=CO{-}CH_2{-}CH_2{-}CH_2$ az egyik fémről teljes mértékben a másikra vándorolt [35]. Esetenként az ilyen karbén vándorlások együtt járnak a fém-fém kötés felhasadásával, mint pl. amikor $[(OC)_5Cr\{\mu\text{-}C(OMe)Ph\}Pt(PMe_3)_2]$ vegyületet toluolban melegítjük és ez $[Cr(CO)_5PMe_3]$-t, valamint a (16) triplatina komplexet adja.

A karbéneknek az egyik fém centrumról a másikra való vándorlásának további példáját a Fischer-féle karbén reakciója $[Pt(C_2H_4)_2(PR_3)]$-val szolgáltatja. Így a $[W\{C(OMe)Ph\}(CO)_5]$ és a $[Pt(C_2H_4)_2(PBu^t_2Me)]$ reakciója (17) vegyületet eredményezi [36]. A $=CR_2$ és a CO ligandumok migrációja az egyik fémcentrumról a másikra utánzata kell legyen annak a folyamatnak, amely a Fischer—Tropsch [30] féle heterogén katalitikus rendszerben történik.

Platina(0) reakció egymagvú fém-karbin komplexekkel

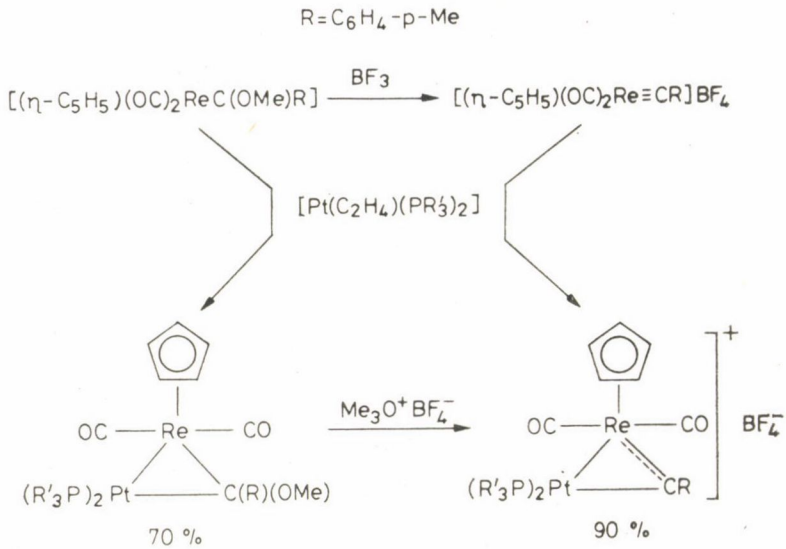
A Pt(0) és a fém-karbén csoportok kölcsönhatása formálisan levezethető a jólismert olefin C=C kötés és a fém közötti kötésből. Hasonlóan a platina készségesen kötődik az acetilénhez, ennél fogva a karbin komplex (M≡C csoport) és a Pt(0) közötti kölcsönhatás valójában a két fématomot tartalmazó ciklopropán gyűrűs szerkezettel szemléltethető:



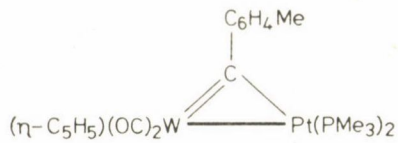
Összhangban ezzel az elmélettel úgy találtuk, hogy az egymagvú $[W(CC_6H_4\text{-}p\text{-}Me)(CO)_2(\eta\text{-}C_5H_5)]$ reagál a $[Pt(C_2H_4)(PMe_3)_2]$ vegyülettel és kvantitatív termeléssel adja az újszerű (18) vegyületet, amelynek szerkezetét Röntgen-diffrakcióval jellemezték [37]. A hídkötésű karbén szénatom rezonancia jele a ^{13}CMR spektrumban δ 338 ppm-nél mutatkozik (d, J(PC) 60, J(PtC) 733 Hz).

A fentebb hivatkozott két fématom tartalmú karbén komplex a kationos karbin típusú vegyületek prekurzoraként alkalmazható, ha $Me_3O^+BF^-$

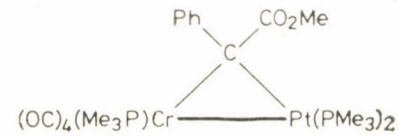
reagenst használunk az OMe csoportok eltávolításához (4. reakcióvázlat). A $[(\eta\text{-}C_5H_5)(OC)_2Mn(\mu\text{-}CC_6H_4Me)Pt(PMe_3)_2]\,[BF_4]$ szerkezetét Röntgen diffrakciós vizsgálattal állapították meg és a ^{13}CMR spektrumban μ-C ligandumra mutatkozó kémiai eltolódás δ 429 ppm volt (J(PC) 68, J(PtC) 757 Hz) [38].



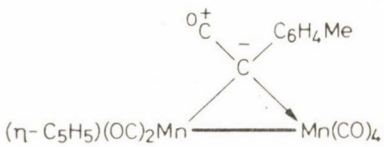
4. reakcióvázlat



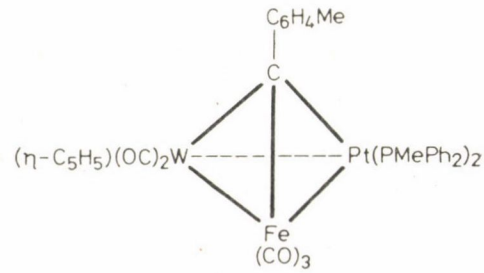
(18)



(19)



(20)



(21)

A kationos karbin komplexek érdekes reakciókat adnak nukleofilekkel. Így a $[(OC)_5\overline{Cr(\mu\text{-}CPh)Pt(PMe_3)_2}]^+$ kation reagál p-MeD_6H_4Li-vel és EtONa-val és a neutrális $[(OC)_5\overline{Cr\{\mu\text{-}CPh(R)\}Pt(PMe_3)}]$ (R = C_6H_4Me vagy OEt) vegyületeket adja, habár csak kis hozammal. A (11)-ből származó $[(Me_3P)(OC)_4\overline{Cr(\mu\text{-}CPh)Pt(PMe_3)_2}]^+$ kation egy rendkívül érdekes reakcióban MeO^- ionnal a (19) karbometoxi származékot adja. Nyilvánvalóan ebben a nem sztöchiometrikus reakcióban a CO ligandum támad a koordinálódott karbinon [39]. Ez a folyamat a katalízis lehetséges mechanizmusának valószínűsítésének szem- pontjából fontos csakúgy, mint az a még újabb észrevétel [40], hogy a d^8 típusú $[Mn(CO_2)]^-$ támad a $[Mn(CC_6H_4\text{-}p\text{-}Me)(CO)_2(\eta\text{-}C_5H_5)]$ kationon és a (20) vegyületet adja, amelyben a CO csoport a koordinálódott difém-karbin rendszerhez kapcsolódik ilid-típusú szerkezetet adva. A (20) vegyület alternatív módon úgy is megformulálható, hogy ketén hidat tartalmaz, amely esetben a kötődő ligandum szolgáltatná az egy elektront a két fématomnak. Ez valószínűbb, mint három elektron donoraként való részvétel az ilid-típusú vegyületben.

Három- és négymagvú fémvegyületek

A $[Pt(C_2H_4)_3]$ vegyület két mól $[W(CC_6H_4\text{-}p\text{-}Me)(CO)_2(\eta\text{-}C_5H_5)]$ komplexszel való reakciójában új típusú trifém vegyület $[Pt\{W(CC_6H_4Me)(CO)_2(\eta\text{-}C_5H_5)\}_2]$ nyerhető (1. ábra, lásd a 157. oldal) [41]. Ebben a molekulában a W—Pt—W kötés-rendszert a két karbincsoport köti össze, valamint két CO ligandum koordinálódik, hogy a platina elektronhiányát pótolja. E vegyület nikkel és palládium analógjait szintén előállították.

Másrészről a különböző magvú fém-fém kötésű vegyületek, mint pl. a (18) komplex és $[Fe_2(CO)_9]$ reakciójában (21) keletkezett, amelynek szerkezetét Röntgen diffrakcióval igazolták. Ebben a vegyületben a „karbin" vagy alkilidén ligandumok három különböző átmeneti fémhez kapcsolódnak. Ez az újszerű szerkezet rokonságot mutat a klasszikus $[Co_3(\mu\text{-}CR)(CO)_9]$ trikobalt vegyülettel, melyet évekkel ezelőtt acetilén és $[Co_2(CO)_8]$ reakciójával nyertek [42] és azóta a kémiáját széleskörűen tanulmányozták [43].

Következtetések

A csoportunk munkájáról a fentiekben adott rövid áttekintésből nyilvánvaló lehet, hogy e területen még sok izgalmas kutatás végezhető. A d^{10} típusú fémkomplexeknek és az egymagvú fém-karbén vagy -karbin vegyületeknek a reakciójával új szisztematikus szintézismódszert vezettünk be olyan vegy-

letek előállítására, amelyekben különböző fémek kötődnek egymáshoz. A hídkötésű karbén és karbin ligandumok kémiája bizonyára kiterjedt kémiai vizsgálatok tárgya lesz, mint ahogy arra már előzetes észrevételek utalnak. A fématomok által kiváltott katalízisek és szerves kémiai szintézisek vonatkozásában a figyelem már régebben az egymagvú fémkomplexekre irányult. Nagyon határozott jelek mutatnak arra, hogy a di- és tri-fém komplexek kutatása — ahogy arról a jelen előadásban is számot adtunk — jelentős eredményeket fog szolgáltatni a szerves kémiai szintézisek és a kismolekuláknak a katalízishez szükséges aktivált állapotú jelenléte területén.

Összefoglalás

A bisz(ciclo-okta-1,5-denil)-platina és a trisz(etilén)-platina készségesen reagál diénekkel és hasonló molekulákkal platina tartalmú szerves gyűrűrendszereket eredményezve. Az acetilén ligandum mono-, di- és tri-platina komplexeinek szintézisét, valamint a platinának a Fe, Os, Rh, Re és más fémekkel együttesen alkotott különböző magvú fém-karbonil fürtvegyületeinek képződését is tárgyaljuk.

Summary

Bis(cyclo-octa-1,5-diene)-platinum and tris(ethylene)-platinum are very reactive towards dienes and related molecules forming platinum contaning organic ring systems. The synthesis of mono-, di- and tri-platinum complexes with acetylene ligands as well as the formation of new heteronuclear metal carbonyl cluster compounds involving platinum in association with Fe, Os, Rh, Re and other metals are discussed.

IRODALOM

1. P. W. Jolly, G. Wilke: „The Organic Chemistry of Nickel", Volumes 1 and 2, Academic Press, N. Y. C. 1974 and 1975
2. J. L. Spencer: *Inorg. Synth.*, 1979, **19.** 213; M. Green, J. A. K. Howard, J. L. Spencer, F. G. A. Stone: *J. C. S. Dalton*, 1977, 271
3. J. Müller, P. Göser: *Angew. Chem. Internat. Edn.*, 1967, **6.** 364
4. M. Green, J. A. K. Howard, J. L. Spencer, F. G. A. Stone: *J. C. S. Chem. Comm.*, 1975, 3
5. G. K. Barker, M. Green, J. A. K. Howard, J. L. Spencer, F. G. A. Stone: *J. C. S. Dalton*, 1978, 1839; M. Green, J. A. K. Howard, P. Mitrprachachon, M. Pfeffer, J. L. Spencer, F. G. A. Stone, P. Woodward: *ibid.*, 1979, 306; M. Green, G. Scholes, F. G. A. Stone: *ibid.*, 1978, 309
6. N. M. Boag, M. Green, J. A. K. Howard, J. L. Spencer, R. F. D. Stansfield, F. G. A. Stone, M. D. O. Thomas, J. Vicente, P. Woodward: *J. C. S. Chem. Comm.*, 1977, 930; J. B. B. Heyns, F. G. A. Stone: *J. Organometallic Chem.*, 1978, **160.** 337
7. L. J. Farrugia, J. A. K. Howard, P. Mitrprachachon, J. L. Spencer, F. G. A. Stone, P. Woodward: *J. C. S. Chem. Comm.*, 1978, 260
8. N. C. Harrison, M. Murray, J. L. Spencer, F. G. A. Stone: *J. C. S. Dalton*, 1978, 1337
9. G. K. Barker, M. Green, F. G. A. Stone, A. K. Welch, T. P. Onak, G. Siwapanyoyos: *J. C. S. Dalton*, 1979, megjelenés alatt
10. M. Ciriano, M. Green, J. A. K. Howard, J. Proud, J. L. Spencer, F. G. A. Stone, C. A. Tsipis: *J. C. S. Dalton*, 1978, 801; M. Green, J. L. Spencer, F. G. A. Stone, C. A. Tsipis: *J. C. S. Dalton*, 1977, 1519, 1525
11. G. K. Barker, M. Green, T. P. Onak, F. G. A. Stone, C. B. Ungermann, A. J. Welch: *J. C. S. Chem. Comm.*, 1978, 169
12. E. O. Fischer, A. Maasböl: *Angew. Chem. Internat. Edn.*, 1964, **3.** 580

13. E. O. FISCHER: *Adv. Organometallic Chem.*, 1976, **14.** 1; E. O. FISCHER, U. SCHUBERT, H. FISCHER: *Pure and Appl. Chem.*, 1978, **50.** 857
14. C. P. CASEY, T. J. BURKHARDT, C. A. BUNNELL, J. C. CALABRESE: *J. Amer. Chem. Soc.*, 1977, **99.** 2127; C. P. CASEY, T. J. BURKHARDT: *ibid.*, 1973, **95.** 5833
15. E. O. FISCHER, W. HELD, F. R. KREISSL, A. FRANK, G. HUTTNER: *Chem. Ber.*, 1977, **110.** 656
16. R. R. SCHROCK: *Accnts. Chem. Res.*, 1979, **12.** 98
17. D. J. CARDIN, B. CETINKAYA, M. F. LAPPERT: *Chem. Revs.*, 1972, **72.** 575; D. J. CARDIN, B. CETINKAYA, M. J. DOYLE, M. F. LAPPERT: *Chem. Soc. Revs.*, 1973, **2.** 99
18. F. A. COTTON, C. M. LUKEHART: *Prog. Inorg. Chem.*, 1972, **16.** 243
19. E. O. FISCHER, V. KIENER: *J. Organometallic Chem* , 1970, **23.** 215
20. B. L. BOOTH, R. N. HASZELDINE, P. R. MITCHELL, J. J. COX: *J. Chem. Soc. (A)* 1969, 691
21. E. O. FISCHER, T. L. LINDNER, H. FISCHER, G. HUTTNER, P. FRIEDRICH, F. R. KREISSL: *Z. Naturforsch.*, 1977, **32ő.** 658
22. W. A. HERRMANN, C. KRÜGER, R. GODDARD, I. BERNAL: *J. Organometallic Chem.*, 1977, **140.** 73
23. R. A. ANDERSON, R. A. JONES, G. WILKINSON, M. B. HURSTHOUSE, K. M. A. MALIK *J. C. S. Chem. Comm.*, 1977, 865
24. M. GREEN, A. LAGUNA, J. L. SPENCER, F. G. A. STONE: *J. C. S. Dalton*, 1977, 1010
25. E. O. FISCHER, G. HUTTNER, T. L. LINDNER, A. FRANK, F. R. KREISSL: *Angew. Chem. Internat. Edn.*, 1976, **15.** 231
26. W. MOWAT, G. WILKINSON: *J. C. S. Dalton*, 1973, 1120
27. N. CALDERON, J. P. LAWRENCE, E. A. OFSTEAD: *Adv. Organometallic Chem.*, 1979, **17.** 449
28. T. J. KATZ: *Adv. Organometallic Chem.*, 1977, **16.** 283
29. R. H. GRUBBS: *Progr. Inorg. Chem.*, 1978, **24.** 1
30. C. MASTERS: *Adv. Organometallic Chem.*, 1979, **17.** 61
31. T. V. ASHWORTH, M. BERRY, J. A K. HOWARD, M. LAGUNA, F. G. A. STONE: *J. C. S. Chem. Comm.*, 1979, 43
32. T. V. ASHWORTH, J. A. K. HOWARD, M. LAGUNA, F. G. A. STONE: *J. C. S. Dalton*, megjelenés alatt
33. D. M. COLLINS, F. A. COTTON, S. KOCH, M. MILLAR, C. A. MURILLO: *J. Amer. Chem. Soc.* 1977, **99.** 1259; M. H. CHISHOLM, F. A. COTTON, M. W. EXTINE, B. R. STULTS: *Inorg. Chem.*, 1977, **16.** 603
34. F. A. COTTON: *Progr. Inorg. Chem.*, 1976, **21.** 1
35. M. BERRY, J. MARTIN-GIL, J. A. K. HOWARD, F. G. A. STONE: közlés alatt
36. T. V. ASHWORTH, M. BERRY, J. A. K. HOWARD, M. LAGUNA, F. G. A. STONE: *J. C. S. Chem. Comm.*, 1979, 45
37. T. V. ASHWORTH, J. A. K. HOWARD, F. G. A. STONE: *J. C. S. Chem. Comm.*, 1979, 42
38. J. C. JEFFERY, R. NAVARRO, F. G. A. STONE: közlés alatt
39. J. A. K, HOWARD, M. LAGUNA, F. G. A. STONE: közlés alatt
40. J. MARTIN-GIL, J. A. K. HOWARD, R. NAVARRO, F. G. A. STONE: közlés alatt
41. T. V. ASHWORTH, M. CHETCUTI, J. A. K. HOWARD, F. G. A. STONE, S. J. WISBEY, P. WOODWARD: közlés alatt
42. R. MARKBY, I. WENDER, R. A. FRIEDEL, F. A. COTTON, H. W. STERNBERG: *J. Amer. Chem. Soc.*, 1958, **80.** 6529
43. D. SEYFERTH: *Adv. Organometallic Chem.*, 1976, **14.** 97

Fordította:
BURSICS LÁSZLÓ

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981 p. 167—188

MOLEKULÁK SZERKEZETÉNEK ÉS KONFORMÁCIÓJÁNAK MEGHATÁROZÁSA KVANTUMKÉMIAI MÓDSZERREL*

PETER SCHARFENBERG

(Ints. für Wirkstofforschung der AdW der DDR
1136 Berlin-Friedrichsfelde A.-Kowalke Str. 4, DDR)

Érkezett 1980. április 22-én

Bevezetés

A kémiai kötésviszonyok nemcsak a molekulán belüli elektroneloszláson keresztül nyilvánulnak meg, hanem az atommagok eloszlásán, a molekulageometrián keresztül is. Egy adott molekulában, vagy molekulakomplexben levő összes atommag relatív helyzete határozza meg a molekulageometriát. Ennek leírásához egy N atomból álló molekula esetén legalább 3N—6 független ξ_i koordináta szükséges, amelyeket a $\{\xi_i\}_{i=1}^{3N-6}$ szimbólummal jelölünk. A molekulageometriának két összetevőjét szokás megkülönböztetni: a szerkezetet és a konformációt. A molekula szerkezetét ismertnek mondjuk, ha kiindulva a kémiai kötésviszonyokból, azaz a hagyományos szerkezeti képletből, csupán az egyes atomok legközelebbi szomszédjait figyelembe véve meg tudjuk adni a lokális geometriát. Ez gyakorlatilag a kötéshosszak, kötésszögek, és a síkból való kitérítések szögének megadását jelenti. A 3N—6 $\{\xi_i\}$ koordintának ezt a $\{\chi_i\}$ részét „kemény", illetve „félkemény" szabadsági fokoknak is nevezik annak megfelelően, hogy az adott molekulageometria környezetében az $\{E(\chi_i)\}$ potenciális energia változása közepesen, illetve erősen meredek ezen koordináták mentén. A közvetlenül nem kötött atomok közötti kölcsönhatások határozzák meg a molekula konformációját. Ennek leírásához a $\{\tau_i^2\}$ torziós szögek (amelyeket diéderes szögeknek is neveznek) megadása a fontos. A megfelelő szabadsági fokokat „lágy"-nak nevezik, utalva arra, hogy az $\{E(\tau_i)\}$ potenciálfelület viszonylag lapos, az $\{E(\chi_i)\}$ potenciálokhoz képest.

A konformáció és a szerkezet elhatárolásával kapcsolatos problémában felismerhetők azon általános definíciókkal kapcsolatos nehézségek, amelyekkel a kémiai kötéseket próbálják elhatárolni az egyéb kölcsönhatásokról. Tekintsük a következő, végeredménybe *ad hoc* jellegű osztályozási elvet: „a konformációs szabadsági fokok olyanok, amelyek mentén az intramolekuláris $E(\tau_i)$ potenciál

* Az anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottság 1980. ápr. 22-én tartott ülésen elhangzott előadás anyaga.

lényegesen laposabb, mint az egyéb szabadsági fokok mentén, amelyeket ezért, *per definitionem*, szerkezeti szabadsági fokoknak nevezünk". Ennek a definíciónak nagy előnye, hogy a konformáció problémáját nem szűkíti le a molekulacsoportok σ-kötések körüli rotációjára,* hanem (pl. piramidális konformáció esetén) vonatkozik a csoportok relatív térbeli elhelyezkedésére, a kötéshosszizomerizációra [1], a koordinációs viszonyokra (pl. trigonális bipiramisos → négyzetes piramisos), és a Van der Waals-komplexek [2] képződésére is.

Egy molekulaszerkezetről vagy konformációról akkor mondjuk, hogy stabil, ha az megfelel az energia-hiperfelület egy minimumának. A geometriaoptimalizációs eljárások sajnos általában nem szolgáltatnak egy *a priori* minimumot, hanem csupán egy stacionáris pontot, amelyre az jellemző, hogy a megfelelő koordinátaértékeknél minden első parciális derivált eltűnik, azaz

$$\frac{\partial E}{\partial \xi_i} = g_i = 0 \qquad (i = 1, 2, \ldots .) \tag{1}$$

Dolgozatomban először a stacionáris pontok osztályozásával kapcsolatos kérdésekkel foglalkozom, azaz a minimumok, maximumok és nyeregpontok megkülönböztetésével. Ezután következik a molekulák szerkezetének és/vagy konformációjának meghatározására kidolgozott számítógépi program ismertetése, végül néhány optimalizációs problémával kapcsolatos eredmény értelmezése zárja a dolgozatot.

A molekulageometriák stabilitására vonatkozó kritériumok

A molekulákban és molekulakomplexekben levő atomok relatív helyzetétől függően egy stabil vagy egy instabil szerkezet alakulhat ki. Az első parciális deriváltak eltűnése (lásd (1) egyenlet) szükséges, de nem elégséges feltétele a molekula stabilitásának. Ha az $E(\xi_1, \xi_2, \ldots)$ energia-hiperfelület görbülete egy adott stacionárius pontban (amelyre az (1) egyenlet teljesül) az energiatengely pozitív irányába nézve *konkáv*, akkor egy *energiaminimum*ról van szó, és a molekula a klasszikus mechanika szemszögéből stabil. Ha azonban a görbület ellentétes, azaz *konvex*, akkor *energiamaximum*ról van szó, és a molekula instabil. Instabilitás lép fel akkor is, ha egy stacionáris pontból kiindulva létezik egy olyan irány, amely mentén a felület konvex. Ilyen pont például egy nyeregpont. További lehetőség az instabilitásra, hogy a nullponti rezgési szint, amelyet a magok mozgásának kvantummechanikai leírásával kaphatunk meg, kívül esik az energiaminimum konkáv környezetén.

Az energia-hiperfelület stacionáris pontjainak numerikus meghatározása leggyakrabban egy minimalizációs eljárás alkalmazását jelenti. Az alkalmazott

* Aliciklusos vegyületek esetén ez a rotáció a gyűrű kényszermozgása miatt több kötés résztvételét eredményezi, s így a rotáció következtében az egész molekula deformálódik.

eljárások véges számú iterációs lépés után egy stacionáris pont közvetlen környezetébe jutnak. A számított stacionáris pont távolsága a valóságostól függ az alkalmazott eljárástól és a konvergenciakritériumtól, valamint a vizsgált hiperfelület tulajdonságaitól.

A minimalizációs eljárások lényegében a következő, egymást követő korrekciós lépések sorozatából állnak:

$$\xi_k \xrightarrow{\text{minimalizálás}} \xi_{k+1} \tag{2}$$

ahol ξ_k a koordináták oszlopvektora, k pedig az iterációs lépés sorszáma.

Az ilyen eljárások természetes konvergenciakritériuma

$$N(\Delta\xi) < \varepsilon \tag{3}$$

ahol N egy tetszőleges vektornormát jelöl [3], ε pedig egy előre megadott korlát, végül

$$\Delta\xi = \xi_{k+1} - \xi_k \tag{4}$$

Különösen ajánlott az ún. maximál norma használata

$$\max_j (|[\Delta\xi]_j|) < \varepsilon \tag{5}$$

Fletcher ajánlatának megfelelően [4] lehetséges azonban minden $[\Delta\xi]_j$ elemre egy külön ε_j korlátot megadni.

$$[\Delta\xi]_j < \varepsilon_j \quad (j = 1, 2, \ldots) \tag{6}$$

A kvantumkémiai geometriaoptimálási számítások során gyakran alkalmazott konvergenciakritérium [5, 6]

$$\max_j (|g_j|) \leq \varepsilon \tag{7}$$

kevésbé kielégítő, mivel ennek hatékonysága nagyon függ az energiafelület alakjától az energiaminimum környezetében. Az eljárást egy nyeregpont környezetében alkalmazva a [7] egyenlőtlenség alapján a minimalizálást befejezhetjük akkor is, ha $\Delta\xi$ elemei még nagyok, annak ellenére, hogy a g gradiensvektor g_1 elemei már nagyon kicsik.* A minimalizálás idő előtti befejezésének veszélye különösen nagyon lapos potenciálok esetén, vagy majdnem vízszintes vállak környezetében nagy.

* Lapos minimum esetén az energia hibája már elhanyagolható lehet, ugyanakkor a geometria hibája néha még jelentős.

1. táblázat

Az $AsCl_3$-molekula spd-CNDO/2 módszerrel számolt egyensúlyi geometriája

		A	B
As—Cl	[Å]	2,227	2,146
∢ ClAsCl	[°]	55,4	96,9
$E_{relatív}$	[kJ/mol]	0	662

Az $AsCl_3$-molekula geometriájának spd-CNDO/2 eljárással történő optimalizálása során, annak ellenére, hogy ugyanabból a geometriából indultunk ki a [6] kritérium alapján globális energiaminimumhoz jutottunk (A), míg a gyengébb [7] kritérium felhasználásával egy lokális optimumot (B) kaptunk [7]. Az 1. táblázatban megadott A geometria egyébként az spd-CNDO/2 módszer egy gyengeségét reprezentálja, de ennek az itt tárgyaltakkal kapcsolatban nincs jelentősége.

Egy további példaként szolgálhat az alábbi általánosított Rosenbrock-függvény [8]:

$$E = \sum_{l=1}^{n-1} 100\,(\xi_{k+1} - \xi_1^2) + (1 - \xi_1)^2 \tag{8}$$

VAO9A eljárással [4] történő minimalizálása.

A

$$\xi_0 = (-1{,}2,\ 2{,}0,\ -1{,}2,\ 2{,}0,\ \ldots)^T \tag{9}$$

kiindulási koordináták, valamint három különböző

$$\varepsilon = 10^{-5},\ 10^{-6},\ 10^{-7} \tag{10}$$

felhasználásával a gradiensvektornak a 2. táblázatban megadott maximálnormáit kapjuk [9].

2. táblázat

A VA09A minimalizáló eljárás Rosenbrock-függvénnyel végzett tesztelése. A {10} egyenletben megadott számhármas változása a konvergencia függvényében

n	Iterációk száma	$\max_j (\lvert g_i \rvert)$
2	41	10^{-7}
4	42	10^{-8}
6	47, 49	10^{-4}, 10^{-6}
8	51, 54	10^{-4}, 10^{-6}
10	48, 50, 54	10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-7}
12	41, 58, 62	10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-6}
14	63, 65, 71	10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-6}
16	63, 64, 67	10^{-4}, 10^{-4}, 10^{-6}
18	68, 70, 73	10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}
20	68, 71, 71	10^{-4}, 10^{-6}, 10^{-6}
22	72, 75, 77	10^{-5}, 10^{-5}, 10^{-6}

A különféle minimalizáló eljárásokkal kapott molekulageometriák instabilitásának kérdése, azaz az energia-hiperfelület egy adott φ-koordináta irányába való konvexitásának lehetősége a $\partial^2 E/\partial\varphi^2$ második parciális differenciálhányadosok vizsgálata alapján dönthető el:

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \varphi_2} < 0 \qquad \text{konvex görbület,} \tag{11}$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \varphi^2} > 0 \qquad \text{konkáv görbület.} \tag{12}$$

Az energia második parciális deriváltjainak mátrixát Hess-féle mátrixnak nevezzük, amely egyensúlyi helyzetben megegyezik az erőállandómátrixszal, amelynek elemei

$$[\mathbf{G}]_{ij} = \frac{\partial^2 E}{\partial \xi_i \partial \xi_j} \tag{13}$$

Ha ennek a mátrixnak valamely diagonális eleme negatív, az adott molekulageometria nem tartozhat az energia-hiperfelület egy minimumához. A számított geometria instabilitásának felismerése ebben az esetben triviális feladat. A ciklikus minimalizálások esetében, amikor a többdimenziós problémát ciklikusan feldolgozandó egydimenziós feladatok sorozatára vezetjük vissza (azaz a $\{\xi_i\}_{i=1}^{n}$ koordinátákat egymástól függetlenül variáljuk), a $[\mathbf{G}]_{ii}$ diagonális elemek minden esetben pozitívak. Ennek az eljárásnak kvantumkémiai problémákra történő alkalmazásait a [10—13] irodalomban mutatjuk be.

Minden ciklikus minimalizációval kapott stacionárius pont kielégíti a következő feltételeket:

$$\begin{aligned} &\min_{\xi_1} [E(\xi_1, \xi_2 = \text{áll.}, \xi_3 = \text{áll.}, \ldots \xi_n = \text{áll.})] \\ &\quad\vdots \\ &\min_{\xi_n} [E(\xi_1 = \text{áll.}, \xi_2 = \text{áll.}, \xi_3 = \text{áll.}, \ldots \xi_n)] \end{aligned} \tag{14}$$

Minden egydimenziós $E(\xi_j)$ esetben egy minimum lép fel, ami azt jelenti, hogy minden ξ_j-re teljesül a

$$\frac{\partial^2 E}{\partial \xi_j^2} > 0 \tag{15}$$

feltétel. Ezzel azonban az nincs kizárva, hogy több $\{\xi_i\}$ szabadsági fok csatolása egy olyan φ koordinátához vezet, amelyre a (11) egyenlőtlenség áll fenn. A $\{\xi_i\}$ koordinátákat egymástól funkcionálisan független $\{\varphi i\}$ koordinátákkal helyettesítve a **G** mátrix helyett a Q mátrixot kapjuk, amelynek elemei

$$[\mathbf{Q}_{ij}] = \frac{\partial^2 E}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} \tag{16}$$

A **Q** meghatározása során a stacionáris pontok környezetében a $\{g_i\}$ elemeket tartalmazó tagok elhanyagolhatók, mivel a stacionáris pontokban ezek eltűnnek (lásd (1) egyenletet). Így ebben a speciális esetben:

$$\mathbf{Q} = \mathbf{J}^T \mathbf{G} \mathbf{J}, \tag{17}$$

ahol

$$[\mathbf{J}]_{ij} = \frac{\partial \xi_i}{\partial \varphi_i} \tag{18}$$

azaz **G**-t egy kongurencia transzformációnak vetjük alá. A kvadratikus alakokra vonatkozó tehetetlenségi törvény szerint [14] egy mátrix rangja (r) és szignatúrája (s) egy lineáris koordinátatranszformációnak megfelelő kongurenciatranszformáció hatására változatlan marad. Ezt felhasználva osztályozhatjuk a stacionáris pontokat. Ha a G-mátrixot valamilyen módon diagonális alakra hozzuk, ahol a diagonális elemek nem mindenkor G sajátértékei, hiszen a kongurenciatranszformáció nem feltétlenül hasonlósági transzformáció, akkor

$\frac{1}{2}(r + s)$ pozitív,

$\frac{1}{2}(r - s)$ negatív, és

$n - r$ zérus

diagonális elemet kapunk. Ez azt jelenti, hogy pontosan $\frac{1}{2}(r+s)$ funkcionálisan független koordináta létezik, amelyek kielégítik a (12) egyenletet, míg nem több mint $\frac{1}{2}(r - s)$ koordinátára érvényes a (11) egyenlet. Más szavakkal a következő hozzárendelés lehetséges: ha $r = n$, akkor

maximum esetén $s = -n$,
minimum esetén $s = n$,
k-ad rendű nyeregpont esetén $s = n - k\ (k + 1)$.

Az r és s meghatározható oly módon, hogy kiszámítjuk a **G**-mátrix sajátértékeit, majd — amint az a kvantumkémiában általánosan elterjedt — megszámláljuk a pozitív, negatív és zérus sajátértékeket. Az eljárás nagy hátránya, hogy csupán egy geometria kizárásához is szükséges a teljes **G**-mátrix ismerete. (A **G**-mátrix teljes, olyan értelemben, hogy a minimalizálás során felhasznált összes koordinátát figyelembe kell venni. Ez nem mindig azonos az N-atomos molekula 3N—6 szabadsági fokával, lehet például ennél több is, például a 3N Descartes-koordináta).

A sajátértékek ismerete ugyan hasznos, de nem feltétlenül szükséges egy mátrix rangjának és szignatúrájának a meghatározásához. Numerikusan sokkal kényelmesebb a módosított Cholesky-faktorizáció [3] felhasználása:

$$\mathbf{G} = \mathbf{L}^T \mathbf{g}_{\text{diag}} \mathbf{L}, \tag{19}$$

ahol **L** egy háromszögmátrix, $\mathbf{g}_{\text{diag}}$ pedig egy diagonális mátrix. Ennek az új eljárásnak van néhány praktikus előnye [15]. A **G** mátrix számítása általában költségesebb mint maga az $E(\xi_1, \xi_2, \ldots)$ minimalizálása, mivel ekkor az erőállandók számításához az energia első parciális deriváltjait különösen időigényes numerikus módszerrel kell differenciálni [16]. A sajátértékszámítástól eltérően, amely a teljes **G**-mátrixból indul ki, a (19) összefüggés alapján a numerikus differenciálással kapott **G**-mátrix sorokat (ill. oszlopokat) rögtön faktorizálni lehet. Ha csupán a stabil molekulaformák érdekesek, akkor az első

$$[\mathbf{g}_{\text{diag}}]_i > 0 \tag{20}$$

fellépése esetén le lehet mondani a *g*-mátrix további sorainak (ill. oszlopainak) a számolásáról, és az adott molekulageometriát instabilnak kell tekinteni. Hasonlóképpen járhatunk el két olyan $[\mathbf{g}_{\text{diag}}]_i$ elem esetén, amelyre a (20) feltétel teljesül, ha egy *egyszerű* nyeregpontot keresünk.

Elméletileg nem megalapozott általános tapasztalat, hogy kémiai intiúció mindig szükséges kiindulópont olyan koordináták természetének megállapításához, amelyek éppen egy adott geometria nemkívánt tulajdonságaival kapcsolatosak. Ezen koordináták felhasználásával hozzuk a **G** mátrixot diagonális, vagy legalább kvázidiagonális alakra. Az előzőekben tárgyalt „lágy"-koordináták a molekula egyéb koordinátáival nem csatolódnak. Ez a szétcsatolás egyenértékű a blokk-diagonalizálással. Egy izolált molekula esetében először a konformációs szabadsági fokokkal kapcsolatos erőállandókat kell analizálni, azaz a torziós erőállandókat. Ezek közül is legelőször azokat, amelyek egy adott szimmetria torzulásáért felelősek. Egy p db. egyszerű molekulát tartalmazó van der Waals-komplex esetén először a $6(p-1)$ intermolekuláris koordinátához tartozó erőállandót kell megvizsgálni.

Az eddig elmondott elméleti megállapításokat sok eredményünk alátámasztja [17]. Ezek ismertetése előtt azonban meg kell adni azon koordináták pontos definícióját, amelyek bázisán a **G**-mátrix blokkdiagonális alakra hozható.

A konformációk és molekulaszerkezetek számìtására szolgáló eljárás

Az egy adott magelrendeződéshez tartozó molekula-energia kiszámítására szolgáló CNDO/INDO eljárásra alapozva [18] egy geometriaoptimáló eljárást dolgoztunk ki [13], és az eljárást megvalósító számítógépi programot írtunk [19]. Az eljárás főbb jellemzői a következők:

(i) a molekula a H-től az I-ig terjedően minden főcsoportelemet tartalmazhat, a vegyértékbázis lehet sp vagy spd,
(ii) görbementi belső koordinátákat alkalmaz,
(iii) az energia előbbi koordináták szerinti első parciális deriváltját analitikusan állítja elő,
(iv) nagyon effektív kvázi-Newton típusú minimalizálási eljárást alkalmaz.

Mivel az (i) és (iii) pontokat már máshol ismertettük [7, 9, 20, 21], ezért itt csak az (ii) és (iv) pontokat tárgyaljuk részletesebben.

Görbementi belső koordináták

Az előbbiekben használt csoportkoordináta elnevezés arra utal, hogy ezen koordináták segítségével egy atomcsoport helyzetváltozását írjuk le. A „görbementi" jelző a szögek kezelését jellemzi. (Meg kell jegyezni, hogy a rezgési problémák elméleti leírása is lehetséges a görbementi belső koordináták felhasználásával [22, 23].)

Egy molekula minden belső mozgása relatív mozgás. Technikai okokból (a definíciók megkönnyítése érdekében) a geometriaoptimálással kapcsolatban célszerű minden ilyen relatív mozgást egy rögzített pontra, illetve egy rögzített atomcsoportra vonatkoztatni. Ehhez a molekula minden koordinátáját két részre kell osztani: egy, a rögzített atomcsoportokat tartalmazó $\{F\}$ és az elmozdítható atomokat tartalmazó $\{V\}$ részre. Ezen az alapon meg lehet különböztetni a $\{V\}$ atomok transzlációját és rotációját. Ekkor a koordináták abszolút értékeként a molekula meghatározott belső koordinátáinak értékeit vehetjük. Így a

$$\{B_1, B_2, B_3, \ldots\} = \{V\} \tag{21}$$

atomcsoport transzlációját az A—B kötéshossz megváltozásaként írhatjuk le, ahol $A \in \{F\}$. A viszonyokat az 1. ábrán szemléltetjük. Ha az A atomot egy tetszőleges helyen levő segédponttal helyettesítjük, a transzláció tetszőleges térirányba történhet.

$$\{C_1, C_2, C_3, \ldots\} = \{V\} \tag{22}$$

atomcsoport rotációja leírható az A, B, C_1 kötésszög megváltozásaként, ahol $A, B \in \{F\}$. A forgási tengelyt a következő vektoriális szorzat adja:

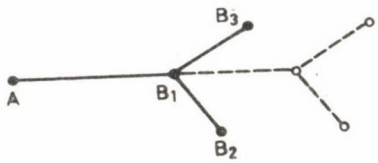
$$\overrightarrow{AB} \times \overrightarrow{BC_1} \tag{23}$$

A viszonyokat a 2. ábra szemlélteti.

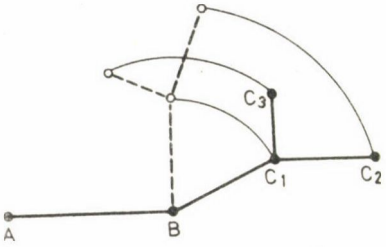
Más típusú rotációs a $\sphericalangle$A, B, C, D_1 torziós vagy diéderes szög megváltozása ahol

$$\{D_1, D_2, D_3, \ldots\} = \{V\}, \tag{24}$$

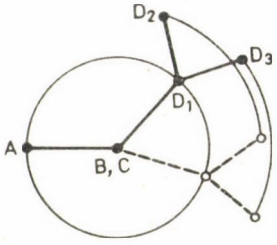
és $A, B, C \in \{F\}$.



1. ábra. A $\{B_1, B_2, B_3, \ldots\}$ atomcsoport transzlációja leírható az $A-B_1$ kötéstávolság megváltozásaként, ha a $\{B_1, B_2, B_3, \ldots\}$ csoporthoz tartozó összes belső szabadsági fokokat változatlannak tekintjük



2. ábra. A $\{C_1, C_2, C_3, \ldots\}$ atomcsoport rotációja az $AB \times BC_1$ tengely körül. A forgatást az $\sphericalangle ABC_1$ szög megváltozásával írjuk le, a $\{C_1, C_2, C_3, \ldots\}$ atomcsoport összes belső szabadsági fokához állandó értéket rendelünk



3. ábra. A $\{D_1, D_2, D_3, \ldots\}$ atomcsoport B—C tengely körüli rotációját leíró $\measuredangle$ ABCD diéderes szög Newman-projekciója. A $\{D_1, D_2, D_3, \ldots\}$ atomcsoport összes belső szabadsági fokát állandóként kezeljük

A forgási tengely itt a B—C kötéssel azonos [3. ábra]. Az

$$\sphericalangle A, B, C = \pi \tag{25}$$

kötésszög forgástengelyének definíciója nem egyértelmű (az A, B és C atom egy egyenesen helyezkedik el). Ez egy segédpont alkalmazásával oldható fel. Ezért a tetszőleges térirányba mutató tengelyek körüli forgások definíciója során megengedett az A és B, illetve a B és C atomok segédponttal való helyettesítése.

Az összes itt leírt csoportkoordináta nagy hátránya a Descartes-koordinátákkal szemben, hogy a felhasználónak minden molekula esetében egyedi definíciókat kell adnia. Ennek során, ha komplett geometriaoptimalizálást

3. táblázat

A planáris nitro-etilén-molekula szerkezetének optimálása során felhasznált teljes belső csoportkoordináta rendszer.
(Az atomok számozása megegyezik a 4. ábrán megadotakkal)

Referencia koordináta	Az elmozdítható atomcsoport
R(1,2)	2
R(1,3)	3,4,5
R(3,4)	4
R(3,5)	5
∢2,1,3	3,4,5
∢1,3,4	4
∢1,3,5	5
R(1,6)	6,7,8
R(6,8)	8
R(6,7)	7
∢2,1,6	6,7,8
∢1,6,8	8
∢1,6,7	7

akarunk végezni, nemcsak a koordinátarendszer teljességére kell ügyelni, hanem a következőkben még ismertetésre kerülő megszorítás nélküli minimalizálás megköveteli az egyes belső koordináták egymástól való teljes függetlenségét is. Az elmondottakat a nitroetilén-molekula egy teljes csoportkoordináta rendszerével szemléltetjük, amelyeket a 3. táblázatban és a 4. ábrán adunk meg.

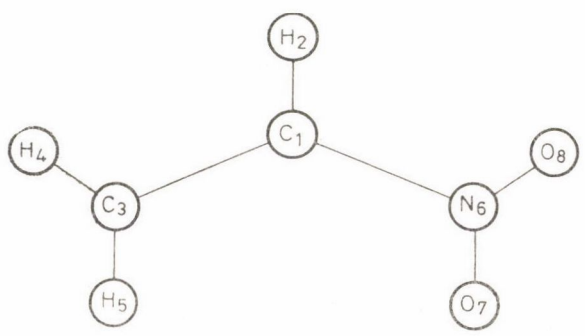
További nehézség lép fel, ha a nagy kötésszög változások során, a koordináták formális függetlensége ellenére is, túllépjük a $n\pi$ értéket, ahol n egy egész szám. Például a

$$\sphericalangle \mathrm{A, B, C} = \theta \rightarrow \theta' = -\theta \tag{26}$$

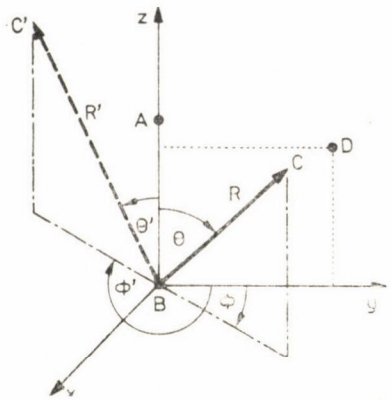
kötésszögváltozás járhat a következő diéderes szögmegváltozással is:

$$\gtrdot \mathrm{D, A, B, C} = \Phi \rightarrow \Phi' = \Phi + \pi \tag{27}$$

a viszonyokat az 5. ábra szemlélteti.



4. ábra. A nitro-etilén-molekulában levő atomok sorszámozása belső csoportkoordináták definíciójához (lásd még a 3. táblázatot)



5. ábra. Az R, Θ, Φ gömbi koordináták és az r(B—C), $\sphericalangle$ABC, $\sphericalangle$DABC belső koordináták A $\Theta \rightarrow -\Theta = \Theta'$ átmenet közben C → C' elmozdulás valósul meg, miközben $\Phi = \Phi + \pi$

A csoportkoordináták alkalmazásának említett hátrányait az előnyök legtöbbször több mint kiegyenlítik. Az előnyök közül a legfontosabbak:

(i) megnyílik a lehetőség arra, hogy egyes belső koordinátákat szükség szerint elhanyagoljunk, illetve rögzítsünk, pl.
   — a molekulaváz geometriájának optimalizálásakor mereven kötött H-atomokkal dolgozhatunk, vagy fordítva: a hidrogénatomok helyzetét külön optimálhatjuk,
   — energiaminimumban haladó reakcióutak és energia-hiperfelületek számításakor,
   — komformációanalízis, illetve optimalizáció során, amikor csak a torziós szabadsági fokokat kell számításba vennünk [17],

(ii) olyan koordináták választása lehetséges, amelyek biztosítják a szimmetria megtartását, vagy éppen a kívánt mértékű torzulását a *kvázi*-Newton-eljárás során, pl. olyan reakcióutak számolása, amelyeknél a kiindulási és az átmeneti állapothoz tartozó szimmetriák különbözőek, például a formaldehid—hidroxikarbén átrendeződés [24] és a Berry-féle pszeudorotáció [25] során,

(iii) legyőzhetők az olyan nehézségek, amelyek más szerzők tapasztalatai szerint a Descartes-koordináták alkalmazásával kapcsolatban fellépnek, ha az atomcsoportok rotációjához tartozó nagyon lapos intramolekuláris potenciálokkal kell számolni [26]. A Descartes-koordinátákkal ellentétben lehetséges csak azon szabadsági fokoknak a definiálása, amelyek a kívánt optimalizáláshoz szükségesek. Példaképp a 4. táblázatban megadott koordinátákat említjük, amelyeket az etilbenzol konformációjának meghatározása során használtunk.

(iv) egy számolt szerkezet, vagy konformáció stabilitásának a vizsgálatát az erőállandómátrix blokkdiagonalizálása nagyon megkönnyíti. A görbe-

menti belső csoportkoordináták alkalmazása a blokkdiagonális mátrixalakot jó közelítésben biztosítják.

Az utóbbi (iv) pontban mondottakat, amit már az előzőekben is tárgyaltunk, néhány példával támasztjuk alá.

4. táblázat

Az etilbenzol-molekula konformációjának optimálása.
A $\Delta\tau_1$ és $\Delta\tau_2$ szögkülönbségek a molekula koplanáris konformációjától való eltérést jellemzik, a τ_1 a fenil-, a τ_2 a metilcsoport rotációját írja le {9. ábra}

Iterációs lépés	$\Delta\tau_1$ [°]	$\Delta\tau_2$ [°]	Relatív energia [kJ/mól]
0	2,	0,	12,946
1	1,848	0,676	12,920
2	1,813	0,915	12,920
3	1,823	0,977	12,920
4	1,859	1,062	12,916
5	1,942	1,182	12,916
6	3,782	3,312	12,904
7	5,323	4,716	12,904
8	6,483	3,708	12,761
9	7,291	3,095	12,736
10	7,480	3,044	12,732
11	10,647	2,826	12,653
12*	90,754	5,854	0,239

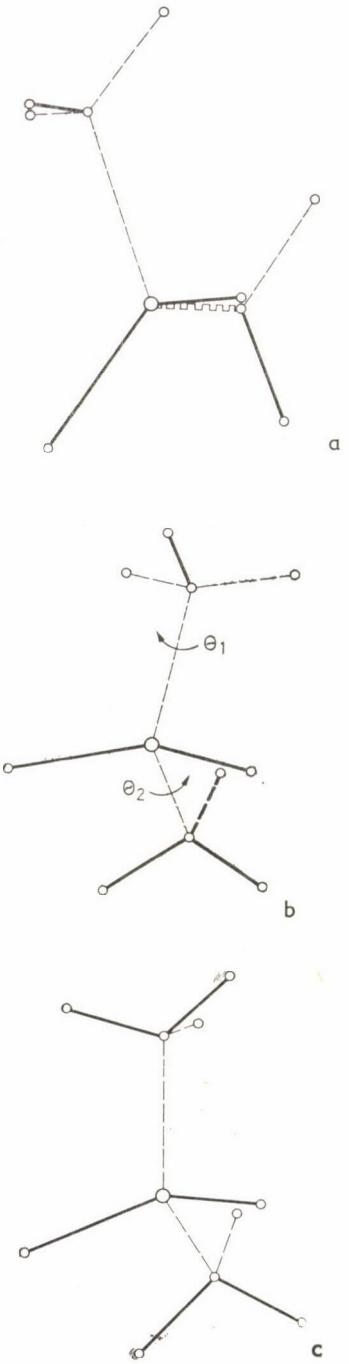
* Ebben az iterációs lépésben az energiát 5-ször számítottuk ki.

5. táblázat

A dimetil-szulfon-molekula három {a, b, c} szimmetrikus konformációjának spd-CNDO/2 módszerrel optimált geometriája.
A felső {1, 2} index a θ_1, ill. θ_2 szögeket jelöli {6. ábra}; a kötési-, diéderes- és síkból való kitérítéske szögei fokokban {°}, a kötéshosszak pedig 100 pm egységekben vannak megadva

	a	b	c
S—O	1,5495	1,5494	1,5496
<OSO	117,894	117,788	117,757
S—C^1	1,7540	1,7627	1,7638
S—C^2		1,7542	
<CSC	103,714	104,019	106,089
◁OSOC^1		52,637	
◁OSOC^2		51,382	
C—H_{cis}		1,1145	1,1136
<SCH_{cis}		109,201	110,766
C—H^2_{skew}		1,1152	1,1155
<SCH_{skew}		108,603	108,011
<CSCH^2_{skew}		120,170	120,594
C—H_{trans}	1,1170	1,1170	
<SCH_{trans}	105,360	105,419	
C—H^1_{skew}	1,1149	1,1150	
<SCH^1_{skew}	109,174	109,176	
⩛CSCH^1_{skew}	61,042	61,034	

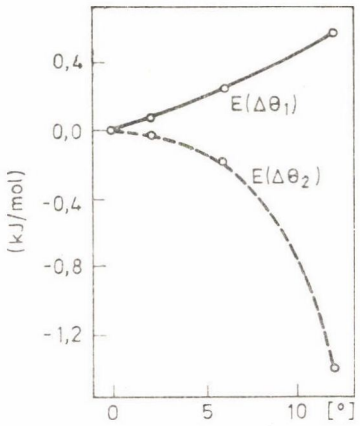
⩛: diéderes szög (torziós szög); ◁: síkból való kitérítés szöge.



6. ábra. A dimetil-szulfon-molekula. Θ_1 és Θ_2 jelöli a torzióss zögeket, amelyeknek a megváltozása az a, b és c konformációk kialakulásához vezet

A dimetil-szulfon-molekulának három szimmetrikus elemi szerkezete írható fel, amelyeket a 6. ábrán adunk meg. Az spd-CNDO/2 eljárással végzett optimalizáció az 5. táblázatban megadott egyensúlyi geometriát szolgáltatta [9]. Kísérleti eredmények is bizonyítják [27], hogy csak az (a) szerkezet stabil. Az irodalomból ismeretes egy CNDO/2 szintű konformációanalízis [28], amelynek szerzői egy félmerev, standard geometriai adatok felhasználó molekulamodellre végzett számítások alapján ugyanerre a megállapításra jutottak, azaz a (b) és (c) szerkezeteket instabilnak minősítik. Az (a) teljesen optimált szerkezete az $E(\theta)$ potenciálfelület egy minimumához tartozik. (A torziós szög definíciója a 6. ábrán szerepel.) Míg azonban a (c) optimált formája biztosan instabil, a (b) optimált szerkezete pontosabb vizsgálatot igényel. Más molekulák hasonló konformációanalíziséből (pl. cisz-buntén-1 [29]) ismeretes, hogy ez a szerkezet stabil is lehet. $\Delta\theta_1$ és $\Delta\theta_2$-vel jelölve a (b) optimumától való szögeltéréseket, a 7. ábrán látható potenciálgörbéket kapjuk. Az egyéb belső koordináták értékei megegyeznek az 5. táblázatban megadott értékekkel. Minthogy az $E(\Delta Q_2)$ görbének $\Delta\theta_2 = 0$-nál minimuma van, ezért a (b) forma optimált geometria esetén is instabil.

Az öt ligandumot tartalmazó koordinációs vegyületek két alapvető konformációban fordulhatnak elő: trigonális biparimisos és négyzetes piramisos alakban. A 6. táblázat tartalmazza a CNDO/2 számításokkal hat különböző molekulára kapott eredményeket. Csupán az energetikai viszonyok alapján nem dönthető el az egyes molekulaformák stabilitása. A 8. ábrán szerepelnek az egyes belső koordináták, amelyekre az erőállandókat is kiszámítottuk. A trigonális bipiramisos IF_5 molekula esetén a diagonális erőállandó (sp-CNDO/2) negatív, és ezzel a konformáció instabilitása bizonyított [20]. A négyzeter piramisos felépítésű PCl_5 molekula esetén először a két azonos-



7. *ábra.* A dimetil-szulfon-molekulában levő metilcsoport rotációjához tartozó potenciálgörbe az 5. táblázatban megadott (b) konformáció optimált geometriája esetén

6. táblázat

Pentakoordinált vegyületek geometriajának számolása sp-CNDO/2 és egy módosított spd-CNDO/2 eljárással [7].
A kötésszögek fokokban {°}, *a kötéshosszak 100 pm, a relatív energiák kJ/mól egységekben szerepelnek*
R_{ax} = *axiális kötés*, R_{eq} = *ekvatoriális kötés*

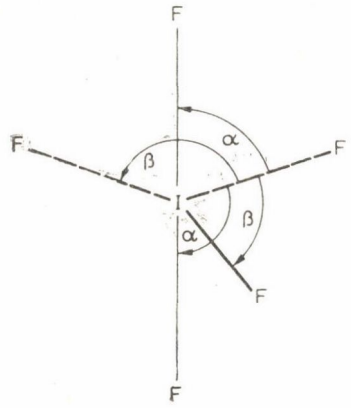
Molekula		Négyzetes sp	Bipiramisos spd	Trigonális sp	bipiramisos spd
IF_5	R_{ax}	1,9527	1,8448	1,9519	1,8365
	R_{eq}	1,9455	1,8390	1,9396	1,8402
	$<R_{ax}, R_{eq}$	78,95	83,60	(90,0)	(90,0)
	E_{rel}	0,0	0,0	83,115	175,184
BrF_5	R_{ax}	1,9900	1,8504	1,9876	1,8395
	R_{eq}	1,9740	1,8409	1,9728	1,8452
	$<R_{ax}, R_{ex}$	77,46	83,08	(90,0)	(90,0)
	E_{rel}	0,0	0,0	147,985	269,356
ClF_5	R_{ax}	1,7479	1,6505	1,7351	1,6367
	R_{eq}	1,7252	1,6366	1,7146	1,6329
	$<R_{ax}, R_{eq}$	81,38	84,92	(90,0)	(90,0)
	E_{rel}	0,0	0,0	96,875	177,962
AsF_5	R_{ax}	2,1709	2,0500	2,2044	2,0598
	R_{eq}	2,2016	2,0590	2,1878	2,0548
	$<R_{ax}, R_{eq}$	105,25	103,10	(90,0)	(90,0)
	E_{rel}	4,831	6,472	0,0	0,0
PF_5	R_{ax}	1,8984	1,8033	1,9367	1,8213
	R_{eq}	1,9338	1,8189	1,9182	1,8112
	$<R_{ax}, R_{eq}$	104,34	102,83	(90,0)	(90,0)
	E_{rel}	7,983	9,478	0,0	0,0
PCl_5	R_{ax}	2,1664	2,0792	2,2408	2,1195
	R_{eq}	2,2276	2,1086	2,1958	2,0901
	$<R_{ax}, R_{eq}$	102,98	103,14	(90,0)	(90,0)
	E_{rel}	13,52	14,489	0,0	0,0

értékű α és β koordinátákhoz tartozó erőállandómátrixot kell megvizsgálni. A szintén sp-CNDO/2 számításokkal kapott eredményeket a 6. táblázatban és a 8. ábrán mutatjuk be.

A 9. ábrán a dopamin molekula egy koplanáris konformációja szerepel. Az ebben levő etilbenzol fragmens alapján adtuk meg a 4. táblázatban szereplő adatokat. A megadott szerkezethez hasonló koplanáris konformációk instabilak. Ezt a τ_1 és τ_2 koordinátákhoz tartozó erőállandó vizsgálata is bizonyítja [15, 17].

A kvázi-Newton-eljárás

A BIENE2 programban [19] az $E(\xi_1, \xi_2, \ldots)$ energiafüggvény minimalizálása a Fletcher-féle VA09A szubrutinnal [4] történik, amely ugyanezen



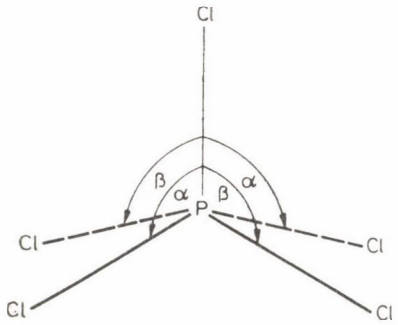
sp-CNDO/2 [20]: $\partial^2E/\partial\alpha^2 = -0{,}13 < 0$

$\partial^2E/\partial\beta^2 = 0{,}14$

módosított spd-CNDO/2 [7, 20]: $\partial^2E/\partial\alpha^2 = 0{,}11$

$\partial^2E/\partial\beta^2 = -0{,}14 < 0$

8a ábra. A trigonális bipiramisos jód-pentafluorid-molekula. Az $\alpha = \sphericalangle R_{eq}$, $R_{ax} = 90° \rightarrow 94°$ kötésszögek szimmetrikus deformációjához sp-CNDO/2 közelítésben egy negatív erőállandó tartozhat, míg a módosított spd-CNDO/2 eljárás alkalmazása esetén a $\partial^2E/\partial\beta^2$ erőállandó negatív (minden itt szereplő számadat a 4. táblázatban megadott optimált szerkezetre vonatkozik)



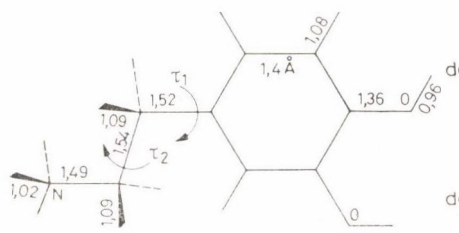
sp-CNDO/2 [18]:

$$\det\begin{bmatrix}\partial^2E/\partial\alpha^2 & \partial^2E/\partial\alpha\partial\beta\\ \partial^2E/\partial\alpha\partial\beta & \partial^2E/\partial\beta^2\end{bmatrix} = \det\begin{bmatrix}0{,}14 & 0{,}19\\ 0{,}19 & 0{,}14\end{bmatrix} < 0$$

módosított spd-CNDO/2 [7, 18]:

$$\det\begin{bmatrix}\partial^2E/\partial\alpha^2 & \partial^2E/\partial\alpha\partial\beta\\ \partial^2E/\partial\alpha\partial\beta & \partial^2E/\partial\beta^2\end{bmatrix} = \det\begin{bmatrix}0{,}15 & 0{,}21\\ 0{,}21 & 0{,}15\end{bmatrix} < 0$$

8b ábra. A négyzetes piramisos foszfor-pentaklorid-molekula. Az $\alpha = \sphericalangle R_{eq}$, R_{ax}, ill. β kötésszögek szimmetrikus deformációja a mellékelt bizonyítás szerint nem biztosítja, hogy a torziós erőállandók mátrixa pozitív definit legyen (minden számérték a megfelelő optimált geometriára vonatkozik)



Etilbenzol

$$\det 10^3\begin{bmatrix}\partial^2E/\partial\tau_1^2 & \partial^2E/\partial\tau_1\partial\tau_2\\ \partial^2E/\partial\tau_1\partial\tau_2 & \partial^2E/\partial\tau_2^2\end{bmatrix} \quad \det\begin{bmatrix}7{,}0 & 30{,}8\\ 30{,}8 & 54{,}4\end{bmatrix} < 0$$

Dopamin

$$\det 10^3\begin{bmatrix}\partial^2E/\partial\tau_1^2 & \partial^2E/\partial\tau_1\partial\tau_2\\ \partial^2E/\partial\tau_1\partial\tau_2 & \partial^2E/\partial\tau_2^2\end{bmatrix} \quad \det\begin{bmatrix}12{,}1 & 27{,}8\\ 27{,}8 & 57{,}0\end{bmatrix} < 0$$

9. ábra. Az etilbenzol- és dopamin-molekulák koplanáris konformációja. Az instabilitásuk bizonyítása a τ_1 és τ_2 torziós koordinátákhoz tartozó (CNDO/2 közelítésben számolt) erőállandók felhasználásával lehetséges

szerző egy kvázi-Newton típusú eljárásán [30] alapul. Az eljárást a következőképpen lehet röviden leírni:

$$\xi_{K+1} = \xi_K - \alpha \tilde{\mathbf{G}}_K^{-1} \mathbf{g}_K \tag{28}$$

Itt $\tilde{\mathbf{G}}$ egy pozitív definit mátrix (feltétel!), amely az elvégzett iterációs lépések során kapott

$$\mathbf{g}_0, \mathbf{g}_1, \ldots\ldots \mathbf{g}_{k-1} \tag{29}$$

differenciálhányadosokból megbecsült erőállandómátrix (a *regula falsi*-hoz hasonló módszer).

Nyilvánvaló, hogy a k futóindex növekedésével ez a becslés egyre jobb lesz. Feltételezzük, hogy a molekula egyik stacionáris pontra vonatkoztatott relatív energiája a relatív koordináták (elmozduláskoordináták) kvadratikus alakjaként írható fel:

$$E_{\text{rel}} = \xi_{\text{rel}}^T \mathbf{A}\, \xi_{\text{rel}} \tag{30}$$

ahol $\mathbf{A}$ egy konstansokat tartalmazó szimmetrikus mátrix. Ekkor

$$\mathbf{g}(\xi_{\text{rel}}) = 2\,\mathbf{A}\, \xi_{\text{rel}} \tag{31}$$

és

$$\mathbf{G}(\xi_{\text{rel}}) = 2\,\mathbf{A} \tag{32}$$

úgy, hogy

$$\xi_{\text{rel}} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{g} \tag{33}$$

és ezzel

$$\xi_{K+1} = \xi_K - \mathbf{G}_K^{-1}\, \mathbf{g}_k \tag{34}$$

A (34) egyenlet írja le a Newton-(Raphson)-féle minimalizálási eljárást. Kvadratikus (34) potenciálfelületen elegendő egyetlen iterációs lépés egy stacionáris energiaérték eléréséhez. Ilyen esetben az n elemű g vektorból n numerikus differenciálással pontosan megkapható a G-mátrix. Ezért a *kvázi*-Newton-eljárás n iterációs lépésben szintén eljut a potenciálfelület egy stacionáris pontjába. Minthogy egy molekula kvantumkémiai alapokon kapott energiakifejezése sohasem teljesíti a kvadratikus egyenlet feltételeit, a geometria optimálása során az n csak alsó határa lehet a szükséges iterációs lépéseknek. A belső koordináták használata ezen kívül azzal járhat, hogy az energia egy kiválasztott koordináta mentén periodikus lesz. Kötésszög vagy diéderes szög esetén pl.

$$E(\tau) = E(\tau + 2\pi) = E(\tau + 4\pi) = \ldots \tag{35}$$

Ha τ egy atomcsoport n-szeres forgástengely körüli forgatást jelöl, akkor

$$E(\tau) = E\left(\tau + \frac{2}{n}\tau\right) = E\left(\tau + \frac{4}{n}\pi\right) = \ldots \tag{36}$$

Ha ilyen esetben egy olyan konformációból indulunk ki, amely távol esik a minimumtól, úgy néha előfordulhat, hogy a (τ-szerinti) kvadratikus közelítésben a potenciálfelület stacionáris pontja nem érhető el. Ezt a jelenséget a *kvázi*-Newton-eljárás oszcillációjaként ismerjük. Ekkor végeredményben olyan lépésközt használunk, amelyre

$$\max_j \left(|[\Delta \xi]_j| \right) \geq \frac{2}{n} \pi \tag{37}$$

A konformációk optimalizálása során éppen ezért célszerű nem kvadratikus függvényeket, hanem egyszerű periodikus függvényeket alkalmazni a potenciális felület leírására. Pl.

$$E = a \cdot \cos (n\tau + b) + c \tag{38}$$

Ezzel az előzőekben már leírt, a kölcsönösen függő kötési- és diéderes szögekkel kapcsolatos nehézség (5. ábra) is egyidejűleg áthidalható.

Más jellegű problémát jelent a kritérium megválasztása, amelynek alapján a *kvázi*-Newton-eljárással kapott stacionáris pontok jellege megállapítható. Itt sajnos néhány kedvezőtlen tapasztalatról kell beszámolnunk. Ha a minimalizálást egy nyeregpont közvetlen környezetében kezdjük, az eljárás nem a nyeregpontba konvergál, hanem egy globális minimumhoz. Ez annak a következménye, hogy az első iterációs lépés lényegében egy „steepest descent"-lépésnek felel meg. Az etilbenzol molekula optimálása során a kiindulási konformáció (4. táblázat) a konformációs energiafelület egy nyeregpontja (koplanáris konformáció) közvetlen környezetében van. Ennek ellenére néhány iteráció lépésben megkapjuk a minimumot (a merőleges konformációt). Ha a minimalizációt egy a nyeregponttól távoli geometriából indítjuk, néhány iterációs lépés után meglehetősen jó közelítését kapjuk a G erőállandómátrixnak, de „véletlenszerűen" egy nyeregpont környezetébe jutunk, akkor ezt a pontot az eljárás „átugrani" nem tudja. A G pozitív definit voltának megtartása, ami a minimalizáló eljárás alkalmazásának feltétele, és amit a g_k elemeinek analitikusan számolt differenciálhányadosai biztosítanak, ahhoz vezet, hogy még élesebb konvergenciakritérium alkalmazása sem eredményezi a koordináták javulását. A g legnagyobb elemének értéke még elfogadható lehet. A g maximálnormájának konvergenciakritériumként való használata ezért ebből a szempontból sem ajánlott, hiszen az eljárás értelmetlenül tovább iterál. (Erről már korábban is volt szó.) Ilyen helyzetben a minimalizálás újraindítása segíthet. Az eredeti Newton-eljárás ilyenkor rögtön a nyeregponthoz konvergál, mivel nem tud különbséget tenni a stacionáris pontok között. Természetesen vannak azért olyan tartományok is, amelyekben ez az eljárás sem konvergál. Az ennek elkerüléséhez szükséges feltételeket meg lehet adni, azonban a függvény magasabb rendű differenciálhányadosait tartalmazza, ezért kvantumkémiai jelentőségük nincs.

Mindebből az következik, hogy a megállásra vonatkozó pontos előírások nélkül nagyon valószínűtlen, hogy a minimalizálás egy nyeregpontban fejeződjék be. Az eredmények gondos vizsgálata során ezért az erőállandómátrix rangjának és szignatúrájának kiszámítása felesleges. Néhány koordináta kizárása a minimalizálásból ahhoz vezethet, hogy a kapottt stacionáris pont nem valódi minimum, hanem az elhanyagolt szabadsági fokok szempontjából maximum és így egy tetszőleges rendű nyeregpontról lehet szó. Ez az eset különösen a szimmetria megtartás előírásával kapcsolatban léphet fel [24]. A stacionáris pontok jellemzése céljából ekkor legtöbbször kielégítő a ténylegesen nem optimált koordinátákhoz tartozó erőállandókat analizálni. Ezt a 8. ábrán bemutatott példa is igazolja.

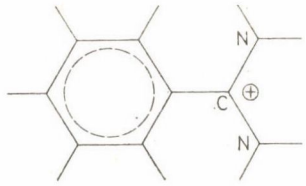
Értékelés

Megpróbáltam bemutatni a szerkezet és konformáció kvantumkémiai számításokkal történő meghatározásával kapcsolatos néhány elméleti problémát. Néhány megállapítás nemcsak a CNDO/2 számítások körében érvényes, hanem más módon leírt potenciál-hiperfelületekre is vonatkozik. Például az empirikus potenciálokkal leírtakra, vagy bizonyos hibrid eljárásokra is (pl. PPP + empirikus potenciálok).

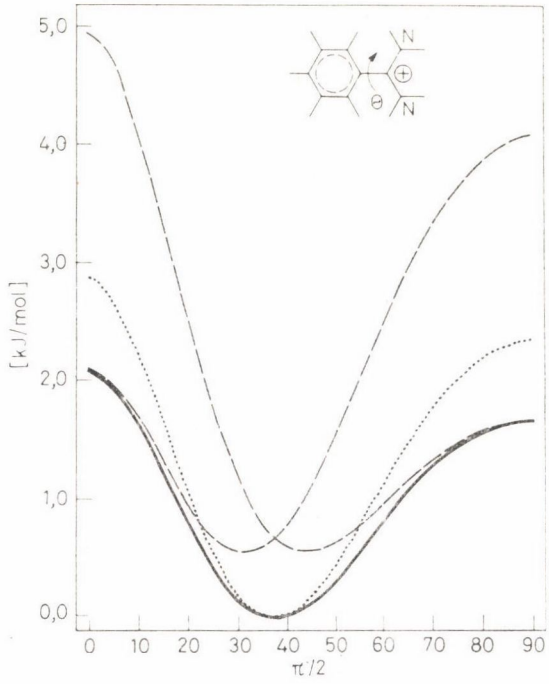
Ma már nagyszámú különböző kvantumkémiai geometriaoptimáló eljárás, illetve program létezik, amelyek között nagyon effektív *ab initio* módszerre épülők is vannak [32]. Ezekben mivel az erőállandók nem kerülnek számításra, gradiensvektort numerikusan is meghatározhatjuk [33]. Éppen a félempirikus SCF-eljárások esetén a gradiensek számolása nem igényel sok gépidőt, ezért manapság a geometriaoptimálás már szinte kötelező része a standard programoknak, pl. a MINDO/3 vagy MNDO [34].

Dolgozatomat be lehetne fejezni a számított és mért szerkezeti adatok összevetésével. Ez azonban más máshol megtörtént [7, 9, 35]. Így az alkalmazott geometriaoptimalizáló eljárásokkal kapott eredményekre nem térek ki, hanem néhány olyan eredményt ismertetek, amely „csak" kvantumkémiai szempontból érdekes. Így még egy eljárás-specifikus alkalmazási területet ismertetek, más példák a [13, 36, 37] dolgozatokban találhatók.

A belső rotációról van szó, amely során a molekula egyéb szabadsági fokainak teljes relaxációját megengedjük. A kvantumkémiai konformációanalízisek több mint 90%-a félmerev molekulamodellen alapul, ami azt jelenti, hogy csak a konformációs szabadsági fokokat optimálják (leggyakrabban egyszerre az összeset). Mivel a konformációs koordináták nincsenek csatolásban a többivel, ez az eljárás indokolt. A relaxáció figyelembevételével végzett számítások általában csak kvantitatív értelemben szolgáltatnak eltérő eredményeket [36, 37]. A feltevés hogy a CNDO/INDO eljárás ismert kudarca



10. ábra. A fenil-amidinium-kation



11. ábra. A fenil-amidinium-kation belső rotációjához tartozó CNDO/2 potenciálgörbe a relaxált geometria (planáris amidinium- és fenil-csoport feltételezése mellett végzett), és az optimált koplanáris, ortogonális és nem fedő formák félmerev forgatása során (amikor csak a τ-t változtatjuk)

a félmerev molekulamodel esetében a molekulacsoportok konjugált kötés körüli rotációjának leírására, visszavezethető a sztérikus gátlások nem kielégítő figyelembevételére [9, 37, 38], nem nyert igazolást [36]. A kudarc nem is általános. Például az anilin [13, 39], az anilidek [13], vagy fenol [17] esetén, azaz olyan vegyületeknél, amelyekben egy elektronpár és egy kettőskötés parciális konjugációja lép fel, a CNDO/2 eljárás korrektül alkalmazható. Azonban még töltéssel rendelkező rendszerek esetén is várható, hogy a kémiai kötésről alkotott elképzelésekkel megegyezésben levő eredményeket kapunk. Ezt mutatják a fenil-amidiniumkationra kapott eredmények is [40] (10. ábra).

Itt az optimált és a standard geometriára épülő modell esetén egymástól még kvalitatíve is teljesen különböző potenciálgörbét kapunk, amelyeket a 11. ábrán mutatunk be. A fenil-amidinium konformációjára vonatkozó kísérleti adat nem ismeretes, de úgy tűnik, hogy a teljesen relaxált szerkezethez tartozó potenciálgörbe az inkább elfogadható.

Összefoglalás

A dolgozat a különböző molekulaformák stabilitásának kritériumaival foglalkozik, amelyek alkalmazhatóságát különböző konformációs problémákon keresztül szemlélteti (etilbenzol, dimetilszulfon, jód-pentafluorid, stb.). Röviden ismertetésre kerül a szerző által kidolgozott BIENE/2 programrendszer is, valamint ennek alkalmazása a fenil-amidinium-ion rotációs gátjának meghatározására egy félmerev, és egy relaxált molekulamodell feltételezése esetén.

Summary

A criteria for the stability of different molecular forms is discused and its application to several conformational problems is presented (ethylbenzene, dimethylsulphone, iodpentafluoride, etc.). A short description of the author's BIENE/2 program is given together with numerical results obtained for the rotational barrier in the phenyl-amidinium-ion adopting a semi-rigid and a relaxed molecular model.

IRODALOM

1. Paddon-Row, M. N., Radom, L., Gregory, A. R : J. Chem. Soc., Chem. Comm. **1976.** 427
2. Zahradnik, R., Hobza, P.: in Topics in Current Chemistry, Springer-Verlag, Berlin (im Druck)
3. Isaacson, E., Keller, H. B:. Analyse numerischer Verfahren, Edition Leipzig, Leipzig 1972
4. Fletcher, R.: FORTRAN subroutines for minimization by quasi-Newton methods (VA09A, VA10A), Herwell 1972
5. McIver Jr., J. W., Komornicki, A.: Chem. Phys. Letters **10** (1971), 303
6. Yamaguchi, K., Nishio, A., Yabushita, S., Fueno, T.: Chem. Phys. Letters **53** (1978), 109
7. Scharfenberg, P:. Theoret. chim. Acta (Berl.) **49** (1978), 115
8. Rosenbrock, H. H.: Computer J. **3** (1960), 175
9. Scharfenberg, P.: Dissertation, Berlin 1979
10. Schmid, G. H.: J. Mol. Struct. **8** (1971), 488
11. Kirby, G. H.: J. Mol. Struct. **26** (1975), 77
12. Csizmadia, I. G., Lucchini, V., Modena, G.: Theoret. chim. Acta (Berl.) **39** (1975), 51
13. Scharfenberg, P., Sklenar, H.: in Quantitative Structure-Activity Analysis (Suhl 1976-, S. 175; Akademie-Verlag, Berlin 1978
14. Courant, R., Hilbert, D.: Methoden der Mathematischen Physik, Bd. I, S. 24; Springer-Verlag, Berlin 1968
15. Scharfenberg, P.: Theor chim. Acta (Berl.), (eingereicht)
16. Pulay, P.: Mol. Phys. **17** (1969), 197
17. Scharfenberg, P., Sauer, J.: Int. J. Quant. Chem. (im Druck)
18. Pople, J. A., Beveridge, D. L.: Approximate Molecular Orbital Cheory, McGraw-Hill, New York 1970
19. Scharfenberg, P.: BIENE2 — Ein Programm zur Bestimmung der Gleichgewichtsgeometrie groűer Molekeln, Berlin 1975
20. Scharfenberg, P.: Chem. Phys. Letters **65** (1979), 304
21. Scharfenberg, P.: in Vorbereitung
22. Quade, C. R.: J, Chem. Phys. **64** (1976), 2783

23. QUADE, C. R.: J. Chem. Phys. **69** (1978), 1321
24. SCHARFENBERG, P.: Theoret. chim. Acta (Berl.) **53** (1979), 279
25. BERRY, R. S.: J. Chem. Phys. **32** (1960), 933
26. PANCIR, J.: Coll. Czechoslov. Chem. Commun. **40** (1975), 2726
27. HARGITTAI, I.: Sulphone Molecular Structures, Lecture Notes in Chemistry, Vol. 6, Springer-Verlag, Berlin 1978
28. ROBINET, G., CRASNIER, F., LABARRE, J.-F., LEIBOVICI, C.: Theoret. chim. Acta (Berl.) **25** (1972), 259
29. KONDO, S., HIROTA, E., MORINO, Y.: J. Mol. Spectry. **28** (1968), 471
30. FLETCHER, R.: Computer J. **13** (1970), 317
31. WARSHEL, A., KARPLUS, M.: J. Am. Chem. Soc. **94** (1972), 5612
32. PULAY, P.: Theoret. chim. Acta (Berl.) **50** (1979), 299
33. COLLINS, J. B., SCHLEYER, P. v. R., BINKLEY, J. S., POPLE, J. A.: J. Chem. Phys. **64** (1976), 5142
34. DEWAR, M. J. S., FORD, G. P.: J. Am. Chem. Soc. **99** (1977), 1685
35. STOREK, W., SAUER, J., STÖÜER, R.: Z. Naturforschg. **34**ó (1979), 1334
36. SCHARFENBERG, P., JUNG, CH.: Chem. Phys. Letters **57** (1978), 131
37. SCHARFENBERG, P.: Int. J. Quent. Chem., eingereicht
38. RAYEZ, J. C., DANNENBERG, J. J.: Chem. Phys. Letters **41** (1976), 492
39. SCHARFENBERG, P.: Z. Chem. **19** (1979), 198
40. LABES, D., HENKEL, A., SCHARFENBERG, P.: nicht publiziert

Fordította:
CSÁSZÁR PÁL

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981 p. 189—199

ÖSSZEFOGLALÓ ÉRTEKEZÉS

LEHETŐSÉGEK AZ NMR-SPEKTROSZKÓPIA FELHASZNÁLÁSÁRA A RÁK-DIAGNOSZTIKÁBAN ÉS A RÁK-TERÁPIÁBAN

SOHÁR PÁL
a kémiai tudományok doktora

HOLLÓS ANDREA
(EGYT Gyógyszervegyészeti Gyár, 1475 Budapest, Pf. 100)

Bevezetés

Régóta ismert tény [1—3], hogy a tiszta vízhez képest a szövetek vízmolekuláira rövidebb spin—rács (T_1) relaxációs idők* jellemzőek, amit a celluláris vízmolekulák mozgásának gátoltságával indokolnak. Az élő szövetek 70—90%-át kitevő víz [5] ugyanis nem egyszerűen biológiai oldószerként van jelen a szervezetekben, hanem a vízmolekulák egy része erős kölcsönhatásban van a sejtek makromolekuláival, s ezért fizikai állapota eltér a normális vizétől [6—12]. Az intra- és extra-celluláris vízmolekulák nagyobb hányada ugyan változatlanul a közönséges vízmolekulák fizikai sajátságaival rendelkezik, vagyis szabad állapotú, mozgásában nem gátolt és megfagyasztható, ugyanakkor a vízmolekulák kisebb része hidrátburkot alkot a citoplazma makromolekulái körül, illetőleg a sejtfalhoz, vagy más makromolekuláris felülethez kötődik. Ezen adszorbeált, gátolt mozgékonyságú vízmolekulák térbeli elrendeződése nem azonos a jég szerkezetével, és —70 °C-ig nem fagyaszthatók meg [13, 14]. A kétféle környezet molekulái között gyors kicserélődés folyik, s az így kialakult egyensúly makroszkopikus fizikai paraméterei (így pl. a T_1 spin—rács relaxációs idő is) a két állapotnak megfelelő értékek súlyozott átlagai [15]. A szervezet szöveteinek minden olyan fiziológiai változása, amely a víz—makromolekuláris kölcsönhatások (s ennélfogva a kétféle típusú vízmolekula arányának) megváltozásával jár, szükségképpen az átlagos T_1 relaxációs idő megváltozását is magával vonja. A rákos szövetek kóros elváltozásai várhatóan az egészséges szövetre jellemző T_1 értékek megváltozásához vezetnek.

* A T_1 spin—rács relaxációs idő az NMR-spektrumokból nyerhető egyik spektrumparaméter, amely megadja, hogy a mágneses atommagok mágneses kvantumállapotok közötti egyensúlyi megoszlása milyen gyorsan alakul ki, azaz hogy az atommagok milyen gyors energiacserére képesek a környezettel, ti. a ráccsal. A T_1 relaxációs idő specifikus az egyes atommagfajtákra, s ugyanazon mag esetén ennek kémiai környezetére, s ekként a kémiai szerkezetről az NMR-módszerrel szerezhető információk egyik fontos forrása (lásd pl. 4a).

1. A proton spin—rács relaxációs idő növekedése a rákos szövetekben

A fenti meggondolásból kiindulva DAMADIAN amerikai spektroszkópus figyelte meg elsőként 1971-ben, hogy a rákos szövetek valóban megkülönböztethetők az egészségesektől az NMR-spektroszkópia segítségével [16]. A rosszindulatú szövetmintákban mért ^1H spin—rács relaxációs idők következetesen hosszabbnak bizonyultak a normális szövetekre jellemzőeknél. Ezt a megfigyelést számos más kutatócsoport is megerősítette [5, 17—19]. T_1 növekedését kimutatták különböző fajtájú kísérleti állatok kóros szöveteiben [15, 20—22], s később rákos emberi szövetekre is igazolták [22—24].

T_1 rákos szövetekbeli megváltozásának magyarázatára számos, részben ellentmondó feltételezés látott napvilágot az elmúlt években.

DAMADIAN eredetileg a rosszindulatú szövetekben nagyobb kálium-ion koncentrációval értelmezte a T_1 értékek hosszabbodását [16, 23]; ezt a hipotézist azonban igen hamar megcáfolták [14]. Felmerült az a lehetőség is [24, 25], hogy a vízmolekulák relaxációit paramágneses ionok gyorsítják fel a sejtben. Ezt azonban számos vizsgálat egybehangzóan kizárta [1, 13, 15]. Mások a kötött (hidratált, adszorbeált, nem megfagyasztható), s rövidebb relaxációs időkkel jellemezhető vízmolekulák arányának csökkenésével hozták összefüggésbe T_1 növekedését [13, 14, 26]. Néhány szerző egyszerűen a szövetek összes víztartalmának növekedésével magyarázta a fenti tényt [21, 22, 27]. Utóbbi jelenség valószínűleg a szervezet fokozott Na-visszatartására vezethető vissza, amit az extra- és intra-celluláris víztartalom növekedése kísér [21]. Ellentétes tapasztalatokról is beszámoltak azonban, amelyek szerint nincs szigorú korreláció T_1 nagysága és az össz-víztartalom között [24, 28]. Ismét mások a protein-koncentrációt vélték döntőnek T_1 nagyságát illetően [24, 29], mivel a celluláris víz — több polarizált rétegben — a sejtproteinekre adszorbeálódik [30]. Kimutatták, hogy az össz-víztartalom növekedésével a vérszérum teljes protein-koncentrációja fordított arányban változik, ami szintén a T_1 növekedéséhez vezet [21, 29].

A spin—rács relaxációs folyamatok lelassulásának valódi okát a rákos szövetekben tehát egyelőre még nem sikerült kideríteni, maga a tény azonban ettől függetlenül is lehetőséget kínál a rosszindulatú szövetek felismerésére. Ezen túlmenően T_1 nagysága értékes támpont lehet a rák kifejlődésének mechanizmusára vonatkozó vizsgálatokban is [pl. 21].

A szövetmintákban mért T_1 értékek természetesen a vizsgált szövet összes, kémiailag eltérő protonjaira jellemző egyedi spin—rács relaxációs idők súlyozott átlagai. Mivel azonban a szövetek protonkoncentrációját túlnyomórészt a vízmolekulák hidrogénjei adják, a kísérletileg meghatározott T_1 értékek az egészséges, ill. beteg sejtek vízmolekuláira jellemzőek. Ennek köszönhető, hogy a kémiailag jelentősen eltérő szövetfajták adatai egyáltalán összehasonlíthatók, s elég specifikusak. Bonyolítja ugyan a helyzetet, hogy magán a sejten

belül is helyről helyre más T_1 aktuális értéke [31], azonban az eredető T_1 növekedése a szövetmintában mindenképp valamilyen jellegzetes fiziológiai elváltozásra hívja fel a figyelmet. Kimutatták ugyanis, hogy nemcsak rossz-, hanem bizonyos jóindulatú daganatfajtáknál [23], továbbá másfajta betegségek következtében ödémás szöveteknél is hosszabb relaxációs idők jelentkeznek [28, 32—35].

Ahhoz, hogy a megnövekedett T_1 idők diagnosztikai értéke lemérhető legyen, tisztázni kellett, hogy milyen mértékben specifikus T_1 meghosszabbodása a rák-betegségekre. Természetesen, a kísérletileg mért adatok megbízhatósága is gondos ellenőrzést igényel. Meg kell vizsgálni pl., hogy a halál után vett emberi szövetmintákban milyen mértékben változik T_1 a boncolás és mérés közötti időszakban. Az erre vonatkozó eredmények kielégítőek (T_1 változása $<10\%$/nap [15]). A kísérleti adatokat statisztikus módszerekkel analizálták annak igazolására, hogy a megfigyelt, szisztematikus változás T_1 értékében nem kísérleti hibáktól, vagy az eltérő mérési feltételektől, esetleg az egyes kísérleti alanyok biológiai variabilitásától származik [21].

Igen sok kísérletsorozat általános tapasztalata, hogy azonos daganatfajta esetén T_1 növekedése kismértékben ugyan, de függ a kísérleti alanyok fajtájától. Az emberi szövetekre vonatkozó vizsgálatokból [23] megállapítható, hogy T_1 értéke *valamennyi* daganatos szövetfajta esetén jellegzetesen megnövekszik a normál mintákhoz képest: továbbá az is, hogy az egészséges, ill. tumoros szövetre mért T_1 intervallumok általában jól elkülönülnek.

Újabb kutatások arra is rámutattak, hogy daganatos (pl. lymphosarcomás [21]) kísérleti alanyok szérumában és nem-rákos szöveteiben is megnövekszik T_1 értéke [20—22, 29]. Kimutatták, hogy a relaxáció-lassulás a máj, lép, vese és a szív szöveteiben a legnagyobb arányú, viszont kevésbé szignifikáns a bőr, izom, belek, gyomor, vagy az agy esetén [20, 21]. E változás T_1 értékében azonban csak bizonyos idő elteltével észlelhető. A kísérleti állatokba beültetett rákos sejtkultúrákban, az idő függvényében végzett T_1 mérésekkel lehetséges annak az átmeneti, kifejlődési periódusnak a meghatározása, amely elteltével az egészséges és rákos kontrollcsoportok közötti különbség T_1 értékében, statisztikusan mérhető válik. E periódus — rágcsálóknál — a máj, vese, lép szöveteire 40—50 nap [21]. Kimutatták továbbá, hogy a nem-rákos szövetek T_1 értékei egyenes arányban növekszenek a tumor méretével [21, 29].

A *különböző* daganat-típusok összehasonlításakor kitűnt, hogy adott szövetfajta esetén, az egészséges kontrollhoz képest, T_1 növekedésének mértéke arányos a daganat növekedési-sebességével, illetve fordítottan arányos szövet-differenciáltságának fokával [19]. (A kóros szövetek ui. kevésbé differenciáltak.) Bár az egészséges és daganatos szövetekre mért T_1 értékek általában jól elkülönülnek, fentiek fényében érthető, hogy a lassan növekvő (s ezért jobban differenciálódott) daganatfajtákra és az egészséges szövetekre

jellemző értéktartomány bizonyos esetekben átfed [19]. Mindenesetre úgy tűnik, hogy T_1 mérésekkel esetenként tájékozódni lehet a rák-betegség stádiumáról, ill. kifejlődésének sebességéről, vagy utóbbi — kezelés hatására esetleg bekövetkező — csökkenéséről.

A fenti képbe jól beleillik az a tapasztalat, hogy gyors fejlődésben levő, egészséges, fiatal állatok szöveteire is a szokásosnál hosszabb T_1 értékeket mértek [12]. Arról is beszámoltak, hogy az elő-rákos szövetek (preneoplasztikus csomók), amelyek még nem rosszindulatúak, de elrákosodásuknak nagy a valószínűsége, ugyancsak megkülönböztethetők az NMR-adatok alapján, amelyek átmeneti értékűek az egészséges és rosszindulatú szövetekre jellemzőekhez képest [28].

A T_1 spin—rács relaxációs idő mellett a T_2 spin – spin relaxáció és a D diffúziós konstans, mint további NMR-paraméterek ugyancsak meghatározhatók [17, 23, 28, 36]; s ezek értéke, valamint a belőlük számítható egyéb, molekuláris mozgásokkal kapcsolatos paraméterek (pl. a τ_c korrelációs idő) [29, 36] szintén felhasználhatók diagnosztikai célokra. Már DAMADIAN első mérései [16] is kiterjedtek a T_2 meghatározására, amelynek a T_1 értékekkel analóg megnövekedését tapasztalta a rákos patkány-szöveteknél (T_1 0,3 s-ról 0,8 s-ra, T_2 0,05 s-ról 0,1 s-ra nőtt az egészséges szövetmintákhoz képest).

Napjainkig több mint száz daganatfajta vizsgálatát és azonosítását végezték el az NMR-technika segítségével [23, 37]. Azok az erőfeszítések, amelyekkel az NMR-spektroszkópia rák-diagnosztikai felhasználására törekszenek, bármily csekély remény legyen is egyelőre az orvosi gyakorlatba való átültetésre, igen nagy jelentőségűek és folytatásra érdemesek. A vizsgálat gyors, egyszerű, nem kíván sebészi beavatkozást és semmiféle változást nem okoz sem a vizsgált szövetmintában, sem az élő szervezetben.

Mivel az NMR-paramétereket közvetlenül a kémiai szerkezet determinálja, a különféle rákos betegségek biztosabb és pontosabb megkülönböztethetősége remélhető az NMR-módszertől, tekintve, hogy korábban a klasszifikáció alapját sejtmorfológiai vizsgálatok képezték, s a morfológiai eltérések nyilvánvalóan kevésbé specifikusak, mint a kémiai szerkezet [23].

2. Más magok NMR-paramétereinek alkalmazása a rák-diagnosztikában

Az NMR-technika rák-diagnosztikai alkalmazása során kézenfekvő volt a vizsgálatokat a proton mellett más mágneses magokra is kiterjeszteni: elsősorban azokra, amelyek élettani funkciója a betegség hatására várhatóan megváltozik, s amelyek az NMR-mérés szempontjából is hozzáférhetők. Utóbbi követelményeknek nem felel meg pl. a ^{13}C, ^{14}N, ^{15}N és ^{17}O izotóp, mivel az első három igen sokféle, hasonló gyakoriságú környezetben fordul elő a szerves anyagokban, a ^{13}C, ill. ^{15}N mag pedig még érzéketlen is. A ^{14}N és ^{17}O

mérések fő akadálya a kvadrupólmomentum miatti nagy jelszélesedés, ami végeredményben ugyancsak nagyfokú érzéketlenségként jelentkezik.

Így került sor 1974-ben a ^{39}K [38, 39], majd később a ^{23}Na kationok [40] rákos szövetekbeli NMR-vizsgálatára. E kísérletek közvetlen indítéka az a rég ismert tapasztalat volt, hogy a rákos sejtekben megváltozik a K^+ és Na^+ ionkoncentráció.

E vizsgálatokból kitűnt, hogy a kálium-koncentráció nem nő a rákos szövetekben, ahogy eredetileg hitték [41], hanem a kálium-nátrium-kationok-összkoncentrációja nő, s ezen belül a kálium-tartalom alig változik, viszont a nátrium mennyisége relatíve jelentősen növekszik [38, 40]. Végeredményben a sejtek káliumszelektivitása romlik, ami valószínűleg a kóros szövetek megnövekedett víztartalmával függ össze [38]. Ily módon ezek az NMR-mérések a ^{39}K és ^{23}Na ionkoncentráció igen gyors és a pontosságot tekintve más módszerekkel vetekvő meghatározására is alkalmasak [38, 40].

A kísérleti eredmények azt mutatták, hogy az egészségesekhez viszonyítva a rosszindulatú szövetekben e magok spin—rács relaxációja is lassul, de az eltérés nem túl nagy (a növekedés kb. 25%-os), s ezért nem ad biztos alapot a diagnózishoz.

A ^{39}K izotópra vonatkozó első kísérletek (amelyek egyben a rákos szövetek első, nem protonokon végzett NMR-vizsgálatai voltak) igen érdekes eredménye az a megfigyelés, hogy a T_1 meghatározása céljából mért intenzitások nem exponenciálisan változtak, hanem a progresszív telítési módszer [42] jellegzetes oszcillációs görbét adott a rákos szövetek esetén [38]. Az egészséges sejteknél viszont — a bélszövet kivételével — a szokásos exponenciális változást észlelték. Később néhány egészséges, de gyorsan növekvő sejtfajtánál (pl. újszülött egereknél*) ugyancsak kimutatták az oszcilláció jelenségét [39].

Az oszcilláció elméleti értelmezését Cope adta meg [43]. Abból kiindulva, hogy a káliumionok nem szabad oldatban, hanem gyorsan növekvő sejtek elektromosan töltött makromolekuláihoz kapcsolódva vannak jelen a szövetekben [44, 45], ezek kétféle rezonanciáját (kétféle frekvenciájú precesszióját) tételezte fel, amelyek a kálium-kation és a makromolekuláris anion képviselte elektromágneses dipólusoknak a celluláris környezet elektromos, ill. mágneses tereivel lehetséges kétféle kölcsönhatását reprezentálják. Ezt a feltételezést erősíti meg az a matematikai tény is, hogy az észlelt eredő T_1 oszcillációs görbe két különböző frekvenciájú szinusz-hullám összegeként írható le [39].

Ekként, bár a ^{39}K mag T_1 idejének csekély növekedése nem diagnosztikai értékű, a rákos sejtekre specifikus oszcilláció révén a ^{39}K NMR-mérés mégis értékes információforrásnak bizonyult a rosszindulatú szövetek felismeréséhez. A különböző típusú agytumorok ^{39}K NMR-vizsgálata kimutatta, hogy ezekben

* Ez volt az első, élőlényben végzett ^{39}K NMR-mérés.

különösen nagy a T_1 értékek növekedése a normál szövethez képest. Ez az információ annál is értékesebb, mert az agytumorok — az agyszövet nagy víztartalma és a hosszú T_1 idők miatt — csak nagyon nehezen különböztethetők meg protonrezonancia segítségével a normál agytól [38].

Már korábban felmerült, hogy a különféle (többnyire más-más mágneses magokkal kapcsolatos) NMR-mérések diagnosztikai értéke megsokszorozódik, ha ezeket közös malignancia-(„rosszindulatúsági")-indexbe foglalják [38], s ez indokolta minél több mágneses mag bevonását a rák-diagnosztikai NMR-vizsgálatokba.

Megjegyzendő, hogy ugyanannak a magnak különböző NMR-paraméterei is összekombinálhatók közös rák-indexszé. Így rosszindulatú tüdő-szövetek T_1 és T_2 ^{1}H relaxációs időit közös indexszé vonva össze, 90%-os biztonsággal diagnosztizálható a rák [33].

A ^{17}O izotóp, bár a kvadrupólmomentum miatt érzéketlen az NMR-detekcióra, ugyanakkor éppen a kvadrupólmomentum oly mértékben lerövidíti a relaxációs időt, hogy ez a szövetek különböző kémiai környezetben levő vízmolekulafajtáinak (pl. az intra- és extra-celluláris víz) megkülönböztetését [46], illetve a relatív populációk meghatározását [47] lehetővé teszi, akkor is, ha ez ^{1}H NMR-vizsgálattal a protonok lassúbb relaxációja miatt nem lehetséges (ilyenkor a vízmolekuláknak a relaxációnál gyorsabb cseréje következtében csak az átlagnak megfelelő T_1 értékek kaphatók meg). Így ^{17}O-méréssel a sejtmagban levő és lassabban relaxáló vízmolekuláktól megkülönböztethetőek a citoplazmában levők, s arányuk (amely kb. 2 : 1) is meghatározható. A kétféle vízmolekula eltérő relaxációs sebessége az inverziós módszerrel [48, 49] mért T_1 görbe nem-exponenciális jellegét eredményezi. A komplex görbe azonban két exponenciális komponensre bontható, a lassabban (T_{1s}), ill. gyorsabban (T_{1f}) relaxáló molekulafajtának megfelelően. (Ugyanez érvényes a T_2 görbére is.) Mivel az oxigén relaxációját a vízmolekulák és a sejtproteinek kölcsönhatása determinálja [50], érthető, hogy az elhalt sejtekben eltűnik a különbség: a T_1 és T_2 görbe egyaránt exponenciálissá egyszerűsödik. A rákos sejtekben viszont változatlan a T_1 és T_2 görbék nem-exponenciális lefutása, ugyanakkor mindkét relaxáció (T_1 és T_2) mindkét (gyors és lassú) komponensének nagysága nő [47].

A rákos szövetek NMR-vizsgálatában, az egyes atommagfajták gyakorisági sorrendjében, a protonokat a ^{31}P izotóp követi. Ez teljesen érthető, tekintve a foszfor kulcsfontosságú szerepét a nukleinsavakban. Bár a ^{31}P izotóp érzéketlensége, a foszforvegyületek rossz oldékonysága, s az a körülmény, hogy a foszforatom sokféle kémiai környezetben fordul elő (a nukleinsavak mellett elég csak a foszforlipoidokat és a foszfátsókat említeni), nehezíti az NMR-mérést, illetve az eredmények értelmezését, a foszforvegyületek igen nagy élettani jelentősége, az éles jelek és a nagy eltolódástartomány érthetővé teszik a publikációk e téren mégis egyre növekvő számát.

A ^{31}P izotóp első rákos szövetbeni NMR-vizsgálata [51] megmutatta, hogy hasonlóan a többi magokhoz, itt is a T_1 spin—rács relaxációs idő növekedése észlelhető, de a növekedés nagyobb mértékű (nincs átlapolás a különféle egészséges és rosszindulatú szövetekben mért értéktartományok között) és így diagnosztikai értéke is nagyobb [52, 53].

A lassabb T_1 spin—rács relaxációk úgy értelmezhetők, hogy a rákos sejteknél a kevésbé rendezett vízben a foszfort tartalmazó molekulák gyorsabban mozoghatnak [52, 54]. A mérések arra is rámutattak, hogy a rosszindulatú szövetekben kisebb a foszfor-koncentráció [52].

A T_1 érték az ugyancsak 1/2 spinű foszforra mind az egészséges, mind a rákos szövetekben nagyobb, mint a protonoknál. Ennek elméleti oka az, hogy a spin—rács relaxációs idő fordítva arányos a giromágneses tényező (lásd pl. [4b] négyzetével, pontosabban, ha a foszformagok relaxációját protonok idézik elő, akkor a relaxációs sebességet $R_1 \equiv T_1^{-1}$-el jelölve:

$$R_{1P} = f_P \gamma_P^2 \gamma_H^2 \tag{1}$$

és

$$R_{1H} = 3/2 \cdot f_H \gamma_H^4 \tag{2}$$

s ebből

$$T_{1P} \frac{3}{2} \cdot \frac{f_H}{f_P} T_{1H} \left(\frac{\gamma_H}{\gamma_P}\right)^2 \tag{3}$$

ahol f_H és f_P a korrelációs időtől, a hőmérséklettől és a két mag távolságától függő faktor. Ebből $T_{1P}/T_{1H} = 9{,}2$ [54]. Mivel a rákos sejtekben ezzel az elméleti értékkel jól egyező adatok mérhetők, a foszformagok feltételezetten protonok kiváltotta relaxációja ezúton kísérleti igazolást nyert (az egészséges szövetekre kisebb, 2—8 közötti relaxációs időarányokat mértek [54].

Még fontosabb szerepe lehet a ^{31}P adatoknak az ^1H és más magok adataival kombinálva, a malignancia-faktorhoz való hozzájárulás révén. A DAMADIAN és mtsai által bevezetett kombinált malignancia-index (CMI) alkalmazásával — több mag mérési eredményeit felhasználva — már igen nagy valószínűséggel diagnosztizálhatók az egyes rák-típusok [51].

A CMI definíciója:

$$\text{CMI} = T_1(^1H) \times \text{OC}(^{39}K) \times T_1(^{31}P) \times T_1(i) \tag{4}$$

ahol OC a ^{39}K oszcillációs koefficiens, i pedig azt (azokat) a további magot (magokat) jelöli, amely(ek) még fontos(ak) lehet(nek) az aktuális mérés szempontjából [51].

A mérőberendezések tökéletesedése lehetővé tette, hogy nemcsak a T_1 relaxációs időt, hanem a ^{31}P kémiai eltolódásokat is megfelelő felbontással lehessen mérni. A foszforatom sokféle kémiai környezete vonal-gazdag spekt-

rum jelentkezését eredményezi, amely ekként a sejt „NMR-ujjlenyomatának" tekinthető és rák-diagnosztikai értéke igen nagy. Kimutatták ugyanis, hogy a rákos szövetben az egészséges szövet ^{31}P NMR-spektrumának egyes vonalai nem jelentkeznek, a megmaradók pedig eltolódnak, s relatív intenzitásuk is megváltozik [53].

Az NMR technika rák-terápiabeli alkalmazásának ötlete

A kísérleti technika és a mérőműszerek fejlődésével mód nyílt arra, hogy az élő anyagról nagy felbontású spektrumfelvételek készülhessenek. Ez a körülmény vetette fel az NMR felhasználásának gondolatát a rák-terápiában [55]. A karakterisztikus elnyelési frekvenciák a rosszindulatú sejtek szelektív elpusztításának eszközéül szolgálhatnak anélkül, hogy a rákos sejteket a szervezetben lokalizálni kellene.

Több, mint egy évszázada ismert tény, hogy a magasabb hőmérséklet a rák regresszióját eredményezi. Kimutatták, hogy rákos sejtkultúrában 2 órás 42,5 °C-os hőkezelés 95%-os sejtpusztulás okoz, míg a normál sejteknek csak kb. 43%-a hal el azonos körülmények között [56]. Ebből kiindulva megkísérelték rádiófrekvenciás sugárzással elpusztítani a ráksejteket. Egerek daganatába elektródákat operálva 27 MHz-es rádiófrekvenciával 1 W teljesítménnyel növelték a sejt-hőmérsékletet. Utóbbit 1 órán át 43,5 °C-on tartva 25%-os, 4 órán át 41,5 °C-on tartva 40%-os gyógyulást értek el. Ha az energiafelvételt szelektívvé lehetne tenni, könnyen elképzelhető akár 100%-os gyógyulás is. Az energia-elnyelés szelektivitását pedig éppen az NMR-rezonancia biztosíthatja, ha a rákos sejtekben megváltozott kémiai eltolódású mágneses magok rezonancia-frekvenciájával sugározzák be a beteg szövetet. Sajnos, egyelőre reménytelennek tűnik a szükséges energiamennyiség NMR-rezonancia révén való sejtbejuttatása. Az első számítások szerint 1 l víz 1 °C-kal való felmelegítéséhez kb. 4,2 kJ kell, míg az 1 liter víz protonjai abszorbeálta rádiófrekvenciás teljesítmény az ^{1}H-rezonancia esetén mindössze 0.04 J [55].

Mindenesetre a szelektív NMR-rezonancia elvén alapuló rák-terápia ötlete figyelemre méltó és további erőfeszítéseket érdemel a gondolat hasznosítása.

4. Tér-fókuszált NMR-spektroszkópia (FONAR)

Az NMR-vizsgálat, mint nem-destruktív rák-diagnosztikai módszer, felvetette a nagy térfogatú, nagymértékben mágnesesen inhomogén (élő) „minták" (esetleg ember) „NMR-feltérképezésének" igényét, azaz, az NMR-spektrumparaméterek (spin-sűrűség, ti. adott kémiai környezetű magfajta

előfordulási valószínűsége, T_1 relaxációs idők, stb.) makromintákbeli meghatározását valamely limitált térfogat- vagy keresztmetszet-egységre.

A makrominta (élőszervezet, ember) efajta „spin-térképét", „NMR-fantomképét" az ún. zeugmatográfiás kísérletekkel határozzák meg [57—63].

A módszer lényege, hogy a homogén $\mathbf{B}_0$ sztatikus mágneses térre valamely térgradienst szuperponálnak, s az ezáltal pontról pontra változó térnek csak egy meghatározott részén valósul meg a mágneses rezonancia Larmour-egyenlettel (lásd pl. [4c]) adott feltétele. A kívánt térgradiens a mágneses tér „formázása" útján, térkorrekciós (shim-) tekercsekkel (lásd pl. [4d]) valósítható meg. A $\mathbf{B}_0$ és $\mathbf{B}_1$ egyidejű szabályozásával a rezonáló mintarész háromdimenziós behatárolása, tetszés szerinti térfogatrészre korlátozása lehetséges. Ez a térfókuszált NMR-kísérlet (*f*ield *f*ocusing *n*uclear *m*agnetic *r*esonance, FONAR [63—68]).

A rezonáló ablak vagy rés (resonance aperture) a shim-tekercsekbe változó erősségű áramot vezetve lokalizálható. A $\mathbf{B}_0$ tér z-komponensének nagyságát polárkoordinátákkal definiálva a kívánt térgradiens elméletileg megadható. A rezonáló térfogat méretei kalibrációs mérésekkel határozhatók meg. Tetszőleges rezonancia-jelet adó oldatra két különböző méretű mintacsőben megmérik a jelintenzitásokat, a shim-tekercsekbe változó erősségű áramot vezetve. A két mintacsőre mért jel-intenzitásarányokat az áramerősség függvényében ábrázolva, megkapható az az ún. normalizált áramerősség, amelyre az arány éppen 1 : 1. Ez az áramerősség olyan szabályzó mágneses teret létesít, amely a rezonáló térfogatot a nagyobb mintacsőben éppen a kisebbével azonos nagyságúra határolja be. Több mintacsőpárra meghatározva a normalizált áramerősséget, a mintacsőátmérő — normalizált áramerősség függvény extrapolációjával tetszés szerinti (pl. 1 mm^3 térfogatú) rezonancia-ablaknak megfelelő áramerősség számítható ki. Az ablakot vagy a mintát mozgatva, egy testfelületről, vagy keresztmetszetről NMR-fantomkép, illetve rétegfelvétel-sorozat is készíthető [65].

A kísérleti nehézségek a dolog természeténél fogva rendkívüliek [59] és a megtévesztő eredmények kiküszöbölése igen nagy körültekintést igényel. Az elméleti megfontolások és a tapasztalat egyaránt arra vezetnek, hogy rákdiagnosztikai célokra kedvezőbbek a kisebb, 1—10 MHz-es frekvenciák; és az optimális érték esetről esetre keresendő ki [29, 59].

ÖSSZEFOGLALÁS

Szerzők az irodalmi adatok értékelése alapján vizsgálják a lehetőséget az NMR-spektroszkópia felhasználására a rák-diagnosztikában és a rák-terápiában.

Összegezve az e területen eddig elért eredményeket, az NMR-spektroszkópia rákterapiabeli felhasználására egyelőre kevés a reális esély, e téma kutatás mégis feltétlenül további erőfeszítéseket érdemel. Az NMR-technika diagnosztikai alkalmazása viszont úgy tűnik közvetlenül a gyakorlati megvalósulás előtt áll és rövidesen egyenértékűvé válhat a röntgen-vizsgálatokkal. A legutóbbi években az NMR-spektroszkópusok, s közöttük e tudo-

mányág legkiválóbb nemzetközi szaktekintélyei egyre nagyobb érdeklődést tanúsítanak a biológiai problémák iránt, aminek fő oka, hogy a számítógépek és a Fourier-technika, valamint a szupravezető mágnesekkel elérhető nagy mágneses terek oly mértékben megsokszorozták az NMR-módszer érzékenységét, illetőleg teljesítőképességét, ami mind több esetben teszi lehetővé igen bonyolult molekuláris rendszerek (makromolekulák, biopolimerek) sikeres tanulmányozását. Az NMR-spektroszkópia fejlődésének ebbe az általános irányába illeszkedik a rák-kérdés NMR-tanulmányozása. Az idevágó kutatások jelentősége még felbecsülhetetlen, de kétségtelen, hogy szakadatlanul nő.

SUMMARY

The possibilities of the use of NMR spectroscopy in the diagnosis of cancer and in the therapy of cancer are investigated on the basis of an evaluation of data of literature.

On summarizing the results obtained thus far in this field it was found that for the present there is little chance for the use of NMR spectroscopy in cancer therapy. However, further researches of this problem are surely worth while. In contrast to that, the application of NMR technique in the diagnosis of cancer appears to be immediately before its practical realisation and it may be shortly quite equivalent to the investigations by X-rays. Quite recently the interest of NMR spectroscopists, including the most excellent international authorities of this discipline, is growing more and more towards biological problems. This is due mainly to the fact that the sensitivity and efficiency, respectively, of the NMR method has been multiplied by the computers and by the Fourier technique, further by the high magnetic fields obtainable by superconductant magnets to such an extent that very complex molecular systems (such as macromolecules, biopolymers) can be studied with success in an ever increasing number of cases. The study of cancer problems by NMR fits just in this general direction of the development of NMR spectroscopy. Though the significance of researches in this field is still inappreciable, its growth is increasing without any doubts.

IRODALOM

1. Cope, F. W.: Biophys. J., **9.** 303 (1969)
2. Hazlewood, C. F., Nichols, B. L., Chamberlain, N. F.: Nature, **222.** 747 (1969)
3. Bratton, C. B., Hopkins, A. L., Weinberg, J. W.: Science, **147.** 738 (1965)
4. Sohár P.: Mágneses magrezonancia-spektroszkópia. Akadémiai Kiadó, Budapest (1976). a) 29—31. o., b) 22. o., c) 24. o., d) 344. o.
5. Iijma, N., Fujii, N.: JEOL News, **9a.** 5 (1972).
6. Ernst, E., Tigyi, J., Zahorcsek, A.: Bindungzustand des Wassers und der Elektrolyte Muskel. Acty physiol. Acad. Sci. hung. **1.** 5—26 (1950)
7. Ernst, E.: Biophysics of Striated Muscle. Akadémiai Kiadó, Budapest (1963)
8. Ernst, E.: Inorganic materials in the striated muscle. Acta biochim. biophys. Acad. Sci. hung. **10.** 95—99 (1975)
9. Ernst, E., Hazlewood, C. F.: Inorganic constituents acting in bioprocesses. Part I.: Water. Inorganic Perspectives in Biology and Medicine **2.** 27—49 (1978)
10. Ling, G. N.: A Physical Theory of the Living State. Blaisell, Waltham (1962).
11. Troshin, A. S.: Problems of Cell Permeability. Pergamon Press, New York (1966)
12. Hazlewood, C. F., Nichols, B. L., Chang, D. C., Brown, B.: Johns Hopkins Med. J. **128.** 117 (1971)
13. Fung, B. M.: Biochim. Biophys. Acta, **362.** 209 (1974)
14. Fung, B. M., Wassil, D. A., Durham, D. L., Chesnut, R. W., Durham, N. N., Berlin, K. D.: Biochim. Biophys. Acta, **385.** 180 (1975)
15. Cottam, G. L., Vasek, A., Lusted, D.: Res. Commun. Chem. Pathol. Pharm., **4.** 495 (1972)
16. Damadian, R.: Science, **171.** 1151 (1971)
17. Hazlewood, C. F., Chang, D. C., Medina, D., Cleveland, G., Nichols, B. L.: Proc. Nat. Acad. Sci. (USA), **69.** 1478 (1972)
18. Weisman, I. D., Bennett, L. H., Maxwell, L. R., Woods, M. W., Burke, D.: Science, **178.** 1288 (1972)
19. Hollis, D. P., Saryan, L. A., Morris, H. P.: Johns Hopkins Med. J., **131.** 441 (1972)
20. Frey, H. E., Knispel, R. R., Kruuv, J., Sharp, A. R., Thompson, R. T., Pintar, M. M.: J. Nat. Cancer Inst., **49.** 903 (1972)

21. HOLLIS, D. P., SARYAN, L. A., ECONOMOU, J. S., EGGLESTON, J. C., CZEISLER, J. L., MORRIS, H. P : J Nat. Cancer Inst., **53.** 807 (1974)
22. INCH, W. R., MCCREDIE, J. A., KNISPEL, R. R., THOMPSON, R. T., PINTAR, M. M.: J. Nat. Cancer Inst., **52.** 353 (1974)
23. DAMADIAN, R., ZANER, K. S., HOR, D., DIMAIO, T., MINKOFF, L., GOLDSMITH, M.: Ann. New York Acad. Sci., **222.** 1048 (1973)
24. RANADE, S. S., SHAH, S., KORGAONKAR, K. S., KASTURI, S. R., CHAUGHULE, R. S., VIJAYARAGHAVAN, R.: Physiol. Chem. Phys., **8.** 131 (1976)
25. MILDVAN, A. S., COHN, M.: Advan. Enzymol., **33.** 1 (1970)
26. BLOCK, R. E., MAXWELL, G. P.: J. Magn. Resonance **14.** 329 (1974)
27. INCH, W. R., MCCREDIE, J. A., GEIGER, C., BOCTOR, Y.: J. Nat. Cancer Inst., **53.** 689 (1974)
28. HAZLEWOOD, C. F., CLEVELAND, G., MEDINA, D.: J. Nat. Cancer Inst., **52.** 1849 (1974)
29. COLES, B. A.: J. Nat. Cancer Inst., **57.** 389 (1976)
30. LING, G. N.: Ann. New York Acad. Sci., **125.** 401 (1965)
31. JAMES, T. L., GILLEN, K. T.: Biochim. Biophys. Acta, **286.** 10 (1972)
32. VILLEY, D., MARTIN, G.: Physiol. Chem. Phys., **6.** 339 (1974)
33. GOLDSMITH, M., KOUTCHER, J. A., DAMADIAN, R.: Br. J. Cancer, **36.** 235 (1977)
34. RÁCZ, P., TOMPA, K., PÓCSIK, J.: Exp. Eye Res. **28.** 129 (1979)
35. RÁCZ, P., TOMPA, K., PÓCSIK, J.: Exp. Eye Res. **29.** 601 (1979)
36. WALTER, J. A., HOPE, A. B.: Nuclear Magnetic Resonance and the State of Water in Cells. ("Progress in Biophysics and Molecular Biology.") Pergamon Press, Oxford. **23.** 1 (1971)
37. DAMADIAN, R., ZANER, K. S., HOR, D.: Physiol. Chem. Phys., **5.** 381 (1973)
38. DAMADIAN, R., COPE, F. W.: Physiol. Chem. Phys., **6.** 309 (1974)
39. COPE, F. W., DAMADIAN, R.: Physiol. Chem. Phys., **11.** 143 (1979)
40. GOLDSMITH, M., DAMADIAN, R.: Physiol. Chem. Phys., **7.** 263 (1975)
41. BRUNSCHWIG, A., DUNHAM, L., NICHOLS, S.: Cancer Res., **6.** 230 (1946)
42. FREEMAN, R., HILL, H. D. W.: J. Chem. Phys., **54.** 3367 (1971)
43. COPE, F. W.: Physiol. Chem. Phys., **10.** 535, 541, 547 (1978)
44. DAMADIAN, R.: Biophys. J., **11.** 739, 773 (1971)
45. COPE, F. W., DAMADIAN, R.: Physiol. Chem. Phys., **6.** 17 (1974)
46. SHPORER, M., CIVAN, M. M.: Biochim. Biophys. Acta, **385.** 81 (1975)
47. SHPORER, M., HAAS, M., CIVAN, M. M.: Biophys. J., **16.** 601 (1976)
48. VOLD, R. L., WAUGH, J. S., KLEIN, M. P., PHELPS, D. E.: J. Chem. Phys., **48.** 3831 (1968)
49. FREEMAN, R., HILL, H. D. W.: J. Chem. Phys., **51.** 3140 (1969)
50. KOENIG, S. H., HALLENGA, K., SHPORER, M.: Proc. Nat. Acad. Sci. (USA), **72.** 2667 (1975)
51. ZANER, K. S., DAMADIAN, R.: Science, **189.** 729 (1975)
52. ZANER, K. S., DAMADIAN, R.: Physiol. Chem. Phys., **9.** 473 (1977)
53. KOUTCHER, J. A., DAMADIAN, R.: Physiol. Chem. Phys., **9.** 181 (1977)
54. MAXWELL, L. R., BENNETT, L. H.: Physiol. Chem. Phys., **10.** 59 (1978)
55. ZANER, K. S., DAMADIAN, R.: Physiol. Chem. Phys., **7.** 437 (1975)
56. GIOVANELLA, B. C., MORGAN, A. C., STEHLIN, J. S., WILLIAMS, L. J.: Cancer Res., **33.** 2568 (1973)
57. LAUTERBUR, P. C.: Nature, **242.** 190 (1973)
58. KUMAR, A., WELTI, D., ERNST, R. R.: J. Magn. Resonance, **18.** 69 (1975)
59. HOULT, D. I., LAUTERBUR, P. C.: J. Magn. Resonance, **34.** 425 (1979)
60. LAUTERBUR, P. C.: NMR in Biology. (Szerk.: DWEK, R. A., CAMPBELL, I. D., RICHARDS, R. E., WILLIAMS, R. J. P.) Academic Press, London (1977). 323. o.
61. HINSHAW, W. S., BOTTOMLEY, P. A., HOLLAND, G. N.: Nature, **270.** 722 (1977)
62. MANSFIELD, P., MAUDSLEY, A. A.: Brit. J. Radiol., **50.** 188 (1977)
63. DAMADIAN, R., GOLDSMITH, M., MINKOFF, L.: Physiol. Chem. Phys., **9.** 97 (1977)
64. R. DAMADIAN: U. S. Patent 3,789,832. Filed 17.03. 1972
65. DAMADIAN, R., MINKOFF, L., GOLDSMITH, M., STANFORD, M., KOUTCHER, J. A.: Science, **194.** 1430 (1976)
66. DAMADIAN, R., MINKOFF, L., GOLDSMITH, M., KOUTCHER, J. A.: Naturwissenschaften, **65.** 250 (1978)
67. MIKOFF, L., DAMADIAN, R., THOMAS, T. E., HU. N., GOLDSMITH, M., KOUTCHER J. A., STANFORD, M., Physiol. Chem. Phys., **9.** 101 (1977).
68. GOLDSMITH, M., DAMADIAN R., STANFORD, M., LIPKOWITZ, M.: Physiol Chem. Phys., **9.** 105 (1977).

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981 p. 201—209

AZ OSZTÁLY HÍREI

Osztályülések. Az 1981. február 10-én tartott ülésen az Osztály négyrendbeli doktori kérelem véleményezésével foglalkozott, melyek közül hármat támogatott, egy esetben nemleges álláspontra helyezkedett. Az Akadémiai Díjra beérkezett két javaslatot megvitatva az egyiket nagy szótöbbséggel elfogadta és az Elnökséghez továbbterjesztette. A továbbiakban — osztályelnöki kérésre — állást foglalt amellett, hogy az osztályüléseken a jövőben tudományos előadások is hangozzanak el.

1981. március 10-én az Osztály előadóülésén emlékezett meg Bruckner Győző r. tagról. Beck Mihály r. tag, osztályelnök megnyitója után a volt tanítványok részéről az alábbi előadások hangzottak el:

Kovács Kálmán (SzOTE Orvosi Vegytani Intézet): Különleges szerkezetű aminosavakat tartalmazó peptidek szintézise,

Medzihradszky Kálmán (ELTE Szerves Kémiai Tanszék): Polipeptidhormonok szintézise, hatásmechanizmusuk és metabolizmusuk tanulmányozása,

Szekerke Mária (MTA Peptidkémiai Tanszéki Kutatócsoport): Peptidjellegű hordozók alkalmazása a rákkutatásban,

Furka Árpád (ELTE Szerves Kémiai Tanszék): Egy természetes gamma-glutamilpeptid izolálása, szerkezetvizsgálata és szintézise,

Kajtár Márton (ELTE Szerves Kémiai Tanszék): Ciklopeptidek és ciklusok dilaktámok szintézise és térszerkezetvizsgálata,

Kucsman Árpád (ELTE Szerves Kémiai Tanszék): Sztereokémiai vizsgálatok a kénorganikus vegyületek körében,

Horváth Tibor (Gyógyszerkutató Intézet): Biológiailag aktív cukorszármazékok,

Tóth József (Kőbányai Gyógyszerárugyár): Kortikoidok gyakorlati szintézisének kérdései.

Az ülést Szántay Csaba l. tag, a Szerves Kémiai Bizottság elnöke zárta be.

1981. március 23-án az Osztály Csürös Zoltán r. tag emlékére rendezett felolvasó ülést. Beck Mihály r. tag, osztályelnök megnyitóját az alábbi előadások követték:

Hardy Gyula (MTA KOKI): Lewis-savas komplexek és szerepük szénhidrátkémiai reakciókban,

Petró József (BME): Fémkatalizátorok,

Rusznák István (BME): Cellulóznátriumhidroxid kölcsönhatás hőmérsékletfüggése.

Az ülés Rusznák István, az elhunyt tanszéki utódának zárszavával ért véget.

*

Közgyűlés. Az Akadémia 1981. május 4—5-én tartott közgyűlésének megnyitó nyilvános ülésén került sor többek között az Akadémiai Díjak kiosztására. Az Osztály területéről Dobó János részesült e kitüntetésben a polimerek sugárhatáskémiájában, különös tekintettel az ojtásos kopolimerizáció mechanizmusának és kinetikájának tanulmányozásában és megvalósításában elért eredményeiért.

A közgyűléshez kapcsolódóan az Osztály részvételével az alábbi tudományos ülésszakok zajlottak le:

1981. április 27—28-án a Föld- és Bányászati Tudományok, valamint a Kémiai Tudományok Osztályának rendezésében a következő program szerint:

Április 27-én, hétfőn 9,30 órakor:

Beck Mihály, az MTA r. tagja, a Kémiai Tudományok Osztályának elnöke: Megnyitó.

Vitaindító előadás:

Kapolyi László, az MTA l. tagja: Ásványi kincseink bányászata és hasznosítása.

Felkért korreferálók:

Székely Tamás, a kémiai tudományok doktora: A kémiai kutatások jelentősége az egyes nyersanyagok feldolgozásában,

Rácz Dániel, a műszaki tudományok kandidátusa: A szénhidrogének termelési veszteségét befolyásoló geoműszaki tényezők és a kihozatalnövelő eljárások,

Gagyi-Pálffy András, a műszaki tudományok kandidátusa: Az érc- és ásványbányászati termékek hasznosításának távlati lehetőségei,

Talabér József, a kémiai tudományok kandidátusa: A szilikátipari nyersanyagok és technológiák kölcsönhatása.

Hozzászólások, vita.

Elnöki összefoglaló.

14 órakor:

Vitaindító előadás:

Korányi György, a kémiai tudományok doktora: Az energiahordozók hasznosítási technológiája.

Felkért korreferálók:

Tóth József, a kémiai tudományok doktora: Hatékony szénhidrogéntermelés kémiai módszerekkel.

Gál Dezső, a kémiai tudományok doktora: Oxidáció mint a harmadlagos olajkitermelés és a szén hasznosításának modellje,

Takács Pál, a kémiai tudományok kandidátusa: Szilárd energiahordozók hasznosítására irányuló vizsgálatok,

Bella Lászlóné tudományos osztályvezető: Minőségjavítás lehetőségei a szilárd energiahordozók felhasználásában.

Hozzászólások, vita.

Összefoglaló.

Április 28-án, kedden 9,30 órakor:

Vitaindító előadás:

Nemecz Ernő, az MTA r. tagja: A kémia növekvő szerepe a nem-energiahordozó nyersanyagok felhasználásában.

Felkért korreferálók:

Podányi Tibor, a BKL-Bányászat főszerkesztője: Ércelőkészítés és a kémiai technológiák,

Szántó Ferenc, a kémiai tudományok doktora: Kolloidkémiai feladatok az agyagos kőzetek hasznosításában,

Solymár Károly osztályvezető: Bauxit minőség és a feldolgozási technológia,

Kakasi Lászlóné tudományos csoportvezető: Fizikai-kémiai módszerek a finomszemcsés nemfémes ásványok előkészítésében.

Hozzászólások, vita.

*t*Záró előadás:

Tóth Miklós, a műszaki tudományok doktora: A termeléstechnika és az ásványvagyon gazdálkodás.

Elnöki összefoglaló:

Martos Ferenc, az MTA r. tagja, a Föld- és Bányászati Tudományos Osztályának elnöke.

1981. április 29-én az Agrártudományok Osztálya, a Kémiai Tudományok Osztálya, valamint a Gazdaság- és Jogtudományok Osztálya közös rendezésében a következő program szerint:

Délelőtt 9,30 órakor

Tamássy István, az MTA rendes tagja, az Agrártudományok Osztályának elnöke: Megnyitó

Vas Károly, az MTA levelező tagja: A magyar élelmiszerkutatás helyzete,

KOVÁCS IMRE, MÉM miniszterhelyettes: Élelmiszeripari fejlesztés és a kutatás feladatai,

SIPOS ALADÁR, az MTA levelező tagja: Az élelmiszeripari vállalati gazdálkodás és a kutatás kapcsolata.

Vita, hozzászólások.

Délután 14 órakor:

A vita folytatása. Felkért hozzászólók:

ANTONI FERENC, az MTA levelező tagja, egyetemi tanár, Semmelweis Orvostudományi Egyetem,

BIACS PÉTER, a kémiai tudományok kandidátusa, főosztályvezetőhelyettes, Művelődési Minisztérium,

ELŐDI PÁL, a biológiai tudományok doktora, egyetemi tanár, Debreceni Orvostudományi Egyetem,

FARKAS JÓZSEF, a kémiai tudományok doktora, tudományos igazgatóhelyettes, Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet,

HORN ARTUR, az MTA rendes tagja,

KAFFKA KÁROLY, a műszaki tudományok kandidátusa, tudományos osztályvezető, Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet,

KISS FERENC, főosztályvezető, MÉM,

KOVÁCS FERENC, az MTA levelező tagja, egyetemi tanár, Állatorvostudományi Egyetem,

KURUCZ JÓZSEFNÉ, a kémiai tudományok kandidátusa, műszaki igazgató, Növényolajipari és Mosószergyártó Vállalat,

LÁNG ISTVÁN, az MTA levelező tagja, az MTA főtitkárhelyettese,

LÁSZLÓ ELEMÉR, a kémiai tudományok kandidátusa, egyetemi docens Budapesti Műszaki Egyetem,

LASZTITY RADOMIR, a kémiai tudományok doktora, egyetemi tanár, Budapesti Műszaki Egyetem,

SÁNTA ISTVÁNNÉ, a kémiai tudományok kandidátusa, főosztályvezető, Országos Műszaki Fejlesztési Bizottság,

SOMOS ANDRÁS, az MTA rendes tagja, az MTA alelnöke,

TÓTH-ZSIGA ISTVÁN, ügyvezető titkár, Magyar Élelmezésipari Tudományos Egyesület,

VÁMOS ENDRÉNÉ, a kémiai tudományok kandidátusa, tudományos osztályvezető, Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet.

Zárszó:

BECK MIHÁLY, az MTA rendes tagja, a Kémiai Tudományok Osztályának elnöke.

*

Osztályülés. Az 1981. május 26-án tartott ülésén az Osztály az egyetemi tanári és docensi pályázatok véleményezésével foglalkozott. Alapos vita után a hat pályázat közül négyet támogatott, kettővel nem értett egyet. Ezután az osztályelnök tájékoztatást adott a Művelődési Minisztérium kutatási témapályázatainak véleményezéséről. Az Osztály területi illetékessége alá eső pályázatokat a bizottságok a munkabizottságok bevonásával bírálták el és pontozásos szavazással foglaltak állást. A szavazás után kialakított rangsort, mely a témák száma és az összegköltség tekintetében is jelentékeny korlátozást eredményezett, az Osztály tovább terjeszti. Foglalkozott az Osztály az Akadémiai Kiadó nivójára érkezett kétrendbeli javaslattal és mindkettőt magáévá tette. Végül egyrendbeli doktori kérelmet vitatott meg az Osztály és azt támogatta. Az egyebek során az Osztályelnök bejelentette, hogy MÁRTA FERENC r. tagot az Interational Reviews in Physical Chemistry, továbbá KALLÓ DÉNES a Zeolites c. nemzetközi folyóirat szerkesztőbizottsága tagjai közé választotta. Örvendetes tudomásul szolgál.

Osztályülés. Az 1981. június 9-én tartott ülésen az Osztály mindenekelőtt az akadémiai kutatóhelyek 1976—80. évi beszámolóinak és az 1981—85. évi terveinek véleményezésével foglalkozott. Négy kutatóintézet és hét tanszéki kutatócsoport anyaga került tárgyalásra. Az osztályelnök minden kutatóegység jelentésében megvizsgálására opponenseket kért fel, akik a nagyobb intézetek esetében további szakértőket vontak be a munkába. Az opponensi bírálatok meghallgatása és megvitatása után az Osztály annak a nézetének adott kifejezést, hogy a beszámolók általában jók, helyenként mértéktartóak, azokkal egyetértett és úgy döntött, hogy az opponensi véleményének — a

vita során felmerült néhány apró észrevétellel kiegészítve — mint osztályvélemény kerüljenek tovább terjesztésre. Ezután az analitikai kutatások helyzetéről készült elemzést tárgyalta meg az Osztály, melyet PUNGOR ERNŐ r. tag, mint az Analitikai Kémiai Bizottság elnöke, terjesztett elő. Az elemzést az Osztály vita után elismerőleg tudomásulvette. A következő vitán négy rendbeli doktori kérelmet vizsgált meg az Osztály és valamennyit nagy szótöbbséggel magáévá tette. Végül tudomásul vette a II. félévi Osztályülések tervezetét.

*

PUNGOR ERNŐ r. tagot a japán Society for Analytical Chemistry tiszteletbeli tagjává választotta.

*

A *Kémiai Osztály* és az *Orvostudományi Osztály* közös szervezésében tartott előadóülésén prof. PREOBRAZSENSZKAJA M. N. (Összorosz Onkológiai Tudományos Kutató Központ, Moszkva): Analogues of nucleic acid biotransformation címmel tartott előadást.

*

A *Spektrokémiai Munkabizottság* 1980. november 14-i ülésének előadásai:

CORDINES I.: Beszámoló a KBFI spektrokémiai tevékenységéről. Tömegspektroszkópia,

SZÁVA J. Optikai emissziós színképelemző laboratórium. Geológiai minták vizsgálata,

VAJDA F. Atomabszorpciós szinképelemzés.

*

A *Vegyipari Műveleti Munkabizottság* 1980. november 21-i ülésén a vegyészmérnökképzés keretében folyó gépészeti oktatással és az ahhoz kapcsolódó kutatási tevékenységgel foglalkozott HALÁSZ A. (VVE) és VERBA A. (BME) beszámolói és FÜLÖP J. (MÜKKI) korreferátuma alapján.

*

Az *Analitikai Kémiai Bizottság* 1980. november 21. ülésén a koordinált munkabizottságok értékelő jelentését tárgyalta meg.

*

A *Szilárdtestkémiai Munkabizottság* 1980. november 24-én tartott ülésén nemzetközi konferenciákról szóló beszámolók hangzottak el:

SOLYMOSI F. Szilárd anyagok felületének IV. Nemzetközi Konferenciája,

GÁBOR P-né: Szilárd anyagok reakcióképességének IX. Nemzetközi Konferenciája,

GUCZI L. Kis részecskék és szervetlen klaszterek II. Nemzetközi Konferenciája,

POKOL GY.: Termoanalízis VI. Nemzetközi Konferenciája.

*

A *Vegyipari Gépészeti Munkabizottság* 1980 november 26-i ülésének előadásai:

SZABÓ L.: Az Április 4 Gépipari Művek helyzete, fejlesztési célkitűzései,

HILT L.: Korszerű vízkezelő berendezések fejlesztési irányai,

ŐSZ J.: Termikus gáztalanítók fejlesztése és kísérleti eredményei,

KRUPPA GY.: Csúszógyűrűs tömítések alkalmazási területei, gyártási tapasztalatok,

LAJOS J.: Atomerőművi hőcserélők gyártástechnológiája.

*

A *Lipidkémiai Munkabizottság* 1980. november 26-i ülését a Semmelweis Orvostudományi Egyetem Kórélettani Intézetében tartotta, melynek során az intézet munkatársainak előadásai hangzottak el:

SZOLLÁR L.: A Kórélettani Intézetben folyó lipidanalitikai munkák rövid ismertetése, különös tekintettel a trigliceridek szerkezetvizsgálatára,

PUCSOK J.: A hyperlipaemiák rizikófaktor-jellegének modern koncepciója,

MOLNÁR M.: Lipolitikus enzimek vizsgálata emberi hyperlipoproteinaemiákban,

ZALKA A.: Trigliceridek direkt gázkromatográfiás analízise biológiai mintákban.

*

A *Műanyagkémiai Munkabizottság* 1980. december 2-i ülését a Posta Kísérleti Intézetben tartotta az alábbi napirenddel:

LAJTHA GY. igazgatóhelyettes: A Posta Kísérleti Intézet tevékenységének áttekintése,

BREBOVSZKY J.: Megemlékezés a PKI-ban 20 éven keresztül dolgozott Nobeldíjas Békéssy Györgyről,

WOLKÓBER Z.: Kémiai tárgyú kutatások és vizsgálatok a Posta Kísérleti Intézetben,

PERÉNYI K.: Polietilén alapú kábelkompaundok fotooxidációjának és stabilitásának vizsgálata c. kandidátusi értekezés anyagának munkahelyi vitája.

*

A *Szerves Kémiai Bizottság* 1980. december 2-i ülésén az EGYT Gyógyszervegyészeti Gyárban folyó kutatásokat tekintette át az alábbi program alapján:

PALLOS LÁSZLÓ kutatási igazgató bevezetője,

BENKÓ P.: Kondenzált asz-triazinok gyűrűfelnyílási reakciói,

BERÉNYI D.-né: Gyűrűtranszformációk a kinolin-származékok körében,

BUDAI Z.: Újabb eredmények a szubsztituált cikloalkanon-oxim-éterek körében,

FISCHER J.: Új vérnyomáscsökkentő hatású α-aminosav származékok szintézisei,

VEDRES A.: Néhány érdekes szerves kémiai eredmény
— a szulfonsavészterekkel történő nukleofil szubsztitúciók
— a benzimidazolonok szintézise és
— a 8-azagonánok szelektív átalakításai köréből,

RÁKÓCZI J.: A prosztetikus csoportok, a hatás — szerkezetösszefüggés figyelembevétele biológiailag aktív molekulák tervezésénél és szintézisénél,

KIS-TAMÁS A.: A vetési bagolylepke feromonjának szintézise.

*

A *Biomérnöki Munkabizottság* 1980. december 8-i ülésének programja:

A Munkabizottság témacsaládjainak kialakítása (NYESTE L.)

Kongresszusi ismertetők és tanulmányút beszámolók:

VIth. Intern. Ferm. Symposium (NYESTE L., PUNGOR ERNŐ akadémikus SZENTIRMAY A., UDVARDY I.-né),

XIIIth. Intern. TNO Conference (Biotechnology) (BIACS P.),

Amerikai tanulmányutak (PUNGOR ERNŐ akadémikus SZENTIRMAY A.),

Europian Bioeng. Soc. Reactor Munkabizottságának ülése (JÁRAI M.),

A szocialista országok II. Biomérnöki Szimpóziuma (HOLLÓ JÁNOS akadémikus.)

Ismertető a közeljövő kongresszusairól (NYESTE L.).

*

A *Kémiai Technológiai és Vegyi Környezetvédelmi Munkabizottság* 1980. december 10-i ülésének előadásai:

ZORÁNYI D. (TVK): A vízszennyezés csökkentésére tett lépések és a szennyvíztisztítás helyzete a TVK-nál,

ZORÁNYI D. (TVK): A légszennyezés elleni közdelem a TVK gyáregységeinél,

LUKÁCS J. (TVK): A melléktermék és hulladékhasznosítás helyzetképe és a hulladékmentes technológiák felhasználásának lehetősége a TVK termelő egységeinél.

*

A *Biomérnöki Munkabizottság* 1981. január 9-én tartott ülésén ILLÉNYI T. (Karolinska Institut, Stockholm): Automatikus elemzési módszerek a mikrobiológiában című előadása hangzott el.

*

A *Kromatográfiai Munkabizottság* 1980. december 16-i ülésén a tudományterület 1979—79 évi felmérését vitatta meg.

*

Az *Elektrokémiai Munkabizottság* és az MTA Központi Kémiai Kutató Intézet együttes ülésén, 1981. január 7-én, prof. Dr. KARL SCHWABE (Meinsberg, DDR): Probleme der Korosion und Passivitätsforschung speziell beim Aluminium címmel tartott előadást.

*

A *Termoanalitikai Munkabizottság* 1981. január 14-i ülésének napirendje:

PAULIK F.: Az ICTA és a magyar termoanalitika kapcsolata,

MEISEL T.: A termoanalitikai módszerek általános fejlesztési perspektívái,

PAULIK J.: A hazai termoanalitikai műszerfejlesztés és -gyártás helyzete,

GÁL S.: A hőmérséklet-programozás, -szabályozás,

BUZÁGH É., SIMON L-né: Publikálási lehetőségek, a „Journal of Thermal Analysis" helyzete,

LIPTAY GY.: A termikus analízis módszereinek, metodikáinak helyzete és fejlődési irányaik,

VÁRHELYI G.: Kinetikai kiértékelés problémái a termikus analízis területén,

GÁBOR P-né: Termoanalitikai kutatások a szervetlen kémia területén,

MOHAI B.: Fémkomplexek termikus vizsgálata,

FODOR M.: Termoanalitikai módszerek alkalmazása a reaktorkémiai és szilárdtest-kutatásokban,

JUHÁSZ Z.: Termoanalitikai módszerek alkalmazási lehetősége az építőanyagok kutatásában,

SAJÓ I.: Az oldatos termometriás elemzés jelenlegi helyzete,

VARGA J.: Termikus módszerek a polimer kémia és fizika területén.

HORKAI F., TÁLAS F.-né: Termoanalitikai vizsgálatok helyzete a lakk-festék iparban,

GYÖRE J.: A termoanalitikai módszerek alkalmazása a BM munkájában.

BERÉNYI M.: A termoanalitika orvostudományi alkalmazása.

SIMON J.: Termikus analízis alkalmazása és égéskésleltetők kutatásában.

SZTATISZ J.: Termoanalízis a gyógyszerkutatásban.

*

A *Szerves Kémiai Bizottság* 1981. január 27-i előadóülésének programja:

NESZMÉLYI A. (MTA Központi Kémiai Kutató Intézet): Komplex szénhidrátok szerkezeti analízise ^{13}C-NMR-spektroszkópiával (különös tekintettel az oligoszacharidokra),

KALAUS GY., GYŐRY P., PEREDYNÉ-KAJTÁR M. RADICS L., SZABÓ L., SZÁNTAY CSABA akadémikus (BME Szerves Kémiai Tanszék és MTA Központi Kémiai Kutató Intézet): Helyettesített indolo(2,3-a)kinolizinon származékok előállítása a Pictet-Spengler reakció kiterjesztésével.

*

A *Műanyagkémiai Munkabizottság* 1981. február 17—18-i ülésszakának napirendje:

TÜDŐS FERENC akadémikus: Bevezető,

FEHÉRVÁRI Á., FÖLDES-BEREZSNICH Z., TÜDŐS F.: Etil-akrilát(sztirol)benzol kopolimerizációs rendszer kinetikai vizsgálata,

TÁNCZOS I., TÜDŐS F., FÖLDES-BEREZSNICH T., REHÁK Á.: Molekula-inhibitorok vizsgálata gyökös polimerizációban és kopolimerizációban,

KENDE I., KAWKA L., MÁRIÁSSI B., TÜDŐS F.: A vinil-klorid heterogénfázisú polimerizációjának kinetikai vizsgálata,

LÁSZLÓ-HEDVIG ZS., SZESZTAY M., FAIX F., GÁCSNÉ-BAITZ E., TÜDŐS F.: A furfuril-alkohol — formaldehid savkatalizált polikondenzációs reakciójának néhány jellemző vonása,

AZORI M., CSÁKVÁRI É., PATÓ J., FEHÉRVÁRI F., TÜDŐS F.: Polimergyógyszerek szintézise és vizsgálata.

*

A *Fizikai-Kémiai és Szervetlen Kémiai Bizottság* 1981. február 23-i ülésén SZÉKELY T. az Anyagtudományi és Anyagtechnológiai OKKFT feladatrendszerről számolt be. SOHÁR P. értékelése alapján a bizottság megvitatta az akadémiai anyag- és molekulaszerkezeti kutatások eredményeinek felhasználását a jelen ötéves tervidőszakban a „Biológiailag aktív vegyületek kutatásában".

*

A *Radioanalitikai Munkabizottság* és az *Izotópalkalmazási Munkabizottság* 1981. február 24-i ülésén SZABÓ A.: Bór, stroncium és cézium koncentrációjának és eloszlásának, valamint ezen mikroelemek koncentrációját befolyásoló tényezők vizsgálata biológiai anyagokban. A bizottság emellett összeállította a f. évi ülések programját.

*

A *Kémiai Technológiai és Vegyi környezetvédelmi Munkabizottság* 1981. március 4-i ülésének napirendje:

Az Országos Környezet- és Természetvédelmi Hivatal kérésére a veszélyes hulladékok keletkezésének ellenőrzéséről és azok ártalmatlanításával kapcsolatos tevékeny-

ségekről szóló minisztertanácsi rendelettervezet megvitatása. (Előadó: ÁRVAY J. OKTH főosztályvezetője.).

KERÉNYI E. osztályvezető (MÁFKI), a VEAB Környezetvédelmi munkabizottságának elnöke: Beszámoló a Környezetvédelmi Munkabizottság 1974—1980 közötti tevékenységéről.

*

A *Makromolekuláris Kémiai Bizottság*, a *Műanyagfizikai Munkabizottság*, az MKE és a GTE Műanyagipari Szakosztályaival és azok leninvárosi helyi szervezeteivel együttesen rendezett ülésének (1981. április 23—24.) programja:

Titkári beszámoló a munkabizottságok tevékenységéről az Osztályon tartott megbeszélésről.

BARÁTOSSY J. (VEGYTERV): A vegyipari készülékek fejlődési irányai, nemzetközi trendek, hazai igények.

ZSUGA M. (KLTE): Cseppfolyós nitrogén alkalmazása a hazai gyógyszergyártási reaktortechnikában (Társszerzők: ELEK S., MIHÓK L.-né (BIOGAL) és GULYÁS L. (KLTE)).

SISKA J. (BME): Rétegreaktor alkalmazási lehetőségei szerves szintézisekben (Társszerzők: KOVÁCS L., RÖHRICHT A.-né (BME)).

FÁBRY GY., TAKÁCS I. (Richter KGY): Újabb készülékek és berendezések a gyógyszeriparban.

HUSZÁR ANDOR vezérigazgató (Tiszai Vegyi Kombinát): Megnyitó előadás.

VARGA J., BELINA K., GARZÓ G., SOLTI Á., MOLNÁR I.: A polipropilén szferolitos szerkezete.

SAMAY G., FÜZES L.: Poliolefin termékek jellemzése GPC-vel.

ROCKENBAUER A., JÓKAY L., MOLNÁR I., SERFŐZŐ I., TÜDŐS FERENC akadémikus: Polietilén-polipropilén keverékek vizsgálata ESR spinszonda módszerrel.

KARGER-KOCSIS J., BODOR G., KALLÓ D-né: Elasztomerekkel ütésállóvá tett polipropilén rendszerek tulajdonság-szerkezet összefüggése.

ÁKONCZ E., SERFŐZŐ I.: Adalékolt poliolefinek technológiai modellezése VISKO-SYSTEM laborextruderen.

JÓZSA S., MOLNÁR I.: Adalékolt poliolefin féltermékek továbbfeldolgozása pneumatikus formázással.

*

A *Szilikátkémiai Munakbizottság* 1981. május 4—5-i ülésén a szilikátipar kutatási és műszaki-fejlesztési feladataival foglalkozott FARKAS Ö. (ÉVM Műszaki Fejlesztési Főosztály), TALABÉR J. (SZIKKTI) és PAUKA I. (Pollack Mihály Műszaki Főiskola) bevezető előadásai alapján.

*

A *Termoanalitikai Munkabizottság* 1981. május 7—8-i ülésének előadásai:

ARNOLD M., VERESS. G., PAULIK F., PAULIK J. (BME): Ellentmondások a heterogén reakciókinetikai számításokban az Arrhenius modell használata során.

VÁRHEGYI G. (MTA Szervetlen Kémiai Kutató Laboratórium): A reakciókinetika helyzete a termikus analízis területén.

POKOL GY., GÁL S. (BME): Termoanalitikai görbék reprodukálhatósága.

TAMÁS F. (VVE): Kerámiai ferritek termomágneses viselkedése.

K. GYŐRYOVA, MOHAI B. (Kassai Tudományegyetem — VVE): „Ónium"-kationos cianometalátok hőbomlása.

JÓNÁS K., VARSÁNYI I., HORVÁTH A., UNGVÁRI I. (VVE): Fogzománcok egyes komponenseinek meghatározása derivatográfiás módszerrel.

REISZ T.-né (VVE): Olajpala derivatográfiás és termogáztitrimetriás vizsgálata.

KRISTÓF J. (VVE): Ioncserélt Y-zeolitok termoanalitikai vizsgálata.

*

A *Fizikai-Kémiai és Szervetlen Kémiai Bizottság* és annak *Anyag- és Molekulaszerkezeti, Kolloidkémiai*, valamint *Szilárdtestkémiai Munkabizottsága* által „Felületi tulajdonságok és jelenségek" címmel, 1981. május 11—12-én, tartott ülésszakának programja:

Bevezető előadás: GIBER J. (BME Fizika i Intézet).

Felületi struktúra, atomelrendeződés (módszerek: TEM, SEM, LEED, IBS).

Előadó: BARNA P. (MFKI).

Korreferálók: KISS J. (Reakciókinetikai Kutatócsoport),

GIBER J. (BME FI).

Koordinációs és kötésanalízis (módszerek: Auger, ESCA, ELS, SIMS).

Előadó: BERÉNYI DÉNES akadémikus (ATOMKI),

Korreferáló: GIBER J. (BME FI).

Kemiszorpciós folyamatok vizsgálata (módszerek: Auger, ELS, TPS, UPS, Flash-deszorpció, Mössbauer, hőmérsékletprogramozott deszorpció, termomérleg).

Előadó: SOLYMOSI F. (RKCs).

Korreferálók: MARTON D. (BME FI),

LÁZÁR K. és GUCZI L. (Izotóp Intézet),

PAÁL Z. (Izotóp Intézet),

BERTÓTI I. (Természettudományi Kutatólaboratóriumok).

Laterális összetételeloszlás, inhomogenitások (elektronmikroszonda, SAM, roncsolásos neutronaktivációs analízis).

Előadó: KORMÁNY T. (TKI).

Korreferálók: PAVLYÁK F. (BME FI),

DÉVAI A.-né (BME Alkalmazott Kém.Tsz.).

Mélységi eloszlás, rétegstruktúrák, átmeneti rétegek (módszerek: SIMS, Auger, RBS).

Előadó: GYULAI J. (KFKI),

Korreferálók: GERGELY GY. (MFKI),

SÓLYOM A. (BME FI).

Felületek elektronszerkezete (módszerek: XPS, TSC, elektronemisszió).

Előadó BELEZNAI F. (MFKI).

Korreferáló: BUGYI L. (RKCs).

Kerekasztal-beszélgetés a jelenlegi helyzetről és a további lehetőségekről.

Vezeti: WOLFRAM E.

*

A *Kémiai Technológiai és Vegyi Környezetvédelmi Munkabizottság* 1981. május 13-i ülésének napirendje:

ANTAL J. (Budapesti Vegyiművek): Tudományterületi elemzés a szervetlen vegyiparra vonatkozóan,

BAGINÉ-GÖBEL M., FRISCH M., SZABÓ L. (Országos Környezet- és Természetvédelmi Hivatal): Tudományterületi elemzés a vegyi környezetvédelemre vonatkozóan.

*

A *Kovalens Szervetlen Vegyületek Munkabizottság* 1981. május 14—15-i ülésszakának előadásai:

MINK J.: Az etilén- és az acetilén pi-komplexei,

VÉKEY K., TAMÁS, J., CZIRA G., I. E. DOLGIJ: Szubsztituens kölcsönhatás trimetil-szilil-szubsztituált ciklopropénvázas vegyületek tömegspektrométerben lejátszódó fragmetációjában,

SZAKÁCS L.: Szilil-karbaminátok alkoholízise, reakciói sav-halogenidekkel és savkloridokkal,

GÁL M., KNAUSZ D., VOLFORD J.: Szilil-karbaminátok rezgési szinképe,

MAYER J., RÉVÉSZ M., HARGITTAI J.: A d-pályák részvétele a hipervalens kén kötéskonfigurációjában,

RÉVÉSZ M., MAYER J.: A szilicium-szén kettős kötés kvatumkémiai vizsgálata,

DOBOS S.: Szilíciumorganikus vegyületek rezgési színképeinek vizsgálata s Szervetlen Kémiai Kutatólaboratóriumban,

PÁRKÁNYI L.: Szilíciumorganikus vegyületek röntgen-diffrakciós vizsgálata a Központi Kémiai Kutatóintézetben,

KERTÉSZ M.: A fémes állapot stabilizálása nemfémes anyagokban.

*

A *Szerves Kémiai Bizottság* előadóüléseinek napirendje:

1981. május 21-én:

TÓTH G. PENKE B. ZARÁNDY M. KOVÁCS K. (SZOTE Orvosi Vegytani Intézet): Metionin és triptofán tartalmú peptidek szulfátészstereinek új, racionális szintézisei,

SZABÓ L. SÁPI J. NÓGRÁDI K. KALAUS GY., SZÁNTAY CSABA akadémikus (BME Szerves Kémiai Tanszék, MTA Központi Kémiai Kutató Intézet és Kőbányai Gyógyszerárugyár): Újabb eredmények a *Vinca*-alkaloidok szintézise területén.

1981. június 4-én:

Prof. H. SUSCHITZKY (University of Salford): Review Lecture on Our Work on Polyhalopyridines,

Prof. P. A. BARTLETT (University of California, Berkeley): Stereocontrol of *via* Cyclization Reactions.

*

Az *Elektrokémiai Munkabizottság* 1981. május 25-i ülését az alábbi napirenddel tartotta:

I. Az MTA SZKKL Elektrokémiai és Korróziós Csoport beszámolója.

LENGYEL B.: Az MTA SZKKL Elektrokémiai és Korróziós Csoport tevékenységének rövid ismertetése,

MÉSZÁROS L.: Faraday-torzításon alapuló módszerek alkalmazása az elektrokémiai és korróziós méréstechnikában,

LENGYEL B.: Az aktív-passzív átmenet potenciósztatikus vizsgálatánál fellépő instabilitások modellezése,

GARAI T.: Gyors redoxifolyamatok vizsgálata intermodulációs polarográfiával és és impedencia módszerrel,

LENDVAYNÉ-GYŐRIK G.: Felületelőkezelőszerek hatásosságának vizsgálata impedancia módszerrel.

II. KÓNYA J.: Ag/Ag^{+} és Fe/Fe^{2+} rendszer heterogén izotópcseréje és elektródfolyamatainak kinetikája. (Kandidátusi értekezés előzetes vitája).

III. KÁLMÁN E.: Ismertető a CODATA-ról.

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója. Műszaki szerkesztő: Marton Andor
A kézirat nyomdába érkezett: 1979. I. 15. — Terjedelem: 13,25 (A/5) ív

81.9153 Akadémiai Nyomda, Budapest — Felelős vezető: Bernát György

СОДЕРЖАНИЕ

Общее собрание АН ВНР в 1980-ом году
Открытое заседание Отделения Химических наук
М. Бек, председатель Отделения: Деятельность Отделения Химических Наук в периоде 1976–80 3
Попрощенные выступать: *Я. Холло, Дь. Хорват, Б. Пецели, Г. Порош, А. Санто* 22
Дискуссия 41
Образование химиков и инженеров в Венгрии
М. Бек: Введение 47
И. Себени: Структура и рамки образования химиков и химиков-инженеров в Венгрии 49
З. Сабо: Проблемы и задачи в образовании химиков и химиков-инженеров в университетах 75
Попрощенные выступать: *К. Йобст, Й. Курц, З. Месарош, Б. Надь, Дь. Задор* 85
Выступления, ответы, заключительное слово 99
Приложение 115

Научное Заседание Отделения Химических Наук по случаю 80-ой годовщины со дня рождения академика Геза Шай 117

Доклады

Ф. Г. А. Стон: Трис (этилен)-платина и сходные комплексные соединения: Общие реагенты для синтеза ди- и три-карбенов и карбинов металлов 155
П. Шарфенберг: Определение структуры и конформации молекул методом квантовой химии 167

Обзоры

П. Шохар, А. Холлош: Возможности применения ЯМР-спектроскопии в диагностике и терапии раковых заболеваний 189
Новости Отделения 201

CONTENTS

General Assembly of the Hungarian Academy of Sciences in 1980
Open session of the Department of Chemical Sciences
Beck, M., President of the Department: Activities of the Department of Chemical Sciences in the period 1976—1980 3
Invited speakers: *J. Holló, Gy. Horváth, B. Péczeli, T. Poros, A. Szántó* 22
Discussion 41
Education of chemists and chemical engineers in Hungary
Beck, M.: Introduction 47
Szebényi, I.: Structure and framework of the education of chemists and chemical engineers in Hungary 49
Szabó, Z.: Problems and tasks of the education of chemists and chemical engineers in universities 75
Invited speakers: *K. Jobst, Mrs. J. Kuracz, Z. Mészáros, B. Nagy, Gy. Zádor* 85
Remarks, replies, closing speech 99
Appendix 115

Meeting of the Department of Chemical Sciences on the 80th birthday of Academician Géza Schay 117

Lectures

Stone, F. C. A.: Tris(ethylene)-platinum and similar complex compounds: General reagents for the synthesis of di- and tri metal carbenes and carbines 155
Schafenberg, P.: Determination of the structure and conformation of molecules by a quantum chemical method 167

Review

Sohár, P., Hollós, A.: Possibilities of the use of NMR spectroscopy in the diagnosis and in the therapy of cancer 189
News of the Department of Chemical Sciences 201

50,— Ft

TARTALOMJEGYZÉK

A Magyar Tudományos Akadémia 1980. évi közgyűlése
A Kémiai Tudományok Osztályának nyilvános ülése
Beck Mihály osztályelnök: A Kémiai Tudományok Osztályának 1976—1980. közötti tevékenysége ... 3
Felkért hozzászólók: *Holló János, Horváth Gyula, Péczeli Béla, Poros Tamás, Szántó András* ... 22
Hozzászólások ... 41
A hazai vegyész- és vegyészmérnök-képzés
Beck Mihály: Bevezető ... 47
Szebényi Imre: A hazai vegyész- és vegyészmérnök-képzés szerkezete és keretei ... 49
Szabó Zoltán: Az egyetemi vegyész- és vegyészmérnök-képzés problémái és feladatai ... 75
Felkért hozzászólók: *Jobszt Kázmér, Kurucz Józsefné, Mészáros Zoltán, Nagy Bálint, Zádor György* ... 85
Hozzászólások, válaszok, zárszó ... 99
Függelék ... 115

A Kémiai Tudományok Osztálya felolvasó ülése Schay Géza akadémikus 80. születésnapja alkalmából ... 117

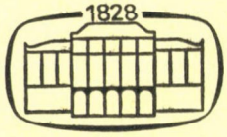
Előadások

F. G. A. Stone: Trisz(etilen)-platina és hasonló komplex vegyületek: Általános reagensek a di- és tri-fém karbének és karbinek szintéziséhez ... 155
P. Scharfenberg: Molekulák szerkezetének és konformációjának meghatározása kvantumkémiai módszerrel ... 167
Összefoglaló értekezés
Sohár Pál, Hollós Andrea: Lehetőségek az NMR spektroszkópia felhasználására a rákdiagnosztikában és a rák-terápiában ... 189
Az Osztály hírei ... 201

Megjelent 1981. VIII. 17-én.

Index: 26.406

ISSN 0022—9814



Kémiai Közlemények

56 kötet 3–4

Főszerkesztő
Beck Mihály

A Magyar
Tudományos Akadémia
Kémiai Tudományok Osztályának
Közleményei

Akadémiai Kiadó, Budapest 1981

KEKOAS 56(3–4) 213–458 (1981)

KÉMIAI KÖZLEMÉNYEK

A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA
KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYÁNAK KÖZLEMÉNYEI

56. KÖTET 3—4. SZÁM

Főszerkesztő:
BECK MIHÁLY

Szerkesztő:
CSÁKVÁRI BÉLA

A szerkesztő bizottság tagjai:
HARDY GYULA, HOLLÓ JÁNOS, LENGYEL BÉLA,
PUNGOR ERNŐ, SCHAY GÉZA, SZABÓ ZOLTÁN,
SZÁNTAY CSABA, TÜDŐS FERENC, VAS KÁROLY

A Kémiai Közlemények változó terjedelmű füzetekben jelenik meg. Egy kötet általában négy füzetből áll. Évente általában két kötet kerül kiadásra.

A folyóiratban a Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Tudományok Osztályán, bizottságaiban és munkabizottságaiban, ill. akadémiai rendezvényeken elhangzott kémiai előadások, továbbá egy-egy tudományág újabb eredményeit kritikailag összefoglaló értekezések, az Osztály és bizottságai munkájáról szóló beszámolók és értékelések, egy-egy intézmény kutatómunkájáról szóló összefoglaló ismertetések, nemzetközi rendezvényekről szóló beszámolók, könyvbírálatok stb. kerülnek közlésre.

A kéziratokat a 48. kötet 277—278. oldalán közölt Tájékoztató szerint elkészítve, valamint 5—15 soros magyar és angol nyelvű összefoglalással ellátva CSÁKVÁRI BÉLA, Budapest, Múzeum körút 6—8. címre (postai küldemény esetén: 1445 Bp. 8. Pf. 323) kell beküldeni.

A Kémiai Közlemények előfizetési ára kötetenként 100 forint. Belföldi megrendelések az Akadémiai Kiadó (1363 Budapest, Alkotmány u. 21. — Pénzforgalmi jelzőszám: 215—11488), külföldi megrendelések a „Kultura" Külkereskedelmi Vállalat (1389 Budapest, Fő utca 32. — Pénzforgalmi jelzőszám: 218—10990) útján eszközölhetők.

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 213—224

AZ AGRÁRTUDOMÁNYOK OSZTÁLYA, A KÉMIAI TUDOMÁNYOK OSZTÁLYA, A GAZDASÁG- ÉS JOGTUDOMÁNYOK OSZTÁLYA AZ MTA 1981. ÉVI KÖZGYŰLÉSÉHEZ KAPCSOLÓDÓ ÁPRILIS 29-i EGYÜTTES NYILVÁNOS OSZTÁLYÜLÉSE

A MAGYAR ÉLELMISZERKUTATÁS HELYZETE

VAS KÁROLY

az MTA levelező tagja

Az élelmiszerkutatás az élelmiszertudomány fejlesztését célzó kutatási tevékenység. Az élelmiszertudomány maga a kémia, a fizika, a biológia, a medicina, az agrár-, a műszaki és az ökonómiai tudományok segítségével komplex módon foglalkozik az emberi szervezet élelmi anyagokkal történő helyes ellátásának tanulmányozásával. Tipikusan határterületről van szó, melynek tudományági összefüggéseit, elágazásait BORGSTRÖM nyomán az 1. ábra mutatja be (G. BORGSTRÖM: Principles of Food Science, Vol. II., Macmillan, New York, London, 1968).

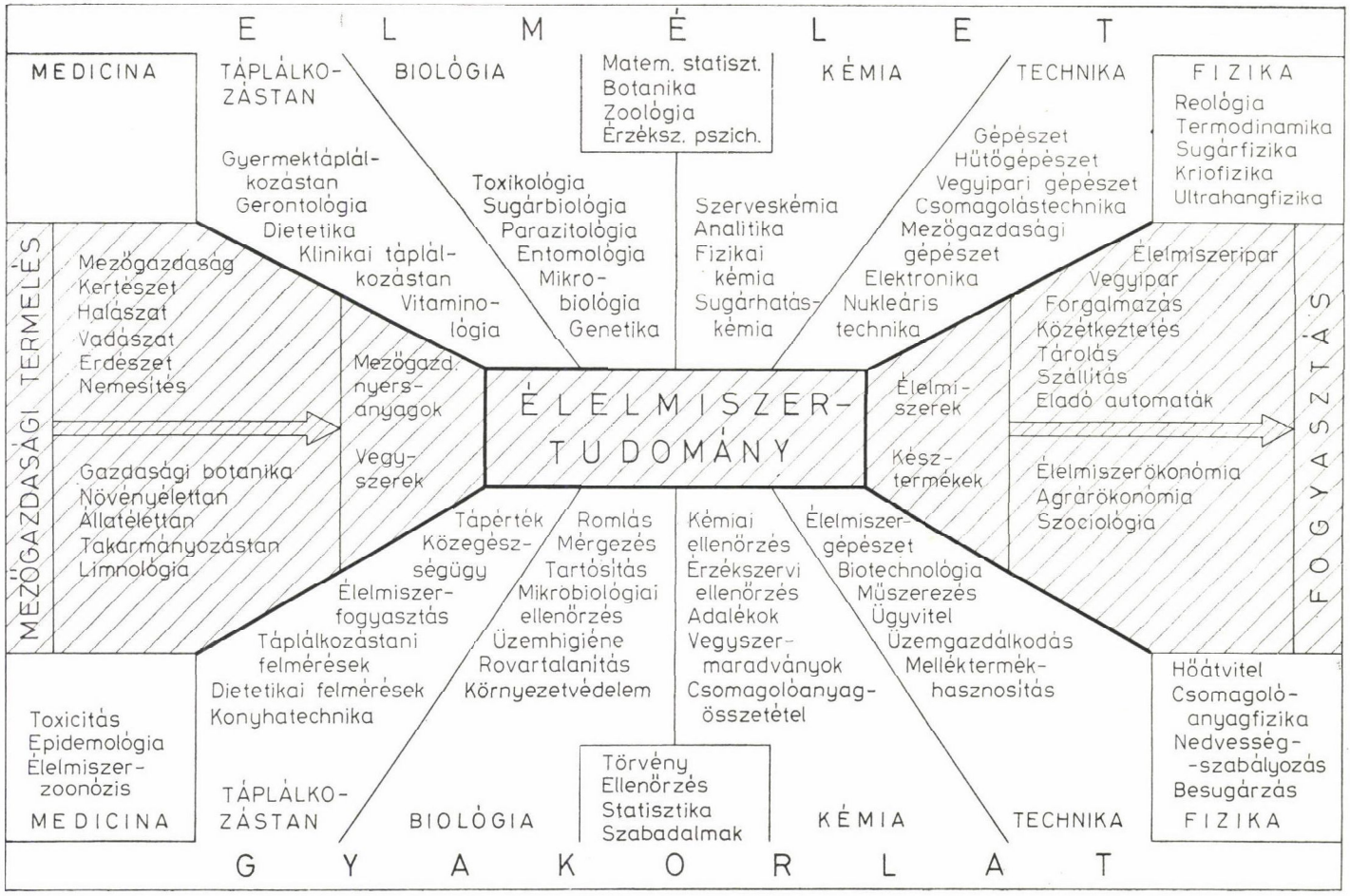
Gyakorlati célkitűzéseit tekintve, az élelmiszertudomány az élelmiszeripar fejlesztésének alapvető eszköze. Hazánkban ezért az élelmiszerkutatás nagy népgazdasági jelentőségű tevékenység, hiszen a magyar ipar második legnagyobb ágát szolgálja, mely a teljes ipari termelési érték közel egyötödét, a teljes magyar export 12%-át, ezen belül a konvertibilis valutával bonyolódó export 19%-át adja. Brutto termelési értéke 1980-ban 219 milliárd forint. Az élelmiszeriparban dolgozók száma ugyanakkor 202 ezer volt. Az élelmiszeripar jelentőségét külön aláhúzza az a tény, hogy hazánkban ennek az iparnak van meg az alapanyagbázisa, importhányada pedig ennek a legkisebb.

Az élelmiszer-előállítás az ország minden lakósát naponta és közvetlenül érintő népgazdasági tevékenység, melynek politikai jelentőségét nem szabad alábecsülni. A külkereskedelem útján — közvetve — ugyancsak meghatározó szerepet tölt be ez az iparág az életszínvonal alakulásában.

Az élelmiszeripar népgazdasági és politikai jelentőségét a vonatkozó párthatározatok és kormányintézkedések világosan felismerték, ill. aláhúzták.

Az élelmiszeripar kb. 30 éve kezdődött hatalmas fellendülésével párhuzamosan az élelmiszerkutatásra fordított eszközök is fejlődtek, új kutató helyek sora jött létre. 1978-ban 10 kutató intézetben, 4 kutató-fejlesztő intézményben és 10 tanszéken összesen 490 teljes munkaidőre számított kutató és 1146 egyéb alkalmazott dolgozott a területen.

Előadásom célja az itt folyó kutató munkának az elemzése és javaslattétel a továbbfejlődés biztosítását szolgáló intézkedésekre.


E L M É L E T
MEDICINA
TÁPLÁLKOZÁSTAN
BIOLÓGIA
Matem. statiszt.
Botanika
Zoológia
Érzéksz. pszich.
KÉMIA
TECHNIKA
FIZIKA
Reológia
Termodinamika
Sugárfizika
Kriofizika
Ultrahangfizika
Gyermektáplálkozástan
Gerontológia
Dietetika
Klinikai táplálkozástan
Vitaminológia
Toxikológia
Sugárbiológia
Parazitológia
Entomológia
Mikrobiológia
Genetika
Szerveskémia
Analitika
Fizikai kémia
Sugárhatáskémia
Gépészet
Hűtőgépészet
Vegyipari gépészet
Csomagolástechnika
Mezőgazdasági gépészet
Elektronika
Nukleáris technika
MEZŐGAZDASÁGI TERMELÉS
Mezőgazdaság
Kertészet
Halászat
Vadászat
Erdészet
Nemesítés
Gazdasági botanika
Növényélettan
Állatélettan
Takarmányozástan
Limnológia
Mezőgazd. nyersanyagok
Vegyszerek
ÉLELMISZER-TUDOMÁNY
Élelmiszerek
Készítmények
FOGYASZTÁS
Élelmiszeripar
Vegyipar
Forgalmazás
Közétkeztetés
Tárolás
Szállítás
Eladó automaták
Élelmiszerökonómia
Agrárökonómia
Szociológia
Tápérték
Közegészségügy
Élelmiszerfogyasztás
Táplálkozástani felmérések
Dietetikai felmérések
Konyhatechnika
Romlás
Mérgezés
Tartósítás
Mikrobiológiai ellenőrzés
Üzemhigiéne
Rovartalanítás
Környezetvédelem
Kémiai ellenőrzés
Érzékszervi ellenőrzés
Adalékok
Vegyszermaradványok
Csomagolóanyag-összetétel
Élelmiszergépészet
Biotechnológia
Műszerezés
Ügyvitel
Üzemgazdálkodás
Melléktermékhasznosítás
Hőátvitel
Csomagolóanyagfizika
Nedvesség--szabályozás
Besugárzás
Toxicitás
Epidemológia
Élelmiszerzoonózis
Törvény
Ellenőrzés
Statisztika
Szabadalmak
G Y A K O R L A T

1. ábra

1. Tudományos eredmények

A magyar élelmiszerkutatás igen sok, tudományosan fontos eredményt tud felmutatni. Csak példaképpen lehet itt néhányat ezek közül felsorolni, bízva abban, hogy a korreferátumok egyeseket közülük kissé bővebben is exponálnak majd, ill. általam fel nem említetteket tesznek majd hozzá a helyzetkép teljesebbé tétele céljából. Kitérek ezek kapcsán a hazai kutatási eredmények tudományos elismertségének kérdésére is.

1.1. Néhány eredményes kutatási terület

Azoknak a kutatási területeknek egy részét, melyeken a nemzetközi élvonalban vagyunk, a következőkben szeretném felvillantani.

1.1.1. Élelmiszerek minőségének mérése

Exportra orientált iparunk alapvető érdekében állt mindig is az élelmiszerek összetételének vizsgálatára szolgáló analitikai eljárások kutatása, biológiai (mikrobiológiai), fizikai és érzékszervi minősítésre szolgáló módszerek kidolgozása.

A múltban világszerte elismert eredményeket hozó magyar vitamin (főleg C-vitamin)-meghatározási kutatások mellé az aromaanyagkutatások kezdenek felzárkózni. Ezek során újabban bizonyos aminoknak paradicsomkészítményekben való jelenlétére derült fény. Sikerült továbbá — a világon elsőként — szeszes párlatok gyümölcsbázisának identifikálására szolgáló kromatográfiás rendszer kidolgozása.

Sok sikeres magyar módszer született az élelmiszeranalízis folytonossá tételére is.

A lipidkémia terén jelentős sikereket értek el hazai kutatók, s újszerű megállapításokra jutottak a lipideknek az élelmiszerminőségben játszott szerepét illetően.

Nagyon sok várható attól az újabb kutatási törekvéstől, mely az élelmiszerek fizikai paramétereinek mérésével igyekszik a kémiai összetételre következtetni, és ilymódon roncsolásmentes és gyors vizsgálattal biztosítani az üzemi ellenőrzés hatékonyságát. E kutatások sorában jelenleg nagy volumenű, eredeti munka folyik hazánkban az élelmiszerek optikai sajátságainak vizsgálata terén. Még „opak" (átlátszatlan) anyagok (pl. alma, paradicsom, húskészítmények) esetén is képesek vagyunk nemcsak a visszavert fény, hanem a tárgyon átesett fény spektrumát is regisztrálni, és nagy gyorsasággal, beépített számítógéppel értékelni, ill. azt a kémiai összetétellel korrelációba hozni. Az USA Mezőgazdasági Minisztériuma kutató hálózatával közösen, projektszerű együttműködéssel világszerte elismert spektrokomputeres kutatások folynak e területen idehaza.

1.1.2. Fizikai tartósítási módszerek kidolgozása

Igen jelentős kutatási eredmények születtek hazai intézetekben az élelmiszertartósítás módszereinek korszerűsítése terén is. Miután a vegyszeres tartósítás gondolata — főleg a vegyszermaradványoktól való félelem következtében — világszerte fokozódó ellenállásba ütközik, előtérbe kerültek a fizikai elven alapuló eljárások.

Hazai kutatásunk az élvonalban halad e téren pl. a vízaktivitás csökkentését célzó besűrítéses tartósításnak fordított ozmózissal történő megoldásában. Biológialag érzékeny anyagok, pl. gyümölcslevek, enzimoldatok stb. hidegen történő besűrítésére kidolgozott eljárásaink korszerűnek mondhatók.

Ugyanilyennek minősíthető a nagyfrekvenciás szárítási módszer élelmiszeripari alkalmazása is, mellyel a vízelvonás fajlagos energiaszükséglete jelentősen csökkenthető.

Az ionizáló sugárzások élelmiszertartósítási célra történő alkalmazása terén a magyar élelmiszerkutatói gárda ma is a nemzetközi élvonalban halad. Fűszerek, enzimkészítmények, szárítmányok sugárkezelése terén nemzetközi tekintélyünk általánosan elismert, és hasonlóképpen ismertek az eljárás gyakorlati bevezetésére tett erőfeszítéseink is. Számos ENSZ-ösztöndíjas külföldi képzése folyt és folyik e területen hazánkban.

1.1.3. Biokatalizátorok élelmiszertechnológiai alkalmazása

Jelentős tudományos és népgazdasági eredménnyel jártak azok az élelmiszer-enzimológiai kutatások, melyek a fermentációs úton való enzimtermelés mechanizmusát és kinetikáját tárták fel, és az így irányíthatóvá vált gyártási eljárással kapott enzimkészítmények gyakorlati alkalmazását dolgozták ki. Glükózoxidáz-, laktáz-, kimozin-, endopoligalakturonáz-, endo-polimetilgalakturonáz-, pektinliáz- és pektátliáz-készítményeinkkel a sajtgyártásnál, a gyümölcslégyártásnál, a paradicsomlé besűrítésénél sikerült jelentős minőségi javulást, ill. energiamegtakarítást elérni.

Gyümölcsök, zöldségek szöveteiben levő, a termény minőségét a tárolás folyamán befolyásoló enzimkomplexek vizsgálata terén különösen az aromaváltozásokat okozókat tanulmányoztuk eredményesen. Szöveti enzimek hővel történő inaktíválódásával, ill. azok tárolás alatti reaktíválódásával foglalkozó kinetikai kutatásaink nemzetközi együttműködésre szóló felkéretésünket váltották ki visszhangként.

1.1.4. Élelmiszermikrobiológiai kutatások

Alapvető jelentőségűek azok a hazai munkák, melyek spórás baktériumok (Clostridium, Bacillus) spóraképzése és spóracsírázása témakörében folynak. E téren a nemzetközi élvonalba tartozó külföldi intézetek (USA) kezdeményeztek és folytattak velünk együttműködést.

Exportunk szempontjából is fontos az a magyar alapozó kutatás, melynek során a húsalapú élelmiszerek esetleges mikotoxintartalmának vizsgálatával nemzetközi együttműködésben (NSZK) tisztázták a mikotoxinok keletkezésének körülményeit. E vizsgálatok arra az eredményre vezettek, hogy egyik fontos árucikkünkben, a jellegzetes penésztakaróval fedett magyar szalámiban nem keletkeznek mikotoxinok, és így az exportnak emiatt nem lehet akadálya.

1.2. Az eredmények elismertsége

Az előbbiekben rendkívül vázlatosan szemléltetett, az időhiány miatt radikálisan csökkentett számú példában is már volt utalás arra, hogy kutatási eredményeinket a külföld is számon tartja, és azok alapján kapcsolatot keres a magyar élelmiszerkutatókkal.

Kutatási eredményeink nemzetközi elismertetése mégsem mondható kielégítőnek. Különösen korábban született és csak magyarul megjelent originális közleményeink körül van baj. Ezek jórésze nem kerülhetett a nemzetközi irodalom vérkeringésébe. Újabban sokat javít a helyzeten az a tény, hogy *Acta Alimentaria* címen angolnyelvű hazai folyóirat áll a kutatók rendelkezésére, és hogy a külföldi közlésnek sincs akadálya.

A hazai élelmiszerkutatás elismertségének indikátoraként fogható fel az a tény, hogy külföldi tudományos egyesületek, nemzetközi szervezetek, társaságok tagjai között rendszeresen dolgoznak munkatársaink. A CIIA, az ISF, az IIF, az ICC, az OIV, az IUFOST, az IUPAC és egy sor más, hasonló szervezetben van magyar képviselő, egyes egyesületekben vezetői, vezetőségi poszton. Az UNIDO, a FAO szakértői, sőt tisztviselői között is rendszeresen dolgoznak magyar élelmiszerkutatók.

Nemzetközi elismertségre utalnak azok a külföldi meghívások is, melyeket kutatási eredményeink alapján kapnak szakembereink. Kutatóink ENSZ-szakértőkként is nagyszámú külföldi államban dolgoztak már.

Számos nemzetközi folyóirat szerkesztőségébe hívtak meg magyar élelmiszerkutatót.

Itt említendő meg az a tény is, hogy külföldi egyetemeken készült doktori értekezéseket többször opponáltattak már magyar szakemberekkel, sőt egyetemi tanári kinevezések véleményezésére is sok esetben kaptak felkérést (még az USA-ból is) magyar élelmiszerkutatók.

Számos külföldi országból dolgoznak intézeteinkben olyanok, akik tudományos haladásukat tőlünk várják. Ezeknek csak egy része jön fejlődő országokból, sokan dolgoztak már itt fejlett államokból való kutatók (USA, NSZK Dánia stb.) is.

2. Gyakorlati eredmények

Gyakran szokás a kutatóktól számonkérni a gyakorlat terén elért eredményeket. Ipari kutató intézetekben különösen elterjedt a — sokszor türelmetlen — elszámoltatásnak ez a szempontja. A felettes szervek ilyen irányú igényei természetesen jogosak, bár nyilvánvaló, hogy a türelmetlenség mértékén konkrét esetekben lehetne és gyakran kellene is vitatkozni.

Ilyen szempontból a hazai élelmiszerkutatás abban a szerencsés helyzetben van, hogy pusztán elméleti célkitűzésű feladatokon a dolog természetéből kifolyólag nem dolgozhat. Azok az alapozó jellegű munkák, melyekre időnként lehetőség nyílik, célkitűzéseik tekintetében mindig konkrét gazdasági eredményre irányulnak, akkor is, ha mód nyílik arra, hogy a végső gyakorlati cél eléréséhez szükséges alapkérdéseket tudományos igényességgel lehessen megoldani. Az „elefántcsonttorony" típusú munka a mi területünkön szükségszerűen ismeretlen.

A gyakorlati munkánk közben felmerülő alapozó jellegű igények jelentkezése az élelmiszeripari kutatásban már csak azért is elkerülhetetlen, mert — bár az élelmiszeripar a második legnagyobb magyar ipar és népgazdasági, valamint export-jelentősége meghatározó — a többi, fontos népgazdasági területtel ellentétben akadémiai kutató bázissal egyáltalán nem rendelkezik.

Mint mondottam, kutatásaink egésze a gyakorlatot szolgálja. Az eredmények bevezetése így lényegében az ipar fogadó készségének függvénye elsősorban. Tekintettel arra, hogy a magyar élelmiszeripar közismerten nem tartozik a tőkeerős iparok közé, beruházási lehetőségei korlátozottak és nem eléggé programozhatók, a fogadókészség előrebecslése nem tartozik a biztonsággal elvégezhető kutatáselőkészítési műveletek közé.

Még ilyen körülmények között is azt kell mondanunk, hogy kevés olyan területe van a népgazdaságnak, ahol a kutatási eredmények megvalósulása és népgazdasági hasznossága olyan mértékű volna, mint az élelmiszeriparban.

Nem is beszélve az iparági kutató intézetek eredményeiről, melyek közvetlenül realizálódnak az iparágban, példaként az élelmiszeripar központi kutató intézetének erre vonatkozó felméréseit hozom itt fel. Az intézet teljes fenntartási költsége 40 MFt körül van évente. Az intézet által kidolgozott és az iparban eddig, részlegesen bevezetett kutatási eredmények népgazdasági nettó értéke évi 140 MFt, azaz 3,5-szerese az összes — a még meg nem valósultakat is magában foglaló — kutatási eredmény elérésére fordított befektetésnek. Ha a bevezetés teljes körűvé lesz, a faktor értéke 3,5 helyett 19-re is növekedhet.

Joggal állítható tehát, hogy a kutatási ráfordítás a mi területünkön távolról sem meg nem térülő presztizs-befektetés, hanem nagyonis gazdaságos tevékenységet eredményező invesztició. Kereskedelmi nyelven szólva, még a jelenlegi, 3,5 értékű faktor esetén is 0,28 év alatt megtérülő befektetésről van

tehát szó, ami a gyakorlatban igazán kedvező szám, pedig nem is a ténylegesen bevezetett témákra fordított kiadásokról van szó, hanem az egész intézetfenntartási költségeiről, melyeknek a már ténylegesen bevezetett eredményekre eső része az egésznek talán 20—30%-a.

3. A jövő teendői

A hazai élelmiszerkutatás előbbiekben vázolt szép tudományos és gyakorlati eredményei annál értékesebbek, mert nemcsak világviszonylatban, hanem országos összehasonlításban is igen szerény személyi és tárgyi feltételek között születtek.

A kutatás problémáit és ezek megoldásának lehetőségeit igyekszem itt röviden diszkutálni.

3.1. A kutatási témák meghatározása

Gyakorlati végcélkitűzésű kutatás esetén a témák meghatározásának nagy gonddal és a gazdasági célkitűzések ismeretében kell megtörténnie. Ezen a téren a kutatástervezés nagy nehézségekkel küzd abban az esetben, ha nem ismertek előtte az általa szolgálandó ágazat közép- és hosszútávú fejlesztési célkitűzései és beruházási lehetőségei, ill. ezek időbeli ütemezése.

A kutató igazán racionális célokat akkor tűzhet maga elé, ha tudja, hogy a kutatás sikeres befejezésének várható időpontja körül lesznek-e az iparágnak anyagi (főleg beruházási) lehetőségei a kutatási eredmény bevezetésére. Ha ez ismeretlen, akkor a kutatás csak gazdasági hipotézisekre építhet. Ennek szükségszerű velejárója a jelentős tévedések lehetősége, amiért a kutató természetesen nem hibáztatható.

Az intézetek többsége vállalati rendszerben dolgozik, a kutatási célkitűzések ezért sűrűn változnak, legtöbbször évente. Ez — érthetően — a szolid kutató munkát jelentősen nehezíti.

Ami a kutatási feladatok kiválasztását illeti, ésszerű tervezés esetén az élelmiszeriparnál is abból kell kiindulni, hogy azt kell kutatni, amire meglevő eljárást, módszert, eszközt megvásárolni — licencia, know-how formájában — nem lehet. Az utóbbi feladatok részben alkalmazott, részben alapozó kutatás tárgyát képezhetik.

Nagyon gondos elemzés készült az OMFB-ben (1980-ban) azokról a fontosabb kutatási irányokról, melyek művelése a hazai élelmiszeripar ügyének előmozdítását szolgálja.

Az ipar igényeinek felmérése alapján az *alkalmazott* kutatások főbb irányai a következőkben általánosíthatók:

A) Élelmiszerkészleteink növelése a meglevő nyersanyagok jobb hasznosításával.

B) Élelmiszereink tápértékének és minőségének javítása.

C) Az élelmiszerek megőrzése, tárolása, tartósítása.

D) Az élelmiszeripari termelés gazdaságosságának fokozása.

Az élelmiszeripari *alapozó* kutatások fő célkitűzései ugyancsak a gyakorlat feladatainak megvalósítását kell, hogy szolgálják — csak hosszabb távon. Biztosítani kell velük az alkalmazott kutatás és a licencia-, know-how-vásárlás megalapozottságát („adaptációs kutatás"), továbbá a magyar élelmiszeripar speciális és/vagy csak hazailag vizsgálható problémáinak színvonalas megoldását. Itt három fő irány jelölhető ki:

a) Fontosabb élelmiszerkomponensek sajátságainak tanulmányozása az azokat befolyásoló genetikai és ökológiai tényezők vizsgálatával.

b) Élelmiszerek előállítása és tárolása során bekövetkező kémiai, fizikai és biológiai (enzimológiai, fiziológiai, mikrobiológiai) alapfolyamatok törvényszerűségeinek feltárása.

c) Az élelmiszervizsgálati módszertan (kémiai, fizikai, szenzórikus, mikrobiológiai) továbbfejlesztése.

3.2. A kutatás személyi feltételei

Az élelmiszerkutatásban jelenleg dolgozók összlétszáma a szakmának az ország ipari termelésében és exportjában játszott döntő szerepét egyáltalán nem tükrözi. A teljes munkaidőre átszámított kutató intézeti és egyetemi-dolgozók 2,6%-a, a műszaki kutatásban alkalmazottak 4,4%-a (összesen 1636 fő a a 63 263-ból, ill. 37 460-ból) tevékenykedett 1978-ban az élelmiszerkutatásban az egyetemi alkalmazottakat is beleszámítva.

A teljes munkaidőre átszámított tudományos kutatói létszám az élelmiszeriparban 1978-ban 490 fő volt, ami a hazai tudományos kutatások teljes területén dolgozó 25 308 főnek mindössze 1,9%-át teszi ki.

A kutatók számának rendkívül alacsony abszolút értékével ellentétben áll a minősített kutatók viszonylag nagy, 18%-os arányszáma.

Ugyancsak viszonylag kedvező a kutatók és az egyéb alkalmazottak arányszáma: egy kutatóra 2,3 nem-kutatói beosztású dolgozó jutott 1978-ban.

A kutatók továbbképzési törekvései viszont erősen limitáltak. Az aspirantúrára jelentkezők száma igen kicsi. A kutató intézetek többségének vállalati jellege nem kedvez az ilyen törekvéseknek, sőt: a kutatási célkitűzések főhatóságtól, ill. trösztvezetéstől függően sűrűn változó jellege nagyon károsan hat az elmélyült aspirantúra-munkára. Ilyenre leginkább csak a külföldről jött aspiránsok képzése során van lehetőség. Azok a magyar kutatók, akik kandidátusi, doktori értekezést készen (aspirantúrán kívül) nyújtanak be — rendszerint a kutatást megrendelők intenciói ellenére: több évig ugyanazon a témán dolgozva — jutnak el odáig. A megrendelők türelmetlensége a több éven át tartó témákkal szemben nagyon egészségtelen légkört teremthet a tudományos munkás természetes törekvései számára.

Szemléletváltozásra van szükség azon kutatást megrendelők részéről is, akik rosszalólag, gyakran megvetéssel tudnak csak nyilatkozni az olyan tudományos munkáról, melynek „disszertáció" vagy „pusztán publikáció" a célja, ill. eredménye.

A kutatók szakmai továbbképzésének egyéb módozatai közül az ösztöndíjas tanulmányutak területén bőven van pótolni való. A külföldi ösztöndíjasok száma elenyésző, pedig éppen az élelmiszeripar exportcikkeinek minőségi fejlesztése lehetetlen az importáló országok élelmiszereinek és élelmiszerkutatási színvonalának ismerete nélkül. — Még kevésbé kedvező a kép a belföldi ösztöndíjasok vonalán. Itt pedig még csak a devizahiányra sem vezethető vissza a helyzet. A belföldi ösztöndíjas rendszer anyagi támogatásának megreformálása csodákat hozhatna. Az ösztöndíjasnak és — adott esetben családjának — az esetleg más városban levő kutató intézménybe jutását lakás biztosításával és ésszerű költségtérítéssel kell lehetővé tenni. E nélkül nem várható javulás e téren.

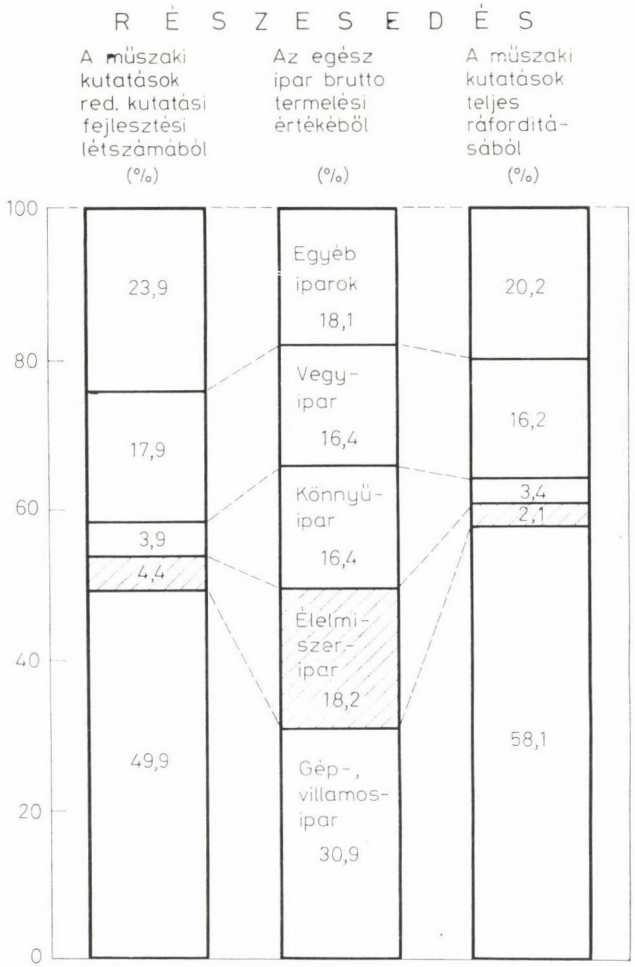
3.3. A kutatás tárgyi adottságai

Ami a magyar élelmiszerkutatás tárgyi adottságait illeti, ezek még országos viszonylatban is szegényesek — nemzetközi viszonylatban pedig különösen azok. Az élelmiszeripar népgazdaságban betöltött szerepének figyelembe vételével határozottan, aránytalanul rosszak a tárgyi adottságok.

Míg az egész ipar bruttó termelési értékének 18,3%-át az élelmiszeripar termeli meg, addig a műszaki kutatásokra fordított összeg teljes értékének mindössze 2,1%-át kapja kutatási célokra (2. ábra). Még világosabb a kutatási ráfordítások képe, ha az egész kutatásra-fejlesztésre költött népgazdasági támogatást nézzük: az élelmiszerkutatás ebből 1,4%-kal (azaz kb. 1/70 résszel) részesül. Az élelmiszerkutatás felszereltsége, műszerekkel, kísérleti üzemmel való ellátottsága — hazai viszonylatban is — különösen gyenge. Az ennek magyarázatára, ill. mentségére gyakran felhozott érv, hogy ti. az élelmiszerkutatás nem beruházás-, ill. műszerigényes, továbbá, hogy az élelmiszeriparban nem gyors a termékváltás, teljesen téves. A világ legfejlettebb élelmiszeriparával rendelkező Egyesült Államokban az élelmiszerkutatásra fordított összeg 1970-ben 250 M $ volt (akkori értékben 8,25 milliárd Ft). Ugyanakkor Magyarország 138 MFt-ot költött élelmiszerkutatásra, tehát fajlagosan (lakosságszámra arányosítva) 3-szor kevesebbet. — Ami a termékváltás kérdését illeti: az elmúlt tervperiódusban az élelmiszeripar 530 új termékkel jelentkezett (összesen kb. 4500-féle terméket állít elő).

A kutató intézeteknek nemcsak a felszereltsége gyenge, hanem az elhelyezési adottságai is ilyenek. Építéssel, átépítéssel, korszerűsítéssel kell javítani ezen a méltatlan helyzeten.

A szellemi kapacitások teljes kihasználásának a tárgyi adottságok optimális biztosítása a záloga.



2. ábra

A kutatási ráfordítások kérdését alaposan meg kell vizsgálni a közeljövőben. Miután minden befektetés csak akkor kezdhet hasznot hozni, ha nagysága elér egy bizonyos küszöbértéket (a „kritikus tömeget"), ennek a minimumnak a gondos kimérésére és biztosítására alapvetően szükség van, ha nem akarjuk, hogy az — ugyancsak jelentős, de nem egészen elégséges — befektetés teljesen célját tévessze.

3.4. A kutatás szervezeti és irányítási feltételei

Ahhoz, hogy egy ipari kutató hálózat jól funkcionáljon, szervezeti és irányítási szempontból is kielégítő rendszert kell kialakítani.

Ideális esetben a kutatás-fejlesztés háromlépcsős rendszerét kellene létrehozni tudni:

a) üzemi zavarelhárító és fejlesztő laboratórium

b) iparági kutató-fejlesztő intézet

c) élelmiszeripari kutató intézet.

Jelenleg az iparági kutató intézetek idejük zömét a zavarelhárítás és üzemfejlesztés feladatkörének ellátására kell, hogy fordítsák, miután ez utóbbi a legtöbb iparágban gyakorlatilag hiányzik, ill. nem kielégítő. Az eredmény természetesen az, hogy a gyár napi működése szempontjából elsődleges üzemi zavarelhárítási feladat miatt az iparági kutató intézetek nem nagyon foglalkozhatnak kutatással, sőt gyakran még műszaki fejlesztéssel, engineering feladatokkal sem. E láncszem kiesése viszont hosszabb távon nem maradhat káros következmények nélkül.

Az egész iparág központi kutatási feladataival foglalkozó intézet ilyenformán az iparági kutató intézetek gyakorlati kiesése miatt sok esetben ez utóbbiak feladatainak elvégzésére szorul. Az a tény, hogy szinte egyik intézet sem a saját típusának megfelelő tennivalókat látja el, végső soron a szellemi kapacitás rossz kihasználásához járul hozzá, és a kutatási színvonal általános csökkenéséhez vezet.

Az optimális megoldás a kutatás háromlépcsős tagozódásának megvalósítása lenne. Amennyiben ez jelenleg még nem járható út, átmeneti megoldásként a meglevő — bár hézagos — hálózat kapacitásának maximális kihasználását biztosító, szerződéses összefogás erősítése kínálkozik. Lényegében a keretek az OTTKT (K-11) révén adva vannak. Sikeres kitöltése e kereteknek a középtávú gazdasági fejlesztési tervek és a beruházási lehetőségek ismeretén túlmenőleg a szükséges mérvű kutatás-irányítás és az elégséges pénzügyi alátámasztás biztosítása révén képzelhető el.

Ami az élelmiszerkutatás koordinációjának jelen helyzetét illeti, ez kevésbé tekinthető megnyugtatónak. A MÉM egyes intézeteket bízott meg bizonyos tárcaszintű programok koordinációjával. Az egyik tárcaszintű és az országos szintű (OTTKT-11) kutatási programját vezető KÉKI-ben szerzett tapasztalatok nem utalnak arra, hogy ez a tevékenység hatékonyan volna megvalósítható. Bár minden erőfeszítés megtörténik, az eredmény sok kívánnivalót hagy maga után.

A kutatásirányítás, koordináció hatékonyságához ugyanis vagy főhatósági hatáskörű (hatalmi) szervezet, vagy megfelelő kutatási szerződési pénzkeret felett közvetlenül rendelkező csoport, iroda stb. létrehozására van szükség.

Vállalati jellegű kutató intézetek esetén az utóbbi alternatíva tűnik elképzelhetőnek. Ha sem hatáskör, sem anyagi irányítás nincs, koordináció, ill. irányítás helyett legfeljebb regisztrálásról, nyilvántartásról lehet csak szó.

Itt látszik szükségesnek megemlíteni az élelmiszerkutatás azon panaszát, mely az OKKFT-programok készítése során e területen jelentkezett. A hosszas

és gondos előkészítés, ipari és főhatósági egyeztetés után, kb. 100 kiemelkedő szakember részvételével kialakított élelmiszeripari OKKFT-program végülis nem kerülhetett be az országos szintű programok közé. Jelenleg tárcaszintű programmá (TCP) alakítása folyik, pedig 12 főhatóság 22 intézményének összefogott munkájára épül. Az élelmiszertudománnyal foglalkozók ezt a döntést a terület leértékeléseként tudják csak felfogni.

Egy ilyen, országos szintű tervre szükség van azért is, mert a különböző diszciplinák „összehozása" egy tárcaközi szerv keretében az egyszerűbb és megfelelőbb.

Bizonyos mértékben a kutatás szervezési kérdéseit is segít megoldani a tudományos társadalmi szervezeteknek a bekapcsolása. A magyar élelmiszertudomány fejlődésében fontos szerepet játszott és játszik a Magyar Élelmezésipari Tudományos Egyesület (MÉTE) is. A jövő feladatai közé tartozik a MÉTE-vel való kapcsolatok még intenzívebb továbbfejlesztése.

*

Összefoglalásként elég annyit aláhúzni, hogy a magyar élelmiszerkutatás eddigi szép eredményei mind elméleti, mind gyakorlati síkon jelentősen fokozhatók volnának a tárgyi feltételek javításával és a kutatáskoordináció hatékonyabbá tételével. A kutatási célkitűzések helyes megállapításához az ipari fejlesztési programok megbízhatóbb ismeretére van szükség. Az élelmiszerkutatás interdiszciplináris összefogást igénylő tevékenységéhez a különböző tudományágak még konzekvensebb együttműködését kell előmozdítani lehetőleg országos jellegű programok keretében. Az elmondott feltételek biztosítása esetén a magyar élelmiszerkutatás, mely eddigi sikereivel is már bizonyított, még eredményesebben tud majd dolgozni a tudomány termelő erővé válásán a maga területén.

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 225–23

AZ ÉLELMISZERIPARI FEJLESZTÉS ÉS A KUTATÁS FELADATAI

KOVÁCS IMRE

MÉM-miniszterhelyettes

Örömmel vállalkoztam előadásom megtartására, hiszen az agrártermelés, s ezen belül az élelmiszeripar is olyan korszakba lépett a VI. ötéves tervidőszak kezdetével, amelyben a *mennyiségi* szempontok mellett mindinkább a *minőségi* követelmények kerülnek előtérbe, vagyis nemcsak *több*, hanem *jobb*, *versenyképesebb* termékeket kell előállítani. Erre különösen az kényszeríti rá az élelmiszeripart, hogy a belső ellátás magasabb szintű követelményei mellett egyre meghatározóbb jelentőségre tesz szert az export célú fejlesztés.

A VI. ötéves terv szerint az élelmiszeripari többlet termelés mintegy 3/4-ét külpiacokon kell értékesíteni. Ez, párosulva a nemzeti jövedelem termeléséhez való fokozottabb hozzájárulás követelményével, szükségessé teszi, hogy az élelmiszertermelés vertikumán belüli feszültségek, aránytalanságok feloldási lehetőségeit és a feladatok teljesítésének feltételeit a tudomány képviselőivel is megvitassuk és kérjük segítségüket. A tanácskozás jelentőségét az is növeli, hogy gazdasági problémáink megoldásában az agrártermelés nagy szerepet, fontosságot kapott.

Ezért engedjék meg, hogy *feladataink* mértékének értelmezésével és azok *feltételeinek* áttekintésével röviden ismertessem az ágazat fejlesztési elképzeléseit.

Egy ágazat prosperitási lehetőségét sok, néha egymást keresztező tényező befolyásolja. Az élelmiszeripar számára kedvező, hogy termékeivel szemben mind belföldön, mind külpiacokon — a fizetőképes kereslet korlátaival együtt is — viszonylag tartós igénynövekedés jelentkezik.

A keresleti tényező mellett az ágazat jelentőségét a világ minden országában — társadalmi berendezkedéstől függetlenül — kiemelik az élelmiszer ellátás mértékének, színvonalának gazdasági-politikai összefüggései, vagyis a tágan értelmezett stratégiai szerepe.

Élelmiszertermelésünk prosperitását befolyásoló tényezők közül a legdöntőbb, hogy *hazánk kedvező mezőgazdasági termelési adottságokkal* és feltételekkel rendelkezik. A mezőgazdaságilag művelhető terület kivételesen magas részaránya a termelési tradíciók az ökológiai adottságok a fejlett nagyüzemi háttér, az integrált kistermelés, nemcsak az élelmiszeripar hazai nyersanyag

bázisának stabilitását adja, hanem egyben meg is határozza az agrártermelés sajátos súlyát az ország gazdasági életében.

A 70-es évek közepén népgazdaságunk a teljes termelés nagyságát tekintve a 28 európai ország közül a 23. helyen volt. A mezőgazdasági termelés alapján elfoglalt helyünk ennél kedvezőbben alakult (13.) Az agrárexportban elfoglalt 11. helyezésünk pedig még ennél is jobb volt. (Az egy főre jutó élelmiszer kivitel tekintetében a 4—5. helyet foglaltuk el.)

Mindez nem minősíti valós helyzetünket, de utal agrártermelésünk kedvező adottságaira, arra, hogy a belföldi élelmiszer igényeken felül tartós kivitelre fordítható többlettermék előállítására vagyunk képesek.

Ezt bizonyítja az is, hogy az ország külkereskedelmi — különösen a nem rubel elszámolású — forgalmában az agrártermékek nagyobb részarányt képviselnek, mint a népgazdaság termelésében. Kedvező adottságaink mutatkoznak meg abban is, hogy a célszerű szakosodás mellett agrártermelésünk megőrizte sokszínűségét is.

Nemzetközi mércével mérve *mezőgazdaságunk fejlettségét*, helyzetét ösz szességében *jó közepesnek* ítélhetjük. Néhány fontos termék (például a gabonafélék) esetében pedig az élvonalban vagyunk. Ugyanezt mondhatjuk el az egy főre jutó hústermelésről is.

A statikus nemzetközi összevetéskor azonban mindig számolni kell kontinentális éghajlatunk meglepetéseivel, az ebből következő termés ingadozásokkal, az egyes tájegységek szélsőséges ökológiai adottságaival, az ebből adódó készletezési költségekkel.

Az élelmiszertermelés feldolgozási fázisa, tehát az *élelmiszevipavi* tevékenység — jelentős szakágazait különbségek mellett — összességében még elmarad a mezőgazdaság nemzetközi rangjától. Ez elsősorban abból adódik, hogy a vertikum két szakaszának fejlesztésében elsőként a mezőgazdasági termelést kellett a szocialista nagyüzemek megszervezésével, megszilárdításával biztos alapokra helyezni. Ezt követően tudtunk csak erőt fordítani — döntően a hetvenes években — az élelmiszeripar jelentős fejlesztésére. Ennek során a mezőgazdasági termelés és az élelmiszerfeldolgozás közötti aránytalanságok nagyobb részét sikerült megszüntetni, gondjaink azonban ma sem csekélyek. Néhány területen (pl. gabonatárolás, hűtés, fagyasztás) még kapacitáshiánnyal is küzdünk, de *problémáink leginkább a műszaki színvonalat tekintve vannak.*

A termelési erőforrásokkal való ésszerű gazdálkodás következtében az elmúlt ötéves tervidőszakban a mezőgazdaság 12%-kal növelte termelését, megalapozva ezzel az élelmiszeriparban elért 17%-os termelés növelés nyersanyag bázisát.

Az elért növekedés elmarad ugyan az előirányzottól, mégis azt mondhatjuk, hogy eredményes öt évet zártunk, mert jó színvonalú belföldi élelmiszer ellátást tudtunk biztosítani és 23%-kal növeltük a nyers- és feldolgozott élelmiszerek kivitelét.

Az agrártermelés népgazdasági szerepe az V. ötéves tervidőszakban semmit sem csökkent. A népgazdaság bruttó termelésének több mint *egynegyedét*, a nettó termelés *egyötödét* a tervidőszak elején és végén is az agrártermelés adta. Az ország exportjának továbbra is 23—25%-*a*, a dollár elszámolású kivitelnek pedig *egyhavmada* változatlanul agrártermék. Az összes fogyasztáson belül nem mérséklődött lényegesen az élelmiszerek és élvezeti cikkek részaránya sem, ma is eléri a 45%-ot.

Örömmel mondhatom, hogy eredményeink alapján ágazataink tevékenységének társadalmi, gazdasági megítélése kedvező. Ezt erősítette meg pártunk XII. Kongresszusa, állást foglalva az élelmiszertermelés további kiemelt fejlesztése mellett.

Lehetőségeink és ágazataink jelentősége alapján az élelmiszertermelés fejlesztésének célja a *VI. ötéves tervidőszakban* sem változik. Továbbra is alapvető, minden mást megelőző feladatunk, hogy *a hazai lakosság ellátásában* elért jó szintet megtartsuk, illetve tovább emeljük és ezzel hozzájáruljunk az életkörülmények javításához, a jó társadalmi közérzet kialakulásához. Ezt a feladatot, vagyis a még jobb színvonalú ellátást szolgálja a megtermelt élelmiszerek kereken *háromnegyed* része.

Tudjuk, hogy a kiegyensúlyozottabb élelmiszerkínálat érdekében sok a tennivaló. Mindenekelőtt javítani kell a termékek *minőségét*, szélesíteni a *választékot* és — a kereskedelemmel együttműködve — térben és időben egyenletesebbé tenni az *áruterítést*.

Mindezekből látszik, hogy a mennyiségi igények kielégítése alapfeladat, de ennél jellemzőbb követelmény:

— a fogyasztás tudatosabb befolyásolása az élettanilag kedvezőbb táplálkozási struktúra irányába;

— a különböző fogyasztói rétegek igényeinek differenciáltabb kielégítése, beleértve az olcsóbb termékek kívánatos arányának fenntartását; a diabetikus választék bővítését; a háztartási munkát könnyítő feldolgozott termékek fokozottabb bevezetését,

— és végül a csomagolás fejlesztése, a minőség, az eltarthatóság javítása.

A lakosság kiegyensúlyozott élelmiszerellátása mellett — mint már utaltam rá — az élelmiszertermelés fejlesztésének, egyre nagyobb jelentőségű célja *az export növelése*. Ezt a feladatot a termelés volumenének kereken *egynegyede* szolgálhatja.

A bevezetőben ismertetett kedvező adottságaink kihasználása, de főként az ország gazdasági helyzete az agrártermékek kivitelének dinamikus növelését követeli meg. Élelmiszer exportunknak 1985-ig, 1980-hoz viszonyítva *egyharmaddal*, ezen belül a dollár elszámolású kivitelnek még nagyobb ütemben kell nőnie. Egyidejűleg kiemelt figyelmet kell fordítani az import-takarékosságra.

Amikor növekvő export feladatainkról szólunk, reálisan számot kell vetni azzal is, hogy az élelmiszerek külpiacán — pontosabban a fizetőképes piacokon

— éleződik a verseny, nőnek a követelmények. Jelenlegi pozícióinkat megtartani, különösen pedig bővíteni csak akkor leszünk képesek, ha növeljük versenyképességünket. Mi ennek a feltétele?

Mindenekelőtt az, hogy:

— a hagyományos cikkeink mellett újabb korszerű termékekkel szélesítsük export skálánkat,

— nagyobb figyelmet fordítsunk a speciális igények kielégítésére, a kis volumenű termékek kínálatára; a vevők kívánságának megfelelő csomagolásra de elsősorban a termékek kifogástalan és egyenletes minőségére.

Általánosabban fogalmazva: jobban kell alkalmazkodni a piac, a vevők igényeihez. Ezt elérendő döntő jelentősége van a külkereskedelmi vállalatokkal való — kölcsönös érdekekre alapozott — együttműködésnek, az aktívabb piaci munkának, a hullámzó kereslethez való rugalmasabb alkalmazkodásnak és a megbízható, pontos szállításnak.

Nem elég azonban egyszerűen csak növelni kivitelünket. Emellett az is hangsúlyozott követelmény, hogy javuljon a kivitel gazdaságossága, vagyis hogy ráfordításaink térüljenek meg az export árakban. Jelenleg mint ismeretes, e tekintetben igen heterogén a kép: a kifejezetten gazdaságos termékek mellett exportunkban olyan cikkek is szerepelnek, amelyeknek a gazdaságossága nem megfelelő. A termelő munka igényesebb szervezésével, a lehetséges szerkezet váltással, aktívabb külpiaci munkával kell az utóbbin változtatni. Emellett a legkedvezőtlenebb devizakitermelésű termékeink exportját meg is kell szüntetnünk.

A belföldi ellátás és az export feladatok teljesítése a mezőgazdaságtól évi 2,5—2,8%-os, az élelmiszeripartól pedig 2,7—3,2%-os termelésnövelést kíván. Ez a növekedési ütem kisebb ugyan a megelőző tervidőszakban elértnél, mégsem vonhatunk le olyan következtetést, hogy könnyebb dolgunk lesz, mint korábban volt. Ellenkezőleg: nehezebben teljesíthető feladatok előtt állunk. A minőségi követelmények előtérbe kerülése, a szigorúbb belső és külső feltételek mellett a feladat nehézségi fokát növeli, hogy egy viszonylag magas termelési szintről kell dinamikusan továbblépni.

Az egyes szakágazatok termelés növekedésének üteme a nyersanyagtermelés, a piaci lehetőségek függvényében természetesen a VI. ötéves tervidőszakban is differenciált lesz:

— az átlagosnál nagyobb termelésnöveléssel számolunk a növényolaj, a szesz, a bor, az üdítőital és a húsiparban,

— a többi ágazatban az átlagoshoz közelálló növekedést tervezünk.

Az élelmiszeripari feladatok vázlatos bemutatása után a továbbiakban azok megalapozottságáról, teljesítésének feltételeiről kívánok szólni.

A mezőgazdasági kapcsolatokról

Az élelmiszeripar versenyképességének elengedhetetlen javítása változást igényel a szakma mezőgazdasági kapcsolataiban is. Ennek fontosságát úgy érzem, kellően érzékelteti az a tény, hogy *egyrészt* a mezőgazdasági termékek több mint 50%-*a* az élelmiszeripar „közvetítésével" jut el a fogyasztókhoz, *másrészt* pedig az, hogy az élelmiszeripar összes költségeinek kb. 70%-át a mezőgazdasági eredetű anyagok beszerzése teszi ki.

Ez a szoros egymásra utaltság, a mindkét ágazatban egyaránt növekvő feladatok azt igénylik, hogy az élelmiszertermelő vertikum két fázisának kapcsolatát — mindenekelőtt a kölcsönös előnyökre alapozva — még szorosabbá kell tenni.

A piaci igényekhez való rugalmasabb alkalmazkodás érdekében az ipar termeltetési gyakorlatában egyrészt a termelői érdekeltség fokozását, másrészt a minőség szerinti átvétel rendszerének kiszélesítését, a szabványok korszerűsítését, egyáltalán a minőségi termelés előtérbe helyezését kell elérni.

Ugyanakkor a szerződéses fegyelem mindkét fél részéről történő erősítésével javítani kell az élelmiszertermelés tervszerűségét is.

Feladataink között a vertikális kapcsolatok elmélyítése után fontossági sorrendben is a termelési erőforrásokkal való gazdálkodás követelményéről szólni kell.

A VI. ötéves tervidőszakban a népgazdaság egyensúlyi követelményeivel összhangban az élelmiszeriparban is mérséklődik a megvalósítható fejlesztések volumene, ezért kiemelkedő fontosságú a meglevő termelőberendezések jó kihasználása, az anyag- és energia gazdálkodás javítása.

A tevmelőkapacitások kihasználását elemezve megállapítható, hogy

— *az extenzív* kihasználás az élelmiszeriparban kedvezőbb, az átlagos műszakszám magasabb az ipar átlagánál. További nagyobb változás e területen nem várható, vagy mert a technológiai vonalak szűk keresztmetszete azt nem teszi lehetővé, vagy mert a szükséges munkaerő nem áll rendelkezésre. Feladatunk viszont, hogy megkülönböztetett figyelmet fordítsunk az új, korszerű termelőkapacitások kihasználására, ha kell, az elavult berendezések terhére,

— nem ilyen kedvező az *intenzív kihasználás*. A különböző okok miatti állásidő viszonylag magas. Ennek oka egyrészt a nem elég hatékony üzem- és munkaszervezés, másrészt az állóeszközfenntartási (karbantartási) munka alacsony szervezettségi színvonala.

A jobb kihasználás lehetőségére utal, hogy külföldi szervezők néhány vállalatunknál végzett „átvilágítást" követően — a szervezés megrendelése esetére — általában a termelékenység 30%-os növelésére tettek javaslatot. Szakembereinken a sor, hogy igényesebb munkával — nem szégyelve az egymástól való tanulást sem — mielőbb változtassanak ezen.

El kell mondani, hogy a nem kellő kapacitáskihasználás nemcsak a régebbi berendezéseknél tapasztalható, hanem egyes új létesítményeknél, rekonstruált üzemeknél, új, korszerű gépsoroknál is. Ez pedig azt jelenti, hogy esetenként a beruházások előkészítése nem volt elég körültekintő, nem gondoskodtak időben a nyersanyaghátter vagy a felkészített munkaerő biztosításáról, vagy a telepítés volt megalapozatlan.

A kapacitások kihasználásának problémái — a konvertálhatóság korlátai ellenére — arra is felhívják a figyelmet, hogy az ipar kevésbé élt az úgynevezett profil-idegen tevékenységek meghonosításával. Különösen az idényiparágaknál nem használják ki a kiegészítő tevékenység lehetőségét.

A növekvő eszközigényesség terheinek viselése a munkaerő jobb kihasználása érdekében minden vállalatunknál — ahol ez lehetséges — támogatjuk az olyan termelési, szolgáltatási tevékenység beállítását, ami az alaptevékenységet — annak sérelme nélkül — bővíti és reális keresletet elégít ki gazdaságosan.

Előrelépést eredményezne a kapacitás kihasználásban az azonos szakágazatokba tartozó állami, szövetkezeti és egyéb feldolgozó vállalatok közötti ésszerűbb munkamegosztás kialakítása is. Ezen a területen is kevés még a kezdeményezés, pedig élelmiszer feldolgozás mintegy 5400 telephelyen folyik, sok jó alkalmat kínálva az együttműködésre.

Az együttműködés fejlesztésére mindezek mellett lehetőséget ad az is, hogy ipari hátterünk, általában iparszerkezetünk eltér a fejlett országokétól. Hazánkban az élelmiszeriparban olyan tevékenységeket is el kell látni, amit másutt önálló, szakosított vállalatok végeznek el. Ilyenek pl. a karbantartási, javítási, szállítási, raktározási, infrastrukturális (hő, vízellátás, szennyvízkezelés stb.) szolgáltatások. Ezek is jelzik azokat a területeket, ahol a helyi adottságokra figyelemmel eszköztakarékosságot eredményezve fokozni célszerű a vállalatok közötti együttműködést, mert azzal fejlesztési igényt lehet kiváltani.

A meglevő berendezések jobb kihasználása mellett nagyon fontos feladataink megalapozásában, hogy *fejlesztési lehetőségeinket* milyen hatásfokkal használjuk fel a következő években.

Élelmiszeriparunk termelő kapacitása — az V. ötéves tervidőszak alatt minden eddigit meghaladó módon fejlődött és javult a műszaki színvonal is. Ennek ellenére ágazatonként és vállalatonként jelentősen szóródva a műszaki színvonal csak *közepesnek* minősíthető. Az elsődleges feldolgozó kapacitáshoz képest a tárolás, az anyagmozgatás, a csomagolás és a továbbfeldolgozás terén egyes esetekben igen nagy az elmaradottság.

Ennek egyik oka, hogy a mezőgazdasági alapanyagtermelés gyors növekedése miatt az élelmiszeripar a legutóbbi évekig szinte kizárólag extenzíven fejlődött. Elsődleges cél az értékmentő-megelőző feldolgozás feltételeinek megteremtése volt és viszonylag kevés erő jutott a termelési folyamatok komplexitásának kialakítására, a technológiák korszerűsítésére.

A másik ok az, hogy ritkán volt lehetőség egész technológiai vonalak cseréjére, helyette egyes gépegységek, vagy tartozékok pótlására kerülhetett sor, és ez egy—egy termelési folyamatban még üzemen belül is aránytalanságokat, összhang hiányt okoz.

A felzárkózást nehezíti a *háttéripar* helyzete. Az élelmiszeripari gépgyártás teljesítőképessége még az egyszerű pótlási igényt sem fedezi, színvonala — néhány berendezés kivételével — a közepes nemzetközi szintet alig éri el.

A gépipar a jövőben is csak a hagyományosan kialakult területeken tervez gyártmányfejlesztést, de ott sem teljeskörűen. Nem kedvezőbb a helyzet a nem technológiai gépek és berendezések területén sem (szivattyúk, hajtóművek, kötőelemek, szerelvények, anyagmozgató gépek stb.). Élelmiszeriparunk műszaki fejlesztését ezért a jövőben is jelentős részben import gépekre, berendezésekre és alkatrészekre lehet csak alapozni.

A kívánatos mértékű csomagolásfejlesztést — a hazai csomagológépgyártás hiánya, illetve elégtelensége mellett — a korszerű csomagolóanyagok és csomagolóeszközök) különleges alakú, illetve tépőzáras konzervdobozok, konzervipari formaüvegek, korszerű műanyagfóliák és kombinált csomagolóanyagok, nyomdai dobozok, címkék, gyűjtőkartonok stb.) hazai gyártásának hiánya, illetve nem kielégítő színvonala is behatárolja. Örömmel szólok viszont vegyiparunk legutóbbi időben tapasztalt azon törekvéséről, hogy az élelmiszeripar és a mezőgazdaság számára korszerű csomagolóanyagokat fejlesszenek ki. Nagyon remélem, hogy törekvése eredményes lesz. Ez rendkívül fontos, hiszen a nem megfelelő csomagolóanyag akadályozza a külpiacok bővítését, rontja termékeink versenyképességét, illetve növeli az import igényt.

Élelmiszeriparunk műszaki színvonalából, fejlesztési lehetőségeinkből kiindulva a következő évek fejlesztési gyakorlatában a *rekonstrukciónak* kell előtérbe kerülnie. Az előző tervidőszak fejlesztéseinek eredményeként ma már egyértelmű, hogy az élelmiszerfeldolgozás országos hálózata lényegében kialakult. A következőkben a műszaki színvonalra, elsősorban annak javítására, a technológiai folyamatok összhangjának megteremtésére, a versenyképesség növelésére, és nem új létesítményekre kell a figyelmet és a forrásokat fordítani.

A fejlesztési források szűkössége is indokolttá teszi, hogy azt döntő részben korszerű gépek, berendezések beszerzésére, a technológiák komplettirozására fordítsák, minimális építési beruházások mellett. Azt kell tudni elérniük, hogy a gépi beruházásoknál lehetőleg ne legyen visszalépés az V. ötéves tervhez képest, a kisebb invesztíció az építéseknél jelentkezzen.

Az importtakarékosság, termékeink biztonságosabb elhelyezésének követelménye alapján tovább kell vizsgálni annak lehetőségeit is, hogy miképpen tehetjük a korszerű élelmiszergépgyártással rendelkező külföldi cégeket érdekeltté fejlesztéseinkben.

Gyakorlati példák alapján célszerűnek tartjuk egyes fejlesztéseknél olyan használt berendezések importját is, amelyek hazai viszonyaink között

előrelépést jelentenek, a meglevőknél korszerűbb színvonalat képviselnek, műszaki állapotuk még több éves üzemelést tesz lehetővé. Tudjuk, hogy ez a megoldás nem lehet általános, de azt is, hogy az ilyen jellegű fejlesztések világviszonylatban sem elszigeteltek; a nyugati országokban is jelentős a használt gépek forgalma.

Egyes élelmiszeripari termékeink előállításának fejlesztéséhez, néhány elengedhetetlen terménymegóvó beruházáshoz a jövőben is szándékunkban áll az élelmiszeriparon kívüli szabad fejlesztési erőforrások bevonása, melynek eredményességét több, a mezőgazdasági üzemekkel közösen létesített feldolgozónk bizonyítja. Kívánatos lenne, hogy ilyen konstrukcióban necsak a nyersanyagtermelők, hanem a termékforgalmazók is részt vegyenek, megfelelő közös érdekeltségi rendszer kialakítása mellett.

Feladadataink megalapozásában a kapacitás kihasználás mellett döntő szerepe van az *anyaggazdálkodásnak.*

Az élelmiszeripar átlagában az *anyagköltség* meghaladja az összes költség 80%-át. Ez az arány egyértelműen mutatja, hogy a vállalati nyereségnövelésnek egyik fő tényezője és lehetősége a takarékos és szervezett anyaggazdálkodás.

Ezen belül is kiemelten fontos az *energia* gazdálkodás. Az elmúlt öt év energiafelhasználását elemezve megállapítható, hogy az élelmiszeriparban ez összességében kedvezően alakult. Az energiafelhasználás növekedési üteme alatta maradt a termelés növekedési ütemének, annak ellenére, hogy a gépesítettség évről évre emelkedett. Ezt kell céltudatosan folytatni a következő években, hisz az eredmények nem jelentik a tartalékok teljes kiaknázását. Az energiafelhasználás további fajlagos csökkentése irányozható elő beruházás nem igénylő szervezési tevékenységgel, az ellenőrző műszerezettség növelésével, középtávon energia takarékos technológiák alkalmazásával.

Hasonló a helyzet az *alap- és segédanyag* gazdálkodás területén is, ahol lehetőségeinkből kiindulva:

— célul kell kitűzni a termelés anyagigényének technológia fejlesztéssel, szervezési intézkedéssel, a gyártási selejtek csökkentésével megvalósítható mérséklését,
— a nyersanyagok beszerzésénél tovább kell folytatni a minőségi átvétel feltételeinek megteremtését, majd megfelelő előkészítés, az érdekelt termelő üzemekkel való megismertetés után minél szélesebb körben való bevezetését. Ugyanakkor gondoskodni kell arról is, hogy a feldolgozás során a jó minőségű alapanyag értéke tovább növekedjen,
— gyorsítani kell a melléktermékek, hulladékok feldolgozását és a mezőgazdaságban vagy az iparban való hasznosítását.

Az anyagi, technikai feltételek mellett az *emberi tényezőnek* mindig kiemelten fontos szerepe volt és lesz is a termelésben, ezért erről is szólni akarok, hiszen napjainkban és a jövőben a termelés személyi feltétele minden eddiginél

nagyobb hangsúlyt kap. Az élelmiszeripar további fejlődése ugyanis elképzelhetetlen a munka szervezettségi színvonalának és a szakmunka színvonalának emelése, a vezetők vállalkozó szellemének kifejlesztése, a termelésirányítók szakmai képzettségének emelése nélkül.

A személyi feltételeket tekintve az élelmiszeriparban dolgozó fizikai dolgozók 40%-a szak-, 40%-a betanított munkás. Az egyetemet végzettek száma 7000. Ez nem kevés, a szakértelemmel való, jó értelemben vett gazdálkodásunk azonban még sok kívánnivalót hagy maga után. Egyes esetekben a műszaki és technológiai végzettségű szakemberek nem kapnak képzettségüknek megfelelő munkát. Más esetekben pedig főleg — közgazdasági területeken — vezetőállásokban is megfelelő képzettség nélküliek dolgoznak.

Úgy hiszem, ezek után hihetően hangzik, ha azt mondom, hogy igen nagy tartalékaink vannak a szakmai színvonal emelésében. Növelni kell a szakemberek számát, nagyobb figyelmet kell fordítani szakmai ismereteik bővítésére, de legfőképpen arra, hogy a hozzáértő szakemberek mindenütt igényes feladatot kapjanak és munkájuk hasznosságával arányban álló anyagi, erkölcsi megbecsülésben részesüljenek. Az Élelmiszeripari Dolgozók Szakszervezetével, a Magyar Élelmezésipari Tudományos Egyesülettel és az illetékes pártszervekkel közös feladatunk, hogy ezen a téren is előbbre jussunk.

Az élelmiszeripar feladatairól, azok megvalósításának néhány feltételéről szóltam eddig vázlatosan.

Ki kell hangsúlyoznom, hogy eddigi eredményeink is magukban foglalják a *tudomány*, a *kutatási tevékenység* eredményeit és nem tudjuk azt nélkülözni a jövőben sem. Ellenkezőleg, minden eddiginél nagyobb szükségünk lesz arra, hogy a *műszaki*, *biológiai*, *ökonómiai* tudományok eredményeit a gyakorlatba bevezethessük.

Ehhez az szükséges, hogy hazai, vagy külföldi kutatók munkája révén legyenek olyan eredmények, amelyek az élelmiszertermelés versenyképes növelését elősegítik és legyen megfelelő felkészültség, fogadókészség a vállalatok, szövetkezetek részéről azok bevezetésére. Úgy hiszem, a termelő szféra részéről az igény a hasznosítható kutatási eredmények iránt növekszik. A közgazdasági környezet *ösztönző*, illetve *kényszevítő* hatása egyaránt ebben az irányban hat. Azt remélem, hogy ez találkozik kutatóintézeteink törekvéseivel.

A K-11. kutatási célprogram amely „Az élelmiszerek választékának bővítése, feldolgozásuk és tartósításuk új irányait" foglalja magában teljesítésének ötéves tapasztalatai és az iparban jelentkező fejlesztési igények alapján a jövő időszak élelmiszeripari kutatási tevékenységének teendői a következőkben foglalhatók össze:

A központi jellegű és jelentőségű élelmiszeripari kutatások a VI. ötéves tervidőszakban a tárcaszintű kutatási célprogramok, az úgynevezett TCP programok keretében folynak. Az ezekben összefoglalt fejlesztési célkitüzések elsősorban az egész élelmiszeripart vagy több szakágazatot együttesen érintő,

illetve az egyes iparági kutatóintézetek, kutatóhelyek felkészültségét meghaladó, viszonylag gyors megoldásra váró gyártás — és gyártmányfejlesztési feladatokkal kapcsolatos kutatásokat igénylik. Ezen belül változatlanul az *élelmiszerkészletek és alapok* — más szóval a humán célra felhasználható termék — *növelésére*, az élelmiszerek *minőségének*, *beltartalmi és élvezeti értékének javítására*, valamint az élelmiszerek *megőrzésének, tartósításának és tárolásának* fejlesztésére kell törekedni.

A már elfogadott tárcaszintű élelmiszeripari kutatás-fejlesztési célprogramok között a legaktuálisabb szakterületek, így a hús- és baromfiipar, a tartósítóipar (konzerv és hűtőipar) a cukor, a növényolaj és dohánytermelési vertikum, valamint a sütőipar fejlesztési feladatai szerepelnek.

A célprogramok keretében végzett kutatásoktól várjuk a takarékos technikai megoldások, technológiai eljárások kialakítását, a meglevők ilyen értelmű továbbfejlesztését. Ugyancsak várjuk a minőség javításának elősegítését, az ipari melléktermékek, hulladékok humán-, illetve takarmányozású célú hasznosításának legcélszerűbb megoldási módjait, az ipari termelés anyag- és energiaigényességének csökkentését.

Ezen témák hasznosítható kutatási eredményeit minden szakágazat és minden vállalat azt hiszem mielőbb nagyon szívesen alkalmazná.

A szakágazati (iparági) kutatóintézetek, kutatóhelyek tevékenységét elsősorban a helyi fejlesztési célok megvalósításának szolgálatába állítjuk, az eddigieknél szorosabb és koordináltabb együttműködést kialakítva az általános, központi kutatásokat végző Központi Élelmiszeripari Kutató Intézettel, illetve a témákban érdekelt egyéb, tárcán belüli és tárcán kívüli kutatófejlesztő szervekkel. Ezzel is a kutatási munka eredményességét, hatékonyságát kívánjuk elősegíteni.

A kutatási munka hatékonyságának fokozása és a kutatások gazdaságosságának javítása érdekében a Tudománypolitikai Bizottság múlt évi határozata alapján szervezeti korszerűsítéseket is végrehajtunk az élelmiszeripari kutatási hálózatban. Ennek keretében — a megállapított létszámcsökkentés folyamatos végrehajtása mellett — általában egyszerűsítjük a szervezetet, csökkentjük az indokolatlanul megnövekedett adminisztrációt, megszüntetjük az ésszerűtlen párhuzamosságokat, elősegítjük a belső és külső együttműködéseket. Mindezek révén a tényleges kutatómunka racionalisabbá tételét tervezzük mind a központi feladatokat ellátó KÉKI, mind az iparági kutatóintézetek, kutatóhelyek területén.

A kutatási-fejlesztési tevékenység hatékonyságának fokozása érdekében különös figyelmet kívánunk fordítani a számunkra megfelelő *külföldi eredmények hazai adaptálási* lehetőségeinek feltárására, az adaptációs kutatások fokozására. Ezekkel ugyanis a kutatási költségek csökkentése és a gyakorlati megvalósítás időszükségletének lerövidítése nagymértékben elősegíthető, végeredményben a rendelkezésre álló kutatási kapacitások jobban kihasználhatók.

A gyakorlati igényeknek megfelelően a kutatásokat a jövőben mindenkor a szükséges gazdaságossági vizsgálatokkal kiegészítve, *komplex* módon indokolt végezni. Ehhez kapcsolódva a kutatások megindításával egyidejűleg az érdekelt iparterülettel közösen tisztázni kell a várható eredmények gyakorlatbavételének feltételeit is. Konkrét igény, illetve a megvalósítás belátható időn belüli reális lehetőségeinek hiányában — éppen a korlátozott anyagi-pénzügyi körülmények miatt — kutatásokat nem kezdeményezünk, ami természetesen az alapozó és a távlatra szóló kutatásokat nem érinti.

Eredményes kutatói munka mellett nagy szükség van arra is, hogy az élelmiszeripari *vállalatok* — tehát a kutatási eredmények gyakorlati megvalósítói — fokozottabb figyelmet fordítsanak a tudomány eredményeinek gyakorlati alkalmazására. Keressék a bevezethető jó megoldásokat — és mielőbb vezessék be azokat — sőt adjanak minél több igényes rendelést a kutatóknak.

A *kutatók* részéről pedig azt kérem, legyen törekvés arra is, hogy eredményeiket megismertessék a vállalatokkal, segítsék azt bevezetni, hiszen az a kutatási eredmény szolgálja igazán a tudomány és a termelés fejlődését, amelyet a gyakorlatban megvalósítanak. Vagyis szükség van a kutatás és a gyakorlati alkalmazás szorosabb kapcsolatára jobban, mint bármikor.

Feladataink mind a termelésben, mind a kutatásban dolgozók előtt ismertek. Ezen ismeretek birtokában mondhatjuk, hogy ezek a feladatok nagyok. Azt is látjuk azonban, hogy lehetőségeink sem csekélyek, és ha az eddiginél is jobb együttműködést tudunk megvalósítani, egyrészt az élelmiszertermelés vertikumában, másrészt a termelés és a kutatás között, akkor igényes munkával ezek a feladatok megvalósíthatók.

Azt, hogy igényes munkát *tudunk* és *akarunk* végezni, én a legtermészetesebb szakmai és emberi törekvésnek tekintem az élelmiszertermelés különböző területein dolgozók részéről is, ezért feladatainkat reálisnak tartom. Kérem a jelenlevőket és azokat is, akiket képviselnek, hogy együttesen dolgozzunk azok megvalósításán.

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 236—314

AZ ÉLELMISZERIPARI VÁLLALATI GAZDÁLKODÁS ÉS A KUTATÁS FELADATAI

SIPOS ALADÁS

az MTA levelező tagja

A magyar élelmiszertermelésnek népgazdaságunkban betöltött szerepe és jelentősége általánosan ismert, de a nyilvánosság előtt kevés szó esik azokról a nehézségekről és problémákról, amelyekkel a népgazdasági terveket megvalósító vállalatok küzködnek. Viszonylag kevés figyelmet fordítunk a közgazdasági kutatómunkában is az itt jelentkező problémák megoldására, s különösen hiányzik a feladatok interdiszciplináris megközelítése. Nem érdektelen tehát, ha figyelmünket az élelmiszertermelés alapegységeire fordítjuk és ezen belül is elsősorban az állami élelmiszeripar vállalatainak kérdéseivel foglalkozunk.

Tekintsük át az élelmiszeripari vállalatok helyzetét és az általuk megoldandó feladatokat s vizsgáljuk meg, hogy a vállalatok feladatai milyen mértékben állnak összhangban elvégzésük feltételeivel, és az esetleges összhanghiány milyen feszültségeket okoz. A feltételek közül is három témának kívánok kiemelt figyelmet szentelni, éspedig

— a vállalatok önállósága kérdésének,
— a vállalatok önfinanszírozási képességének és
— a termelés és fejlesztés egyes elemei közötti összhang hiányának.

E három fő témához kapcsolódóan más kérdéseket is érinteni kell, mert igen bonyolult és sokrétű problémakomplexummal állunk szemben. Úgy vélem hogy egyfajta vélemény kifejtésével és vitájával segíteni tudjuk az élelmiszeriparra irányuló ökonómiai kutatást legsürgősebb feladatainak meghatározásában.

1. A magyar élelmiszertermelés szerkezete

E helyen nem szükséges az élelmiszertermelésnek népgazdaságunkban betöltött szerepét és jelentőségét ismertetni, de az élelmiszertermelés jelenlegi szerkezetének és az élelmiszeripari vállalatok gazdasági környezetének áttekintése megkönnyíti a vállalatok helyzetének megértését.

A szocialista állami élelmiszeripar az 1948 és 1950. évi államosításokat követő évtizedben alakult ki és vált minden szakágazatában gyáriparrá. Közben olyan új ipari szakágazatok is kialakultak, mint a gyorsfagyasztott árukat gyártó hűtőipar és a keveréktakarmánygyártó ágazat. A gazdaságirányítás 1968. évi új rendszere egy koncentrált és irányításában centralizált élelmiszeriparral rendelkezett, amelynek a közvetlen fogyasztásra kerülő élelmiszerek

gyártása vonatkozásában monopol helyzete volt. A gazdaságirányítás új rendszere ezen a monopol helyzeten változtatott elsősorban, amikor lehetővé tette más szocialista szerveknek is, elsősorban a szocialista mezőgazdasági nagyüzemeknek bekapcsolódását az ipari élelmiszertermelésbe, illetve a mezőgazdasági termékek iparszerű feldolgozásába.

1979-ben az állami és szövetkezeti élelmiszeripar 14 ipari szakágazatban 1679 termelő ipartelep és további 5000 egyéb telep működött, és 159 ezer fő fizikai dolgozót foglalkoztatott. A mezőgazdasági nagyüzemek élelmiszeripari tevékenysége 14%-át produkálta az állami és szövetkezeti élelmiszeripar termelésének. Ezt a termelést 2354 ipartelepen 18 ezer fizikai dolgozó, az állami és szövetkezeti ipar létszámának 12%-a állította elő.

A mezőgazdasági nagyüzemek élelmiszeripari tevékenységének közel felét két szakágazati tevékenység: a húsipari és a boripari termelés adja.

Az élelmiszeripari szakágazatok négy főcsoportja közül az állatot és állati termékeket feldolgozó főcsoport három ipari szakágazata (a hús; a baromfi feldolgozó- és a tejipar) az állami és szövetkezeti élelmiszeripar állóeszközeinek 27%-ával rendelkezik és az élelmiszeripari termelés 41%-át produkálja, míg a többi 11 szakágazat állítja elő a termelés 59%-át. A növényi termékeket feldolgozó szakágazatok főcsoportjában a belföldi kenyérellátás s a gabonaexport-árualap felvásárlása és tárolása szempontjából a gabonaiparnak, export szempontjából a tartósító- és a növényolajiparnak van nagy jelentősége (lásd az 1. táblázatot).

Az állami és szövetkezeti élelmiszeripar nagyobb része (9 szakágazat) nyersanyagszükségletének biztosítása érdekében közvetlen árukapcsolatban van a mezőgazdasági nagyüzemekkel és kisebb részt közvetlenül, nagyobb részt a mezőgazdasági nagyüzemek és az ÁFÉSZ-ek közvetítésével több százezer kisegítő és háztáji gazdasággal. A minisztériumi élelmiszeripar vállalatai végzik az 1957-ben megszüntetett felvásárló nagykereskedelem tevékenységét, amely azt jelenti, hogy egyes szakágazatok (gabonaipar, húsipar) által felvásárolt mezőgazdasági termék egy része nyers, illetve élő állapotban kerül exportra és csak a másik része szolgál a szakágazatnak nyersanyagul.

Az élelmiszeripar további sajátossága, hogy késztermékeinek egy része gyorsan romló, vagy napi fogyasztású cikk, amely nem bírja el a nagykereskedelem közvetítő tevékenységét. Így az ún. „művi" cikkek vonatkozásában az élelmiszeripari vállalatok látják el a nagykereskedelmi funkciót. Ez azt jelenti, hogy az ország 19 ezer élelmiszer boltjába és 18 ezer vendéglátóipari egységébe naponta vagy hetente több alkalommal is ki kell szállítaniuk a megrendelt árumennyiséget. Ez a belföldi élelmiszerforgalomnak mintegy 75%-át jelenti. Ugyanakkor feladat még a visszatérő csomagolások és göngyölegek visszaszállítása is.

Az élelmiszeripar termeli meg azt az árualapot, amely a lakossági kiadások mintegy 45%-át köti le, továbbá azt az export árualapot, amely a népgazdaság összes exportjának 13%-át jelenti.

1. táblázat

A magyar élelmiszeripar szerkezeti megoszlása (az 1979. évi adatok alapján)

Szektorok és szakágazatok	Termelési érték	Fizikai foglalkoztatottak száma %	Állóeszközök bruttó értéke %	Ipar telepek száma	Egy ipartelepre jutó foglalkoztatottak száma fő
Állami és szövetkezeti élelmiszeripar:					
Húsipar	23,4	16,7	15,4	55	462
Baromfifeldolgozóipar	6,1	6,8	3,9	26	402
Tejipar	11,4	7,3	8,1	86	130
Állatot, állati terméket feldogozó szakágazatok	40,9	30,9	27,4	167	292
Tartósítóipar	10,2	16,1	11,6	83	298
Malomipar	14,5	10,1	14,6	281	52
Cukoripar	5,3	6,0	18,0	12	688
Növényolajipar	3,9	1,5	2,2	7	326
Növényi termékeket feldolgozó szakágazatok	33,9	33,7	46,4	383	140
Sütő- és tésztaipar	5,0	15,3	6,6	669	34
Édesipar	7,0	4,6	2,8	28	253
Élelmiszeripari termékeket tovább feldolgozó szakágazatok	12,0	19,9	9,4	697	45
Szesz- és keményítőipar	2,6	2,7	3,9	63	64
Boripar	3,9	4,3	4,3	193	34
Söripar	2,7	4,6	6,3	25	278
Ásványvíz- és üdítőitalt gyártó ipar	0,5	1,1	0,5	115	15
Dohányipar	3,5	2,9	1,8	36	126
Ital- és dohánytermékeket gyártó szakágazatok	13,2	15,6	16,8	432	58
ÁLLAMI ÉS SZÖVETKEZETI ÉLELMISZERIPAR ÖSSZESEN	100,0	100,0	100,0	1679	89,8
Mezőgazdasági nagyüzemek élelmiszeripari tevékenysége:					
Húsfeldolgozás	22,5	18,4		265	13,2
Baromfifeldolgozás	6,2	5,6	—	18	56,4
Tejfeldolgozás	5,8	3,8	—	90	9,3
Tartósítóipari tevékenység	9,5	12,0	—	158	13,8
Sütő- és tésztaipar	2,9	10,4	—	84	22,2
Szeszipari tevékenység	1,9	5,2	—	267	3,6
Boripari tevékenység	27,3	16,2	—	393	7,5
Ásványv.-üdítőital gyárt.	2,4	3,5	—	17	32,6
Egyéb élelmiszerip. tev.	21,5	23,8	—	1062	4,1
MEZŐGAZD.-i ÜZEMEK ÖSSZ.	100,0	100,0	—	2354	7,7
Mezőgazdasági üzemek aránya a szoc. élelmiszerip. %-ában	14	12	—	140	8,6

2. Az élelmiszeripari vállalatok műszaki színvonala

Állóeszközeinek gyors fejlődése ellenére az élelmiszeripar átlagos műszaki színvonala igen nagy szóródásokat takar mind a szakágazatok között, mind azokon belül az egyes vállalatok vonatkozásában. Az elmúlt tíz évben ugyanis a nagyobb fejlesztések döntő részt az égető feszültségek feloldására, vagy legalábbis azok enyhítésére irányultak. Így pl. a mezőgazdaság gabonatermelésének gyors ütemű növekedése a gabona tárházak építését, a tejhozam emelkedése a tejfeldolgozók bővítését, a vágóbaromfi termelés tartós emelkedése új baromfifeldolgozó üzemek létrehozását, a vágósertés termelés növekedése és a húsipari export bővítésének lehetőségei új vágóhidak és az exportkövetelményeknek megfelelő, magas higiéniai színvonalon álló húsárugyárak létesítését és a meglevők bővítését, a növényolaj világkonjunktúrája és a hazai olajosmag termelés növekedése új olajgyár megteremtését tette szükségessé. Ezek az ipari létesítmények halaszthatatlanok voltak, de a mezőgazdasági nyersanyagbázis fejlődése mögött mégis lépéshátránnyal készültek el. Hosszú távon is tervszerűnek talán csak a hűtőházak fejlesztése mondható, amely a mintegy 15 évvel ezelőtt kialakított fejlesztési koncepció alapján töretlenül halad.

Az elmondottakat igazolja az a tény, hogy míg a IV. ötéves terv időszakában az összes élelmiszeripari beruházásból új létesítmény kereken 33% volt, addig az V. ötéves tervben az új létesítmények aránya az összes beruházás 48%-át képezte, vagyis az V. ötéves terv időszakában az összes beruházásnak majdnem fele kevés számú új nagy létesítmény volt, s ennek következtében a többi üzem technológiai színvonalának emelésére, az elhasználódott berendezések korszerűbbel való lecserélésére nemigen marad pénzügyi lehetőség.

Az élelmiszeripar állóeszközállománya évről-évre jobban elhasználódik, 1980 végén az állóeszközök nettó értéke a működő állomány értékének 65%-át képviselte. A 0-ra leírt üzemelő állóeszközállomány aránya növekszik és amíg 1976. január 1-én 6,7% volt, 1980 végére 9,4%-ra emelkedett a minisztériumi élelmiszeriparban működő állomány bruttó értékének %-ában.

Ezen 9,4%-os átlagszámon belül azonban olyan mértékű szóródások találhatók, mint a baromfiipar 5,4%-os, a húsipar 5,5%-os, az édesipar 10,4%-os, a dohányipar 16,9%-os és a konzervipar 17,1%-os arányszámai a 0-ra leírt, de működő állóeszközök tekintetében.

Az Élelmiszeripari Gazdaságkutató Intézetben készült számítások szerint 1981—85 között a kiselejtezendő állóeszközök pótlására mintegy 22 milliárd Ft, a kiegészítő és járulékos létesítmények megvalósítására pedig további 13 milliárd Ft beruházásra lenne szükség.

A VI. ötéves tervben az élelmiszeripar számára mintegy 28%-kal kevesebb beruházást terveztek, mint amennyi az V. ötéves terv időszakában megvalósult. (Ez a szocialista szektor tervezett beruházásainak 3,3—4,1 százaléka.) A beruházási keret csökkenésének mérlegelésénél még figyelembe kell

venni az árszínvonal emelkedést, amelynek csak egy része származik a berendezések műszaki tartalmának növekedéséből, a nagyobb hányad az inflálódás következménye. Az állami beruházások nagymérvű csökkenése folytán növekszik a vállalati beruházások aránya. Az állami beruházások csoportjában a célcsoportos beruházások terjedelme is csökkent. Ebben a csoportban a gabonatárolók létesítése szerepel. A vállalati beruházások 40%-át három szakágazat: a hús-, a tej- és a malomipar irányozzák elő.

A magyar élelmiszeripar műszaki színvonala európai viszonylatban közepesnek tekinthető. Termelékenységének színvonala 35—45%-kal alacsonyabb az ismert legfejlettebb országok élelmiszeriparáénál. A berendezések korszerűsége — néhány legújabb üzem, illetve berendezés kivételével — messze elmarad a jelenleg ismert legfejlettebb színvonaltól.

Üzemelési ráfordításai: a fajlagos víz és energiafelhasználásai magasabbak, mint amennyit a fejlett technika és technológia igényel. Gépesítettségének viszonylag alacsonyabb szintjére utal az a körülmény, hogy villamosenergia felhasználása a technológiai folyamatokban alacsonyabb, mint a fejlett országok korszerű élelmiszeripari vállalatainál.

Egy teljeskörű termékszerkezetvizsgálat megállapította, hogy élelmiszeriparunk legfontosabb 363 termékcsoportjából 63 minősíthető „jó"-nak, 165 „megfelelő"-nek és 130 termékcsoport „nem megfelelő".

Az élelmiszeripari szakágazatok és vállalatok heterogén műszaki színvonalának az is oka, hogy a beruházások megvalósítása hosszú időn át elhúzódó és a vállalati hatáskörű fejlesztési lehetőségek elaprózódottak. A szakágazatok többségében található 1—1 fejlett színvonalúnak minősülő gyár, de a többi színvonala erősen avulóban van, mind műszaki, mind erkölcsi szempontból.

A fejlesztési forrásokkal való rosszul értelmezett takarékoskodás eredménye az a gyakran látható kép, amelyen 1—1 korszerű vonal egyes közbülső vagy perifériku szakaszai hiányoznak, vagy a vonal közepén van egy hazai, esetleg más import relációból származó gépegység, amely nincs szinkronban a többi szakasszal.

Az esetek nagy részében az importált berendezések nem tudják produkálni a gépkönyvi paramétereket, sok esetben indokolatlanul nagyobb kiszolgáló létszámmal üzemeltetik a berendezéseket.

3. Az élelmiszeripari vállalatok önállóságának a kérdése

Az 1977. évi VI. törvény szerint az állami vállalat az állam gazdasági vállalkozása, amelynek gazdasági és társadalmi feladatai vannak. Gazdaságunk több szektoruságára való tekintettel a szocialista vállalatot célszerű akként definiálni, miszerint az a társadalmi tulajdonban levő termelési eszközök-

nek és a munkaerőknek olyan elkülönült egysége, amely tervszerű tevékenységével a társadalom valamely konkrét anyagi szükségletét elégíti ki, miközben nyereségre törekszik.

A szocialista vállalat előbbi definíciójához két megjegyzés kívánkozik. Az első az, hogy 1968 óta a mezőgazdasági termelőszövetkezetek is vállalatszerűen gazdálkodó egységek. A második megjegyzés annak hangsúlyozása, hogy a szocialista vállalat elsődleges feladata valamely társadalmi, anyagi szükséglet kielégítése és csak ezt követi a nyereségszerzésre irányuló törekvés. Valójában a termelőeszközök társadalmi tulajdona mellett ez tesz szocialistává egy vállalatot és alapvetően ez különbözteti meg a tőkés vállalattól, amelyet kizárólag a profitérdek iniciál és motivál.

Gazdaságirányításunk 1968. évi reformja a gazdasági élet középpontjába a vállalati önállóságot állította, melynek a szabályozott piacon a verseny keretében kell kifejtenie tevékenységét. Az ettől várt hatások és eredmények azonban csak részben és egyes területeken jelentkeztek, elsősorban azért, mert a piac elemei, egyben feltételei részben hiányoztak. A piaci versenyhez ugyanis árubőségből eredő kínálati pozíció kell, amelynek hátterében szabad, sok setben kihasználatlan kapacitások és egyéb termelési tényezők (pl. készletek) állnak. Az árubőség azonban mindig viszonylagos és az áruval szemben álló vásárlóerővel és a konkrét igények által meghatározott. A termelőeszközök piacán az eladók várt versenye helyett továbbra is jellemző a vevők versenye. A fogyasztási cikkek piacán észrevehetően talán csak a pörkölt kávét és a szintetikus mosószert gyártó két-két nagyvállalat versenyzett, valamint a nyugati importból származó, főként divatcikkek és élvezeti áruk szélesítették az áruválasztékot, de ez nem indította különösebb versenyre a hazai gyártó vállalatokat. Pedig ez volt a fogyasztási cikkek importjának elsődleges célja.

A gazdaságirányítás reformjának előkészítése közben többször felmerült a vállalati önállóságnak és a nagy egységeknek — köztük az élelmiszeripari trösztöknek is — a versenyt akadályozó helyzete.

Az állami élelmiszeripar szakágazatonkénti centralizált szakágazati irányítást legtöbbször a következőkkel indokolták:

— a belföldi ellátás egyenletességének és zavartalanságának biztosítása;

— homogén jellegű exportárualapok termelésének szervezése;

— az élelmiszeripar valamennyi szakágazatában szükségessé váló rekonstrukciók és bővítések pénzügyi forrásainak koncentrálása és felhasználásának centralizált irányítása, a központosított eszközgazdálkodás előnyeinek kihasználása;

— a gyártis profilok gazdaságos kialakítása;

— a kormányzat agrárpolitikájának végrehajtásában való egységes közreműködés.

Ezek a feladatok — többé-kevésbé — ma is időszerűek, de az kérdés, hogy maradéktalan ellátásuk kizárólag a trösztі és országos vállalati központok működésével történhet-e meg?

Az tény, hogy a magyar élelmiszeripar, erőforrásainak koncentrációja és az irányítás centralizációja mellett, 1960 és 1970 közötti évtizedben jelentősen fejlődött. Az intenzív fejlesztés időszakához érve azonban egyre inkább előtérbe kerültek azok a momentumok, amelyek a vállalatok érdektelenségeit tükrözték. Ilyenek voltak a vállalatok, gyárak eredményeinek átcsoportosítása és újbóli felosztása, a közvetlen erőfeszítésekben való érdektelenség, néhány egység kivételezettsége stb. Ez volt az élelmiszeripari vállalatok önállóságának egyik problémája.

A másik problémakört az jelentette, hogy teoretikusan fel lehetett tételezni, miszerint az 1968 óta vállalatként és megfelelő önállósággal rendelkező állami gazdaságok és mezőgazdasági termelőszövetkezetek a hasonló jogállású élelmiszeripari vállalatokkal közvetlenebbül és hatékonyabban fognak majd együttműködni, mint a tröszti központok által irányított és hatáskörükben korlátozott, de — látszólag — monopol helyzetben levő élelmiszeripari vállalatokkal. Ez a várakozás azonban nem következett és nem is következhetett be.

Az élelmiszeriparnak ugyanis 1967 közepéig a kész élelmiszerek termelése. a mezőgazdasági termékek élelmiszerekké való feldolgozása terén volt — kifogásolhatóan — monopol helyzete. A mezőgazdasági üzemekkel való felvásárlási kapcsolatok monopol jellege, az élelmiszeripar és a mezőgazdasági üzemek eltérő tevékenységéből, területi elhelyezkedésükből és a mezőgazdasági termékforgalmazás rendszeréből, a rögzített felvásárlási árakból eredtek és csak kis szerepe volt ebben az élelmiszeripari szakágazatok centralizált voltának. A tröszti vállalatok és az országos vállalatok gyáregységei ugyanis meglehetősen széles körű operatív hatáskörrel rendelkeztek a nyersanyagbeszerzés területén.

Az önállóság fogalma filozófiailag, a szabadság fogalomhoz hasonlóan mindig viszonylagos és nem más, mint a felismert szükségszerűségeknek megfelelő, a mindig meglevő korlátozásokon belüli cselekvési változatok közötti választás lehetősége. A szocialista mezőgazdasági nagyüzemek vállalati önállósága magasabb fokú és szélesebb tartalmú, mint — akár a teljes mértékben önállósított — élelmiszeripari vállalatoké lehet. Ennek több oka is van.

A mezőgazdasági nagyüzemek több lehetőséggel rendelkeznek termelésük terjedelmének, termékösszetételüknek, melléktevékenységek végzésével árbevételüknek kisebb-nagyobb mértékű változtatásában, mint az élelmiszeripari vállalatok. Az iparvállalatok termelését annak összetételét és felső határát ugyanis alapvetően meghatározzák termelőerőik. A malom csak őrölni tud, a konzervgyár csak konzervet gyárthat, mert termelési eszközei és szakmunkásai csak az alaptevékenység végzésére alkalmasak. (Egyébként az iparosodó mezőgazdaság is gyors ütemben közelít ebbe az irányba.)

A mezőgazdasági nagyüzemek szabadságfoka nagyobb amiatt is, hogy saját termelési, gazdálkodási és fejlesztési célkitűzéseik felöl — anyagi lehetőségeiken belül — önállóan döntenek, és ez a döntés minden esetben a jövedel-

mezőség által motivált. Az élelmiszeripari vállalatnak, tevékenysége szerinti konkrét és a mezőgazdasági üzeménél konkrétabban meghatározott társadalmi szükségletet ki kell elégítenie, tekintet nélkül vállalatjövedelmezőségi érdekeire. Ez az úgynevezett „ellátási felelősség" jogi elismerést még a vállalati törvényben sem kapott, de van. Jogszabály szerint az ország ellátásáért az ágazati miniszter a felelős, viszont a netalán jelentkező élelmiszerellátási hiányosságért elsősorban az illetékes élelmiszeripari vállalatot teszik felelőssé. Ez a felelősség pedig nem pusztán erkölcsi, hanem anyagi is. Kollektív vállalati is és a felsőbb vállalati vezetőket is érintő.

Az élelmiszeripari vállalatok önállóságát olyan mértékben és olyan szervezeti keretek között célszerű meghatározni, hogy a vállalatnak

— kötelessége és érdekeltsége legyen a belföldi ellátási feladatok elvégzésében, valamint export szerződéseinek teljesítésében;

— tevékenysége eredményeként és érdekében tudja fejleszteni termelési eszközeit, gyártmányait és a népgazdasági tervben meghatározott keretek között dolgozóinak jövedelmét;

— termelési eszközei állami tulajdoni jellegének fenntartása mellett, anyagi érdekeltsége szerint társulhasson a vertikum más gazdasági egységeivel.

Az élelmiszeripari vállalatok önállósítását azonban fokozott gonddal, kutató és szervező munkával kell előkészíteni. A kormányzat az elmúlt évben számos nagy gazdálkodó egységet feloszlatott és önállósította azok tagvállalatait. Az eddigi értékelések azt mutatják, hogy alaposabb előkészítő munkára van szükség és az önálló működés feltételeit időben biztosítani kell. A vállalatok önállósításainak sem lehet más célja, mint a népgazdasági érdek hatékonyabb érvényesítése. Nem lehet szem elől téveszteni azt a körülményt sem, hogy az alrendszerek optimumának aggregátuma nem biztos, hogy a rendszer optimumát is jelenti, vagyis nem lehet az a következménye az önállósításnak, hogy minden vállalat jól jár, csak a népgazdasági érdek szenved csorbát.

A kutatómunkának — lehetőleg több ágazati kutatóhely közreműködésével — arra kell irányulnia, hogy az élelmiszeripari, jelenlegi középirányító szervek által végzett funkciókat, amelyeket az előbbiekben ismertettünk, milyen módokon és milyen formátumok alkalmazásával lehetne — legalább az eddigi minőségi színvonalon — elvégezni. Itt a belföldi ellátási, a külkereskedelmi, a mezőgazdasági, az iparági és főként az érdekek egyeztetését és az önállósítás feltételrendszerének kimunkálását kell elvégezni.

4. Az élelmiszeripari vállalatok önfinanszírozási képessége

Népgazdaságunk helyzetének ismeretében természetes, hogy az 1980-tól érvényben levő gazdasági szabályozórendszer az egyensúlyi helyzet javítását, a gazdasági hatékonyság növelését és a termelési szerkezet korszerűsítését állí-

totta rendszerének középpontjába. Az is elfogadható álláspont, hogy a korszerűen, gazdaságosan és ezáltal nyereségesen dolgozó vállalatok tovább erősödhetnek, könnyebben tudják fejleszteni eszközeiket és dolgozóik kereseteit, míg a gyengébb eredménnyel működő vállalatok stagnálnak vagy tovább gyöngülnek. Meg kell mondani, hogy ez az elképzelés nem egészen új, mert valahogy így képzeltük 1968-ban is, de jelenlegi viszonyainkban a vállalatoknak és a szakágazatoknak fennmaradásukért, létükért, az erősebbeknek még nagyobb erejükért kell versenyezniük. A versenyben azonban törvényszerűen nemcsak nyertesek, hanem lemaradók is vannak és lesznek. A lemaradó vállalatok pedig — ahogy eddig is tették — a rajtuk kívülálló objektív körülményekre hivatkoznak és nélkülözhetetlenségükre tekintettel állami támogatást, kivételes elbánást kérnek. Úgy vetődik fel a kérdés, hogy a szocialista állam engedhet-e egy, a tulajdonát képező vállalatot csőbe jutni? Mindeddig nem engedtük és a kivételezések, állami támogatások szövevényes rendszerével a népgazdaság vállaira, ezen keresztül a társadalom nyakába raktuk a gyenge vállalatok terheit.

A vállalatok, szakágazatok közötti verseny tempóját — tekintettel népgazdaságunk nyitott voltára — a külföldi piac viszonyai is erősen befolyásolják.

Az 1980. január 1-én bevezetett új gazdasági szabályozás a mezőgazdaságban és az élelmiszeriparban a nemzetközi kereskedelem árait nem adaptálta ugyan, ettől függetlenül azonban az önfinanszírozás általános elve alól teljes mértékben az élelmiszeripar sem kivétel.

Megzavarja az igazi képet és félrevezető az a tény, hogy az élelmiszeripar nyereség 1980-ban az előző évhez képest 55%-kal növekedett, amit nagyrészt a hús-, a baromfi- a gabonaipar tervezettnél nagyobb exportja és annak kedvezőbb áralakulása eredményezett. A többi szakágazatban kisebb túlteljesítések, illetve egy-két iparágban lemaradás is mutatkozik. Az 1980. január 1-én hatályba lépett termelői árak és a világpiaci hatások meglehetősen nagy mértékben differenciálták az élelmiszeripar 14 szakágazatát az eredményesség szempontjából.

Az élelmiszeripar szakágazatait úgy is lehet csoportosítani, hogy azok egyrésze — számszerint 8 szakágazat — kis mértékben vagy egyáltalán nem rendelkezik exporttal. Inkább import érdekeltségűek, mint az édes-, a szesz- és a dohányipar. 6 szakágazat eltérő, de jelentős mértékű exportot bonyolít, amelynek terjedelme az árbevétel 28 és 78%-a között változik. Az exportorientált ágazatokból négy: a hús-, a baromfi-, a hűtő- és a növényolajiparok nem rubel elszámolású relációba szállítják exportjuk 85—95%-át. A konzervipar exportjának 70%-a, a borexportnak: 85%-a rubel elszámolású viszonylatba kerül kiszállításra.

Az élelmiszeripar egyes szakágazataiban igen eltérő módon alakul az önfinanszírozási képesség. A konzervipar csak minimális fejlesztési alapot tud

képezni és hitelképtelen, a hűtőiparban és az édesiparban nincs részesedési alap képzésére lehetőség, a fejlesztési alapot terhelő nagy arányú kötelezettségek miatt. Ugyancsak problematikus a tej-, a sör- és a szeszipar fejlesztési alapjainak képzése is.

A húsiparnak a VI. ötéves terv időszakában várható fejlesztési alapját — feltételezve a világpiaci árak viszonylag kedvező szintjét — nagyobb felében leköti az V. ötéves terv időszakában felvett fejlesztési hitelek törlesztési kötelezettsége. Ugyanez a helyzet a növényolajiparban és a hűtőiparban is.

Az anyagok árváltozása a konkrét vállalati gazdálkodásban azt jelenti, hogy az élelmiszeripar egyrészt a nyersanyagárak, másrészt a fogyasztói árak rögzített volta miatt ki van téve az anyagárváltozások begyűrűző hatásának. Az 1981. január 1-i árrendezéskor a mezőgazdasági és élelmiszeripari eredetű anyagok áremelkedésének 100%-át ugyan elismerték, de az energia és az idegen fuvarköltség emekedésének 20%-át és a csomagolóanyagok áremelkedésének 10%-át az iparágaknak kell kigazdálkodniuk, ami az anyagköltségek magas hányadára való tekintettel nem kis feladat. Az ipari eredetű anyagok áremelkedése a vállalatok terhe. Ezeknek a begyűrűző áremelkedéseknek hatása jó részben a csomagolóanyagoknak az árát érinti és problematikussá teszi a vállalatok számára a kívánatos csomagolásfejlesztést.

5. Az élelmiszeripari vállalatok termelésének és fejlesztésének egyes elemei közötti összhanghiányok

A kormányzat a IV. és különösen az V. ötéves terv időszakában jelentős erőfeszítéseket tett arra, hogy a mezőgazdaság egyes gyorsan fejlődő ágazatainak (pl. gabonatermelés, sertésállomány) megfelelő feldolgozó kapacitásokat, illetve raktárakat létesítsen, és ezzel a két ágazat közötti legégetőbb feszültségeket feloldja, vagy legalábbis enyhítse. Ezt a fontos fejlesztési tevékenységet, annak ellenére, hogy bőven lenne még tennivaló, a népgazdaság ismert helyzete következtében — legalábbis átmenetileg — az eddigihez hasonló ütemben nem lehet folytatni.

Néhány olyan összhang-hiányról kívánok említést tenni, amelyek elsősorban nem beruházás igényesek és inkább a gazdasági szabályozók körébe tartoznak, illetve egyszerűen megítélés vagy vita tárgyát képezhetik.

a) Az egyik alapvető probléma árrendszerünk szerkezetéből ered. E szerint az ipar (amelyben jelen esetben nem szerepel az építőipar, az élelmiszeripar és az építőanyagipar) bruttó termelési értékének kereken 28%-a a nettó termelés és ebből kereken 10% a tiszta jövedelem. Viszont az élelmiszeriparban a bruttó termelés 10%-át jelenti a nettó termelés értéke, amelyből nem egészen 5% a tiszta jövedelem. Ez az arányszám is kifejezi azt a feszültséget, amelyet az teremt, hogy az élelmiszer termelésben általában a bruttó termelési érték nem tud lépést tartani az ipari eredetű ráfordítások árának emelkedésével.

A mezőgazdaság és az élelmiszeripar gazdasági hatékonyságának megítélésével kapcsolatban érdemes utalni a KSH egy 1980-ban megjelent közleményére. A KSH egy komplex hatékonysági mutató alapján a népgazdasági átlaghoz viszonyította egyes népgazdasági ágaknak, illetve ipari szakágazatoknak a hazai értékképzés és a tőkés gazdasági értékképzés szerinti mutatóit. Hazai árrendszerben kifejezve az országos átlaghatékonyságnak az élelmiszeripar 95%-a, a mezőgazdaság 71%-a, a gépipar 152%-a, a vegyipar 234%-a. Ha azonban a tőkés országok árképzési strukturájában értékelik az input—output relációit, akkor a kép alapvetően változik és a gépipar 67%, a vegyipar 99%, az élelmiszeripar 171%, a mezőgazdaság pedig 175% hatékonyságú értékmutatót kapna, vagyis mind az élelmiszeripar, mind a mezőgazdaság komplex hatékonysága felülmúlná a népgazdasági átlagot és a feldolgozó ágazatok hatékonysági színvonala a népgazdasági átlagszint alá esne. Nem kívánok állást foglalni a közölt számszerűség realitását illetően, de az nyugodtan állítható, hogy a magyar mezőgazdaság és élelmiszeripar a gazdasági hatékonyságot illetően nem áll a számok által érzékeltetett mértékben sem a gépipar, sem a vegyipar mögött.

b) Nem az egész élelmiszeripar, hanem annak egyik szakágazata, de ezen keresztül külkereskedelmünk szerkezetén belül jelent feszültséget és vált ki vitát a konzervipar exportjának gazdaságossága.

A tartósítóipar két szakágazatának: a konzerviparnak és a hűtőiparnak nagy arányú fejlesztési koncepcióját még a II. ötéves terv időszakában, a hatvanas évek első felében alakították ki, két alapgondolatból kiindulva. Az egyik gondolat az volt, hogy főként a Szovjetunió korlátlan mértékű felvevő piacot jelent konzervipari termékeink számára. A másik meggondolás az volt, hogy a nemrégen szocializált mezőgazdasági nagyüzemekben elegendő munkaerő van az intenzívebb kertészeti kultúrák fejlesztéséhez, és főként indokolt ez a keleti országrészeken, amelyek a Szovjetunióhoz szállítási távolság szempontjából is közelebb esnek. Így került sor a nyíregyházi, a békéscsabai és a debreceni konzervgyárak létrehozására. Az akkori — helyes — koncepció végrehajtása azóta annyiban vált nehezebbé, hogy a mezőgazdasági nagyüzemekből előbb eltávozott a munkaerő és a számítottnál előbb valósult meg a gabonatermelés gépesítése, korszerűsítése és intenzívvé tétele.

A konzervipari exportot a jelzőszámok gazdaságtalannak mutatják. A számítások készítői nem veszik azonban figyelembe a KGST export és importszerkezetét. A KGST árarányai olyanok, hogy a gépipari termékek a világpiaci áraknál magasabb szinten vannak, viszont a mezőgazdasági termékek és az élelmiszerek, valamint az ezek ellentételeként jelentkező alapanyagok és energiahordozók árszínvonala alacsonyabb. Népgazdasági szinten értékelve ezt a problémát a helyes álláspont az lehet, hogy a komparatív költségek elve alapján valamely termék exportjának gazdaságosságát az szabja meg, hogy azért mennyi importot tudunk biztosítani, illetve azzal milyen belföldi ráfordításokat

tudunk megtakarítani. A KGST vonatkozásában ez számunkra kedvező, mert az ide irányuló élelmiszerexportunkért több olajat, energiát, vasércet tudunk megvásárolni, mint amennyit ugyanezért az exportért nem szocialista relációból kapnánk. A KGST országokba irányuló élelmiszerexport, főként a konzervexport látszólagos gazdaságtalansága folytán a gépipari export mutatkozik gazdaságosnak.

Hosszú távú gazdaságpolitikánkban kiemelkedő jelentősége van a KGST országokkal folytatott nemzetközi együttműködésnek, amelynek az árviszonyokon túlmenően legnagyobb előnye a piaci stabilitás és biztonság, amellyel ezt tervezni és bonyolítani lehet.

c) Az élelmiszeripari szakágazatok vállalatait, mint említettem, az jellemzi, hogy egy-egy korszerű gyár mellett a fizikailag és erkölcsileg elavult üzemek sora működik. Még egyes vállalatokon belül is megfigyelhető hasonló jelenség, a különböző berendezések vonatkozásában. Az élelmiszeriparban is várható lesz az önfinanszírozási képesség hiányából vagy annak gyengeségéből eredően a műszaki színvonal gyorsuló romlása. Az élelmiszeripari vállalatok szinte feloldhatatlannak tűnő ellentmondása a növekvő mennyiségű és minőségű termelési feladatok és a fejlesztési képtelenség meglétében rejlik. Az elmúlt évek eladósodásából és a szűkre szabott nyereségszerzési lehetőségből eredő szegénységen túlmenően nehezíti az élelmiszeripari vállalatok műszaki fejlesztését, vagy legalább is szinten tartását a hazai élelmiszeripari gépgyártó bázis gyengesége.

Élelmiszeripari gépgyártásunk színvonala — néhány berendezés kivételével — közepes szintű és teljesítőképessége az ipar egyszerű pótlási igényét sem fedezi. Élelmiszeripari gépgyártásunk a jövőben is csak a hagyományosan kialakult területeken tervez — korántsem teljeskörű — gyártmányfejlesztést. Élelmiszeripari gépgyártásunk is, mint a gépgyártásunk általában, exportorientált termelési és értékesítési politikát folytat, de kínálata és termékeinek színvonala nagyobbrészt a fejlődő országok igényeinek felel meg. A KGST-n belüli élelmiszeripari gépgyártási szakosítás viszont hosszú ideje tárgyalások témája és mindeddig kevés gyakorlati eredményt hozott. Élelmiszeripari vállalataink technológiai fejlesztése ezért csak — többségükben tőkés viszonylatú — kisebb-nagyobb gépimporttal valósítható meg. A nem technológiai jellegű gépek és berendezések (szivattyúk, hajtóművek, kötőelemek, szerelvények stb.) területén hasonlóan kedvezőtlen helyzetben vagyunk. Az alkatrészgyártás sem tud lépést tartani sem mennyiségben, sem minőségben az igényekkel.

A csomagolásfejlesztést a hazai csomagológépgyártás hiánya, illetve elégtelensége mellett a korszerű csomagolóanyagok és csomagolóeszközök hazai gyártásának hiánya is befolyásolja. Ez a körülmény nagy mértékben rontja termékeink külpiaci versenyképességét és növeli az importigényt. A hazai csomagolóanyagok és csomagolóeszközök minőségi hibái miatt a nagyteljesítményű és érzékeny külföldi eredetű csomagológépek teljesítménye a névlegestől jelentősen elmarad.

Igen plasztikusan mutatják be az élelmiszeriparnak az ellátó ágazatokból — közöttük a gépipartól, vegyipartól, papíripartól stb.) való függését az agráripari-komplexumra irányuló kutatások. Az agráripari komplexumnak — mint ismeretes — három szféráját lehet megkülönböztetni, éspedig az ellátó ágazatokat, a mezőgazdaságot és a feldolgozás-forgalmazás szféráját. Az agráripari komplexum és a gazdasági fejlettség között olyan összefüggés mutatható ki, hogy az ipari fejlődés folyamán, mintegy annak eredményeként az agráripari komplexumon belül növekszik az ellátó ágazatok és a feldolgozásforgalmazás szféráinak aránya és csökken a mezőgazdaságé. A fejlett iparral rendelkező országokban a III. szféra, vagyis az élelmiszeripar és az élelmiszerek forgalmazásának aránya egymagában meghaladja az ellátó ágazatok és a mezőgazdaság részesedési arányát mind a termelési értékben való közreműködést, mind a foglalkoztatott munkaerők számát illetően. Ezzel szemben hazánkban 1968 után az élelmiszeripar — 36—37%-os — aránya lényegében stagnál az agráripari komplexumon belül.

d) Az élelmiszeripari vállalatok és a mezőgazdasági nagyüzemek együttműködésével kapcsolatban 1968 után nálunk is előtérbe került az integráció kérdése, amely a hetvenes évek elején az élelmiszergazdaság témája körül folyó vitákban, elsősorban abban csúcsosodott ki, hogy melyik fél legyen az integrátor. A vita részben az elfogultság, részben a kérdés-feltevés hibás volta miatt nem sok eredményt hozott.

Azt kell világosan látni és tudomásul venni, hogy az integráció a termelő erők és a termelési viszonyok fejlődésével együttjáró, de nem egyenletesen fejlődő folyamat, amelyet nem lehet voluntarista intézkedésekkel determinálni. Az integráció a szocializmusban is evolúciós folyamat, amely szükségszerű funkciói folyamán keres és talál magának szervezeti formát, de nem fordítva, hogy egy elgondolt integrációs szervezeti forma keresse funkcióit. Ezt egyébként mezőgazdaságunk jelenlegi integrált formátumai: a termelési rendszerek és a szakosított állattenyésztési, hizlalási telepek gyakorlata és pozitív tapasztalatai bizonyítják. E horizontális jellegű integrációs formák, amelyek tartalmukban a mezőgazdaság iparosodását is képviselik, fegyelmezett, tervszerű működésük esetén nagy eredményeket produkálnak. A kísérleti jelleggel létrehozott agráripari egyesülések működésének értékelése még korai, de esetenként ezeknél is úgy tűnik, mintha a forma keresné az igazi tartalmat, főként ami az élelmiszeripari vállalatok közreműködését illeti.

Az állami élelmiszeripari vállalatok horizontális jellegű integrációs formái a direkt irányítású népgazdaság szigorúan értelmezett ágazati és szakágazati szemléletű rendszerének terméke, amelynek funkciói is a tervutasításos centralista rendszernek felelnek meg. A kérdés ezeknél az integrátumoknál az, hogy az egyes funkcióknak ez-e a legmegfelelőbb formátuma? Az ökonómiai kutatásnak kellene választ adni arra, hogy az egyes integrálandó folyamatok számára milyen hatékony integrációs formát célszerű alkalmazni. Egyébként úgy

tűnik, hogy az önállósított vállalatok sajátmaguk és önként igen rövid időn belül megtalálják a kooperáció és az érdekegyeztetés elfogadható formáit.

Az élelmiszeripari vállalatok és a mezőgazdasági nagyüzemek közötti termelési kapcsolatok nem újszerűek; a felvásárlás, a szerződéses termeltetés, a különböző tartalmú termelési együttműködések, a kölcsönös anyagi előnyök keresése és az állandó partneri jóviszony kialakítására való törekvés már több évtizede az általános. Az itt-ott előforduló nézeteltérések és viták viszont nagyobb nyilvánosságot kapnak, mint az állandóan jó kapcsolat és mint az eredetien új együttműködési formák.

Ilyen pl. az a kezdeményezés, amely a mezőgazdasági üzemek és az élelmiszeripari üzem termelésének összehangolására irányul. A Nyíregyházi Konzervgyárban és a Békés megyei Agráripari Egyesülés üzemeinél az Országos Műszaki Fejlesztési Bizottság támogatásával kísérleti munka indult, amelynek az a lényege, hogy a mezőgazdasági termelő üzem és a feldolgozó vállalat tevékenységeinek kapcsolódó területeit — számítógép alkalmazásával — egy komplex termelésirányítási rendszerbe integrálják. A munka keretében olyan agrometeorológiai modellek kidolgozására került sor, amelyek számítógépes időntéselőkészítéssel segítik elő a konzervipari növények ésszerű vetését és betakarítását, prognosztizálhatóvá teszik az érés várható időpontját, illetve a várható termésmennyiséget. A számítógép alkalmazásával olyan termelésirányítási program alakítható ki, amely figyelembe veszi a gyári kapacitásokat előirányozza azok egyenletes kihasználását és ezáltal elejét veszi a nyersanyag torlódásának és az ebből keletkező veszteségeknek.

Az integráció fejlődési folyamatának másik példájaként lehet említeni a megyei állatforgalmi és húsipari vállalatok és velük együtt a mezőgazdasági nagyüzemek azon tevékenységét, amellyel a területükön levő kisárutermelő állattenyésztő gazdaságok munkáját támogatják és szervezik.

A több évre szóló mezőgazdasági termékértékesítési szerződések rendszeréből alakult ki egyes szakágazatokban — elsőként a tartósítóiparban — a bázisgazdaságok rendszere, amely a mezőgazdaságban elősegíti a termelés szakosodását és koncentrációját, az iparvállalat viszont igényeinek megfelelő fajtájú nyersanyagot kap és nyersanyagszállítóinak számát lényegesen csökkenteni tudja.

A mezőgazdaság és az élelmiszeripar integrációjának szervezeti kérdéseihez tartozik, az a nem megváltoztatható körülmény, miszerint egy-egy élelmiszeripari üzem sok mezőgazdasági üzemtől tudja összegyűjteni a kapacitásának kihasználásához szükséges nyersanyag mennyiséget. Ugyanakkor egy-egy mezőgazdasági üzem a legjobb esetben is három—négy élelmiszeripari szakágazathoz tartozó vállalattal áll termelési kapcsolatban. Ez az adottság már felveti a koncentráció és az üzemnagyság kérdését is.

Az ezzel kapcsolatos vitákban nem egyszer felmerül, hogy a magyar élelmiszeripar „túlkoncentrált". A kérdés bonyolult és az állásfoglalásban több tényezőt kell figyelembe venni. Így többek között élelmiszeriparunk kialaku-

lásának történelmi körülményeit és jelenlegi adottságainkat. A koncentráció mértéke relatív, amely számos tényező függvénye és amelyet végsősoron csak egy — de nehezen meghatározható mutatóval — a népgazdasági szintű hatékonysággal lehetne értékelni.

A koncentráció fogalmának értelmezésénél nem szorítkozhatunk néhány, üzemi szintre számított mutatóra, mint pl. az egy üzemben foglalkoztatottak száma, az egy üzem által termelt mennyiség stb. A koncentráció mutatójával nem jellemezhető egy szakágazat. Érzékelteti a kis- és nagyüzemek arányát, az ettől függő igényt a gazdaság szerkezetére vonatkozóan, beleértve a nagyde elfedi a gazdaság földrajzi területének nagyságát, egyéb adottságait és az ettől függő igényt a gazdaság szerkezetére vonatkozóan, beleértve a nagy- és közép-, valamint a kisüzemek teljes számát, azok egymástól különböző szerepét és jelentőségét az adott termelési szakágazaton és az egész népgazdaságon belül. Ismeretes, hogy más ipari szakágazatokban pl. a gépiparban, műszeriparban helyenként olyan mértékben hiányoznak a közép- és kisvállalatok az ún. „háttérüzemek", hogy hiányuk, illetve termékeik hiánya nem egy esetben akadályozza egyes nagyüzemek ütemes termelését. A közép- és kisüzemek éppen úgy nélkülözhetetlenek, mint a nagyüzemek.

A mi viszonyaink között általában szükség van a nagykapacitású, koncentrált élelmiszeripari üzemekre. Ilyenek a cukorgyárak, növényolajgyárak, malmok, szeszgyárak, exportra termelő vágóhidak és húsfeldolgozók, baromfifeldolgozók, hűtőipari üzemek, konzervgyárak, városellátó tejüzemek stb. Egyes szakágazatokban és egyes termékcsoportok gyártására azonban részben a lakosság jobb ellátására, részben vállalatgazdaságossági okokból helyes és célszerű kis- és középkapacitású élelmiszeripari üzemek létesítése. Ilyenek lehetnek az elsődleges tejfeldolgozók, sütőipari üzemek, borászati üzemek, a nagyobb sertéstelepekhez kapcsolódó közép- és kiskapacitású vágóhidak és húsfeldolgozók, a konzerv- és hűtőiparral való munkamegosztásban kialakított előfeldolgozók stb. A mezőgazdasági nagyüzemek közép- és kisméretű élelmiszertermelő üzemei között is szép számmal működnek korszerű létesítmények, s indokolt számuk további növelése.

Igen fontos szempont az élelmiszeripari kapacitások létesítésénél és telepítésénél a népgazdasági érdekek szem előtt tartása, ami néhány mezőgazdasági nagyüzem kiegészítő tevékenységének szervezésénél háttérbe szorult. Az új kapacitások létrehozásához felhasznált felhalmozási alap ugyanis, bármelyik szektorban keletkezett is, a magyar népgazdaság nemzeti jövedelme, amelynek hovafordításánál a szakágazati és a szektor szempontoknak és érdekeknek a népgazdasági érdekek mögött alárendelt szereppel szabad érvényesülniük. Minden esetben a népgazdasági szintű gazdaságosság és a lakosság jobb ellátásának szempontja az elsődleges.

e) A mezőgazdasági nagyüzemek és az élelmiszeripari vállalatok kapcsolatának tárgya: a mezőgazdasági termék, amely az élelmiszeriparnak döntő

jelentőségű nyersanyagát képezi. Ennek mennyisége meghatározza egy-egy élelmiszeripari vállalalat termelésének terjedelmét, minősége, hasznos tartalma pedig az iparvállalat termelésének gazdaságosságát. Jó minőségű késztermékет csak jó minőségű nyersanyagból lehet előállítani.

Egyébként a nyersanyagok hasznos tartalom és műszeres minősítésen alapuló átvétele is olyan kérdés, amely hosszú évek óta a mezőgazdaság és az élelmiszeripar együttműködésének középpontjában áll és még fog is állni hosszú ideig. Ekérdésben az elkülönült érdekeltségű gazdasági egységek eltérő érdekei ütköznek. A mezőgazdasági üzemek részéről érthető a mennyiségi szemlélet előtérbe kerülése, míg az élelmiszeripari vállalatokat a nyersanyag minőségének kérdése érdekli, főként olyan évjáratokban, amelyekben a mennyiséggel nincs probléma.

A mezőgazdasági termékek nagyobb és fontosabb hányada hatóságilag rögzített (fix) felvásárlási árakon, meghatározott minőségi paraméterek mellett forgalmazódik. Ezekben az esetekben az összhangot a szabvány minőségétől való eltérés mértékének megállapítása zavarja, főként azokban az esetekben, amelyekben a műszeres mérés még nem megoldott. A termék minősége képezi a vita tárgyát a lazán behatárolt, vagy a szabad áru-termékek esetében is.

A közös és kölcsönös anyagi érdekeltség megteremtése látszik az egyetlen kivezető útnak az eladók és a vevők ezen örök problémájából, amelynek elszámolási vagy szervezeti formáját kell az egyenjogúság és az azonos feltételek alapján kialakítani.

Az élelmiszeripari vállalatok számára nemcsak a nyersanyag minősége, hanem a nyersanyag évjáratonként eltérő mennyisége is feszültséget jelent. Az élelmiszeripari vállalatoknak a profiljukba tartozó termékekhez szükséges mezőgazdasági eredetű nyersanyagokra vonatkozóan átvételi kötelezettségük van. Az elv ésszerű, hiszen arról van szó, hogy a már egyszer megtermelt anyagi érték ne menjen veszendőbe és minden megtermelt mezőgazdasági termék kerüljön hasznosításra. Az iparvállalatok termelési kapacitását azonban nem lehet az eltérő évjáratok termelési csúcsaihoz méretezni és tartalékkapacitások létrehozása és fenntartása költségesebb lenne, mint a ritkábban jelentkező nagy termések levezetése. Ezekben az esetekben az a természetszerű eljárás, ha a szerződésen felüli mennyiséget a szerződő élelmiszeripari vállalat olyan áron veszi át a mezőgazdasági termelőtől, amilyen mértékben az — számára is rentabilisan — hasznosítható.

A mezőgazdasági termékek többségének felvásárlási ára hatóságilag rögzített (fix) árformába sorolt. Ezek az árak országosan egységesek és ezektől csak olyan — meghatározott — esetekben lehet eltérni, amilyen mértékben a termék minősége eltér a reá vonatkozó szabványok előírásaitól. A fontos mezőgazdasági termékek árának rögzítettségét számos argumentummal lehet alátámasztani, de azt nem lehet bizonyítani, hogy ez a módszer az egyetlen lehetőség a mezőgazdasági termelés hatékonyabbá tételére és főként a termé-

kek minőségének javítására. A területileg és időbelileg is differenciálható felvásárlási árak alkalmazása esetén is keretek között tartható a mezőgazdaság felé kiáramló vásárlóerő, ugyanakkor jobban érvényesülne a különbözeti földjáradék és főként több gazdaságossági és érdekeltségi tartalommal telítődnék az élelmiszeripari vállalatok és a mezőgazdasági üzemek árukapcsolata.

f) Belföldi élelmiszer ellátásunk egyik alapvető követelménye, hogy a legfontosabb élelmiszerekből (pl. kenyér, liszt, zsír, cukor, tej) mindig és mindenütt igények szerinti ellátás legyen. A társadalmi közhangulat megfelelő szinten tartásához azonban ma már ennél jóval többre van szükség, amit egyrészt az élelmiszeripari vállalatoknak kell megtermelniük. Nagyon kevés kivételtől eltekintve az élelmiszeripari vállalatok megfelelő választékban minden termékcsoportból kielégítik az igényeket. Ennek ellenére a fogyasztók részéről gyakorta merülnek fel jogos kifogások az áruellátással kapcsolatban. A problémák zöme nem a termelés oldaláról ered, hanem a disztribúció, az áruterítés területén keresendők az okok.

Az élelmiszer belkereskedelem áruforgalma az elmúlt évtizedekben sokkal gyorsabb ütemben növekedett, mint a kereskedelmi hálózat kapacitása. A gondot a korszerű önkiszolgáló rendszerre való áttérés és a nagy élelmiszeráruházak létesítése csak részben enyhítette, de megoldani nem tudta. Az élelmiszeripar a hatvanas években tevőlegesen is segítette az élelmiszerboltok korszerűsítését, pl. hűtőpultok beszerzésével, de a bolti hálózat, főként az eladó terek és a bolti raktárak bővítésének kérdését nem tudja megoldani.

Az élelmiszeripari vállalatok és az élelmiszerkereskedelmi vállalatok közötti összhanghiány jórészt abból is adódik, hogy a kiskereskedelmi vállalatoknak közvetlen anyagi érdekeltségük fűződik a minél kisebb készletszinttartáshoz, ami azt jelenti, hogy a bolti megrendelések mennyisége csökken, de a kiszállítások gyakorisága növekszik. Ez ugyanakkor az ipar áruszállítási és göngyöleg visszagyűjtési feladatainak növekedését jelenti, amely az áruszállítási költségek emelkedését eredményezi.

Viszonylag ritka — ha egyáltalán van — az élelmiszeripar és az élelmiszerkereskedelem között olyan együttműködés, amely a közös anyagi érdekeltség alapján a forgalom emelését célozná. A reklám és propaganda költségekhez való hozzájárulás, esetleg a bolti személyzet premizálása régebben alkalmazott formák. A Nagykőrösi Konzervgyárnak, vagy egyik-másik húsipari vállalatnak olyan kezdeményezése, hogy egyes nagyforgalmú üzletekben az adott árucsoportból csak az ő cikkeiket forgalmaztassák, nem rossz marketing módszer, ha a vállalat viszonylag széleskörű termékválasztékkal rendelkezik.

Az élelmiszeripari vállalatok és a külkereskedelmi vállalatok közötti kapcsolatok 1968 után minőségi változáson mentek át. A gyárak több esetben közvetlen kapcsolatot alakítottak ki a külföldi vevőkkel, a külkereskedelmi vállalatok is nyújtottak segítséget a termelés korszerűsítéséhez. Úgy vélem azonban, hogy e területen is további erőfeszítéseket kell tenni. A külkereske-

delmi vállalatokkal szembeni esetleges feszültség sok esetben a termékek nem megfelelő minőségéből és a különböző gyárak termékeinek nem homogén jellegéből adódnak. A minőségi hibákon a termelési fegyelem szigorításával könnyebb segíteni, mint az export áru-alap homogenitását biztosítani, mivel egy külkereskedelmi vállalat 8—10 belföldi iparvállalat termékeit forgalmazza.

A külkereskedelmi vállalatok munkájával szemben viszont gyakori az a panasz, hogy tekintettel profiljuk szélesebb terjedelmére nem tudnak minden termékükkel és minden piacukkal egyforma intenzitással foglalkozni. Ugyanakkor az önálló exportjogot nem lehet minden termelő vállalat részére megadni.

A külkereskedelmi vállalatoknak nagyobb lehetőségük van részt vállalni az iparvállalatok gyártás- és gyártmányfejlesztésében, mivel az iparvállalatokkal való kapcsolatoknak a rugalmasabban alakítható érdekeltség az alapja. A belkereskedelmi vállalatok rögzített árként kezelt kereskedelmi árréséből viszont még a hálózat szükséges fejlesztéséhez sem jut elegendő összeg.

6. Az élelmiszeripari vállalatok szervezettségének kérdései

Amikor az előbbiekben az élelmiszeripar műszaki színvonalát közepesnek, műszaki állapotát avultnak, vagy avuló félben levőnek minősítettük, ezzel nem az élelmiszeripari vállalatokat és azok struktúráját minősítettük, csupán termelőeszközeiknek ezidő szerinti állapotáról vélekedtünk. A vállalat ugyanis nemcsak gépek, berendezések, statikus halmaza, hanem ennél sokkal több és sokrétűbb rendszer, amelyet termelési eszközeinek minőségénél és működésénél nagyobb mértékben a munkaerők attitűdje, szakmai és politikai felkészültsége emel a gazdasági és társadalmi rendszer színvonalára. Önmagukban a legmodernebb gépsorok sem biztosítják a vállalat korszerűségét, mert lehet olyan vállalat, amely avultabb termelési eszközökkel is tud eredményesen működni.

Nehéz lenne rendszerezetten és teljes mértékben felsorolni a korszerű vállalat kritériumait, de feltétlenül ezek sorában szerepelnének olyan követelmények mint a környezetismeret és a saját helyzet ismerete, a változó helyzet felismerése és az ehhez való rugalmas alkalmazkodóképesség, az innovációs készség és a kockázatvállalás bátorsága, a környezetet befolyásolni tudó képesség stb.

A gazdasági és társadalmi rendszernek, alapegységnek tekintett szocialista vállalattól elvárt fenti tulajdonságok azonban csak az önálló vállalatnál bontakozhatnak ki. Nem lehet e tekintetben — az állami vállalatról szóló törvénytől eltérően — a trösztöket vállalatnak tekinteni. A vállalat földrajzi területileg is egység, amelynek jelentősége a vállalat szociológiai voltából következik. Népgazdaságunk jelenlegi helyzetében, a népgazdaság problémáinak döntő részét csak a vállalatok, kizárólag a népgazdasági mikroszféra tudja megoldani. A gazdaságirányító szervek tudnak irányt mutatni, kereteket

biztosítani, vagyis meg tudják tenni azt, ami rajtuk múlik, de gazdasági helyzetünk gyökeres változtatására csak a vállalatok képesek. Kíséreljük meg felvázolni ennek a vállalati képességnek élelmiszeripari feltételrendszerét, előrebocsátva azt, hogy felvetéseink egy részének realitását közgazdasági és vállalatgazdasági kutatások és elemzések tárgyává szükséges tenni. Olyan felvetésünk is akadhat, amely jelenleg illuzórikusnak vagy naívnak tűnik, egyes dogmaszerűen védett fogalmak (pl. a felvásárlási árak hatóságilag rögzített fix volta, a mezőgazdasági termékek átvételi kötelezettsége stb.) tükrében.

a) Elsőként és ismételten említem, hogy szükséges lenne megteremteni az élelmiszeripari vállalatok önállóságának feltételrendszerét. Ez többrétű feladat, amely magában foglalja:

— az állami élelmiszeripari vállalatok irányításának — szakágazati közgazdaságok irányítási rendszerét (esetleg hasonlóan az állami gazdaságok irányítási rendszeréhez);

— az élelmiszeripari és az élelmiszerkereskedelmi vállalatok közellátási kötelezettségének minimalizált, alsó határának meghatározását;

— az élelmiszeripari vállalatok önfinanszírozó képességének megteremtését, tekintettel a régebben lehatározott és már elkészült fejlesztések hiteleinek törlesztési képességére is;

— az élelmiszeripari vállalatok társulási szabadságát, amelyet nem pusztán engedélyezni kell, hanem biztosítani szükséges annak pénzügyi lehetőségét, hosszúlejáratú hitelek formájában.

b) Az élelmiszeripari vállalatok számára lehetővé kell tenni, hogy nemcsak a mezőgazdasági üzemekkel alakíthassanak sokrétű és különböző tartalmú kapcsolatokat, hanem az élelmiszerbelkereskedelmi vállalatokkal is. Ezekkel kapcsolatban szükséges megjegyezni, hogy az élelmiszer kiskereskedelmi vállalatainkat is az indokolatlan centralizáltság jellemzi.

c) A nemzetközi piacokon való versenyképességünk és a belföldi ellátás színvonalának javítása érdekében az élelmiszertermelés és forgalmazás minden területén előtérbe kell helyezni a minőség kérdését. Így egyebek között:

— a mezőgazdasági és élelmiszeripari vállalatok árukapcsolatainak és közös anyagi érdekeltségen alapuló együttműködésének centruma a minőség kell legyen;

— az élelmiszeripari vállalatok mezőgazdasági áruátvételi kötelezettsége csak a gazdaságosan feldolgozható, illetve a minőségi áru gyártására alkalmas mezőgazdasági termékre vonatkozzék;

— a mezőgazdasági eredetű élelmiszeripari nyersanyagok műszeres mérésén alapuló objektív minősítését — mindenütt, ahol ez megoldható — általánossá kell tenni;

— az élelmiszeripari termelés gyártási folyamatszervezésében mindenütt meg kell valósítani a teljeskörű minőségellenőrzés és a higiénia rendszerét, amely az anyagátvételnél kezdődik és a kereskedelem eladóterében végződik;

— minden termelési és forgalmazási fázisban szigorítani és gyakoribbá kell tenni a hatósági minőségellenőrzést és azt anyagilag érzékelhető konzekvenciával kell párosítani;

— mind a mezőgazdasági nagyüzemekben, mind az élelmiszeripari vállalatoknál általánossá, legalábbis a jelenleginél jóval szélesebb körűvé kell tenni a dolgozók minőségén alapuló bérezést.

d) Felülvizsgálatra és korszerűsítésre szorul az élelmiszeripari vállalatok belső szervezeti struktúrája. A termelésirányítás lineáris szervezeti rendszerét a termékcentrikus, vagy gyártmány-csoportos termelésirányítás és végtermékcentrikus külső kapcsolattartás rendszerével lenne célszerű felváltani, amely mind a termelés területén, mind a vállalati törzskari szervekben működő specialisták tudásának szélesebb körű kibontakozását eredményezhetné.

Nagyobb mértékben decentralizálandó az élelmiszeripari vállalatok belső döntési hatásköre. Az alsóbb szintű és a termelés közvetlen irányításában résztvevő vezetők egyre nagyobb hányada fiatal, felsőfokú képesítéssel rendelkező szakember, akik lendületesebben és bátrabban, több kezdeményező képességgel rendelkeznek, mint a nyugdíj korhatár közelében levő dolgozók, akiknek a több évtizedes szakmai gyakorlatát is hasznosítani lehetne.

Az élelmiszeripari vállalatok szervezeti struktúrájának decentralizációs jellegű korszerűsítése mellett általánossá kellene tenni a kivételeken alapuló vállalatvezetési módszert. Ennek az a lényege, hogy a vállalati részlegek feladatait és hatásköreit a szervezeti és működési szabályzatban pontosan rögzítik, továbbá, hogy minden egyes részleg a vállalati terv üzemekre való bontása alapján megkapja az időszakonként elvégzendő tervfeladatokat. A közép- és felsőszintű vezetők az így szabályozott és terjedelmében meghatározott vállalati folyamatokról csak akkor értesülnek, amikor a tervtől szignifikáns eltérés mutatkozik, amely vezetői döntést, illetve állásfoglalást igényel. Így a vezetőnek csak a rendes állapottól való eltérés eseteiben, „kivételesen" kell beavatkozni a vállalati folyamatokba. A vezetők munkaidejének nagyobb része így fennmarad a valódi értelemben vett vezetői tevékenységre és nem aprózódik el az operatív döntések tömegében. A kivételeken alapuló vezetés alapvető feltétele a vállalati terv és az ehhez kapcsolódó anyagi érdekeltség megfelelő módozatú üzemrészekre való bontása. Ez a módszer a vállalati belső információs rendszernek, operatív számvitelnek a korszerűsítését is szükségessé tenné.

e) A vállalati üzem- és munkaszervezés kérdése az 1971. évi decemberi párthatározat nyomán az érdeklődés előterébe került. A párthatározat indokoltan helyezte előtérbe a kérdést és hívta fel ennek fontosságára a vállalatok figyelmét. Ezzel kapcsolatban a probléma akkor kezdődött, amikor a következő év elején a párthatározat egy kormányhatározaton keresztül állami vonalra került. Már a kormányhatározatban domináltak a bürokratikus és adminisztratív elemek, mint pl. a szervezettségi színvonal mérésének máig sem megoldott kérdése (amely egyébként abban a formában nem is oldható meg),

a szervezési tervek és beszámoló jelentések készítése, a vezetők munkájának elbírálásánál való figyelembe vétel stb. Ezt a bürokratizálódást csak betetőzte az üzem- és munkaszervezésről készítendő rendszeres statisztikai jelentésadási kötelezettség. Azt kell világosan látni, hogy az üzem- és munkaszervezés olyan vállalati kategória, amely a vállalat érdekeltségébe tartozik. Az üzem- és a munkaszervezést ugyanis a vállalat kezdeményezi és annak gazdasági eredménye a vállalat jövedelmezőségi mutatójában nyilvánul meg. A gazdaságos és hatékony vállalati üzem- és munkaszervezést nem a minisztériumi utasítások viszik előre, hanem a gazdasági kényszer vagy a vállalati érdekeltség, illetve párhuzamosan mind a kettő.

Az üzem- és munkaszervezés akkor válik vállalataink eleven gyakorlatává és nélkülözhetetlen működési elemévé, ha annak eredménye csorbítatlanul, még azt is mondhatnák, hogy adókedvezménnyel vagy adómentesen a vállalatok rendelkezésére, a vállalatoknál visszamaradhatna. A vállalati jövedelmet átcsoportosító tröszt ugyanis külön nem honorálja vállalatainak az üzemszervezésből eredő nyereségtöbbletét.

f) A vállalati szervezők és a hazai szervezési intézetek szervezésre irányuló javaslatai, az esetek igen tekintélyes részében, a megrendelők íróasztalainak fiókjaiban feküsznek el. Viszont sajtónyilvánosságot is kapnak azok a szervezések, amelyeket külföldi szerzőirodákkal, deviza ellenében végeztetnek. Meg lehet tudni ezekből a hírekből azt is, hogy milyen nagyszerű eredményekkel járt a külföldi — természetesen nyugati — szakemberek közreműködése. A hírek valódiságát kétségbe nem vonva azt is meg kell állapítani, hogy minden egyes külföldi szervező igénybevétele esetén, a megbízó vállalat kötelezettséget vállalat a szervezési javaslatok feltételrendszerének teljesítésére. A magyar szervezői szakembergárda is tudna ilyen gazdaságosságjavulási eredményeket produkálni, ha javaslataikat, illetve azok feltételeit a vállalatok teljesítenék is. Sajnálatos módon itt is érvényesül a régi megállapítás, mely szerint senki sem lehet próféta saját hazájában.

g) Az élelmiszeriparnak az ipar más ágazataihoz viszonyítva lényegesen több a feladata, egyben lehetősége az üzem- és munkaszervezés javítására. Az élelmiszeripar ugyanis nemcsak átalakítja késztermékké a mezőgazdaságtól átvett nyersanyagokat, hanem egy részüket (pl. a vágóállatot) az átvétel után azonnal, más részét (pl. a gabonaféléket) hosszabb-rövidebb tárolás után exportálja. Ez a felvásárlási tevékenység szerves és meglehetősen költségigényes tevékenysége az élelmiszeripari szakágazatok többségének. A tárolás ideje alatt a feldolgozásig tartó szakaszban ugyanis tekintélyes veszteségek keletkeznek, amelyek részben a nyersanyag biológiai jellegéből erednek (pl. a cukorrépánál), részben a tárolóterek nem elegendő kapacitásának, illetve nem megfelelő voltának a következménye (pl. a gabonaiparban).

Az élelmiszeripari vállalatok „művi" szakágazataiban nagy költségtényezőt jelentenek a szállítási költségek és ennélfogva nagy jelentősége van a

szállítások szervezésének, amely elsősorban a szállítási utak rövidítésére és a szállításközi időveszteségek csökkentésére irányul.

A nagykereskedelmi tevékenység végzésével természetszerűen együtt jár a nagytömegű ügyviteli munka, amelyet egyre nagyobb mértékben végeztetnek a vállalatok korszerű számítógépekkel.

A felvásárlás, a tárolás és a nagykereskedelem folyamatainak területein annyi veszteségforrás, illetve rejtett tartalék van, hogy folyamatos és részleges feltárásuk és megszüntetésük biztos forrása a vállalati eredmények állandó jellegű növelésének. Ismét megjegyezve azt, hogy olyan mértékben, amilyen mértékben ezekben anyagilag közvetlenül érdekelt a vállalat.

h) A gyártási folyamatszervezés feladatai az élelmiszeriparban is igen sokrétűek. A gépek, berendezések intenzív kihasználásának növelése az állásidők csökkentése révén, a gyártmányösszetétel optimalizálása a korszerű számítástechnika alkalmazásával, az anyagfelhasználás és az energiafelhasználás csökkentése, a munkaszervezés és az ergonómia területén a munkahely-, a munkaidő- és a munkamódszer elemzése és szervezése; a mikroveszteségek feltárása, a filmtechnika és a műszeres munkamérések eszközeinek felhasználásával, különösen a nagyteljesítményű palackozó és csomagoló gépek jobb kihasználása érdekében bír nagy jelentőséggel. Az üzem- és munkaszervezésnek annyi feltáratlan területe és lehetősége van még az élelmiszeripari vállalatainknál is, amelyek eredménye a vállalat működésének gazdaságosságát, hatékonyságát és jövedelmezőségét a feltárás ütemében és arányában növelni tudja. Meggyőződésem, hogy a hatékony üzem- és munkaszervezés útján (a külföldi eladási árak kedvezőbbre fordulására való számítgatás nélkül is) biztosítható az élelmiszeripari vállalatok önfinanszírozó képessége, ismét hangoztatva a feltételt: a vállalati önállóságot!

i) Végezetül, de nem utolsó sorban kell szólni a fontosabbik termelőerőnek: az embernek a vállalatoknál betöltött szerepéről. A vállalat, mint szociológiai jelenség társadalmunk mezzoszíntű alapegysége. A dolgozó ember életének nagy, de inkább nagyobb részét ebben a társadalmi közegben éli le. Innen kapja megélhetésének anyagi bázisát, innen származhatik a sikerélménye és innen ered számára a munka öröme is. A társadalmi klíma alakítása és a jó munkahelyi közérzet megteremtése elsőrendű vezetői feladat minden színtű vezető számára. Üzemi demokráciánk jogszabályokban is rendezett fórumainak felhasználása és megfelelő működtetése ugyancsak előírt vezetői kötelesség. E munkaköri kötelességen túlmenően azonban, a dolgozó ember humanista megbecsülése, tisztelete és szeretete is olyanerőt jelentenek, amely a munkahelyi identifikáció révén komoly erőforrásává, elsődleges termelési tényezőjévé válhat a szocialista vállalatnak.

FELKÉRT HOZZÁSZÓLÓK

ANTONI FERENC

az MTA levelező tagja, egyetemi tanár, Semmelweis Orvostudományi Egyetem

A humán táplálkozás problémái egyfelől mennyiségi, alapellátási szinten jelentkeznek, másfelől általában az északi hemiszférán a mennyiségi igényeken belül minőségi igények is egyre élesebben jelentkeznek. Általánosan elfogadott, hogy a táplálkozás az egészségmegőrzés és az életkor meghatározásában is jelentős szerepet játszik. Jól ismert, hogy a túltápláltsághoz számos szervi elváltozás társul, így a diabetes mellitus (cukorbetegség), keringéssel kapcsolatos megbetegedések, magas vérnyomás, epekő képződés stb.

A technikai és műszaki fejlődés következtében csökkent a nagy erőkifejtéssel járó fizikai munka, rövidült a heti munkanapok száma, növekedett a szabadidő, mindezek és még sok egyéb más tényező hozta előtérbe a humán táplálkozással kapcsolatos eddig elfogadott normatívák újraértékelését.

Ez utóbbi még folyamatában van, nem zárult le. Sőt, egyre újabb és komplexebb formában jelentkeznek a humán táplálkozással kapcsolatos megoldásra váró problémák. Ezzel kapcsolatban szükséges még megemlíteni, hogy a korosztályok közötti arányok is változtak, különösen a felső korhatárok felé, ami tovább növeli a társadalom oldaláról felvetett táplálkozási problémákat.

A humán táplálkozással kapcsolatos ismereteinkről kiderült, hogy azok közel sem olyan megalapozottak, mint ahogy azt korábban hittük. Az egyes tápanyagok iránti igény és tápanyagok közötti arány új kérdésként jelentkeznek. Utalok ezzel kapcsolatban a koleszterinre, amelyre vonatkozólag rövid időn belül többször is változott a tudományos állásfoglalás. Továbbá számos szubsztituens (pl.: a ciklamátok) adalékanyaggal kapcsolatban, ízesítő, tartósító anyagok, továbbá a főzés során képződött anyagokkal kapcsolatban igen kiterjedt vizsgálatok folynak világszerte, annak megismerésére, hogy azok menynyiben befolyásolják az egészség állapotát.

A vizsgálatokat jelentős mértékben nehezíti az a tény, hogy a kísérleti modell-rendszerek, amelyeket állatokon végeznek, eredményei közvetlenül nem vihetők át az emberre, vagyis a végső bizonyíték csak az önkéntes emberen végzett vizsgálatok alapján ad megbízható eredményt.

Hazánk mezőgazdasági termésterületén igen jelentős eredményeket tudhat magáénak, amelyet mind a hazai, mind a nemzetközi elismerés egyaránt tanúsít.

Hazai tennivalóink a termelési tér továbbfejlesztése mellett tápanyagaink minőségével kapcsolatosak, ami azt jelenti, hogy egy olyan szemléletre van szükség, amely egységes folyamatnak tekinti a tápanyagok előállítását, élelmiszerré történő feldolgozását, fogyasztását.

A hústermelés és a húselőállítás már az első fázisban a zsiradékszintnél meghatározza a fogyasztással kapcsolatos problémákat. A táplálkozással kapcsolatos hazai problémáink igen jelentős szerepet játszanak a hazai morbiditás, az egyes betegségek kialakításában és nem utolsó sorban a munkavégző képesség, illetve az átlag életkor megszabásában.

A táplálkozással kapcsolatos felvilágosító munka csak egyik része a tennivalóknak, mert a felvilágosításhoz társulnia kell korszerű élelmiszertechnikával előállított élelmiszereknek, amelyekből az egyes korosztályok szükségleteiknek és igényeiknek megfelelően válogathatnak. Egyébként egy ilyen jellegű élelmiszeripar nemzetközi versenyképessége is számottevő lehet, keresettebbé válik a piacon. A hazai vonatkozásban fokozni kell mindenekelőtt a kalóriaszegény élelmiszerek előállítását, ízesítő és adalékanyagokkal gazdagítani kell az egyes élelmiszerfajtákat. Az ízigény fokozásával lehet kialakítani olyan igényeket, amelyek a hazai táplálkozási tradiciókkal versenyképesekké válnak, csökkentik a lakosság ragaszkodását a túlzsírozott, túlfűszerezett élelmiszerekhez. Az ésszerű, soványító élelmiszerek forgalmazása össztársadalmi igényként jelentkezik, ugyanis folyamatában vagyunk annak a tudatváltozásnak, amely egyre szélesedik, hogy a testsúly és a várható életkor között szoros összefüggés van.

Külön kívánom felhívni a figyelmet az egyre nagyobb számú, idősebb korosztály ésszerű táplálkozásigényeinek a kielégítésére, amely táplálkozásnak kímélőnek kell lennie, ugyanakkor az összes, a szervezet számára nélkülözhetetlen anyagot tartalmaznia kell.

Nagyon kívánatos lenne, ha fokozottabban tudnánk helyt adni a tápszerek előállításának és forgalmazásának. A tápszerek, ha azok megbízhatók, jelentős mértékben hozzájárulhatnak a ma már túlméretezett gyógyszer-fogyasztás csökkentéséhez. Utalok ezzel kapcsolatban arra, hogy a vitaminoknak gyógyszerként való fogyasztása még hatóanyagukban is megkérdőjelezhető. Ugyanis nem mindegy, hogy valaki a B-vitamin igényét tablettában veszi fel tápszerben vagy táplálékkal, ahol a különböző táplálékkomponensek a B-vitaminnak a tápcsatornába történő felszívódásához fokozott mértékben járulnak hozzák, vagy csak B-vitamint, mely legfeljebb a vizelettel vagy a széklettel kiürül a szervezetből.

Összefoglalva hasznos dolognak tartanám, ha az agrár, az élelmiszeripar és az egészségügy sokkal koordináltabban és szorosabban működne együtt,

amely a mi körülményeink között, a mi társadalmi rendszerünkben sokkal előnyösebben megvalósítható, mint a kizárólag profitra orientált társadalmakban, ahol ezek az ágazatok legfeljebb a reklámpropaganda érdekében képesek csak együttműködni.

BIACS PÉTER

a kémiai tudományok kandidátusa, főosztályvezető helyettes, Művelődési Minisztérium

A Magyar Tudományos Akadémia Kémiai Tudományok Osztálya, valamint Agrártudományok Osztálya már jó néhány évvel ezelőtt *tudományos rangot adott* az élelmiszeripari kutatásnak akkor, amikor létrehozta az Élelmiszertudományi Komplex Bizottságot. Azóta a Bizottságon belül több munkabizottság alakult ki, így 1976-ban létrejött a Lipidkémiai Munkabizottság, mely a kémiai és az agrár tudományterületeken kívül fórumot teremtett a biológiai és orvosi területeken dolgozó kutatók számára is, hiszen tevékenységével, interdiszciplináris működésével hiánytpótló szerepet tölt be.

A zsiradékok és zsírszerű vegyületek, a lipidek és lipoidok kutatása valóban *viszonylag elhanyagoltnak* tűnt a természetes szerves vegyületek két nagy csoportjával, a fehérjékkel és szénhidrátokkal összehasonlítva. Az élelmiszerkémia területén pedig szinte *kimondottan hátrányt* jelentett a lipidekkel foglalkozás, hiszen táplálkozásunkban ma sem ítélik előnyösnek a zsiradékokban gazdag étrendet. Hazai klimatikus- és talajadottságaink ugyanakkor lehetővé teszik az *esszenciális zsírsavakban gazdag olajosmagvú növények*, mint a *napraforgó* bőséges termesztését, feldolgozását és minden fogyasztói réteghez eljuttatását. Napraforgó- és repce-termesztésünk évről évre fokozódik, a termésből bőven jut exportra is, komplex felhasználását pedig jelentősen elősegítette a hazai kutatók eredményes munkássága a hidrogénezéssel történő margarinelőállítás, az ételzsírválaszték-bővítés és a sütőzsírok optimális összetételének kialakításával.

A növényi és állati eredetű zsiradékok kémiai és enzimekkel katalizált hidrolizise, az autooxidáció reakciókinetikájának tanulmányozása, a zsiradékok polimerizációs mechanizmusa, a hidrogénezés és átészterezés törvényszerűségeinek felderítése jelentették e kutatások mérföldköveit. Ezen az úton azonban még sokszor kell végigmennünk, mert biológia, a növénynemesítés új eredményei — mint a napraforgó-hibridek, az erukasavmentes repce-mutánsok — állandóan megújuló feladatokat rónak kutatóinkra: az új nyersanyagok függvényében tudományos kutatási eredményeink állandó átértékelésre szorulnak. Gyakorlati célkitűzéseit tekintve azonban ez a viszonylag fiatal hazai kutatási terület nemcsak naprakész, hanem Keserű János szavaival élve: „garantált" kutatásokat nyújt: a mezőgazdasággal intenzív együttműködése révén a helyszínen tudja bemutatni eredményeit, átadni tapasztalatait.

Koránt sem lehetünk azonban éppolyan elégedettek élelmiszereink egészének vonatkozásában: táplálkozásunkban egyre több jelét találjuk, hogy *ismeretlen, rejtett zsiradékok* jutnak szervezetünkbe az élelmi anyagokkal. Nemcsak a zsiradékokkal túlzsúfolt húsipari készítmények, hanem sok más kész- vagy féligkész élelmiszer is hordoz lipid-összetevőket, melyek szervezetünkben lerakódnak, szöveteinket átformálják. Ne felejtsük el, hogy a fehérjékkel és a szénhidrátokkal összevetve a lipidek viszonylag kevéssé alakulnak át az anyagcsere során. Ráadásul a zsiradékok jó raktározó helyei a különböző mérgező anyagoknak, vegyszereknek, növényvédőszereknek.

Úgy vélem, hogy az együttes osztályülés feljogosít minket, a lipidkémia tudományterületének művelőit arra, hogy még időben *figyelmeztessünk* minden szakembert: nem gazdaságos és távlatilag különösen nem kifizetődő az „olcsó zsírral" könnyelműen, és a tudományos kutatások eredményeit figyelembe nem véve átitatni élelmiszereinket. Minket pedig arra kell ösztönözzön ez a felismerés, hogy a *következő időszak* kutatási tervében kiemelt figyelmet fordítsunk a takarmányokon keresztül állati szövetekbe kerülő, azokat *átformáló zsiradékokra*, melyek között *várhatóan mikrobiológiai eredetűek* is lesznek. Nem az elrettentés, hanem a tudományos igényű problémafeltárás a mi feladatunk, hogy a mezőgazdasági, élelmiszeripari és táplálkozásélettani szakemberek tisztán lássák ezen, egyre markánsabban jelentkező folyamat következményeit. A Lipidkémia Munkabizottság az elkövetkező ciklusra — a két osztály jóváhagyásával — ezért elsősorban biológus, orvos és mikrobiológus kollégákkal erősítette meg sorait és kér támogatást ezekhez a *komplex, problémafeltáró kutatásokhoz!*

A nyersanyagok és a végtermék közötti összefüggés biokémiai-élettani aspektusának előtérbe kerülése másirányú mondanivalót is sugallt számomra, a *szakemberképzés területéről.*

Az élelmiszeripar vezető szakembereinek képzése hazánkban több felsőoktatási intézményben folyik, de egységes egészként felöleli az élelmiszertudomány teljes területét. Komplex jellegén belül az egyes intézmények arányeltolódási kémiai, fizikai vagy biológiai megalapozást részesítenek előnyben. A képzés egészét tekintve hazánkban jól érvényesül a LENIGER által leírt, klasszikusnak számító *háromszög-diagram*, melynek egy-egy csúcsában a műszaki, természettudományos (biológiai) és a gazdasági ismeretek sűrűsödnek. Az ismeretanyagok átadásának *kellő varációja* érvényesül a műszaki, agrár vagy közgazdasági felsőoktatási intézmények tananyagában, sőt eredményes kísérlet történt *önálló élelmiszeripari képzés kialakítására* a szegedi főiskolán. Az elmúlt három évtized során az élelmiszeripar a korábbi 100 felsőfokon képzett szakembere helyett ma már közel 7000 fős gárdával rendelkezik: ezek továbbképzése, átképzése, ismeretanyag-felfrissítése egyre feszítettebb igényként jelentkezik.

A *teljeskörű posztgraduális képzés* megteremtését megelőzően azonban fel kell számolnunk módszertani elmaradottságainkat: — meg kell erősíteni és az

élelmiszeripar egészére *konvertálhatóvá* kell tenni *tevmészettudományi* (kémia-fizika-biológia) megalapozását és *alkalmazott jellegét;* — ki kell szélesíteni a *művelettani oktatást* és *általános szakmai intelligenciát* kell biztosítani;

— ismeretanyag-*szintetizálásva* képes szakembergárdát kell kinevelni, akik a tudományos kutatásban és a technológiai irányításban egyaránt fogékonyak az *adaptációra* és az *innovációra!*

ELŐDI PÁL

a biológiai tudományok doktora, egyetemi tanár, Debreceni Orvostudományi Egyetem Biokémiai Intézete, Debrecen

Az átlag újságolvasó számára is világos napjainkban, hogy az élelmiszertermelés életszínvonal politikánk egyik letéteményese két szempontból is. A megfelelő mennyiségű, minőségű és összetételű árukészlet útján lehetővé teszi a lakosság növekedő igényeinek kielégítését, emellett azonban számottevő exporttevékenysége révén jelentékeny mértékben részese annak a folyamatnak, amely hazánk külgazdasági egyensúlyát fenntartja. Az elhangzott referátumok meggyőzően és imponálóan bizonyították, hogy az élelmiszertermelés jó kezekben van és a fejlődést elősegítő ipari kutatás kellő ütemben halad.

Mint minden iparágban, az élelmiszeriparban is, amint erre Kovács miniszterhelyettes elvtárs is felhívta a figyelmet, a korábbi mennyiségű növekedést ösztönző körülményekkel szemben a minőségi igények növelésére kell a jövőben több figyelmet fordítani. Ezt az igényt fejezik ki a Minisztertanács által a közelmúltban elfogadott Országos Középtávú Kutatási-Fejlesztési Terv 14. pontjában megfogalmazottak. Eszerint, olyan bázisok, technológiák feltárására kell törekednünk a jövőben, amelyekkel „... az állati terméktermelés fehérjetranszformációjának hatásfoka javítható, másrészt a táplálkozási célú fehérjeforrások köre bővíthető, minősége és biológiai értéke fokozható."

Vas Károly akadémikus referátumából megtudtuk, hogy az élelmiszerminőség vizsgálatára a fizikai, fizikai-kémiai és kémiai eljárásoknak igen széles spektrumú készletét alkalmazzák. Lásztity professzor hozzászólása rámutatott arra, hogy a vizsgálatok eredményeinek számítógépes analízisével, az eljárások automatizálásával milyen mértékben növekszik az analitikai munka hatásfoka. Egy problémakörről azonban nem esett szó, talán azért sem, mert erről napjainkban a vélemények megoszlanak. Ez a probléma a táplálék és takarmányok *biológiai értékével* függ össze. A fogalom nem újkeletű, a harmincas években vetődött fel, akkor, amikor a táplálkozás élettani és biokémiai kutatások megfelelő lendülettel megindultak.

Azóta, természetesen, a biológiai-érték fogalma a vizsgáló módszerek fejlődése következtében szemléletében is jelentős változásokon ment keresztül. Mellőzése, ipari jellegű hústermelési technológiák fokozódó térhódítása ellenére

hiba lenne, mert az amúgy is szűkösen rendelkezésünkre álló takarmányfehérjék transzformációját nem kedvezően befolyásolná. A táplálkozásélettan és a biológiai érték problémája különösen élesen vetődik fel az extrém teljesítőképességű haszonállatok fenntartásával kapcsolatban, amire a Hereford és Holstein-friz szarvasmarhák közelmúltban bekövetkezett tömeges elhullása is figyelmeztet.

A biológiai érték kérdése elsősorban a nyersen fogyasztott táplálék esetén merül fel, néhány esetben azonban a feldolgozás következtében alakulnak ki értékcsökkentő hatások. Ha fehérje vagy peptid természetű anyagról van szó, a kémiai analízis ezeket rendszerint nem mutatja ki, minthogy aminosav analízis segítségével nem a tápanyag fehérjeösszetételét vizsgálják, hanem a fehérje hidrolizátum összetételét, ami az eredeti fehérjékről már aligha adhat felvilágosítást. Emellett, az a körülmény, hogy valamely fehérjének biológiailag káros hatása lehet, az sem aminosavösszetételéből, de egyelőre még aminosavsorrendjéből sem következik nyilvánvalóan.

A táplálkozással, takarmányozással foglalkozó szakemberek a tápanyag teljességét és értékét, a többi között a lizin-mentionin-triptofán „szentháromság" alapján ítélik meg. Minél nagyobb ezek mennyisége, annál értékesebbnek tekintik a fehérjekészletet. Napjainkban azonban ennek a hittételnek alapjai is ingadoznak. A közelmúltban számoltak be arról, hogy sikerült kitenyészteni egy igen magas lizintartalmú árpát, amit a biológiai hatásfok szempontjából kétségtelenül jónak minősítenénk. A baj csak az, hogy a nagy lizintartalom jelentékenyen csökkenti a fehérjék emészthetőségét, vagyis amit megnyertek a réven, az elveszett a vámon. Hasonlóan, értékesülést csökkentő hatásuk van a növények magvaiban rendszerint szekunder metabolitként keletkező sokféle nem-fehérje aminosavnak (pl. metil-, hidroxi-triptofán stb.). Ha az aminosavanalízist nem célzottan végezzük, ezek csaknem biztosan elkerülik figyelmünket. Aminosavanalizátorral nem kimutatható változások következnek be növényi anyagok lúgos feltárásakor, a természetes aminosavak racém, D-módosulatai keletkeznek és ezek az anyagcsere folyamatokban gátolják a természetes L-módosulatok átalakulását, felhasználását. Kimutatásuk nem megoldhatatlan feladat, de nem is egyszerű, rutin eljárás. A lúgos feltárás alkalmával egyébként olyan műtermékek is keletkezhetnek, mint például az alanil-lizin és mások.

A félreértések elkerülése érdekében hangsúlyozni szeretném, hogy magam is vitába szállnék azzal, aki a korszerű kémiai vagy fizikai analitika eljárások értékét vitatná. De a táplálkozás nem egyszerűen kémiai folyamat, mint ahogy az élőlény sem egyszerűen sokféle kémiai folyamat valamilyen komplex összege, jóllehet folyamatainak egy részét igen megbízhatóan írhatjuk le különféle kémiai reakciókkal. A táplálkozás élettani problémák egy — talán jelentősebb — részét tekintve, nem arról van szó, hogy nem ismerjük eléggé a fogyasztó élőlényt, mert a tápanyagban található, értékcsökkentő tulajdonságok a fo-

gyasztó faj sajátságaitól, többé-kevésbé függetlenül, többféle faj esetén is azonosan jelentkeznek. Hogy ilyen hatások vannak, arra meggyőző bizonyítékot szolgáltatnak a különféle ún. *antinutritív* anyagok. Ezek közül némelyek csak a fehérjehasznosulás gazdaságosságát csökkentik, mások azonban kifejezetten egészségkárosító hatásúak.

Az antinutritív anyagok többsége elsősorban a nagyfehérjetartalmú magvakban, mint például a pillangósok magvai, fordulnak elő kisebb-nagyobb mennyiségben. Sokféle formáját ismerjük a *proteáz inhibitoroknak*, melyek jelentékeny mértékben csökkentik a fehérjék lebomlását a bélben, így azok egyrésze, minthogy nem szívódik fel, kárba vész. Hasonló gátló hatásuk lehet a természetes, *nem-fehérje aminosavaknak* is. Másféle folyamatokat befolyásolnak kedvezőtlen irányba az *antivitaminok* és *antiminerálok*. Olajos magvakból származó fehérjék elfogyasztását megakadályozhatja az a körülmény, hogy a poliénzsírsavakat a jelenlevő *lipoxigenáz* kellemetlen szagú és ízű vegyületekké oxidálja. A sokféle növényi *lektinnek* (hemagglutininnek) egyelőre csak *in vitro* hatása ismert, táplálkozás-élettani befolyása még vitatott. Károsító hatásúak lehetnek a *goitrogének*, *cianogének*, *szaponinok*, a *latirizmus* és *favizmus faktovok aflatoxin* és egy sereg másféle vegyület. A szarvasmarhák körében észlelt, ketózissal járó tüdőödéma patomechanizmusa még nem ismert, de bizonyos, hogy jó része van benne a nem megfelelő táplálkozásnak, ami a végső egyenleget tekintve, több tízmillió forintos veszteséget okozott a népgazdaságnak a nagyszámú állat elhullása miatt. A drámai példáknál, úgy vélem, népgazdasági szempontból kevésbé látványos, de anyagilag sokkal jelentősebbek azok az esetek, amelyek során az a megfelelőnek tartott összetételű tápkeverékekkel a tenyésztők nem érik el a kívánt termelési eredményeket. Minthogy az évenkénti takarmányfehérje importra több százmillió dollárt költünk, egyszerűen belátható, hogy már egy-egy százaléknyi megtakarítás is sok millió dollárt jelenthet a népgazdaságnak.

Hozzászólásom célja lényegében az volt, hogy egy általam fontosnak vélt, de méltatlanul elhanyagolt kérdésre, a tápanyagok *adekvát jellemzésére* irányítsam a figyelmet. A kémiai analízis vitathatatlanul rendkívül fontos feltétele és eszköze az élelmiszerkémiának, de kémiai módszerek *per se* nem adhatnak minden esetben egyértelmű választ enzimológiai, biológiai és egyéb kérdésekre. Pontosabban, fehérjetermészetű antinutritív anyagok kémiai módszerekkel kimutathatók akkor, ha a kérdéses nyersanyag *fehérjeösszetételét* vizsgáljuk (például elektroforézissel vagy más módon). Ez azonban eléggé körülményes, mert a nagytömegben jelenlevő egyéb fehérjék elfedhetik a kis mennyiségű, de jelentős biológiai hatású anyagokat.

Összefoglalásul szeretném megállapítani, hogy a korszerű fizikai, fizikai-kémiai és kémiai eljárásokon kívül akár élelmiszerek új komponenseinek, akár takarmányok *biológiai értékének* megállapítása érdekében, tekintettel az élelmiszertermelés hazai jelentőségére, szükség lenne olyan laboratóriumokra,

melyek alkalmasak mind *in vitvo* (enzimológiai stb.), mind *in vivo* vizsgálatokkal kimutatni antinutritív vagy/és egészségkárosító tényezőket. A MTA tervezi állategészségügyi kutató intézmény létesítését. Úgy vélem, a megfelelő táplálás vizsgálata, a tápanyagok sorsának nyomonkövetése, a nem megfelelő anyagok felhasználásának megelőzése csaknem annyira egészségügyi és gazdasági probléma, mint a fertőzések elleni védekezés vagy azok leküzdése. Minthogy a terv — sajnálatos módon — bizonyára még jóideig csupán terv marad, van még időnk elgondolkozni azon, hogy ilyenfajta biológiai értékmegállapító laboratórium létesítése mennyire szükséges és hasznos.

FARKAS JÓZSEF

a kémiai tudományok doktora, tudományos igazgatóhelyettes, Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet

A spóraképző baktériumok élelmiszertudományi és élelmiszeripari jelentőségét az adja, hogy számos fajuk élelmiszerromlások gyakori előidézője, egyes spóraképzők pedig ételmérgezések okozói.

A baktériumspóra a legellenállóbb élőlény. Antimikrobás hatásokkal szembeni rendkívüli rezisztenciája gondot jelent ilyen spórákat tartalmazó anyagok sterilezésénél, ill. tartósításánál. Számos tartósítási módszerünk eredményességét, ill. energiaigényét a baktériumspórák szabják meg.

A baktériumspórák kialakulásával, rezisztenciájával, pusztulásával stb. kapcsolatos összefüggések mélyebb megismerése elméleti jelentősége és érdekessége mellett ezért a tartósítóipari technológiák továbbfejlesztésének is egyik alapfeltétele. A baktériumspórákat is tartalmazó élelmiszerek tartósítása hatékonyságát elvileg három módon is lehet növelni.

1. az élelmiszertartósító kezelést megelőzően a nyugvó spórák érzékeny sejtállapotba való átalakulása elősegítése révén;

2. a sporocid fizikai és/vagy kémiai tényezők kombinált alkalmazása által;

3. az élelmiszertartósító kezelések/et túlélő baktériumspórák csírázásának, ill. kihajtásának meggátlásával.

Ilyen módszerek racionális alkalmazásához a spóra-dormanciát, a spóracsírázást és a rezisztenciát befolyásoló tényezők jobb megismerése szükséges. A magyar élelmiszerkutatásban e vizsgálatok kezdeményezése, majd-sokoldalú művelése elsősorban VAS KÁROLY és az általa teremtett tudományos iskola tevékenységéhez fűződik. Az utóbbi két évtizedben különös súllyal szerepeltek a kísérletek között az ionizáló sugárzás mint potenciális új tartósító ágens hatásaival kapcsolatos vizsgálatok. A továbbiakban e rövid referátum főként ezeknek a kutatásoknak a vázlatos bemutatására korlátozódik, az idő rövidsége miatt a fontosságuk ellenére mellőzve azokat a kutatásokat, amelyek élelmezésegészségügyi és -ellenőrző intézetekben, ill. egyes ipari kutatóhelyeken folytak és folynak.

A *spóracsírázást befolyásoló tényezők* hazai vizsgálatát VAS és PROSZT kutatásai vezették be, amelyek a sejtkoncentráció, a tápanyagtömény ség, a hőmérséklet és a pH hatásainak vizsgálatára egyaránt kiterjedtek. Későbbi, a spóracsírázás iniciálásával kapcsolatos vizsgálatainkból kitűnt, hogy megfelelő germinánsokkal a spórák többsége csírázásra kényszeríthető, így érzékenyíthető ugyanabban a közegben is, amelyben a spórák képződtek. Különféle germinánsokkal és az általuk iniciált spóracsírázás sóérzékenységével kapcsolatos vizsgálataink eredményei arra mutattak, hogy a spóracsírázás kezdeti szakaszának mechanizmusa különböző közegekben nem feltétlenül azonos.

A csírázás és a *spórák kémiai összetételének* mélyebb megismeréséhez járultak hozzá azok a vizsgálataink, amelyek az elsők között mutattak rá, hogy a spórák kolóniaképző képességét megszüntető, letális sugáradagok a csírázásban szerepet játszó enzimeket még nem inaktiválják, továbbá, hogy a spórákban nagy sugáradagok hatására a részleges fiziológiai csírázásra emlékeztető, „pszeudogerminációs" változások következnek be. Megállapítottuk azt is hogy kisebb, a spórák többségére még szubletális dózisok esetenként spóracsírázást stimuláló hatásúak lehetnek.

A *baktériumspórák pusztulási kinetikájának* vizsgálatában az exponenciálistól eltérő kinetika értelmezésében is VAS és PROSZT végeztek úttörő, s a nemzetközi szakirodalomban sokat idézett munkát. A későbbi vizsgálatok a spórák sugártűrési görbéinek meghatározására irányultak és ezek kapcsán nyert megállapítást, hogy a spóraszuszpenziók sejtsűrűsége és a szuszpendáló közeg pH-ja a spórák sugárrezisztenciáját számottevően nem befolyásolja, a sugárkárosodott spórák tenyészetképző képessége az élőcsíraszámoláshoz használt tápközeg pH-jától és összetételétől azonban nagymértékben függ.

A baktériumspórák *sugárrezisztenciája és a spóraállapotot meghatározó strukturális és kémiai tényezők* összefüggéseinek vizsgálatával a kezdeményezők között voltunk. A közelmúlt években egyes, a spórás baktériumfajok között is kiemelkedő sugártűrésű *Clostridium botulinum* törzsek spórái rezisztenciájának magyarázatát kereső kutatásokba kapcsolódhattunk be egy amerikai—magyar kutatási együttműködési megállapodás révén. Ezek a közös vizsgálatok érdekes eredményeket hoztak a spórákban lehetséges DNS-reparációról és a túlélési görbe alakjának a besugárzás és a csíraszámolás körülményeitől függő voltáról.

A *spóradormancia és -rezisztencia fenntartó mechanizmusának* megismeréséhez hasznos adalékot szolgáltattak azok a vizsgálataink is, amelyekben azt tanulmányoztuk, hogy a spórák hőpusztulása a sejt milyen fizikai és kémiai változásaival jár, továbbá, hogy milyen hatású a hőtűrésre és a dormanciára a spórák Ca-tartalmának a változtatása.

Elméleti és gyakorlati szempontból egyaránt különösen gyümölcsöző a hazai kutatásoknak a nemzetközi tendenciákkal összhangban levő azon irányzata, amely az *antimikrobás ágensek kombinált hatását* vizsgálja Aerob

spórákra is igazoltuk, hogy a besugárzás a túlélő spórák hőtűrését nagymértékben csökkenti, míg a hőkezelés plusz besugárzás sorrendű kombináció additív hatású. Vizsgálataink hozzájárultak, a spóraellenes kezelést követően uralkodó környezeti tényezőknek: az inkubációs hőmérséklet, a pH-nak, a vízaktivitásnak, ill. a sókoncentrációnak a károsított spórákra gyakorolt hatásai megismeréséhez.

A nátriumkloridnak, ill. a vízaktivitás-csökkentésnek a kezeletlen és a különböző fizikai hatásokkal károsított spórák csírázására és posztgerminatív fejlődésére gyakorolt hatása részben nemzetközi kooperációban végzett vizsgálatainknak volt a tárgya.

E vázlatosan felsorolt alapozó kutatások eredményei mikrobiológiailag hatékonyabb kombinált tartósítási módszerek kifejlesztéséhez adnak támpontokat. Ilyenirányú kísérleteink azt mutatják, hogy a sporocid fizikai és szporosztatikus kémiai tényezők tudományosan megalapozott kombinációival kisebb energia-igénnyel és a termékek minőségét kímélőbben lehetséges a baktériumspórákkal szemben védekezni, mint e tényezők egyedi alkalmazásával. A spórák kihajtásának szporosztatikus adalékanyagokkal való gátlására Pulay és munkatársai végeztek úttörő hazai vizsgálatokat a tejiparban, Vas és munkatársai pedig a tartósítóiparban. Hasonló célok vezettek bennünket a tilozinlaktát- és a kannabidiolsav-alkalmazási kísérletekben.

Jelentős szakirodalmi visszhangja volt az elmúlt években azoknak a hazai vizsgálatoknak, amelyek a pácolt húsprezervek biztonságosságát veszélyeztető spóraképzőkkel szembeni eredményesebb védekezést célzó és a húsipari nitrit-használat csökkentési lehetőségeit kereső nemzetközi kutatási irányzatba kapcsolódnak.

A spórakutatás módszerei és eredményei többek között jól alkalmazhatók a nagyrészt baktériumspórákból álló mikroflórájú fűszerek ionizáló sugárzásos csíraszámcsökkentésénél, mely technológia nemzetközi elterjedésének most lehetünk tanúi, s amelynek mikrobiológiai megalapozása 20 évvel ezelőtt kezdődött Magyarországon.

Talán e vázlatos referátummal is sikerült érzékeltetnem: a baktériumspórák dormanciájával és rezisztenciájával kapcsolatos hazai munkák élelmiszertudományi kutatásaink eredményesen művelt és a kutatás nemzetközi irányvonalaival összhangban levő ágát jelentik. Az eredmények gyakorlati alkalmazhatósága nem kétséges és további kutató-fejlesztő munkára ösztönző.

Horn Artúr
az MTA rendes tagja

Az élelmiszeripar versenyképességét alapvetően és a legnagyobb mértékben befolyásolja a nyersanyagtermelés mennyisége, gazdaságossága, minősége és rugalmassága. Egész élelmiszeriparunk alapjában véve erre épül. Az állat-

tenyésztés terén a hús, tej, tojás termelésben a megtorpanás a piac igényeihez való rossz alkalmazkodás a nem megfelelő élelmiszeripari feldolgozás azonnal éreztetheti hatását. Az egy főre eső állati termék-előállításban Magyarország az utóbbi években kétségtelenül felküzdötte magát a világelsők közé a hús- és tojástermelésben és átványos fejlődést ért el az utóbbi évtizedben az egy tehénre eső tejtermelésben is. Már nem ilyen kedvezőek a hatékonyság és a munka termelékenységi mutatói, jóllehet az alapadottságaink megfelelőek. Ezt igazolja az a felmérés is, amelyet az MTA a biológiai és ökológiai lehetőségeink alapján prognosztizált, nevezetesen, hogy a mezőgazdaság termelését az évezred végéig képes megkétszerezni.

Rövid hozzászólásomban két témát szeretnék érinteni. Mindkettő az adottságainkhoz való jobb alkalmazkodást és versenyképességünk megjavítását célozza. Az első a marhahústermelés, amelynek területén a húsipar szerepe az exportban mind meghatározóbbá válik, hiszen mindinkább számolni kell az élőállatok kivitelének erőteljes csökkenésével, amely több vonatkozásban is elavult, ésszerűtlen és gazdaságtalan. Jogosan vetődik fel az a kritika, hogy különösen a marhahústermelésben nem használjuk ki kellően az ökológiai adottságainkat, holott az előrejelzések szerint ezen a téren a külföldi versenyhelyzet szigorúbbá válik. Noha a teljes hústermelés dollárelszámolású exportteljesítménye ma meghaladja a félmilliárd dollárt, ennek a teljesítménynek növelése nem kis feladat. Az Állattenyésztési és Takarmányozási Kutató Központ vizsgálatai szerint a fajlagos eredményjavulás a kérődzőknél az ezredfordulóig 25—30%-ra becsülhető. A rét- és legelőgazdálkodás és a melléktermékhasznosítás viszonylag alacsony eszközvonzattal igen számottevő marhahús többlettermelést eredményezhet. A szénatermés 30%-os növelése például 460 ezer db többlet, főleg húsmarha tartását teszi lehetővé. A rendelkezésre álló 6 millió t. szalma, 8—10 millió t. kukoricaszár, 1,5—1,8 millió t. répafej reálisan felhasználható hányadából 180—300 ezer tonna hústöbblet nyerhető. Ehhez hozzátehetem, hogy a kutatás a gyakorlattal együttműködve ma már kidolgozta a tejelő tehénállományból az igénytelen anyatehénen keresztül a magyartarka, charolais és limousin húsfajtákkal történő végterméket előállító keresztezés révén a heterózishatás maximális kihasználásával, kiváló vágómarha előállítását. Ugyanakkor a legkényesebb változó piaci igényeket is ki tudja elégíteni és esetekhez alkalmazkodik. *Így bezáródik a kör, amely számottevően nagyobb reális hústermeléshez vezet, amire húsiparunknak is fokozatosan fel kell készülni.*

A második kérdés, amellyel röviden foglalkozni szeretnék, mégpedig azért mert ma még szokatlan és némileg új szemléletet követel, a tejtermelés. Ez ugyan egyelőre nem elsősorban exportra orientált ágazatunk, de legnagyobb volumenű jelenleg is évi 2,5 milliárd kg-ot kitevő állati termékünk és nem mentesít a racionálisabb megoldások keresésének a kötelezettsége alól. A szemléletváltozás azért szükséges, mert egy aligha javuló, energiahordozókban be-

következett új helyzet alakult ki, ami messzemenően érinti a tej koncentrációjának, sűrűségének kérdését. Ezen túlmenően megváltoztak a tejösszetétellel kapcsolatos igények. Mindkettő nemcsak a termelést, hanem a tejipart is döntően érinti. Szakkörökben közismert, hogy a tejtermelésre való szakosítást alapvetően az USA-kanadai holstein-friz fajtával hajtjuk végre igen nagy sikerrel. Amikor azonban ezt a fajtát behoztuk, azt is tudtuk, hogy a tej mennyiségi termelésének növelésére aligha vehettünk volna igénybe ennél kedvezőbb eredményt hozó fajtát, ugyanakkor tisztában voltunk azzal, hogy a tej minősége, főleg a zsír- és fehérje tartalom terén romlani fog. Annak a célnak az elérése során tehát, hogy a VI. ötéves terv keretében elérjük a tehenenkénti 4000 kg-os átlagos tejtermelést, a tej további hígulásával kell számolni. Közben már ismerjük a változó igényeket a tejösszetétellel szemben. A Közös Piac országaiban az utóbbi évek átlagában 2× annyi tejzsírt igényeltek, mint tejfehérjét. Ennek a helyzetnek a konzekvenciája, hogy a fölöslegbe kerülő tej alkotórészek a következő sorrendiséget követik: a tejben levő víz, tejcukor, tejfehérje és tejzsír. Ennek a helyzetnek a rugói, amelyekkel az utóbbi néhány évben kerültünk szembe: a nagy mennyiségű tej fejésének, szállításának, feldolgozásának aránytalanul nagy energiavonzata, a tejfehérjét illetően pedig egy bizonyos szinten felüli értékesítés korlátai, ami főleg a tejpornak az afrikai és ázsiai fejlődő népek körében a tejcukorallergia miatti csökkent felhasználási lehetősége, továbbá a pénzhiány ezekben az országokban és végül a ma már bekövetkezett gazdaságtalan felhasználása a tejfehérjének állati takarmány gyanánt. Így pl. a szójában levő fehérje a tejfehérjéjének $^1/_3$-ába kerül. Az eddigi általános felfogástól eltérően aligha számolhatunk a tejfehérje fölöslegnek megalapozott és gazdaságos levezetési lehetőségével. Ez a helyzet vezetett például oda, hogy az FAO által irányított Mezőgazdasági Stratégiai Központja Nagy-Britanniának olyan tejelő típusú tehén kialakítását javasolja, amely tejében 6% tejzsírt és nem több mint 3,8% tejfehérjét termel ugyanakkor minél több ilyen összetételű tejet produkál. Ez nyilvánvalóan nem azt jelenti, hogy a tejfehérje fontosságából veszített csupán azt, hogy a jó minőségű tejtermékekhez több tejzsír szükséges és a fölöslegben termelt tejfehérje értékesítése nehézségbe ütközik, ugyanakkor enyhült a tejzsír koleszterintartalmával szembeni megítélés az ember táplálkozása során.

Az előrebocsátottak alapján hazánkban csupán olyan nagyobb zsír és fehérjetartalmú tej termelését javasolnám, amelyben 4,2%—4,3% tejzsír és 3,7% tejfehérje van. Az ilyen tehéntípus kialakítására a kísérletek nagyrészt végrehajtásra kerültek és csupán elhatározás kérdése, hogy legalább az ipari feldolgozásra szánt tejet ilyen összetételben állítsuk elő. Egy ilyen tejösszetétel-átállítás, a tavalyi tejtermelésünket alapul véve az értékes tejalkotórészek mennyiségének megtartása mellett pl. azt jelentené, hogy közel $^1/_2$ milliárd literrel kevesebb tejet kellene kifejni, transzformálni, szállítani és feldolgozni és közel 20 millió kg tejcukor — amire senkinek sincs szüksége — megtermelését lehetne elkerülni.

Ehhez hozzá kell azonban tenni, hogy a jelenlegi litercentrikus szemlélet, amely eddig a tejárrendszerünkben és ösztönzőinkben egyaránt érvényesült a tejtermelésre történő szakosodás idejében kétségtelenül hasznos és jó volt, most azonban már elavult. A külföldi jelzések egyébként ezen a téren már különösen a fejlett tejgazdasággal rendelkező országokból egyre sűrűbben érkeznek, amennyiben magasabb áron fizetik a tejzsír és tejfehérje kg-ját koncentráltabb mint hígabb tejben. A tejzsír viszonylagos értékének a növekedése is tapasztalható. Így pl. Európa egyik legnagyobb és legfejlettebb tejgazdasággal rendelkező országa Dánia — amely pedig átlagosan 4,3%-os — mienknél 0,6%-al nagyobb zsírtartalmú tejet termel országos átlagban — új tejárrendszerében 25, 1 dán koronát fizet a tejzsír kg-jáért és csak 14,0 koronát a fehérjéért. Ugyanakkor árlevonást eszközöl a hígabb tejben levő tejzsírnál és tejfehérjénél. Hasonló úton rendezte tejárrendszerét Hollandia és több más ország. Ezt a kérdést tehát energiatakarékossági és egyéb okokból nekünk is sürgősen napirendre kell tűznünk, mert a termelés területén az átállás éveket vesz igénybe.

Mindkét általam felvetett kérdés megoldása nemcsak a tudomány széleskörű bekapcsolását és a kísérleti eredmények gyors adaptálását igényli, hanem közgazdasági környezetünk megfelelő alakítását is, amely a szabályozó rendszerek okos és célratörő módosítását, továbbá rugalmas és gyors alkalmazását is kell, hogy jelentse.

KAFFKA KÁROLY

a műszaki tudományok kandidátusa, tudományos osztályvezető, Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet

A délelőtti ülés előadói rámutattak az élelmiszergazdaság — és ezen belül az élelmiszeripar — népgazdasági fontosságára, a lakosság élelmiszerellátásának politikai jelentőségére és az élelmiszeriparnak a magyar exportban játszott meghatározó szerepére; ezért ezen megállapítások bizonyításától és ismétlésétől eltekinthetek. Az előadásokból az is kitűnt, hogy a VI. ötéves tervidőszakra előirányzott feladatokra alapozva a szükséges kutatás-fejlesztés egyik legfontosabb részterülete a termékek minőségjavítása és versenyképességük fokozása.

Hozzászólásomban ehhez szeretnék kapcsolódni rámutatva a gyors, roncsolásmentes műszeres élelmiszerminősítés eredményeire, problémáira és várható irányaira.

A korszerű technológiai berendezések, feldolgozó vonalak önműködő irányításának alapvető feltétele, hogy gyártás közben, a munkafolyamatok különböző fázisában résztvevő anyagok, valamint a berendezésből távozó végtermék minőségéről folyamatosan megbízható információt szerezzünk.

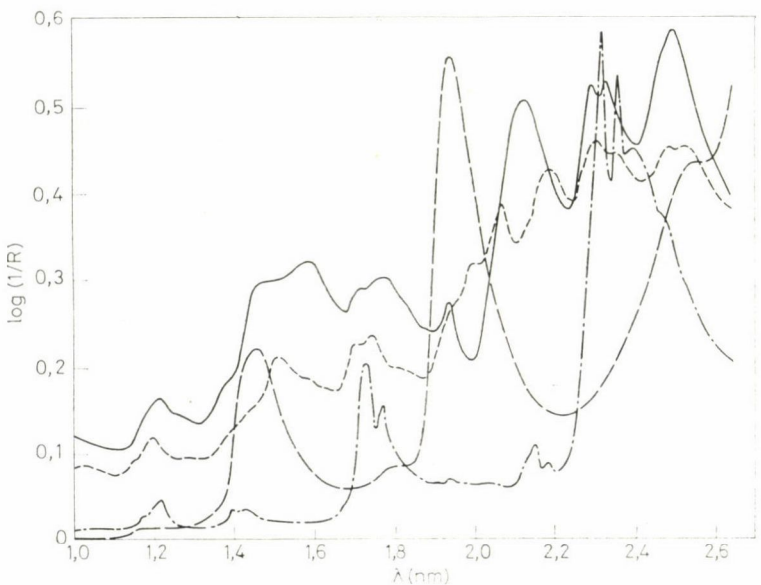
A minőségmérés tehát egyre nagyobb jelentőségre tesz szert, és már nemcsak a minősítés, a minőségellenőrzés területén, hanem a folyamatok önműködő irányításának alapfeltételeként a gyártás területén is.

Az élelmiszeripari termékek minőségének egyenletességével, a termékek minőségének javításával szemben támasztott növekvő követelmények olyan műszerek kifejlesztését teszik szükségessé, melyek mind a minősítő, mind a gyártással foglalkozó szakemberek számára a termékek minőségéről gyors, pontos és lehetőleg anyagveszteség nélküli, „roncsolásmentes" információ szolgáltatására képesek.

Egy-egy élelmiszeripari termék minősége nagyon sok jellemzővel írható le; de ezek közül is a legfontosabbak az összetételi jellemzők. A termékek ilyen jellemzőinek, mint például a fehérje, zsír, szénhidrát, rost, karotin, klorofill, alkohol, víz stb. százalékos mennyiségének hagyományos módszerekkel történő meghatározása általában speciális vegyszereket igénylő lassú folyamat. A kémiai analizisek elvégzéséhez szükséges idő túl hosszú ahhoz, hogy a termelés irányítását az így kapott információkra lehessen alapozni.

Az elmúlt évek során élelmiszeripari termékek összetételi jellemzőinek gyors meghatározására több módszert és műszert fejlesztettek ki. Az összetételmérő műszerek fejlődésében két fő irányzat figyelhető meg. Az egyik a klasszikus analitikai eljárások magas színvonalú mechanizálásával biztosít jó reprodukálhatóságot, nagy pontosságot, gyorsabb adatszolgáltatást. (Erre jól példa a Labor MIM „CONTIFLO" műszer-családja). A másik irányzat a „közvetett" módszert alkalmazza: fizikai jellemzőket már, és ebből határozza meg az összetételt. (Erre példa a Labor MIM „INFRAPID" műszer-családja).

A prompt mérhető „szelektív" fizikai jellemzők felhasználása termékek egyes komponenseinek meghatározására már régóta ismert, de a pontossági



1. ábra

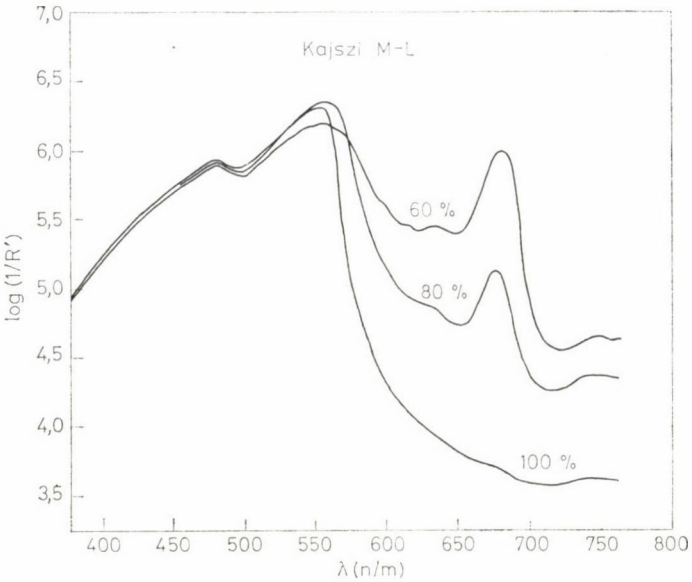
igények növekedésével ezek alkalmazása háttérbe szorult. A „mérésalterációs" módszer több nem szelektív, de egymástól független fizikai jellemző mért értékéből transzformációval határozza meg a termék több komponensét. Ezt a módszert előnyösen alkalmazták italok, konzervipari felöntőlevek és tejtermékek összetételének mérésére, de általában a komponensek számával megegyező számú fizikai jellemzőt kellett mérni és ennek megfelelő számú érzékelőt, mérőműszert kellett használni. Több esetben az élelmiszeripari termékek állománya miatt egyes fizikai jellemzők mérése komoly nehézségbe ütközött. Az utóbbi években — paradox módon — a fizikai jellemzők körének az optikai jellemzők körére történő szűkítésével sikerült a módszer használhatóságát növelni, alkalmazási területét kiszélesíteni. Ez a módszer, mely a termékminta több komponensének egyidejű meghatározására alkalmas, a sugárzás és a termék-minta kölcsönhatásán alapszik. A termék-mintán átjutott, vagy arról visszavert sugárzás a minta tulajdonságaira — így összetételére — vonatkozó információk hordozója. Az élelmiszeripari termékeket alkotó legfontosabb komponensek szinte mindegyike abszorpciós sávokkal rendelkezik a közeli infravörös spektrum tartományban; így ez a hullámhossztartomány különösen alkalmas termékek összetételének meghatározására. Az 1. ábrán néhány fontosabb komponens; így fehérje, zsír, keményítő és víz spektrumát mutatjuk be példaképpen.

Bár a látható, sőt ultraibolya-tartományban is találhatunk és használhatunk egyes komponensek számára jellemző abszorpciós maximumokat, a gyakorlatban e technika megnevezésére a NIR (near infrared reflectance) technika elnevezés terjedt el. E technika előnye, hogy az optikai tulajdonságok az anyag állományától függetlenül, gyorsan, roncsolásmentesen mérhetők, és egy érzékelővel sok egymástól független jellemző mérhető.

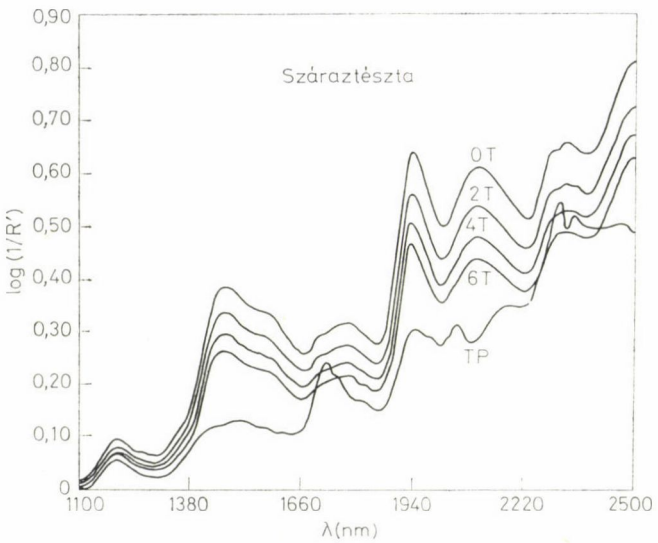
A legtöbb élelmiszeripari termék transzmissziós, ill. reflexiós spektruma komplex, a termékben található komponensek abszorpciós sávjainak átlapolódása, az abszorpciós csúcsok elmosódása következtében. A 2. ábrán különböző érettségi szintet képviselő kajszi transzmissziós spektrumát; a 3. ábrán különböző tojástartalmú száraztészta reflexiós spektrumát; a 4. ábrán különböző minőségű marha- és sertéshús reflexiós spektrumát mutatjuk be példaképpen. Így azután az egyes komponensek százalékos mennyiségének meghatározása érdekében bonyolult matematikai módszereket kell igénybe venni és az eredeti spektrumok raffinált transzformációihoz kell folyamodni.

A NIR technika az Amerikai Egyesült Államokban fejlődött ki, először mezőgazdasági termékek — így búza, kukorica, árpa, szója stb. — nedvesség-, fehérje- és zsírtartalmának gyors meghatározása terén aratott sikert. Az utóbbi időben e technika világméretű gyors elterjedésének és az alkalmazási területek kiszélesedésének vagyunk tanúi.

A NIR technika jelentőségét felismerve Magyarország is bekapcsolódott a munkába és mind a kutatás-fejlesztés, mind a gyártás és alkalmazás vonalán



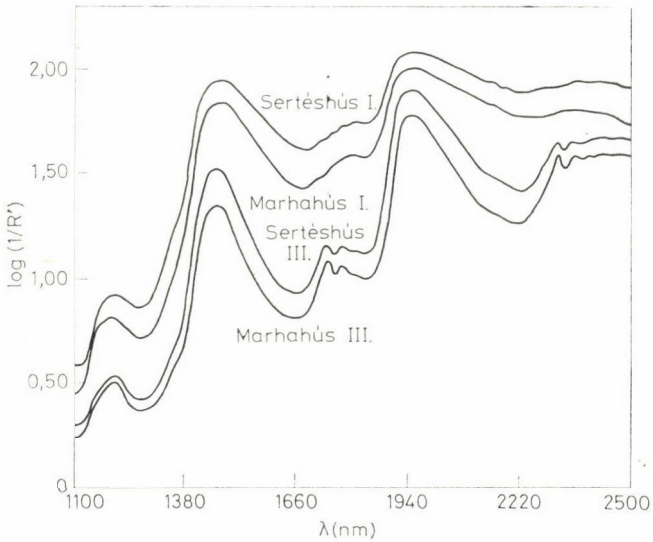
2. ábra



3. ábra

jelentős eredményeket ért el. Az eredmények illusztrálására legyen szabad azok közül csak néhányat és azokat is csak tömören bemutatni.

A Növényolaj és Mosószeripari Kutató Intézet, a Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet, a Labor Műszeripari Művek, valamint a beltsvillei USDA-BARC Istrumentation Research Laboratory szakemberei team-munká-



4. ábra

ban végzett kutatásainak ezévi eredménye napraforgó magok NIR technikás olaj-, fehérje-, rost- és nedvességtartalom meghatározási módszerének kidolgozása. Az eredményeket az 1. táblázatban mutatjuk be. A kalibráció céljára felhasznált, rendkívül gondosan előkészített és analizált mintasorozat olajtartalma 1,39 és 54,55 tömeg % között, fehérjetartalma 12,35 és 35,25 tömeg %

1. táblázat

*30 db napraforgó őrlemény minta kémiai analitikai adatai és a reflexiós spektrumok második deriváltjainak két hullámhosszon mért értékei közötti lineáris regresszió eredményei**

Egyenlet forma: $Q_i = k_{0i} + k_{1i}(V''_{\lambda 1i}/V''_{\lambda 2i})$					
	r	SEC tömeg %	λ_1(nm)	λ_2(nm)	RPD tömeg %
Olajtartalom (tömeg %)	0,9988	0,643	1684,8	2012,8	0,515
Fehérjetartalom (tömeg %)	0,9932	0,654	1771,2	1667,2	0,447
Nedvességtartalom (tömeg %)	0,9980	0,459	1852,8	1643,2	0,276
Rosttartalom (tömeg %)	0,9912	0,953	1548,8	1867,2	1,014

Jelölések:

r:	korrelációs tényező
SEC:	(standard error of calibration) hiba
λ_1:	karakterisztikus hullámhossz a számlálóban
λ_2:	karakterisztikus hullámhossz a nevezőben
k_1 és k_2:	állandók
RPD:	reprodukálóképesség

2. táblázat

Egyenlet forma: $Q_i = k_{0i} + k_{1i}(V_{\lambda 1i}/V_{\lambda 2i})$

	r	SEC tömeg %	λ_1(nm)	λ_2(nm)	RPD tömeg %
Zsírtartalom (tömeg %)	0,9972	0,122	2310,4	1892,8	0,057
Fehérjetartalom (tömeg %)	0,9820	0,268	1404,4	2054,4	0,137
Nedvességtartalom (tömeg %)	0,9261	0,329	1467,2	1401,6	0,204

3. táblázat

Egyenlet forma: $Q_i = k_{0i} + k_{1i}(V_{\lambda 1i}/V_{\lambda 2i})$

	r	SEC tömeg %	λ_1(nm)	λ_2(nm)	RPD tömeg %
Zsírtartalom (tömeg %)	0,9986	0,134	1763,2	1633,6	0,187
Fehérjetartalom (tömeg %)	0,9817	0,186	2054,4	2286,4	0,230
Szénhidráttartalom (tömeg %)	0,9938	0,233	2088,0	1763,2	0,484

között, rosttartalma 3,81 és 30,20 tömeg % között, míg nedvességtartalma 3,09 és 28,92 tömeg % között változott.

A Malom- és Sütőipari Kutatóintézet, a Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet, a Labor Műszeripari Művek, valamint a beltsvillei USDA-BARC Instrumentation Research Laboratory szakemberei team-munkában végzett kutatásainak ugyancsak ezévi eredménye száraztészta-készítmények (makaróni, spagetti) NIR technikás zsír-, fehérje- és nedvességtartalom meghatározási módszerének kidolgozása. Az eredményeket a 2. táblázatban mutatjuk be. A kalibráció céljára fejshasznált, rendkívül gondosan előkészített és analizált mintasorozat zsírtartalma 1,03 és 5,04 tömeg % között, fehérjetartalma 12,46 és 16,03 tmeg % között, nedvességtartalma 9,19 és 12,76 tömeg % között változott.

A MÉM Élelmiszerellenőrző és Vegyvizsgáló Központ, a Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet, a Labor Műszeripari Művek, valamint a beltsvillei USDA-BARC Instrumentation Research Laboratory szakemberei team-munkában végzett kutatásainak szintén ezévi eredménye kakaóporok NIR technikás zsír-, fehérje- és szénhidráttartalom-meghatározási módszerének kidolgozása. Az eredményeket a 3. táblázatban mutatjuk be. A kalibráció céljára felhasznált, rendkívül gondosan előkészített és analizált mintasorozat zsírtartalma 8,92 és 17,20 tömeg % között, fehérjetartalma 18,40 és 21,84 tömeg % között, szénhidráttartalma 34,96 és 42,96 tömeg % között változott.

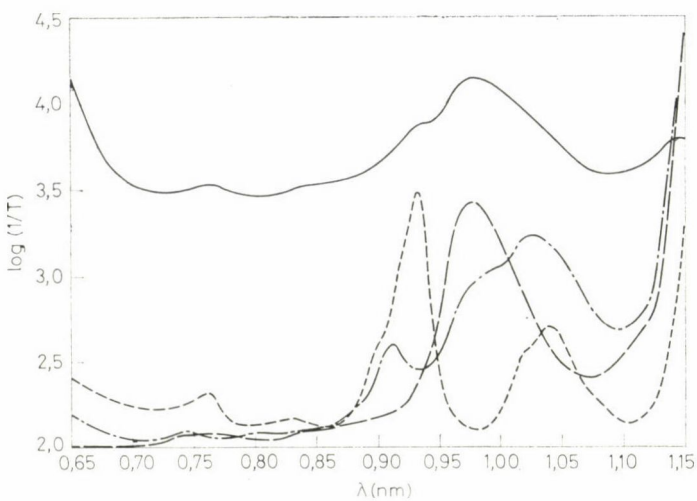
Az Országos Húsipari Kutató Intézet, a Konzerv- és Paprikaipari Kutató Intézet, a Gyümölcs- és Dísznövénytermesztési Kutató Intézet, az OTKI Egészségügyi Főiskolai Kar Dietetikai Szaka, a Kertészeti Egyetem, valamint a Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet szakembereinek együttműködése kapcsán az elmúlt évek során jelentős eredmények születtek húsok, gyümölcsök és zöldségfélék gyors, roncsolásmentes műszeres minősítése terén a NIR technika felhasználásával. Ezekről az eredményekről számot adtunk az MTA-MÉM Élelmiszertudományi Komplex Bizottsága, a Magyar Élelmiszeripari Tudományos Egyesület és a Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet által szervezett tudományos kollokviumokon.

Eredményeink elérését egy az OMFB támogatásával beszerzett NEOTEC gyártmányú 6450 típusú kutatási célokat szolgáló összetétel-analizátor tette lehetővé. A gyors működésű, nagy intenzitású két monokromátor a 250—2500 nm hullámhossztartományban használható. A gép operatív memóriájában tárolt spektrum a „display"-n megjeleníthető, kívánságra a „hard-copy"-n rögzíthető és a „floppy-disc" egységen tárolható a továbbfeldolgozás céljára. A spektrumok a beépített NOVA III számítógép segítségével transzformálhatók, feldolgozhatók és kiértékelhetők. Az összetétel-analizátor által regresszió-számítással meghatározott „jellemző hullámhossz"-ak és egyenlet-paraméterek birtokában célműszer építhető egy-egy anyag minőségének, összetételének meghatározására. A NIR technika gyakorlati alkalmazását a Labor MIM által gyártásba vett „INFRAPID" műszercsalád teszi lehetővé.

A NIR technika eszközeinek; így a fényforrásoknak, diszperzív elemeknek, sugárzásdetektoroknak, valamint a jelfeldolgozó számítástechnikai elemeknek rohamos fejlődése következtében ma már ott tartunk, hogy a vizsgált termékek vizsgált komponenseinek legtöbbjénél elértük a hagyományos kémiai analitikai módszerekkel elérhető pontosságot, sőt a NIR technikával olyan részletek feltárása vált lehetővé, amire eddig nem volt mód. Szinte mindenhol nehézségbe ütközünk azonban, ahol a hagyományos módszerek „deklarált" értékeket szolgáltatnak. Egy anyagmintáról NIR technikával szerzett információ például az anyagban levő fehérje természet által megszabott választ tartalmazza az őt megvilágító sugárzásra; természetesen ez nehezen korrelálható a nitrogéntartalom-meghatározás alapján egy bűvszám, mint szorzófaktor segítségével deklarált fehérjetartalommal. Még egy olyan egyszerű felépítésű anyaggal is mint a víz, problémák merültek fel; ki hiheti ma, hogy az alapmódszer mely meghatározott hőmérsékleten, meghatározott ideig, meghatározott geometria melletti súlycsökkenésből határozza meg a víztartalmat valóban az anyagban levő víztartalmat szolgáltatja. Természetesen ez a deklarált érték is nehezen korrelálható a NIR technika szolgáltatta információkkal, mely technika a különböző módon kötött vizeket különböző komponenseknek látja. Folytathatnám a problémák sorát a rosttartalom, a szénhidráttartalom hagyományos meghatározásának kritikájával.

Miután a NIR technikás módszer korrelatív jellegű, sohasem válhat alapmódszerré; így továbbfejlődése nehezen képzelhető el fehérje-analitikai, rostanalitikai, a víz fizikai-kémiai tulajdonságaira vonatkozó ismereteink fejlődése nélkül. Bár a műszeres analitikától, így a NIR technikától nem várhatjuk a néhány példa kapcsán érzékeltetett komplex problémák megoldását; remélhető, hogy éppen ezek, a fizikai tulajdonságok vizsgálata során jelentkező nehézségek fognak hozzájárulnia az anyagszerkezeti és analitikai ismereteink gyorsabb előrehaladásához.

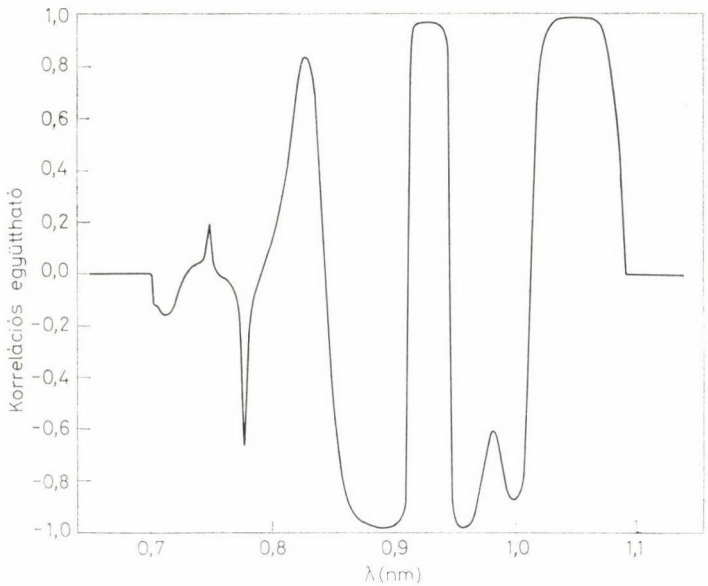
A NIR technika fejlődése során várható, hogy az eddig elhanyagolt 900—1100 nm hullámhossztartomány nagyobb jelentőségre tesz szert. A szilicium detektorok itt már nem, az ólomszulfid detektorok még nem voltak elég érzékenyek; sőt a spektrumok sem mutattak karakterisztikus jelleget. Ma már a germánium detektorokkal ebben a hullámhossztartományban is jól mérhetünk, ezenkívül kiderült, hogy a jellegtelennek tűnő spektrumok ellenére a korrelációs spektrumok nagyon éles csúcsokkal rendelkeznek. A 5. ábrán például a nyers sertéshús spektrumát mutatjuk be ebben a hullámhossztartományban, feltüntetve a fehérje, zsír és víz spektrumait is. A 6. ábrán sertéshús-



5. ábra

minták víztartalomra vonatkozó analitikai adatai és log (1/R) spektrumaik második deriváltjainak különböző hullámhosszakhoz tartozó értékei közötti korrelációs tényezők spektruma látható. E hullámhossztartomány előnye még, hogy a sugárzás lényegesen mélyebbre hatol az anyagba, mint más hullámhosszakon, így a minta inhomogenitása kevésbé zavaró.

Végül meg kell említeni, hogy a NIR technika továbbfejlődése és széles körű elterjedése mellett egy hasonló jellegű gyors, roncsolásmentes műszeres



6. ábra

minőségmérő technika kifejlődése várható. Ez a technika a vizsgált anyagnak az őt megvilágító sugárzásra adott hang-válaszát vizsgálja. PAS technikának nevezték el az angol (Photo-acustic spectroscopy) kifejezés rövidítéseként. E technika az összetételi jellemzők mellett a vizsgált anyag texturájáról, termikus és mechanikus jellemzőiről is gyors információ szolgáltatására képes.

Azt hiszem a fentiekből nyilvánvaló, hogy az élelmiszeripari kutatásnak ez a szűk területe is milyen komplex, milyen interdiszciplináris jellegű és további eredmény csak a különböző tudományterületeken dolgozó szakemberek koordinált együttműködésétől várható.

KISS FERENC

főosztályvezető, Mezőgazdasági és Élelmezésügyi Minisztérium

Az élelmiszeripari vállalatok, trösztök és ipari nagyvállalatok munkájának értékelésekor az utóbbi időben gyakran elhangzik az a bírálat — munkájuk elismerése mellett is — hogy gyenge, nem megfelelő a közgazdasági, helyesebben üzemgazdasági munka. Ezt a vállalatok gazdasági vezetői önkritikusan el is ismerik.

Úgy gondolom, hogy ezen a fórumon, ahol a feladatok megoldásának jobbításáról tanácskozunk, célszerű az üzemgazdasági munka javításának, színvonalasabbá tételének feltételeiről is szólni.

A rendelkezésemre álló rövid időben — a teljességre való törekvés nélkül — szeretnék rámutatni azokra a tényezőkre, jelenségekre, amelyek jelzik, hogy van javítani valónk az élelmiszeripari üzemgazdasági munkaterületen.

Mik ezek a jelenségek:

1. Az élelmiszeriparban a középvezetők mintegy 50%-ának nincs meg a felsőfokú képesítése. Az irányító munkakörök mintegy fele műszaki vonal; valószínű, hogy itt nagyobb a felsőfokú végzettségűek (mérnökök) aránya. Ebből adódik, hogy a tervezési, pénzügyi, számviteli, munkaügyi és forgalmazási területek vezetői között kedvezőtlenebb a képzettségi szint.

2. Az élelmiszeripari üzemgazdasági szakirodalom nagyon szegényes. Ma is csak egy-két szerző publikál, akik tették ezt 20—25 évvel ezelőtt is. Ez vonatkozik a tankönyvekre, az egyéb szakirodalmi művekre és a tudományos cikkekre.

3. Sajnos üzemgazdász hiány is van, a vállalatok nem rendelkeznek jól felkészült, 5—10 éves gyakorlattal rendelkező üzemgazdákkal. Ebben rejlik a fő ok, hogy a vállalati munkában halvány a gazdasági szemlélet, legyen az fejlesztéssel összefüggő gazdasági megalapozás, vagy éppen egy gazdasági cselekvés elemzése.

4. Nincs rangja a vállalati közgazdásznak. 1968 után a vállalati szervezetben módosították a tervosztályok helyét, azóta szerepük, rangjuk csökkent. Napjainkban a terv- és közgazdasági osztályokat más, megváltozott feladattal nem tudjuk felemelni, illetve az osztályok munkájukkal nem tudnak megfelelő szintre emelkedni. A munka színvonalában és a vezetői igénytelenségben van a hiba.

5. A végzős — talán jól képzett — közgazdászok sem azokat a termelő vállalati munkahelyeket keresik, ahol munkájuk eredménye napról-napra mérhető lenne, hanem előnyben részesítik az intézményeket. Ebben szerepe van a fiatalokkal szemben oly bátortalan vállalati káderмunkának, valamint a kisebb vállalatoknál az alacsony jövedelmeknek is.

Az élelmiszeripari üzemgazdaságtan, vagy legalább is annak gyakorlati alkalmazása nem maradhat az elmúlt évek szintjén. Elméleti és módszertani kérdéseit tovább kell fejleszteni, hogy megfeleljenek a jelenlegi gyakorlatot meghaladó jövőbeni követelményeknek.

Az élelmiszeriparban nem alkalmazható egy az egyben a szocialista vállalatra kidolgozott és továbbfejlesztett üzemgazdaságtan, mert az ágazat és ezen belül a szakágazatok sajátosságai jelentősek és éppen e sajátosságok miatt dinamikusan változik.

A sajátosságokat ebben a körben nem kell felsorolnom, de gondoljunk csak arra, hogy az élelmiszeripar termelői-, felhasználói-, beszerzői kapcsolataiban szinte évről évre milyen nagyok a változások, nemcsak a beszerzett anyagok mennyiségében, választékában, minőségében, hanem azok ütemezésében, differenciált tételeiben, a kapcsolati formákban, az elszámolás módjában stb.

De ugyanezt tapasztalhatjuk a termékértékesítési kapcsolatokban is, a belföldi értékesítésnél éppúgy, mint az exportnál.

Az élelmiszeripari tevékenységre kihat az életmód változás minden tényezője, még az is, hogy az 5 napos munkahét miatt a vásárlási ritmusok eltolódnak, a fogyasztói szokások megváltoznak, vagy például, hogy a hűtőlánc végén: a családoknál egyre több, korszerűbb, nagy mélyhűtőterű hűtőszekrény üzemel, megteremtve a korszerű háztartásvezetés alapeszközét.

Az élelmiszeripar sajátosságai között szerepel a nagy anyagmozgatás és szállítás. Nincs még egy ágazat, ahol annyi nyersanyagot és készterméket kell — kampánycsúcsokban és napi gyakorisággal — kiterjedt üzlethálózatba kiszállítani. Például csak a sört 35 000 kiskereskedelmi egységbe szállítják. Ezt sajátos feladatot újból átrendezi a szállítási költségek gyors változása, emelkedése. A napi, sőt naponta többszöri szállítási feladatok, azok költségei, a javítandó ellátási színvonal és a vásárlási szokások megkérdőjelezik az eddigi gyakorlatot.

Nem kis átrendezést kíván az energiaköltségek emelkedése sem. Már egy sor — energiaigényes — termék helye és szerepe változott meg az élelmiszeripari termékszerkezetben. De ide sorolhatjuk az importigényes termékeket, a csomagolási módokat is.

Nem élelmiszeripari sajátosság, de a témához tartozik, hogy az élelmiszeriparban napjainkban gyorsult fel a technika, technológia változása, a versenyképesség követelményeként jelentkező gyártás- és gyártmányfejlesztési tevékenység. Jellemző, hogy ez a munka ott hozott jó eredményeket, ahol a műszaki gárda fiatal.

Úgy vélem, hogy e pár téma is ékesen bizonyítja, hogy az élelmiszeriparban is — minden bizonnyal más ágazatokhoz hasonlóan — bőven van feladat az üzemgazdaságtan javítására, továbbfejlesztésére, különösen, ha nemcsak a megtörténtek regisztrálását, elemzését, hanem a döntéselőkészítést is feladatául szabjuk meg.

Ilyen alapvető feladatnak tartom a fejlesztést megalapozó számításokat és a munkamegosztás kérdéseit. Ez utóbbi az élelmiszerfeldolgozásban napjaink alapkérdésévé lépett elő, mind nemzetközi-, mind belföldi ágazatközi-vállalatközi méretekben. De erre még elméletileg és módszertanilag nem vagyunk felkészülve.

Az élelmiszerfeldolgozás belföldi munkamegosztásának ésszerű, vállalati szinten és népgazdasági szinten is gazdaságos megoldását csak akkor tudjuk megalapozottan kidolgozni, ha a különböző tevékenységek fázisköltségeit különböző megoldási módozatok között össze tudjuk hasonlítani. Ez termékenként, adott vagy tervezett vállalatközi szituációkban külön-külön kell elemezni. Erre modellt számíthatunk, de döntést a konkrét eset ismeretében kell hozni. Ez vonatkozik szinte minden termékre, a mezőgazdaság és az élelmiszeripar közötti munkamegosztásra éppen úgy, mint a termelő üzemek és a

forgalmazó vállalatok közöttire. Az előbbi kapcsolati pontra a kertészeti vertikum, a másodikra a hús vertikum kínálja az üzemrészenkénti differenciált megoldási módozatok sokaságát.

Korreferátumom célja az, hogy felhívjam minden illetékes figyelmét — bár az élet, a gazdasági kényszer minden felhívásnál erősebb — az élelmiszerfeldolgozás üzemgazdaságtanára, annak fontosságára, gyakorlati alkalmazására. Helyre kell állítanunk az élelmiszeripari vállalatoknál is, de minden élelmiszerfeldolgozó üzemnél is a gazdasági elemzés rangját.

Ebben segíteni kell a vállalatoknak:

— a közgazdasági környezet viszonylagos stabilitásával, hogy a gazdasági törvényszerűségeknek legalább a tendenciái felismerhetők legyenek,

— az üzemgazdasági munka szervezeti és személyi feltételeinek megteremtésével, javításával,

— az élelmiszeripari vállalati gazdaságtan, üzemgazdaságtan elméleti és módszertani kérdéseinek publikálásával,

— élelmiszeripari szakágazati üzemgazdaságtan kérdéseivel foglalkozó vitafórumok rendezésével és,

— nem utolsó sorban vezetői igényességgel.

KOVÁCS FERENC

az MTA levelező tagja, egyetemi tanár, Állatorvostudományi Egyetem

Amikor KOVÁCS IMRE miniszterhelyettes előadásában az élelmiszeriparnak a mezőgazdaság felé irányuló integráló szerepére utalt, akkor az élelmiszeralapanyagok termelése, feldolgozása és forgalmazása közötti *szoros kapcsolatot* erősítette meg. A kég ágazat fejlesztésének szükséges ötvözete tükröződik VAS KÁROLY akadémikus előadásában is, amikor a kutatások főirányaként elsőként veti fel az élelmiszerkészlet növelését, az élelmiszerek tápértékének és minőségének a javítását. Az ipar ugyanis csak annyi és olyan minőségű nyersanyaggal dolgozhat, amilyet a termelőktől kap. Érdeke tehát a több, a jobb minőség és az a megnyugtató, ha ez a termelők érdekeivel is összhangban van.

A minőség az egyes élelmiszerek belső és lényeges tulajdonságainak összességét jelzi. A *fogalom* és a mögötte levő tartalom is *relatív*. Mást jelent a legfejlettebb élelmiszergazdasággal rendelkező vagy az élelmiszerek minősége iránt legigényesebben fellépő országokban és mást a közepesen fejlett vagy elmaradott élelmiszergazdasággal rendelkező országokban. Hazánkban az állati eredetű élelmiszerek minősége az utóbbi évektől kezdődően vált a termelés mind dominálóbb tényezőjévé, minthogy nélkülözhetetlen feltétele az *export igények* kielégítésének, a *hazai fogyasztásnak* és az értékesítés szempontjából kedvező *közgazdasági környezetnek*.

Élettani értelemben vett nagy tömegű, homogén és jó minőségű élelmiszer *csak egészséges állatállománytól* származó nyersanyagokból állítható elő. Napjainkban az egészség fogalma kibővült és nagyüzemi állományszinten túllépi a klinikailag nem beteg állapot határát. Hazánkban és a fejlettebb élelmiszergazdasággal rendelkező országokban ugyanis a szubklinikai, vagyis a tünetektől mentes bántalmak képezik a termelés mind nagyobb akadályát és rontják az élelmiszerek minőségét.

Az okok elemzésénél abból helyes kiindulni, hogy *háziállataink* örökletesen determinált tulajdonságai századunk második felében nagyon megváltoztak, minthogy ma *sokszorosát termelik* a korábbinak. Nem lehet azonban elég szokszor hangsúlyozni, hogy a nagy genetikai potenciálhoz *nagyobb élettani igények* is társulnak a környezettel szemben. Ezért volt szükséges megváltoztatni az állatok természetes környezetét, melyet a *mesterséges környezet* váltott fel, amely gyakorlatilag a tartástechnológiára és a takarmányra szűkíthető le. A leszűkített mesterséges környezet mellett, hazánkban még a *koncentráció foka* az állatok *mikrobiális („élő"-)* környezetének korábban ismeretlen változását vonta maga után azáltal, hogy megvan a lehetőség a kórokozók nagyfokú elszaporodására és virulenciájuk növekedésére. A termékek mennyisége és minősége tehát attól függ, hogy milyen az összhang az állatállomány élettani igénye, valamint az „élő- és élettelen" környezet között.

Nagyüzemeinkben az állatállomány genetikai szempontból jóval többre képes, mint amennyi jelenleg a termelésben realizólódik, minthogy a nagy genetikai potenciállal párosuló élettani igény nincs összhangban a kielégítést szolgáló *műszaki* és *személyi* feltételekkel. Bár a hangsúly a *műszaki hiányosságokon* van, a személyi feltételekre azért is érdemes odafigyelni, mert *műszaki lemaradásunk* foka a fejlettebb országokéhoz viszonyítva *jóval kisebb*, mint a *termelésben való lemaradásunk* aránya. E „konfliktus" miatt rosszak a termelés mutatói, emelkedett nagyüzemeinkben a különféle fertőző, de főként az ún. polifaktoriális betegségek aránya és az utóbbi a legnagyobb akadálya a minőségi javulásnak is.

A nagyüzemi sertéstartásban meglehetősen magas (átlagosan 10—13%) az úgynevezett *technológiai selejt* aránya. Az állománynak ez a *több mintegymillió* sertést kitevő hányada a tervezett értékesítési súlyt nem éri el a különböző, főként szubklinikai bántalmak miatt. Az ilyen állatoktól származó áru exportra nem alkalmas, de kedvezőtlen a hazai közgazdasági környezete is. Hasonló okai vannak annak is, hogy nagyüzemekben a tervezett határidőre (pl. 210 nap) a hízósertések több mint kétharmada nem éri el a kívánt (100—105 kg-os) súlyhatárt. A továbbhízlalási kényszer miatt kedvezőtlenül alakul a kitermelhető *hús-zsír arány*, az állatok zsírosodása miatt. Az elmúlt öt év statisztikája szerint a hasított sertésre vonatkoztatott kitermelhető hús aránya ugyan jelentősen (47%-ról 51,9%-ra) emelkedett — és ez egyértelműen utal a hibridizáció eredményére — ez azonban még mindig legalább *3—4 kg-al keve-*

sebb, mint Dániában vagy Hollandiában, ami 7 millió sertésre vetítve több, mint *2 millió tonna* hústöbblet lehetőség.

Kisüzemekben az élősúlyra vonatkoztatott (45,1—45,9%-os) húsarány évek óta nem javul, ami főként a tenyésztési tennivalókra (a genetikai munka javítása, a meglehetősen heterogén fajták, vonalak számának csökkentése stb.) hívja fel a figyelmet különös tekintettel arra, hogy a kisüzemekből mintegy 3 millió sertést vásárol fel a húsipar.

A nem kielégítő hízlalási eredmények *oka összetett*, közülük a takarmány minősége, a légző-, emésztő- és mozgásszervi betegségek dominálnak. A nagyüzemekből származó sertések *70—90%-ában* megtalálható a *tüdőgyulladás* különböző foka és emiatt a tüdőket elkobozzák. Az elváltozások az egyes kórokozók specifikus hatása mellett a rossz minőségű, gázzal, porral, mikrobákkal szennyezett és fertőzött levegő miatt alakulnak ki. A gyulladásos tüdő képtelen az olyan mértékű oxigéntranszportra, mint amilyenre a nagy növekedési eréllyel rendelkező hibrideknek van szüksége.

A sertéstartásban a nem megfelelő anyagokból, rosszul kivitelezett padozaton igen gyakoriak a sérülések, amelyek kaput nyitnak a környezetben feldúsuló, virulens gennykeltő baktériumok számára. A sertések gennykeltő baktériumok okozta betegsége a „*menagement related disease*" típusos példája, amely miatt nagyon *sok hús kevül elkobzásra* vagy csökkent értékű áruként való felhasználásra.

A sertéshibridizációban felhasznált fajták közül néhány — amelyek a kitermelhető húsmennyiségen belül a nemes húsrészek (sonka, karaj) arányát is javítják — fokozott *stresszérzékenységgel* rendelkeznek. Ennek következményei aszerint alakulnak, hogy a hízlalás befejezése után a vágószalagig milyen megterhelésnek teszik ki az állatokat. Minél nagyobb a szállítással járó pszichikai és fizikai megterhelés, a veszteségek annál nagyobbak.

A hízlalás időszakában mozgásra nem kényszerített, sötétben tartott állatok egy része a szállítás körülményeitől függően már a járművön vagy a vágóhíd fogadójában *elhullik*, avagy *kényszer kell vágni*.

A pápai export vágóhíd 0,5 millió sertésre vonatkoztatott adatai szerint az ilyen jellegű veszteség az elmúlt 4 évben 1,2%-ról 1,5—1,6%-ra emelkedett. Az állatoknak nem kis hányada teljesen kimerülve kerül a vágószalagra, és nem vérzik el rendesen. Az ilyen állatok ellenállóképessége olyan mértékben csökken, hogy a különböző predilekciós helyeken levő feltételesen vagy enyhén patogén kórokozók betörnek a véráramba és szeptikémiát idéznek elő. Évente mintegy *egy millió tonnára* tehető az olyan hús mennyisége, amely fenti okok miatt fogyasztásra nem vagy csak feltételesen alkalmas.

A pszichikai és fizikai megterhelések okozta veszteségek másik része a fokozott stresszérzékenységet mutató sertések szállításakor keletkező *miopathiából* adódik, amikor a hús *sápadt, puha és vizenyőssé válik (PSE-hús)*. Az állatok teherbíró képességét meghaladó neuromotorikus megterhelések az izomzatban

olyan patofiziológiai mechanizmust váltanak ki, amely nagy mennyiségű tejsav és hőtermelődéssel jár. A tejsav nagy mennyiségben való keletkezése kimeríti a szervezet pufferkapacitását és zavar keletkezik a sav-bázis regulációban. A további savképződés jelentős pH-csökkenéshez vezet, növekszik az oxigénfelhasználás, melynek utánpótlására a legyengült állatok keringési szerve már nem képes. A jelenségre azért is érdemes figyelni, mert az ilyen húsok mennyisége évről évre nő, napjainkban is *több mint 30 ezer tonnára* becsülhető. Az ilyen hús táplálóértéke csökken, exportra nem alkalmas, belőle dobozolt áru nem készíthető.

Minthogy a sertések kedvezőtlen biológiai tulajdonságain — mint pl. a szív és a testsúly kedvezőtlen aránya, a szív rövid diasztolés időtartama a viszonylag kevés vérmennyiség, a külső ingerekkel szembeni fokozott érzékenység aligha változtathatunk — a stresszérzékeny vonalak tenyésztésből való kiszelektálása mellett, a szállítás és a vágóhídi fogadás feltételeinek javításával lehet a még nagyobb gazdasági veszteséget megelőzni.

Az utóbbi években külföldön mind gyakrabban figyelnek fel arra, hogy a kötetlen tartásban *hizlalt bikák* szállítása és levágása után igen gyakori a *sötét metszéslapú (dark, firm, dry) DFD hús*, melynek okát a szállítási megterhelésekhez kapcsolódóan a glikogén tartalék kimerülésével magyarázzák (indokolt lenne jobban megismerni). Ez azért érdemel figyelmet, mert a vágóhídi statisztikák szerint ez nálunk is meglehetősen nagy arányban fordul elő és *exportra* az ilyen hús nem vagy csak *jóval olcsóbban* adható el.

A nagyüzemi tartástechnológiával hozható összefüggésbe sertésekben az *atípusos gümőkór*, amelynek előfordulási aránya az utóbbi években ugyan csökkent, de export miatt is jó lenne felderíteni a betegség oktani összefüggéseit. Hasonló a hízott *libák májában előforduló vérzések* mind gyakoribb előfordulása, melynek okát ugyancsak nem ismerjük.

Az állati eredetű élelmiszerek minőségét a *takamrány* befolyásolhatja a legjobban. Összeállítása túllépi a mezőgazdaság kereteit, minthogy a vegyipar és gyógyszeripar termékei nélkül korszerű takarmányozás nem képzelhető el. A talaj-növény-állat-ember táplálkozási láncolatban az egyik változása nagyon kihat a másikra, és végsősoron minden változás az élelmiszerek beltartalmában tükröződik vissza. —Ez így van a takarmányt szennyező *kémiai anyagokkal*, *növényvédő szerekkel*, és a takarmányokhoz tudatosan kevert *biológiailag ható* kémiai anyagok tekintetében.

Ez utóbbiak gyűjtő néven *hozamnövelők*, a termelő szemszögéből nézve napról napra kínálják a nagy lehetőségeket, és megérthető, hogy a legtöbben ezzel élni is kívánnak. Ugyanakkor az exportra, de a hazai fogyasztásra kerülő élelmiszerrel szemben is az a követelmény, hogy az mentes legyen a minőségre és az ember egészségére károsan ható kémiai anyagoktól. Itt mutatkoznak meg ismét a takarménytermesztés-, felhasználás és a jó minőségű élelmiszerelőállítás látszólagos ellentmondásai, és itt integrálódnak legjobban azok a fel-

adatok, amelyek e látszólagos ellentmondás feloldására hivatottak. Ismeretesek a *tőkés piac ilyen irányú és mind szigorúbb előírásai*, melyeknek velünk szemben különösen érvényt kívánnak szerezni.

Hozamnövelés céljából csaknem mindig radikális biológiai hatással rendelkező anyagokat alkalmaznak. Emiatt is szükséges figyelembe venni a szernek vagy metabolitjainak a tulajdonságát, a *maradványanyag-képzés potenciálját*, az *emberi szervezet* ilyen anyagokkal való *terhelhetőségét*. Ezért ezeket a anyagokat nem lehet és nem szabad egyszerűen csak a hozamnövelő szerek körébe besorolni és ilyen címszóval szimplifikálni mindaddig, amíg nem tisztázódott sorsuk a szervezetben és az élelmiszerekben. Éppen az *antibiotikumok* szolgáltatták a legszembeötlőbb példát arra, hogy a gazdasági haszon tekintetében sokat ígérő lehetőség, az ember szempontjából milyen veszélyeket rejthet magában. Gyakran fordul elő, hogy a nagyüzemi *kacsa- és libatartásban*, főként a hizlalásban a technológiai és egyéb hiányosságokat antibiotikum tartalmú gyógyszerpremixszel kísérlik meg ellensúlyozni, és a levágott állatok *májának és izomszövetének antibiotikum tartalma* kizárja azok külföldre való eladását. Minden olyan hatóanyagot igénybe kell venni, amelynek felhasználásával a termékek mennyisége növelhető de úgy, hogy az ne rontsa a minőséget. A kettő *hasznos összeegyeztetésének záloga a fegyelem*, a felhasznált anyagokra vonatkozóan előírt utasítások betartása lehet.

Szólni kell még a *mikotoxinokkal* kapcsolatos gondjainkról is. Ismeretes, hogy a kukorica már a száron is fertőződhet. Nagy a lehetősége a penészgombák elszaporodásának akkor is, ha a kokuricát nem megfelelően tárolják. Az utóbbi években — az elmúlt évben különösen — a raktározás közbeni fertőződés és toxintermelés vált gyakorivá. A *toxinok* metabolitjait és általában a toxinok *szervezeten belüli forgalmát* nem ismerjük. Köztudott ugyanakkor, hogy közülük egyeseknek *kancerogén* hatása van, mások a *vérképzőszerveket* károsítják avagy a szervezet *aktív védekező mechanizmusára* hatnak károsan (immunszupresszív hatásuk van). Érthető, hogy nyomokban sem lehetnek jelen az élelmiszerekben.

Befejezésül az import takarmányokkal kapcsolatban szükséges megemlíteni, hogy a takarmánnyal együtt az *exportáló ország* különböző *humán- és állategészségügyi gondjaival* is terheljük magunkat. Az elmúlt 15 évben pl. *számos olyan salmonella törzset* hoztunk be import takarmánnyal az országba, melyeket korábban sem a humán, sem az állategészségügyi szolgálat nem ismert. Közülük néhány, különösen a baromfihússal és termékeivel terítődött gyorsan az országban és *súlyos humán járványokat* idézett elő.

Úgy gondolom ez a néhány adat is egyértelműen rávilágít a minőség javításával kapcsolatos tennivalóinkra a kutatásban és a gyakorlatban egyaránt. Sajnálatos, hogy ez a népgazdasági szempontból is igen fontos témakör nem kaphatott helyet az OKKFT-ben. Ezt lehetőségeink jobb kihasználásával, a kutató- és gyakorlati munka jobb koordinálásával és nem utolsósorban a ter-

melőüzemek és az élelmiszeripari közötti információ javításával kísérelhetjük meg ellensúlyozni.

Végül hálás köszönetemet fejezem ki a MÉM Élelmiszeripari Higiéniai Ellenőrző Szolgálat vezetőjének és dolgozóinak, valamint mindazoknak, akik előadásomhoz értékes statisztikai adatokat szolgáltattak.

KURUCZ JÓZSEFNÉ

a kémiai tudományok kandidátusa, műszaki igazgató, Növényolajipari és Mosószergyártó Vállalat

Kérem mindenekelőtt nézzék el nekem, hogy a plenáris előadások által felvetett sok-sok izgalmas problémához elsősorban saját iparágam szemüvegén keresztül nézve szeretnék hozzászólni és ezért hozzászólásomat a növényolajipar rövid bemutatásával kezdem.

A Növényolajipari és Mosószergyártó Vállalat az élelmiszeripar középvállalatai közé tartozik. Hat gyára és önálló iparági Kutató Intézete van. Bruttó termelési értéke 1980-ban csaknem elérte a 7 milliárd Ft-ot (5 év alatt megkétszereződött), 1981-ben pedig meghaladja a 9 milliárdot, ami az élelmiszeripar bruttó termelési értékének durván 4%-a.

A vállalat mintegy 3400 dolgozót foglalkoztat, (Kutató Intézet létszáma 70 fő), tehát az egy főre eső termelési érték jóval az élelmiszeripari átlag felett van.

Az iparágra a folytonos üzemű zárt technológiák alkalmazása a jellemző, viszonylag nagyfokú gépesítettség mellett.

A vállalat élelmiszeripari profiljának keretében nyers növényi olajokat, fehérjetakarmányt, különféle finomított étolajokat, margarint, étkezési növényi zsírokat, takarmányzsírokat gyárt.

Alapvető nyersanyagbázisát csakúgy mint az élelmiszeripar többi iparágáét a mezőgazdaság biztosítja. A növényolajipar belföldi ellátási kötelezettségeinek teljesítése mellett jelentősen export orientált.

A nyers növényi olajok tőkéspiacon tartósan kedvező dollárkitermeléssel értékesíthetők és ez indokolta, hogy az iparág V. ötéves tervének fő célkitűzése a mezőgazdasággal való szoros együttműködésben, az export növeléséhez szükséges alapanyag háttér megteremtése és annak feldolgozására szolgáló korszerű termelőkapacitás létrehozása volt.

A sokoldalúan összehangolt (kutatástól a termeltetésig és feldolgozásig), az ipar által műszaki fejlesztési alappal és fejlesztési alappal egyaránt támogatott, erőteljesen *célorientált* mezőgazdasági-ipari integrációs tevékenység eredményeként az elmúlt öt év alatt megkétszereződött az olajmagvak mennyisége (ezen belül a napraforgó csaknem megháromszorozódott a közel 50%-os termésátlag növekedése következtében).

A nyersanyagháttér növelésével egyidőben megépült részben a vállalat meglevő saját fejlesztési alapjának, részben pedig gyorsan megtérülő konvertibilis hitelkeret felhasználásával az ipar nyersolajgyártó kapacitását kétszeresére növelő Martfűi Növényolajgyár.

A termelés növekedésének eredményeként a tervidőszak alatt háromszorosára nőtt a nyers növényi olajok exportja.

A vállalat gazdasági munkájának szerves részét képezi a Kutató Intézetben folyó, meglehetősen sokoldalú kutatási tevékenység. Az Intézet fő feladata az iparág műszaki fejlesztésével kapcsolatos legfontosabb kérdések kidolgozása, a kutatási eredmények gyakorlati megvalósításának elősegítése, új eljárások, technológiák, vizsgálati módszerek bevezetése, a vállalati gyártás- és gyártmányfejlesztésének, a termelés koszerűsítésének, volumenének növelése érdekében mind a növényolajok, gyártása és továbbfeldolgozása, mind a mosó- és tisztítószerek gyártása területén.

Az Intézet látja el a TCP-23, a „Napraforgó és egyéb olajnövények nemesítése, termesztése, fajtafenntartása és feldolgozása" tárgyú tárcaszintű kutatási célprogram programvezetői tevékenységét és ezen keresztül közvetlenül részt vesz az integrációs folyamatban.

A kutatási célprogram és az ipar fejlesztési célkitűzéseinek összhangját bizonyítják az V. ötéves terv során realizálódott kutatási eredmények, amelyek közül néhány jelentősebbet érdemes megemlíteni:

GKI-ban nemesített GK-70 új nagyolajtartalmú napraforgó fajta,

Iregi nemesítésű IR-1 csökkentett erukasavtartalmú repcefajta köztermesztésbe vitele,

Primor alacsony erukasavtartalmú repcefajta honosítása és köztermesztésbe való vitele. Primor + IR-1 20 000 ha, 25—30%.

Csökkent erukasavtartalmú repcék feldolgozási technológiájának kidolgozása, alkalmazástechnológiai vizsgálata.

Új étolaj ételzsír-féleségek kidolgozása (bébi-tápszerolaj, célzsírok).

Rekonstrukciós fejlesztések előkészítése, beüzemelése, kapacitásbővítést, veszteségcsökkentést célzó technológiák, berendezések kialakítása.

Agrotechnikai kutatások eredményeinek bevezetése.

Martfűi szappancsapadékbontó szennyvíz üzem, laboratórium.

Új vizsgálati módszerek kidolgozása vagy adaptálása: pl.

— margarinok reológiai vizsgálata,
— zsírok esszenciális zsírsavtartalmának meghatározása,
— gyors olaj, fehérje, oldószertartalom meghatározása.

Az Intézet kísérleti üzemmel és viszonylag nagy létszámú (15—20 fő) kísérleti műhellyel rendelkezik. A kutatási témákat sok esetben a kutatástól a kivitelezésen keresztül s beüzemelésig viszi úgy, hogy a teamben a megfelelő gyáregység szakemberei is részt vesznek.

A kutatási eredmények realizálását reprezentálják a túloldali számok:

Kutatási témacsoport	5
Témacsoporton belüli összes téma	35
Alapkutatás	3
Alkalmazott kutatás	19
Gyártmányfejlesztés	5
Gyártástechnológiai fejlesztés	7
Egyéb műszaki fejlesztés	1
Befejezett témák száma	23
Alkalmazásra került témák száma	19
Bejelentett találmányok száma	1
Új szabványok száma	9
Szabványtervezetek száma	1
Megjelent publikációk száma	17
Tudományos előadások száma	10
Agrotechnikai kutatási eredmények elterjesztése céljából tartott előadások száma	15
Kutatóhelyi témabeszámolók száma	12
Állami nyelvvizsgát tett	1 fő
Technikusminősítő vizsgát tett	1 fő
Vegyészüzemmérnöki oklevelet szerzett	1 fő

Az Intézet fenntartási költsége az V. ötéves tervidőszakban átlagosan 9 millió Ft/év, a mezőgazdasági kutató intézetek számára átadott műszaki fejlesztési alap pedig 4 millió Ft/év volt, amit az olajnövényekkel kapcsolatos kutatásokra fordítottak.

A kutatásokból származó közvetlen nettó eredmény minden évben meghaladta a ráfordításokat, a közvetett eredmény pedig sokszorosa annak.

Mindezek alapján talán nem tekinti a Tisztelt Osztályülés szerénytelenségnek azt az összegzést, hogy a növényolajipar az V. ötéves tervidőszak alatt is megfelelt a ma követelményeinek:

— a gazdaságos exportot ereedményező termelését növelte,
— termékszerkezetét korszerűsítette,
— nyereségesen gazdálkodott,
— nyereségéből képződő fejlesztési alapját gazdaságos terméket eredményező kapacitások létrehozásába fektette,
— kutatásfejlesztési tevékenységét *célraorientáltan* folytatta.

Mi hát akkor a probléma?

A VI. ötéves terv fejlesztési koncepcióinak kidolgozását már közel két évvel ezelőtt kezdték meg az ipar műszaki fejlesztéssel foglalkozó szakemberei; kutatók, gyári főmérnökök, műszaki osztályok, közgazdászok. Az elsődlegesen szinttartó *rekonstrukciós fejlesztések*, a belföldi ellátás minőségi, mennyiségi, választékkielégítési igényeinek biztosítása, a munkakörülmények javítását, az energiatakarékossági és környezetvédelmi célkitűzések realizálását célozzák és mintegy 1 milliárd beruházási színvonalat igényelnek.

A növényolajipar K + F tervet készít, így a kutatási terv a vállalat VI. ötéves tervének szerves részét képezi az alábbi fő feladatok megjelölésével:

— a nyersanyaghátter biztosítását célzó kutatások,
— a gyártmányfejlesztés mind az export, mind a belföldi igények kielégítésére szolgáló termékek körében,
— a gyártásfejlesztés tekintettel arra, hogy a vállalat termelésnövelés elsődlegesen technológia-módosításokon, a meglevő üzemek kapacitást-bővítő rekonstrukción keresztül,
— a minőségellenőrzési tevékenység hatékonyabbá tételét új analitikai módszerek kidolgozása, adaptálása és bevezetése útján,
— a környezetvédelmi, valamint a munkavédelmi helyzet javítását célzó kutató-fejlesztő tevékenység.

Mi a helyzet a forrásokkal?

A növényolajipar hitelkötelezettségeinek teljesítése a megváltozott közgazdasági feltételek mellett a képződő fejlesztési forrásokat 1984-ig csaknem teljesen kimeríti és így még a színttartó beruházások sorsa is kétséges.

Mindebből következik, hogy még nagyobb jelentőséget kap a fejlesztési célok alaposabb kimunkálása, a fejlesztések alapos előkészítése, a lehetőségekhez szabott helyes döntések meghozatalának elősegítésére.

Ebben a munkában jelentős részt kell, hogy vállaljon és feladatot kell kapjon az ipari kutatás. Méginkább alapkérdéssé vált véleményem szerint a kutatás *célorientáltsága*, hiszen csak az a kutatási eredmény számíthat gyors realizálásra, — különösen szűkebb forrás lehetőségek mellett — amelynek a gyakorlatban való megvalósítása új forrásokat eredményez. Azt hiszem az innovációs folyamat csak ebben az esetben hozza meg a kívánt eredményt, bizonyos értelemben és határig a kutatásnak kell a fejlesztési lehetőségekhez alkalmazkodni azért, hogy új fejlesztési lehetőségeket hozzon létre.

LÁNG ISTVÁN

az MTA levelező tagja, az MTA főtitkárhelyettese

Szeretnék hozzájárulni egy gondolattal, illetve egy információval a mai tudományos vitaülés jövőbetekintő elképzeléseihez.

A Magyar Tudományos Akadémia elnöksége nemrégiben munkaprogramjába vette fel néhány társadalmilag nagyjelentőségű probléma széles körű felmérését, vizsgálatát. Ezek között szerepel az Agrártudományok Osztályának javaslatára „A biológiai eredetű anyagok (biomassza) hasznosításának távlati lehetőségei" elnevezésű téma is. Ezt a munkát az Akadémia együtt fogja elvégezni az Országos Műszaki Fejlesztési Bizottsággal, a Mezőgazdasági és Élelmezésügyi Minisztéreiummal, az Országos Környezet- és Természetvédelmi Hivatallal, az Ipari Minisztériummal, a Külkereskedelmi Minisztériummal, a Művelődési Minisztériummal, továbbá szoros és rendszeres kapcsolatot fog

fenntartani az Országos Tervhivatallal és a Nemzetközi Gazdasági Kapcsolatok Titkárságával. Én kaptam azt a megtisztelő feladatot, hogy összefogjam és szervezzem a felmérést. Az említett szervek képviselőiből alakult előkészítő csoport már kidolgozott egy előzetes koncepciót a munka tartalmi kérdéseire és a végrehajtás menetére.

Az akciót irányító és vezető komplex bizottság május 8-án tartja alakuló ülését.

Adott esetben a biomassza fogalmába beleértjük a szárazföldi és vízi összes élő és elhalt élő szervezetek (mikroorganizmusok, növények, állatok) össztömegét, továbbá ezek feldolgozását végző ipari folyamatok, az állattenyésztés és az emberi települések összes biológiai eredetű szerves hulladékát, melléktermékét, továbbá a mikrobiális iparok termékeit is.

Hazánk természeti adottságai lehetővé teszik, hogy az évszázad végén, kedvező társadalmi, műszaki és környezetvédelmi feltételek teljesülése esetén a jelenleg képződő növényi összprodukciónak közel a kétszeresét állítsuk elő évente. A lakosság megfelelő élelmezését 2000-ben az ország földterületének kevesebb, mint felén előállított termékekből biztosítani lehet. A többi terület hozama lehetőséget ad a biológiai eredetű termékek exportjának növelésére, vagy az import szükségletek (fehérje, faáru, szénhidrogének, mint energiaforrás stb.) részleges csökkentésére. A szerves anyagok széleskörű hasznosítása, reciklikációja egyúttal a közegészségügy és a környezetvédelem növekvő igényeit is kielégíti.

A biomassza termelés — transzformáció — felhasználás lánc egyes elemeit a többitől függetlenül már eddig is sokan tanulmányozták, de a biomassza *teljes körforgalmát* egy rendszerként még nem vizsgálták hazánkban.

A tervezett felmérés célkitűzése az, hogy a különböző területeken elért eredményeket *egy rendszerbe* foglalja és a biomassza távlati felhasználására olyan *alternatívákat* dolgozzon ki, amelyek figyelembe veszik a kutatási eredmények gyakorlatban való realizálásának sebességét, a gazdasági és társadalmi feltételek feltételezett változását. A felmérés időhorizontja 25 év.

Az alternatívák kidolgozásakor a biológiai eredetű anyagok termelését, feldolgozását és felhasználását alapvetően meghatározó, négy szempontot kell figyelembe venni:

1. A világon sok helyen problémát okoz a lakosság megfelelő mennyiségű és összetételű élelemmel való ellátása. Egyes prognózisok szerint ez a probléma a jövőben még növekszik, így az *élelmiszer stratégiai jellege fokozódni fog*. Magyarország kedvező feltételekkel rendelkezik az élelmiszeralapanyagok termelése terén. Ezzel az adottságunkkal számolni kell és ezért minden alternatíva esetén az *élelmiszertermelésnek* prioritást kell biztosítani.

2. Különös tekintettel Magyarország ipari nyersanyagokkal való ellátottságának problémájára és az ebből eredő import teherre, számításba kell venni az évente keletkező biomassza komplex feldolgozása során kinyerhető, nem

élelmezési célú *ipari alapanyagtömeget*. Ennek nagy része ma rendszerint hasznosítatlan hulladékként, környezetszennyező elemként jelenik meg vagy pazarló módon kerül felhasználásra.

3. A világ élelmiszerrel és ipari nyersanyaggal való ellátása mellett egyre jelentősebb problémát jelent az *energia biztosítása*.

A világon számos eredményt értek el, ill. számos bíztató eredménnyel kecsegtető kutatás indult el *bioenergia* nyerésére. Feletehetően e téren a kutatás és a felhasználás még fokozódni fog, mert

— a genetika és az agrotechnika fejlődésének eredményeként évente növekvő mennyiségű biológiai eredetű anyagot állítunk elő,
— a keletkező biomassza nagy része — melléktermék, hulladék — jelenleg nem kerül hasznosításra, bár jelentős „energia" tartalommal rendelkeznek. Felhasználásuk azért is indokolt, mert így sok esetben környezetszennyező elemként jelennek meg.

Minden alternatívának egyik fő meghatározó szempontja az, hogy a biomassza előállítás energiafelhasználása is racionálisabb legyen a mainál. Tehát a biomassza előállítás és hasznosítás energia input és output arányának javítása egyik fontos feladat.

4. Alapvető szempont a *természeti környezet* megóvása. A mezőgazdasági termelést hosszú távon magas szinten tartani csak kedvező természeti feltételek biztosítása esetén lehet.

A környezetvédő vagy kímélő technológia alkalmazása beruházási eszközök megelőlegezését jelenti, de ezek egyben termelő vagy a termelést racionalizáló beruházások, amelyek gazdaságilag megtérülnek.

Az ilyen típusú beruházásokat mindenképpen el kell végezni, mert ezek megelőzik a környezet károsodását.

A biomassza hasznosításával összefüggő gazdaságfejlesztési alternatívák kidolgozásakor e négy, szorosan összefüggő tényező mindegyikével, mint feltétellel számolni kell, s az alternatívák többek között abban különböznek majd egymástól, hogy ezen szempontokat milyen arányban érvényesítjük.

A felsorolt célok megoldása számos részfeladat elemzését teszi szükségessé. A teljesség igénye nélkül ezek a következők:

1. *A szoláris energia hasznosításának korlátai Magyarországon*

— a *fotoszintetizáló* képesség növelésének milyen elméleti lehetőségei és korlátai vannak hazánkban, a gazdasági és nem gazdasági növények esetében,
— a *fényenergia-hasznosítás* változás milyen biomassza-tömeg változást vona maga után.

2. *A biomassza élelmiszerként történő felhasználása*

— milyen új *élelmiszerforrások* jöhetnek számításba az ezredfordulóig,

— az *élelmiszerfeldolgozás* standard és várhatóan új módszereinek a feltárása (enzimkutatás és fermentációs iparok, minőségjavító eljárások stb.)
— az élelmiszerfeldolgozás során keletkező *melléktermékek és hulladékok* hasznosítási lehetőségei.

3. *Állattenyésztés—takarmányozás*

— az állatállomány *szerkezeti változásának* lehetőségei és annak hatása a biomassza körforgalmára,
— a *takarmányok optimális hasznosítási* lehetőségeinek vizsgálata,
— a *takarmányfehérje deficit* csökkentési lehetőségeinek feltárása,
— az *állattenyésztés természeti környezetre* gyakorolt hatásának az elemzése.

4. *A biomassza mint nyersanyag*

— a *fa- és cellulózipar* műszaki fejlesztésének lehetőségei a hazai nyersanyagkészlet bővítésével,
— növényi produkcióból származó alkohol, mint olajat helyettesítő nyersanyag a *vegyipar* számára,
— növényi hatóanyagok, mint lehetséges *intermedierek* a vegyiparban.

5. *Bioenergia előállítási lehetőségek*

— a *biogáz* előállítása és felhasználása, összhangban a közegészségügyi és környezetvédelmi igényekkel,
— növényi melléktermékek, ipari és kommunális hulladékok *energetikai hasznosítása*,
— növényi produkcióból származó *alkohol, növényi olaj* alkalmazása a *belsőégésű motorok* hajtó, ill. kenőanyagának részleges helyettesítésére.

6. *A biomassza termelés és felhasználás környezeti hatásai*

— a biomassza folyamatos előállítása és a természeti környezet *minőségének megőrzése* közötti összefüggések feltárása,
— a *szervestrágyázás és műtrágyázás* összehangolt alkalmazása környezetvédelem és az energiatakarékosság érdekében,
— a termőföld, a felszíni és felszínalatti vizek szervesanyagokkal és kemikáliákkal való *terhelhetősége*.

A vázolt feladatok megoldása és egyéb tanulmányok, prognózisok eredményeinek szintetizáló elemzése vezet a lehetséges alternatívák meghatározásához. E célból *dinamikus modellrendszer kerül kidolgozásra, amely útmutatást ad a biomassza felhasználás alternativáira, és azok realizálásához szükséges feltételekre.*

Összefoglalva elmondhatjuk, hogy minden alternatíva esetében a cél biológiai eredetű anyagok teljeskörű felhasználásával a *nemzeti jövedelem maximális növelése*. Az egyes alternatívák között a különbség az, hogy ezt milyen eszközök felhasználásával, milyen termelési struktúra előnybe helyezésével akarjuk elérni.

A munka interdiszciplináris jellege szükségessé teszi, hogy a mezőgazdasági és élelmiszeripari szakembereken kívül a számítástechnikával, matematikai modellezéssel foglalkozók, biológusok, kémikusok, műszaki tudományok képviselői, természeti erőforrásokkal, energetikai problémákkal foglalkozó szakemberek, közgazdászok és orvosok (higiéniával, táplálkozás-élettannal foglalkozók) szintén vegyenek részt a felmérésben.

Egyáltalán nem titkolt célja ennek a kollektív szintetizáló munkának, hogy helyzetfeltárásával és ajánlásaival hatással legyen az ország hosszútávú népgazdasági tervének alakítására és ezen belül is a szelektív iparfejlesztés, elképzelésekre.

Az előzetes tervek szerint a munkát két év alatt fogjuk elvégezni. Időközben azonban a részeredményeket számos fórumon, úgy mint az Akadémia szakbizottságaiban a MTESz egyesületeiben, üzemek, vállalatok kollektíváinak részvételével vitára fogjuk bocsátani.

Tisztelettel kérem a mai tudományos ülés résztvevőit, hogy segítsék elő az ismertetett felmérés sikeres végrehajtását részben személyes munkavállalással, részben pedig a tudományos közvélemény bátorító támogatásával.

László Elemér

a kémiai tudományok kandidátusa, egyetemi docens, Budapesti Műszaki Egyetem

Ezévben megindul a termelés a Szabadegyházi Komplex Kukorica feldolgozó üzemben. Kiemelkedő esemény lesz ez a rögzített enzimek élelmiszeripari alkalmazását illetően, hiszen hazánkban megvalósul egy olyan új biotechnológiai irányzat, amelyben az enzimkatalizis mind méreteit, kapacitását, mind jelentőségét illetően hasonlítani fog a modern vegyipar katalitikus folyamataihoz. Az évi 48 ezer tonna glükóz-fruktóz szörp, az izoszörp gyártásához 32 tonna rögzített glükóz-izomeráz enzimet használnak fel, amely — annak 40 napos felezési idejét figyelembevéve —, mintegy 20 m^3 katalizátorágy folytonos működését jelenti.

Egy ilyen új technológiai folyamat tervezése, üzemeltetése, ellátása rögzített enzimkatalizátorral új szemléletű kutató, fejlesztő és irányító szakembereket igényel. Az utóbbi években formálódott új tudományággá a legfejlettebb országokban is a rögzített enzimek alkalmazása által iniciált enzimmérnökség (enzym engineering). Tanszékünk is kapcsolódott ehhez az új kutatási irányzathoz, amelynek alapján jelentős szerepet tudtunk vállalni a fenti

nagyberuházás technológiai, műszaki, gazdasági előmunkálataiban. Technológiai szempontból legfontosabb volt a különböző rögzített glükóz-izomeráz enzimek összehasonlítása, a legkedvezőbb kiválasztása, ill. a választott bioreaktor üzemeltetési feltételeinek elbírálása, az optimális paraméterek alkalmazásának ellenőrzése.

Az enzimmérnökség fogalomhoz tartozik a rögzített enzimek előállítása is. Az elmúlt húsz, de méginkább az utóbbi tíz év során az összes ipari enzim rögzítését elvégezték. Sorra vették a különböző hordozókat, a szerteágazó kémiai rögzítési módszereket és publikálták a rosszabbnál rosszabb eredményeket. Természetesen ezzel a próbálgatásos módszerrel is sikerült néhány jó rögzített enzimet előállítani, de ez nem a tudatosság, inkább a szerencse következménye volt.

Az izoszörp gyártásának is, de számos élelmiszeripari technológiának is fontos folyamata az enzimes keményítő lebontás. Ebből a témakörből vennék példákat a fent említett tudatosság-szerencse ellentétpárhoz az enzimrögzítés területén. A Bac. subtilis α-amiláz a legfontosabb „folyósító" típusú ipari keményítőbontó enzim. Rögzítésére leginkább a hidrofil cellulóz és akrilsavszármazékok váltak be. De még ezeknél is jelentős a megkötött enzimmolekulák inaktiválódása. Pl. a cellulóz diazo-származékához kapcsolt Bac. subtilis α-amiláz aktivitásának mindössze 6%-át lehet a rögzítés után mérni. Ha a rögzítést izotiocianát származékkal végzik, akkor 5,3% a visszakapott aktivitás. Valamivel jobb eredményeket közöltek akrilsav-származékok esetén: pl. diazoszármazékoknál 6,1%, izotiocianátnál 9,5%, savazidszármazéknál 16% a rögzített α-amiláz hatásossága. Még a rendkívül pórusos Sepharose 2B-hez brómciános kapcsolással rögzített enzim is csak 7%-os hatásfokot mutat.

Az okokat keresve abból kell kiindulni, hogy a diazokapcsolás az enzim tirozilcsoportján, az izotiocianátos, a savazidos és a brómciános kapcsolás az enzim aminocsoportján következik be. Legújabb kutatásaink szerint a Bac. subtilis α-amiláz aktívcentrumában két tirozilcsoport és egy aminocsoport található. Ezek reaktivitását viszonyítva az enzimmolekula további felületi 6 tirozil- és 6 aminocsoportjának reaktivitásához — amelyek a fenti kapcsolási reakcióban szintén részt vesznek — pontosan kiszámítható a várható aktivitáscsökkenés. Az enzim aktívcentrumának teljes felderítésével, ill. a kapcsolásra kiszemelt csoport reaktivitásának ismeretében tudatosan megtervezhető a rögzítési reakció.

Még meglepőbb eredményeket kaptak β-amiláz rögzítésénél. Teljesen inaktív terméket eredményezett a savazidos, a brómciános, a dioxiránós és a divinilszulfonos rögzítés is. De diazokapcsolásnál is mindössze 1,5% a rögzített enzim hatásfoka. Módosítás vizsgálatokkal megállapítottuk, hogy a β-amiláz aktívcentrumában közvetlen a kötéshasító hely mellett található egy aminocsoport, amelynek részvétele a rögzítési reakcióban teljesen inaktív enzimet eredményez. A tirozilcsoport a szubsztrát megkötését végzi a β-amilázban, de

minimális kötődés ennek blokkolása esetén is előfordulhat, ez vezethet egy minimálisan aktív (1,5%) rögzített enzimhez a diazokapcsolásnál. Ugyanakkor, ha a rögzítésre a sokkal nagyobb számú karboxilcsoportokat használják, akkor 23%-os hatásfok érhető el, pedig karboxilcsoport az aktívcentrumban is található, de ennek résztvétele a rögzítésben sokkal kisebb valószínűségű.

Glükoamiláznál a tirozilcsoport diazokapcsolása 18%-os terméket, míg az izotiocianát teljesen inaktív terméket eredményezett. Az aktívcentrum kutatásunk itt is igazolta a kudarc okát, s véglegesen meggyőzött bennünket arról, hogy lényegesen biztosabban tervezhetők az enzimrögzítések az aktív centrum szerkezetének ismeretében.

Az élelmiszeripari célú enzimrögzítések hazai kutatásában a jövőben valószínűleg további eredmények érhetők el egy ilyen megközelítéssel.

LÁSZTITY RADOMIR

a kémiai tudományok doktora, egyetemi tanár, Budapesti Műszaki Egyetem

VAS KÁROLY, az Akadémia levelező tagja kiemelte az élelmiszerek minőségének mérésére szolgáló módszerek fejlesztésének fontossgát. Ezzel messzemenően egyet lehet érteni annál is inkább mivel az analitikai módszerek fejlesztése egyben a gyártásirányítás és ellenőrzés, sőt a kutatás szempontjából is igen jelentős. CVET, a kromatográfia feltalálója emelte ki egyik többször idézett mondásában, hogy az igazán jelentős tudományos eredmények csaknem mindig valamilyen új vizsgálati módszerrel kapcsolódnak össze.

Az élelmiszerminősítési eljárások közül kétségtelenül az automatizált módszerek jelentik a legkorszerűbb irányzatot. Mind az ilyen irányú kutatás, mind az alkalmazás területén gyors fejlődésnek vagyunk szemtanúi. Körülbelül 10 évvel ezelőtt készítettem egy tanulmányt a várható fejlődésről és most meg kell állapítanom, hogy az automatizált módszerek térhódítása lényegesen gyorsabb volt, mint az akkoriban merésznek hitt elképzelés.

A hagyományos fotometriás módszerek automatizálása érdekében elsősorban a Budapesti Műszaki Egyetem Biokémiai és Élelmiszertechnológiai, továbbá Mezőgazdsági Kémiai Technológia Tanszékén, valamint több kutatóintézetben végzett kutatások eredményeként ma már valamennyi élelmiszer makroösszetevőre és egy sor mikrokomponensre rendelkezünk hazai automatikus elemző rendszerre (CONTIFLO) adaptált vizsgálati módszerekkel. Több üzemben (pl. Lacta Tápszergyár, Körmend, Húsipari Kombinát, Pápa) többcsatornás automatikus elemzőrendszereket alkalmaznak a gyártásellenőrzésben is.

A Budapesti Műszaki Egyetem Biokémiai és Élelmiszertechnológiai Tanszékén automatikus aminosavanalizátor-számítógép-adatbank rendszert építettünk ki, amelyik nemcsak eredményeket számol és rögzít, de alkalmas

egy sor egyéb számítás (pl. biológiai érték meghatározás, optimalizálás stb.) elvégzésére is.

A fizikai jellemzők mérésén alapuló automatizált minőségvizsgálati módszerekről rövid összefoglalást hallottunk VAS KÁROLY professzor előadásában. E helyen külön szeretném megemlíteni a közeli infravörös sugárzás elnyelésén, illetve reflexióján alapuló módszereket. Ezek, a még néhány évvel ezelőtt is túlzottan drágának tekinthető eljárások ma már úgy tűnik a fehérjetartalom meghatározásában már versenyképesek. Legalábbis elvileg az IR-reflexiós technika alkalmas lehet akár aminosavösszetétel meghatározására is.

Végül megemlítem, hogy az automatizált eljárások, illetve automatikus elemző berendezések felhasználhatók megfelelő programozással rutin kutatási feladatok megoldására is, ezzel bővítve a kutatási kapacitást, illetve tehermentesítve a kutatókat.

SÁNTA ISTVÁNNÉ

a kémiai tudományok kandidátusa, osztályvezető, Országos Műszaki Fejlesztési Bizottság

Hozzászólásomban az OMFB-nek az élelmiszeripari tudományos kutatás és fejlesztés terén folytatott tevékenységét szeretném röviden vázolni és ráirányítani a figyelmet néhány olyan kérdésre, melyek hatékony megoldásához az Akadémia több osztályának koordinált tevékenysége volna szükséges.

Az OMFB kutatás-koordinációs munkája az élelmiszeripar területén is a kutatási tervek, így az OTTKT, majd az OKKFT és a tárcaszintű célprogramok kidolgozásában, egyeztetésében és a végrehajtásban való együttműködésben testesül meg.

Az elmúlt évek során széleskörű koordinációs munka folyt a K-11 kormányszintű célprogram végrehajtásának és a kutatási eredmények bevezetésének elősegítésére. Ugyancsak jelentős volt az a munka, amit a VI. ötéves tervi feladatok meghatározása jelentett, tekintettel arra, hogy az élelmiszeripar korszerű fejlesztése igényli a korszerű technológiák és termékszerkezet alkalmazását ezek kidolgozásához, vagy adaptálásához azonban a szűkös anyagi lehetőségek arra kényszerítetnek, hogy az élelmiszerágazat több mint egy tucat feldolgozási ága közül a legsürgetőbbet, a hazai ellátás biztosítása és az exportképesség szempontjából elengedhetetlen kutató-fejlesztő munkák kerüljenek előtérbe, gondolva emellett nem csak a mára és a holnapra, hanem egy kicsit a holnaputánra is. Arról van szó ugyanis, hogyha az ezredfordulóig biztosítani akarjuk pozíciónkat, akkor már ma vigyáznunk kell a lépéstartásra, mert a külföldi tudományos eredmények nyomonkövetése, azok fogadására való előkészület, a hazai specialitások miatt elengedhetetlen kutatások folytatása biztosíték arra, hogy felkészültek legyünk változó, magasminőségi

igényeket támasztó piacok kielégítésére. Ezért a tárcával és a vállalatokkal közösen meghatároztuk, majd az Élelmiszertudományi Komplex Bizottságban megtárgyaltuk előbb egy tanulmánysorozatban, majd a Vas a. Által említett tanulmányban az alkalmazott és alapkutatások terén végzendő munkát. Ezt tartozzuk szem előtt, amikor az anyagi lehetőségek figyelembevételével közösen kijelöltük a VI. ötéves terv idején feltétlen szükséges kutatási feladatokat.

E munka során alapvető fontosságunak tartjuk a mezőgazdasági és élelmiszeripari technológiai és közgazdasági kutatások összehangolását. Ugyanis a mezőgazdasági termékek minőségi jellemzői eleve meghatározzák az ipari termelés gazdaságosságát és élelmiszereink minőségét. Ugyanakkor az élelmiszeripari technológiának alkalmazkodni kell a korszerű nagy termést adó fajták tulajdonságaihoz és a gépesítéssel, az intenzív technológiák alkalmazásával járó következményekhez.

A mezőgazdasági üzemeket anyagilag is érdekelté kell tenni a fogyasztói igények és a feldolgozói lehetőségek szempontjából is optimális tulajdonságú termékek előállításában. Úgy érzem, hogy a közgazdasági kutatások nincsenek megfelelően összehangolva a mezőgazdasági és élelmiszeripari kutatásokkal. Ugyanis a termelői kedv tartós, a kívánt szinten történő fenntartása és ugyanakkor a nyersanyagok megfelelő minőségének és mennyiségének meghatározott időben történő biztosítása csak a termelői-feldolgozói és a népgazdasági szempontból együttesen optimális, mindezeket a feltételeket figyelembevevő ár és szabályozó rendszer útján lehetséges. Ilyen árrendszer kialakítása pedig összehangolt a helyi körülményeket is szemelőtt tartó kutatómunkát igényel. A kutatómunkának sürgető szükségszerűségére különösen a Sipos A. előadásában említette a Nyíregyházi Konzervgyár gondozásában folyó, a mezőgazdasági üzemek és a gyár termelésének összehangolására irányuló kutatómunka hívta fel a figyelmet.

A másik ilyen kérdés ami nincsen kellően kidolgozva, a mezőgazdaság-élelmiszeripar és forgalmazás minőségben való közös érdekeltségének gazdasági ösztönzökkel történő biztosítása a termelés és forgalmazás láncolatában.

Az OMFB a tanulmányokban megfogalmazott és alátámasztott kutatás fejlesztési feladatok megoldásában a rendelkezésünkre álló anyagi eszközökkel is igyekeztünk közreműködni.

Így fontosnak tartottuk az élelmiszeripari kutatóhelyek műszaki színvonalának javítását, a korszerű műszerek beszerzését, kísérleti üzemek, laboratóriumok felszerelésének kiegészítését. Példaképpen említeném a Magyar Hűtőipar Fejlesztési Laboratóriumát és a Konzerv és paprikaipari Kutatóintézet kísérleti üzemét, vagy a Központi Élelmiszeripari Kutató intézetet, melynek felszereltségét különösen a minőséget befolyásoló tulajdonságok és anyagok feltárását és meghatározását célzó kutató munkák érdekében korszerűsítettük.

Több olyan kutatást támogattunk, melyek korszerű technológiák kidolgozására vagy fogadásukra való felkészülésre irányultak. Itt említeném meg az ionizáló sugárzások alkalmazására szolgáló technológiák és ezek során a termékekben végbemenő fizikokémiai, biológiai folyamatok tanulmányozását a szabályozott légterű tárolás technológiáját és a zöldségek-gyümölcsök eltarthatóságát befolyásoló tulajdonságok vizsgálatát, a liofilezési technológia élelmiszeripari meghonosítását, a dielektromos és kriogén technikák hazai alkalmazására való felkészülést biztosító kutatásokat.

Folyamatban vannak olyan kutatómunkák, melyek a hazai ízlést és a specialitásokat is figyelembe véve a gyártmány és gyártásfejlesztést segítik elő a sütő-, édes-, hús-, baromfiiparban, továbbá melyek alapjait képezik a hazánkban újabban alakuló burgonyafeldolgozó iparban.

Külföldi kutatási eredmények, technológiák megvásárlásával, melyek egyúttal know-how vagy licenc vásárlást is jelentettek jelentős gyártmányfejlesztés gyors megvalósítását tette lehetővé a OMFB támogatása a tejiparban — a tartós tej meghonosítása, a sűtőiparban a péksüteménygyártás és réteslap gyártás gépesítése, a borászatban a melegítéses vörösborkészítés bevezetése stb. Ezek a kiragadott példák úgy vélem nyújtanak némi betekintést abba a sokrétű tevékenységbe, melyet az OMFB a hazai élelmiszeripari kutatás-fejlesztés és a külföldi eredmények meghonosításának elősegítése terén kifejtett.

Az előttünk álló években, amellett, hogy elsőrendű feladatunknak tekintjük a meglevő és még nem hasznosított kutatási eredmények bevezetésének szorgalmazását igen fontosnak tartjuk a rendelkezésre álló pénzeszközöket úgy felhasználni, hogy mód legyen a jövőt megalapozó, célraorientált kutató-fejlesztő munkák segítésére. Ide sorolnám a jó minőség biztosítása szempontjából meghatározó tulajdonságok és folyamatok kutatását és a kívánt minőség eléréséhez szükséges beavatkozások, technológiai módosítások kidolgozását. A hatékonyság növelése érdekében az anyag és energiatakarékosság szempontjából a technológiák állandó vizsgálatát, a melléktermékek és másodlagos nyersanyagok hasznosítási lehetőségeinek kutatását vagy adaptációját, a termelési folyamatokból a szubjektív beavatkozási lehetőségek számának csökkentésére az automatizálás majd a számítógépes folyamatirányítás bevezetéséhez szükséges vizsgálatok elvégzését, az erre irányuló kutató-fejlesztő munkát. Ilyen vonatkozásban kimunkáltuk elképzeléseinket a kutatásban és a termelésben dolgozó szakemberekkel és várhatóan a hús és hűtőiparban a minta-vonalak még a VI. ötéves tervben megvalósulhatnak.

Folytatjuk a gyártmány és gyártásfejlesztésre irányuló kutató-fejlesztő munkák segítését a tejkonzerv, hús-, baromfi-, hűtő-, sör- és szesziparban. Több olyan téma szerepel a kutatási tervekben, mely a mezőgazdasági kutatás számára is feladatot jelent.

Az OKKFT számítástechnika alkalmazásával foglalkozó programja keretében folytatjuk a Nyíregyházi Konzervgyárban megkezdett számítógépes

termelés programozás és folyamatszabályozás kidolgozására irányuló kutatómunkát, de mint említettem számítva a ma megoldatlan közgazdasági környezet vizsgálatában, a problémák feltárásában is a megoldási változatok kimunkálásában az agrár és élelmiszeripari közgazdászok segítségére.

Végezetül néhány szót szeretnék elismerőleg szólni arról a tevékenységről, melyet az MTA Élelmiszertudományi Komplex Bizottsága Vas Károly akadémikussal az élén az élelmiszertudományi kutatások koordinációja, a kutatási eredmények népszerűsítése terén végez. Igen hasznosnak és gyümölcsözőnek tartom azt, hogy a Tudományos Kollokviumok szervezésével rendszeres fórumot biztosítanak a kutatóknak eredményeik széleskörű ismertetésére és megvitatására. Ugyancsak szólni szeretnék a KÉKI gondozásában rendszeresen megjelenő Élelmiszerkutatási Hírek-ről, továbbá a KÉKIben tartott témabeszámolókról, melyek minden érdeklődő szakember számára hozzáférhetők. Úgy vélem ezek a tudományos igényességgel, de közérthetően összeállított színvonalas tájékoztatók a gyakorlati problémák megoldásához komoly segítséget nyújthatnak.

Csatlakozni szeretnék azokhoz is, akik az élelmiszeripari kutatások tárgyi és személyi feltételeinek továbbfejlesztését szorgalmazzák, az élelmiszeriparunk jövőjének biztosítása érdekében.

Az élelmiszertudomány gyakorlati célkitűzései a feladatok interdiszciplináris közelítésének és megoldásának igénye szükségszerűen veti fel az Akadémia érintett osztályainak rendszeres vagy egy-egy téma kapcsán alkalmi együttműködését. Így pl. az orvosi osztály bekapcsolódását a táplálkozástudomány, az élelmiszerek, vagy nyersanyagok dúsításával kapcsolatos témákba, vagy pl. a műszaki osztályét az élelmiszeripar és a mezőgazdaság automatizálása és gépesítése kérdéseinek magasszínvonalú kutatása-fejlesztése érdekében.

Az lenne a jó, ha nem csak a termelők hanem a kutatás szakemberei is szövetkeznének mezőgazdaságunk és élelmiszeriparunk összehangolt fejlesztését elősegítő feladatok megoldására és azt a jelentős szellemi tőkét amivel rendelkezünk elmaradásunk gyors felszámolása, korszerű magas igényeket kielégítő technológiák tudományos megalapozása és kidolgozása szolgálatába tudnánk állítani.

SOMOS ANDRÁS

az MTA rendes tagja, az MTA alelnöke

Hozzászólásomban az élelmiszeripar kertészeti szakágazatának néhány kérdését érintőlegesen kívánom említeni. Az utóbbi időkben végbement nagyarányú gazdasági változások következtében népgazdasági feladataink között a belföldi igények kielégítésén kívül előtérbe került a kertészeti termékek

exportjának folyamatos növelése is. Az ebből származó bevételek energia importunk s részben ipari nyersanyag importunk költségeinek fedezésében jelentős szerepet töltenek be. Ezért a zöldség- és gyümölcskonzervek, a mélyhűtött és szárított készítmények, valamint az ivólevek exportja a jövőben is jelentősen bővíthető. Az alapanyagot biztosító kertészeti háttérrel megfelelőképpen rendelkezünk, hiszen akár a belföldi fogyasztás fejadagját nézzük, akár pediglen az export lehetőségeit, rendelkezésre álló bázist veszünk figyelembe. Ez számszerűen szépen kifejeződik. Csupán a kertészeti termékek fő forrásait említve, tehát a gyümölcs, külön a bor és a friss zöldséget és tartósított zöldséget, a végösszeget alapulvéve a 83 kg, a bor 38 liter fejadagját és a zöldségek 99,6 kg-os, összesen tehát 220 kg kikerekítve 221 kg-os évi fogyasztás és fejadag, ami itt e tekintetben jó közepesnek mondható nemzetközi viszonylatban is. De bőven van még további fejlesztési lehetőség e téren is. Ami hazánk mezőgazdaságában a kertészettel évente hasznosított terület nagyságát illeti, az 1976 és 1979 közötti időszakot és annak középértékét figyelembevéve közel 470 000 ha volt az, ami e tekintetben szintén rendelkezésre állt. Évjáratot és középértéket a három év középértékét alapul véve vettük figyelembe. Azaz, a növénytermesztés területének csaknem 10%-át jelenti ez a terület, a gyümölcs, szőlő és zöldségtermés mennyisége összesen évi 9—10 millió tonnára tehető. Ennek egy része belföldi fogyasztásra kerül, másik része pedig nagyobb hányadában tartósítóipari feldolgozás után exportra. A mezőgazdaság összes értéktermelése az 1979. évi rendelkezésre álló adatok szerint 180 milliárd Ft volt. Ezen belül a növénytermesztés 91 milliárd forinttal szerepel és ebben a kertészet három fő ágazata mintegy 28 milliárd Ft-nyi nagyságrenddel vesz részt, azaz a szántóföldi növénytermesztés értékének több mint a 25%-át jelentette. Az ország kiviteli tervében a mezőgazdaság és az élelmiszeripar 64 milliárd Ft értékkel vett részt, ez 29% kikerekített számokkal dolgozva, szintén ott a számadatokban áttekinthetők és láthatók, és ennek 72%-a volt a dollár és 28%-a a rubel elszámolású nagyságrend és ebből következően a mezőgazdaság, a kertészet és az élelmiszeripar az ország dollár bevételének közel 40%-át, több mint 30%-át tette ki.

Az ipari feldolgozásra kerülő zöldségfélék összes mennyisége 1 millió 200 ezer tonna, összetételében pedig az egyes zöldségfélék közül a paradicsom 34%-kal, a borsó 20%-kal, a fűszerpaprika 8%-kal, az uborka pedig 6%-kal vett részt és ezen kívül vagy hozzá a 6%-ot megközelítő nagyságrenddel a vöröshagyma említhető.

A gyümölcsökből az összes termés évente, megint átlagszám vehető alapul, 1 millió 400 ezer tonna, a közelmúltat, a 79-es adatokat alapulvéve. Ebből 300 ezer tonna jut tartósításra. A gyümölcsfajok közötti megoszlás arányát tekintve az alma, a meggy, a málna és a szamóca vezet a rangsorban. Az szőlő legnagyobbrészt bor formájában és különböző párlatok formájában került kivitelre.

A kertészeti export fejlesztésével kapcsolatban néhány megjegyzés. A fejlesztés általános követelményei között első helyen említendő az élelmiszeripari nyersanyagok minőségének a javítása. A közelmúltban esetenként és növényfajonként jelentős minőségi hiányosságok fordultak elő, amelyek kedvezőtlenül hatottak a tartósított termékek értékére. Példaként említem az egyes paradicsomkészítmények, sűrítményekkel kapcsolatos problémakört, a fűszerpaprika őrleménnyel kapcsolatban jelentkező problémát a zöldségfajok közül. Nem szorul bővebb magyarázatra és igazolásra, hogy csak jó minőségű alapanyagból készíthető nemzetközi szinten is versenyképes tartósított élelmiszeripari termék, ahogy az elhangzott fő előadások között is hallottunk erről.

A felsoroltakon kívül fontos feladatoknak kell tekintenünk újabb kertészeti növényfajok bevonásával a tartósított termékek körének szélesítését. Emellett a már jól bevált és nemzetközi elismerést is szerzett termékeink, lehet talán így említeni, hogy a „hungaricum" jellegű készítmények választékának további bővítésére kívánatos figyelmünket továbbra is összpontosítani. Ilyenek elsősorban a paprikából, gondolok itt a fehér és a világos bogyószintű fajtákra, amelyek e tekintetben egész más jelleget képviselnek mint az általában a nemzetközi piacon, főleg Nyugaton elterjedt zöld bogyójú fajták, és azonkívül a paradicsom és paprika alapanyagból készíthető különböző nem annyira sűrítmények, mint inkább ivóleveknek nagyobb arányú elterjesztése és összetételük javítása. Kívánatos továbbá itt külön említenem a csemege kukorica készítmények választékának a bővítését. Meglehetősen nehezen jutottunk el oda, hogy a csemegekukorica kezd a kertészeti szakágazat területén fontos, reméljük hogy export termékké is válni és az ebben rejlő lehetőségeket figyelembe véve a termesztés vetületében szerintem a feldolgozás, tartósítás vetületében is nagyon jó, eddig kevésbé kihasznált lehetőségek kínálkoznak még számunkra. Itt, figyelembe véve és erre külön szeretném így a figyelmet is felhívni, az európai piacokon kínálkozó elhelyezési lehetőségekre is. Hasonlóképpen kívánatos az alkoholmentes üdítőitalok, ivólevek gyártásának és választékának a bővítése. Itt megint csak talán címszóként és példaként hadd említsem a csipkebogyóból készült csipkeszörp néven nálunk forgalomba hozott nagyon nagymennyiségű C-vitamint tartalmazó értékes készítményt, amelyiknek mindenféle formában keverékek készítésére történő felhasználása is nagyon nagy lehetőség van, nem beszélve arról, hogy olyan karsztos területek hasznosítására alkalmas ez a növényfaj, amelyek más mezőgazdasági növények termesztésére kevésbé alkalmasak. A gyümölcsök közül tovább bővíthet a meggyből, a kajsziból, a málnából és a szamócából készített feldolgozott termékeknek a sora és választéka. A kertészeti termékek exportjának továbbfejlesztésében jelentős szerepet játszik a gazdaságosság és a jövedelmezőség, szintén elhangzott a központi előadások során. E téren azonban ne csak az ipari nyersanyagul használt kertészeti termékek előállítási kötségét, arányosítását

hangsúlyozzuk, hanem ugyanúgy szükséges a tartósítás költségeinek szabályozását is központi feladatként kezelni. E tekintetben a nyersanyagellátás és az ipar között az eddiginél szorosabb együttműködés szükséges. Megint csak ismétlek amikor azt mondom, hogy csak a nyersanyag termelés és az élelmiszeripari feldolgozás és az értékesítés együttműködése biztosíthatja az értékesítési árak feltétlenül szükséges szabályozását. Csak jóminőségű termékkel, nemzetközileg is versenyképes áron biztosíthatjuk exportunk tevékenységét. Hogy e tekintetben milyen társulási lehetőségek, szerződési kapcsolatok kialakítása van már a gyakorlatban és lehetőség nyílik ezekre, megint csak hadd hivatkozzam Sipos Aladár akadémikus elvtárs előadására a többek között ahol a vállalati, állami vállalati formák között és azok értékelése során említette a fennálló helyzetképpen túlmenően a várható lehetőségek alakítását is. A költségszabályozásról részletesebb áttekintést nyújtott dr. Kovács Imre miniszterhelyettes elvtárs bevezető előadása, itt megint csak hadd hivatkozzam azokra a megállapításokra. Az általa felsorolt lehetőségek a kertészet és az élelmiszeripar területére is vonatkoznak. A kertészeti termékek költségeinek alakulásában jelentős szerepet játszik továbbra is a munka- és az energiaköltség. A kertészeti termékek feldolgozásának közös jellemzője a nagyfokú idényjelleg a nyersanyagok előállításában, magyarországi viszonylatban értem a mi földrajzi fekvésünkből adódó klímaviszonyokra. Ennek folytán a tartósítás munkái is idényjellegűek és a tartósító üzem berendezésének különleges gépei, egyes fajok vetületében más és más típusok, évente csak rövid ideig vannak használatban. Ez növeli az amortizációs költséget. A feldolgozási idény meghosszabbítására számításba vehető megoldások közül említhető a nyersanyag átmeneti tárolása és a kertészeti alapanyagok betakarítási folyamatának időbeni széthúzása, meghosszabbítása a szedési idény kezdetének előbbrehozásával és a betakarítási idény befejezésének a késleltetésével egyrészt termesztéstechnikai módszerekkel, másrészt pedig fajták megfelelő kiválasztásával.

A paradicsom, az étkezési- és fűszerpaprika szedési idénye a palántaneveléssel és a vetőmag végleges helyre vetésével kétféle szaporításból kapott állomány megfelelő arányának kialakításával hosszabbítható meg az itt jelentkező feladat. A korábban érő palántázott növények jobb minőségű termése módot ad a termékek minőségének javítására kémiai összetétel, festékanyag, íz és zamatanyagok növelésére, mint ez erősen kapcsolódik az említett két zöldségfaj viszonylatában a paradicsom és fűszerpaprika vonatkozásában. Viszont a kívánt kedvező hatás előfeltétel olyan árpolitika érvényesítése, amelylyel ösztönözhető a kertészeti nyersanyag és a belőle készített termék minőségének a javítása. Az ösztönzés tehát itt is az eddiginél jobban kell, hogy ilyen irányba hasson.

Egy-két gondolatot a kutatás és szakemberpótlás néhány kérdését illetően. A kertészeti élelmiszeripar korszerű fejlesztésének feltétele a kutatás

biztosítása is. Külön áttekintést kíván a kutatási feladatok rangsorolása és ennek alapja a rendelkezésre álló anyagi és személyi keret megfelelő elosztása. A kutatási feladatok egyik részét a tartósítóipari nyersanyagokat előállító kertészeti nemesítéssel, tehát új fajták előállításával, nagyobb biológiai értékű és nagyobb termőképességű fajtákra gondolok itt elsősorban, és a növénytermesztéssel kapcsolatos kutatási feladatok megoldása jelenti az új fajtáknak megfelelő technológiai módszerek kialakításáról van szó. A kutatómunka kiemelt feladatai közé sorolandó a „hungaricum" jellegű növényfajok termesztési problémáinak elmélyült tudományos tanulmányozása. Feladataink egy része termesztési színvonalunk javítására a terméshozamok növelése és a termékek minőségének javítására vonatkozik és ezzel együtt az önköltség csökkentésére is irányul. Megoldásuk fontosabb összetevőit vizsgálva a tennivalók egy része a növekvő igények kielégítése a rendelkezésre álló fajták választékának a bővítésével és ahogy már említettem újabb értékesebb fajták előállításával. A tennivalók másik területe a nagyteljesítményű, biológiailag értékes fajták számára megfelelő módszerek kialakítása és ehhez kapcsolva a termesztési költségek csökkentésének a biztosítása. Itt talán külön kiemelem a költségcsökkentés nem lehetőségei között, mert ezt talán nehéz lesz megmagyarázni vagy indokolni, de minden esetre a drága kézi munkának gépimunkával való helyettesítése. S azért nem mondom, hogy olcsóbb a gépi munka, mert nagyon nehéz ezt egyenlőre bizonyítani, viszont más megoldás nem igen van, úgy hogy feltétlenül itt megint csak sok olyan feladat vár megoldásra, amelyek végül lehetővé teszik ennek az ellentmondásnak a csökkentését. Nem érzem illetékesnek magamat arra, hogy az élelmiszeripar területének kutatási feladatait rangsoroljam. Ezt az érintett területeken dolgozó szakemberek bizonyára eredményesen megoldják. Feltétlenül szóvá kell tenni e helyen is a kertészeti élelmiszeripari szakágazat kutatás-fejlesztési szervezeti kérdéseit. Vas Károly akadémikus bevezető előadásában részletes áttekintést adott az élelmiszerkutatás egészét érintő helyzetről, és itt hadd idézzem, hogy értelemszerűen annak legtöbb megállapítása a kertészeti nyersanyag termelésre is érvényes. Ebből egyértelműen megállapítható, hogy a kutatási igények kielégítésére biztosított lehetőségek eddig nem álltak arányban az élelmiszeripar népgazdasági termelési értékével, illetőleg az ennek alapján jelentkező jogos igények kiegészítésével. Bízom abban, hogy a mai tanácskozás eredményeként mindezt illetékes felsőbb vezető szervek figyelembe veszik és ennek megfelelően foglalkoznak érdemben a megoldásra váró feladatok járható megoldásával. Külön gondot okoz a kertészeti alapanyag ellátásában érintett kutatási hálózat küszöbönálló továbbfejlesztésének a problémája. Az eddigi szervezeti formák helyett olyan újabb megoldások kerültek előtérbe, amelyek révén az állami központi támogatás helyett a vállalati termelési feladatok teljesítéséből eredő bevételekből kell fedezni a kutatás, fenntartás és fejlesztés költségeinek jelentős részét. Az élelmiszeripari kutatás területén az előző években már megvalósított ilyen szer-

vezeti forma nem hozta meg a várt eredményt, és nagymértékben hátráltatta a kutatók tudományos tevékenységét. Felveti azt a kérdést, hogy a kertészeti szakágazat kutatóintézetekben most megvalósulás előtt álló új szervezeti formája mennyiben lehet alkalmas az egyre bonyolultabb és nagyobb feladatok megoldására. Ezzel egyidejűleg fölmerül az ágazati intézetek kutatási profiljának továbbfejlesztése is, és e tekintetben jelentős szerepet játszó alapkutatások, pontosítva alapozó kutatások fejlesztésének a lehetősége. Ezzel függ össze a Tudománypolitikai Bizottságnak a közelmúltban hozott határozatai körül annak a területünkre vonatkozó értékelése is. A szellemi, anyagi erők és a műszerpark ésszerű összpontosításával a kertészet területén jelentősen segítené a Kertészeti Egyetemmel való szorosabb együttműködés, az említett törekvések megvalósítását, beleértve a kutatás és oktatás hatékonyabbá tételét, a nagyobb alkotóközösségek sokoldalú előnyeinek gyakorlati megvalósítását is. Még egy további, a kertészeti nyersanyagot feldolgozó élelmiszeripar fejlesztésében lényegesen befolyásoló tényezőt szükséges szóvátenni. Ez pedig a kertészeti termesztés és az élelmiszeripar szakember ellátása és annak utánpótlása. Nem szorul részletesebb indokolásra ennek az alapvető szerepet játszó tényezőnek a fontossága. Minden egyéb, a fejlesztéshez szükséges feltétel biztosítása jól képzett szakemberek nélkül csak félmegoldást jelent. Mostani nehezebb körülmények között fokozott feladat hárul a jólképezett szakemberek szellemi bázisára. Elsősorban nem a létszám növelésére, s a nagyobb minőségi igényeknek megnövekedett létszámmal való kielégítésére gondolok itt, hanem a jobb elméleti felkészültségből nyerhető nagyobb értékű alkotómunkára. A szakemberképzés továbbfejlesztésének kérdései között feltétlenül részletesebb áttekintést kíván véleményem szerint az élelmiszeripar nyersanyagellátását biztosító kertészeti szakemberek, valamint az élelmiszeripari feldolgozást irányítók összehangoltabb továbbfejlesztése. Gondolok itt elsősorban a Kertészeti Egyetem termesztési karának egylépcsős, öt éves időtartamú és a tartósító kar kétlépcsős, 3 + 2 éves okleveles mérnökképzésen nyugvó és ebből adódó nyitott kérdésekre. A fő feladat az évente kikerülő szakemberek létszáma mellett elsősorban az, hogy a képzés megfelelő formái, a tanított ismeretek olyan szemléletet adjanak leendő szakembereinknek, amely alkalmassá teszi őket a közeljövőben elkerülhetetlenül szükséges szélesebb látókörön nyugvó szemlélet elsajátítására és az ebből adódó feladatok csoportmunkaként való nagyon rövid időn belüli megoldására. Ez azért szükséges, mert hazánk nyitott gazdasági helyzetéből adódóan termelésünknek csaknem felét külföldön kell értékesítenünk. Ezért a gyorsan változó külföldi igényekhez való gyors és rugalmas alkalmazkodás gazdasági fejlődésünk alapvető követelménye.

A felsorolt néhány gondolattal kívántam kiegészíteni a nagyon értékes vita-bevezető előadások anyagát a kertészeti nyersanyagok átalakításával foglalkozó élelmiszeripar fejlesztését érintő néhány kérdés részletesebb értékelésével.

VÁMOSNÉ VIGYÁZÓ LILLY

Központi Élelmiszeripari Kutató Intézet, a kémiai tudományok kandidátusa, tudományos osztályvezető

Az élelmiszerek tartósításának előfeltétele a bennük végbemenő, jórészt enzimes folyamatok megszüntetése, vagy legalábbis nagyfokú lassítása, beleértve az esetleges, mikróba-eredetű fertőzésekből származó enzimes folyamatokat is. Erre a célra az esetek túlnyomó többségében hőkezelést, kisebb részben más fizikai módszereket (pl. ionizáló sugárzás), vegyszeres kezelést, ill. e módszerek kombinációit alkalmazzák.

A hőkezelés hatékonyságának kritériumaként növényi élelmiszerek tartósításakor az ipari gyakorlat mind a mai napig többnyire a peroxidáz-enzim teljes inaktíválódását tekinti (BARTUCZNÉ, 1978). Ennek fő oka, hogy a peroxidáz igen hőtűrő: hőtűrőbb, mint az élelmi anyagokban előforduló, nem-kívánatos mikroorganizmusok, tehát aktivitásának megszűnése egyúttal a káros mikróba-tevékenység megszűnését is jelenti. Ezenkívül ennek az enzimnek tulajdonítják egyes, a tartósított élelmiszerek tárolása folyamán fellépő idegen aroma-komponensek (alifás alkoholok és aldehidek (BURNETTE, 1977; ERIKSSON *et al.*, 1976; ZOUEIL, ESSELEN, 1959) keletkezését, továbbá egyes színanyagok (klorofill, karotinoidok) bomlását is (WALKER, 1964; KANNER *et al.*, 1977).

A peroxidáz-enzim a hőhatásra bekövetkező inaktíválódás után hosszabb ideig 40 °C-t meg nem haladó hőmérsékleten tartva (ADAMS, 1978), aktivitásának egy részét visszanyerheti, regenerálódhat. E regenerálódó-képesség megszüntetése általában olyan drasztikus hőkezelést kíván, amely az élelmiszer beltartalmi értékét (vitaminok, cukrok, szabad aminosavak) és érzékszervi tulajdonságait egyaránt károsítja (ESSELEN, ANDERSON, 1956; ZOUEIL, ESSELEN, 1959), ezért újabban inkább annak megállapítására törekszenek, mekkora maradék (ill. regenerált) peroxidáz-aktivitás esetében érhetők el kielégítő érzékszervi tulajdonságok a termékben (BÖTTCHER, 1975; PAULUS, DUDEN, 1981).

A hőelvonás (fagyasztás, fagyasztva tárolás) hatását az enzimek és ezeken belül a peroxidáz aktivitására kevésbé tanulmányozták, valószínűleg azért, mert általában az előfőzés utáni maradék peroxidáz-aktivitás a —18 °C-on vagy kisebb hőmérsékleten végzett huzamos tárolás esetében sem okoz a termék érzékszervi tulajdonságaiban káros elváltozást (BÖTTCHER, 1975; BURNETTE, 1977; PHILIPPON, ROUET-MAYER, 1971).

Hozzászólásomban a zöldségek szöveti peroxidáza hőinaktiválásának és hőkezelés utáni reaktiválódásának néhány kérdésével foglalkozom, beleértve a hőelvonás (gyorsfagyasztás) hatására bekövetkező aktivitásváltozásokat is.

Anyagok és módszerek

Hőközléses enzim-inaktiválási kísérleteinkhez karalábé-homogenizátumból készült acetonport, üzemi méretben kivitelezett hőelvonásos (gyorsfagyasztásos) kísérleteinkhez kockázott sárgarépát használtunk (SCHALLER, VÁMOS-VIGYÁZÓ, 1980). A hőkezelési kísérlethez alkalmazott berendezésben az acetonpor vizes kivonatának felmelegedése és lehűlése szobahőmérsékletre (25 °C) pillanatszerű volt (PARK, 1976). 70—95 °C között 5-féle hőmérsékleten „0"—35 min-ig hőkezeltük az enzim-oldatot (a „0" min a kívánt hőmérséklet elérése után azonnali lehűtést jelent), majd 22 ± 2 °C-on 24 óráig tartottuk, miközben aktivitását időközönként meghatároztuk.

A gyorsfagyasztást párhuzamosan végeztük nyers és perselyes készülékben 95 °C-on 2 min-ig hőkezelt, kockázott sárgarépával. A terméket polietilénzacskókban —18 °C-on 2 évig tároltuk. Ezalatt 4 ízben vettünk mintát a peroxidáz-aktivitás és az érzékszervi tulajdonságok vizsgálatára.

Az enzim-aktivitást H_2O_2- és o-fenilén-diamin-tartalmú reakcióelegyekben, pH 5.0-ön és 25 °C-on, spektrofotometriásan határoztuk meg (MIHÁLYI, VÁMOS-VIGYÁZÓ, 1975). Egységül a min-enkénti 10^{-3} extinkcióváltozást tekintettük, és az enzim-aktivitást 1 g nedves anyagra vonatkoztattuk.

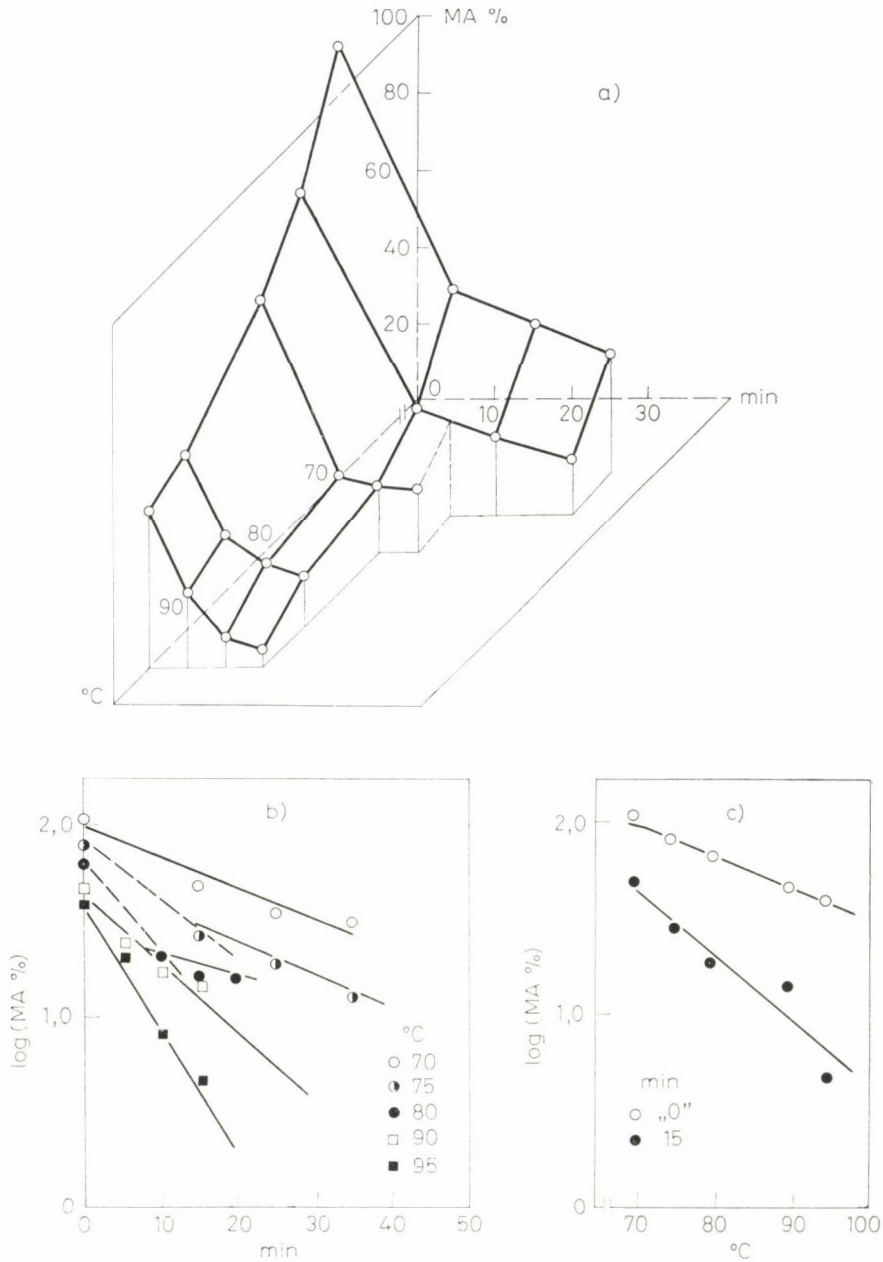
Eredmények és következtetések

Hőkezelés

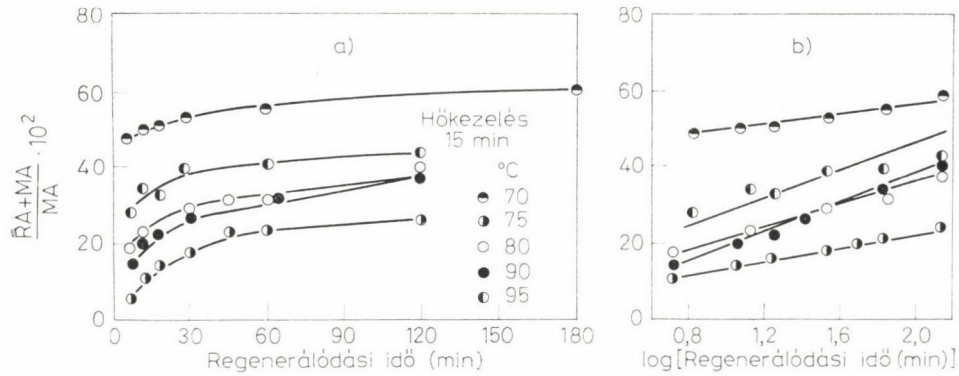
A peroxidáz maradék-aktivitását a hőkezelés után azonnal (5 min) meghatározva, az 1. ábra mutatja. A várakozásnak megfelelően, a maradékaktivitás a hőkezelés idejének és hőmérsékletének növelésével csökkent. A 70 °C-on „0" percig végzett hőkezeléskor észlelt kismérvű aktivitásnövekedés (12%) valószínűleg a lehűtéstől az aktivitásmérésig eltelt 5 min manipulálási idő alatt bekövetkező reaktiválódás eredménye. Az inaktiválódás 70, 90 és 95 °C-on egy, 75 és 80 °C-on két exponenciális szakaszból állt. Ez azt mutatja, hogy 70 °C-on 35 min-en belül csak a peroxidáz hőlabilis részének, 75 és 80 °C-on 35, ill. 20 perc alatt már mind a hőlabilis, mind a hőrezisztens részének aktivitása csökken; 90 és 95 °C-on a hőlabilis rész inaktiválódása pillanatszerű, a maradék aktivitás — hőkezelési idő összefüggés a hőrezisztens rész inaktiválódását írja le.

Az adott ideig tartó hőkezeléssel elérhető inaktiválás a hőmérséklet függvényében egyfázisú, exponenciális függvénnyel leírható folyamat.

A reaktíválódás az idő függvényében logaritmikus (2. ábra), tehát a hőkezelést követő első időben a legnagyobb, 24 óra után pedig már igen lassú. (A görbék számításához a 24 óra elteltével mért, de itt nem feltüntetett értékeket is figyelembe vettük). A peroxidáz reaktíválódása egyes szerzők szerint nem írható le a szokásos kinetikai egyenletekkel (JOFFE, BALL, 1962), mások



1. ábra. A peroxidáz-enzim vizes kivonatának hőinaktiválása különböző hőmérsékleteken különböző ideig tartó kezeléssel. *a)* A maradék aktivitás (MA) értéke a hőkezelés idejének és hőmérsékletének függvényében, a hőkezeletlen enzim aktivitásának %-ában; *b)* és *c)* a maradék aktivitás logaritmusa a hőkezelési idő, ill. hőmérséklet függvényében. Az enzimkivonat eredete: kalarábéból készült acetonpor

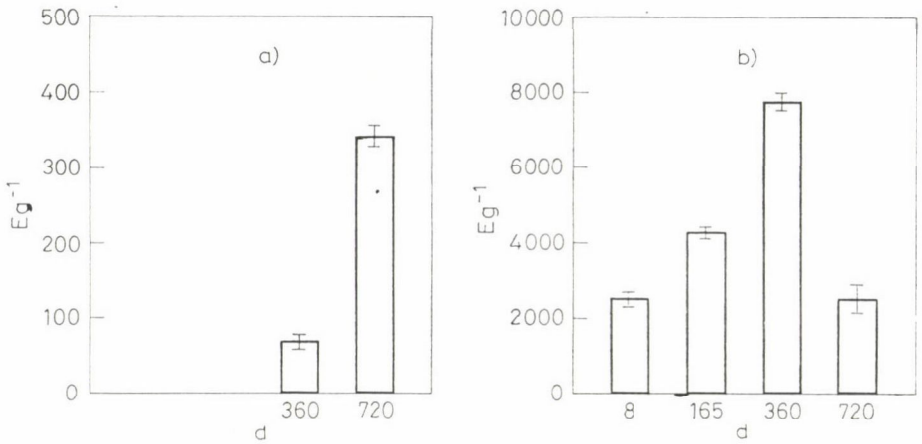


2. ábra. A peroxidáz regenerálódása vizes kivonatban, 22 ± 2 °C-on, különböző hőmérsékleteken 15 min-ig tartó hőkezelés után. *a)* és *b)* a regenerálódott és hőkezelés után azonnal meghatározott enzim-aktivitás (RA, ill. MA) összege a maradék-aktivitásra vonatkoztatva, a regenerálódási idő, ill. annak logaritmusa függvényében; Az enzimkivonat eredete, mint az 1. ábrán

szerint telítési görbe szerint megy végbe (SCHWIMMER, 1944), ismét mások szerint kétfázisú elsőrendű kinetikát követ (ADAMS, 1978). Egyes esetekben a reaktiválódást megelőzően hosszabb (20 h) lappangási szakaszt észleltek (JOFFE, BALL, 1962). A folyamat nyilvánvalóan számos tényezőtől függ, amelyek egy része az enzim-molekulával, más része a hőkezelés, ill. a hőkezelés utáni tárolás körülményeivel kapcsolatos (VÁMOS-VIGYÁZÓ, 1981).

Fagyasztás

A gyorsfagyasztás során (a kockázott sárgarépában) a peroxidáz-aktivitás mintegy 60%-os csökkenését tapasztaltuk a nyers répában talált értékekhez képest. A —18 °C-on végzett tárolás első éve alatt az aktivitás egyenletes ütemű növekedést mutatott: egy év elteltével a kezeletlen nyers répában talált értéket mintegy 30%-kal meg is haladta (3. ábra). A tárolás második évének végére a nyersen gyorsfagyasztott répában a peroxidáz-szint arra az értékre csökkent, amelyet 8 napi tárolás után mértünk. Ezek az eredmények összhangban vannak az irodalmi közlésekkel. A fagyasztáskor fellépő aktivitáscsökkenést az aktív hely hozzáférhetőségét csökkentő hidrogénhidak képződésével magyarázzák (JOFFE, BALL, 1962), a fagyasztva tárolás során észlelhető aktivitásnövekedést pedig annak tulajdonítják, hogy a sejtek károsodása következtében a sejtrészekhez kovalensen kötött enzim ionosan kötött vagy oldott alakba megy át (GKINIS, FENNEMA, 1978; PALLAVICINI *et al.*, 1970; SPETTOLI, BOLCATO, 1973). A két évi tárolás után észlelt aktivitáscsökkenés talán a sejthez kötött enzim-utánpótlás elfogyásának következménye. Ennek alapján az első évben tapasztalt aktivitásnövekedés a sejthez kötött enzim leoldódásának és az oldott enzimrészek inaktiválódásának eredője lehet. Ez magyarázza az aktivitás növekedésének szokatlan (lineáris) menetét.



3. ábra. Nyers (*b*) és előfőzött (92 °C, 2 min) (*a*) gyorsfagyasztott, kockázott sárgarépa nedves tömegre vonatkoztatott peroxidáz-aktivitásának változása a fagyasztva tárolás során

Az előfőzés után gyorsfagyasztott sárgarépában a peroxidáz-aktivitás mérhető növekedése csak a fagyasztva tárolás második évében észlelhető. Bár a növekedés mértéke jelentős (egy év alatt az aktivitás közel ötszörösére nő), az aktivitás értékei egy nagyságrenddel kisebbek, mint a nem előfőzött termékben. Az aktivitás növekedése egyaránt lehet a hőkezelést követő és az alacsony tárolási hőmérséklet által késleltetett regenerálódás, ill. a fagyasztás során bekövetkező dekompartmentalizáció következménye.

Az előfőzés egyébként az adott esetben a gyorsfagyasztott termék minőségére nem volt hatással. Kérdés, hogy a peroxidáz jelző-enzim szerepét indokolt-e fenntartani, ill. nem célszerű-e korlátozni.

Az ismertetett példákkal kívántam röviden szemléltetni, milyen enzimológiai problémákkal kell az élelmiszertudománynak — többek között — foglalkoznia a jó minőségű tartósított termékek gyártásának elősegítésére.

HOZZÁSZÓLÁSOK

ALMÁSI ELEMÉR

a kémiai tudományok doktora, egyetemi tanár

A FAO és a Nemzetközi Hűtési Intézet becslése szerint világméretekben az élelmiszer nyersanyag kb. 30%-a elvész a megtermeléstől a fogyasztásig terjedő úton és időben. A veszteség egy részét a transzformálás, feldolgozás, tartósítás fejletlensége, aránytalansága okozza, jelentős része viszont arra vezethető vissza, hogy nem alkalmaznak adekvát tárolási módszereket.

Ez a rövid vagy hosszú ideig tartó tárolás során fellépő veszteség az állati kártevők okozta kárból, a mikroorganizmusok okozta romlásból és a metabolizmus által létrehozott minőség csökkenéséből tevődik össze.

A fejlett országokban a tárolással kapcsolatos kutatások, a műszaki fejlesztés és az eredmények realizálása következtében ez a veszteség az átlagnál jóval alacsonyabb, a fejletlen országokban az ellentétes körülmények miatt jóval nagyobb.

Hazai becslések, összesítő felmérések hiányoznak, de ismeretes, hogy pl. a burgonya korszerűtlen tárolása miatt esetenként 30%-a veszteségek is fellépnek, de még a viszonylag fejlett hús forgalmazásunk során is 5—7%-ra tehető a veszteség a vágóhídi hús kitermeléstől a fogyasztóig.

Ezért örömmel hallottam, hogy mindhárom főelőadás megemlítette a tárolást az élelmiszergazdaság távlati fejlesztésének feladatai között.

Megítélésem szerint azonban kutatóhelyeink munkájában nagyobb fontosságot kellene ennek a területnek biztosítani, mert már megtermelt értékek megőrzéséről van szó, amely értékeket jelentős szellemi erőfeszítések, anyagi eszközök és effektív munka segítségével hoztunk létre. Élelmiszer nyersanyagaink termelésével az egyik oldalon, a nyersanyagok feldolgozásával, a másik oldalon jelentős és eredményeiben is elismert kutatási tevékenységet folytatnak a mezőgazdasági, kertészeti, illetve élelmiszeripari kutatóintézetek, egyetemi tanszékek. A tárolási problémákkal ugyanakkor elvétve találkozunk a kutatási témák között. Hosszú évtizedekig a tárolás fejlesztésében csak két fizikai eszköz állt rendelkezésünkre, a hőmérséklet és a környező levegő relatív páratartalmának szabályozása, beállítása a megóvást biztosító értékekre. Az utóbbi időben a lehetőségek bővültek és idehaza is jó kutatási eredményeket értünk el és ezek gyakorlati alkalmazását is megállapíthatjuk. Meg-

említhető ezzel kapcsolatban a Központi Élelmiszeripari Kutatóintézetben az ionizáló besugárzás és a hűtés együttes alkalmazására vonatkozó kísérleti munka, amely több élelmiszer nyersanyagnál pozitív eredményhez vezetett a tárolhatósági idő meghosszabbítása tekintetében. Gyakorlati alkalmazásra is került a munkának egy része a vöröshagyma és burgonya kicsírázásának meggátlására a hűtőtárolás során. A Kertészeti Egyetem a gyümölcsök és zöldségek szabályozott, a normálistól eltérő összetételű légtérben végzett hűtőtárolásával értünk el kiváló kísérleti eredményeket. Így pl. a Somos akadémikus által is említett, hungarikumnak tekinthető Kocsolai paprika tárolhatóságát sikerült háromszorosára, 2 hétről 42 napra növelni. Jelentős munkát végzett Egyetemünk az alma szabályozott légterű tárolásának meghosszabbításában is. Mind a KÉKI-i mind a Kertészeti Egyetemi kutatásokat az Országos Műszaki Fejlesztési Bizottság támogatása tette lehetővé.

Fel kell azonban figyelni arra, hogy a fejlettebb országokban még újabb tárolási módok kezdenek terjedni, így az inertgázos, a csökkentett nyomású vagy különböző kismennyiségű gázadalékot alkalmazó tárolási eljárások, amelyek hazai kutatási vonalán el vagyunk maradva.

A tárolási kutatások több olyan vonást mutatnak fel, amelyek némileg magyarázzák, hogy nem kerülnek a kutatások előterébe. Ezek a kutatások több év során megismételve hoznak csak megbízható eredményt, tehát időigényes és kevéssé látványos munkát kívánnak. Az eredmények a népgazdaság különböző ágaiban jelentkeznek, mert tárolási gyakorlatot a mezőgazdasági és élelmiszeripari üzemeken kívül a bel- és külkereskedelem is folytat.

Viszont a kutatási eredmények gyakorlati bevezetése igen hasznos a népgazdaság számára, ezért kívántam ezt a problémát a három osztály együttes ülésén megemlíteni, segítségüket kérve az ilyen irányú kutatások támogatásához.

Bócz Ernő

Nagyon rövid leszek. Nagyon érdekes volt. Ki mint él, úgy ítél. Nagyon sokoldalúan láttuk az élelmiszertermelés mennyiségi és minőségi megközelítését. Most azt szeretném jelezni, hogy ezt a kérdést hogyan közelíti meg egy növénytermesztési és ökológiai intézet. A természetes ökoszisztémához száz éve, hogy hozzányúlt a világ mezőgazdasága, 1880-ban kezdődött a műtrágyafelhasználás. Mi száz éves lemaradásunkat húsz év alatt behoztuk és a természetesnek mondható belső tápanyag-körforgalmat, az anyagcserét, húsz év alatt nitrogénre vetítve tízszeresére növeltük, MPK-ra pedig hússzorozára, húsz év alatt 2000%-kal növeltük a tápanyagszintet. Ez feltétlenül befolyásolja terméseink minőségét. A legnagyobb eltolódás a tápelemek széles spektrumát vizsgálva elsősorban a nitrogénnél jelentkezik, hiszen a nitrogén hordozza

az egésztápanyagfelvételt, a táplálkozásnak gerincét jelenti és a nitrogénhez viszonyítva az ásványanyagokban és a többi elemben vannak nagyobb eltolódások. Nemzetközileg elsőnek fogtunk hozzá és közel egy évtizede vizsgáljuk ezt a harmóniát, ill. a harmónia-megbomlást, amely nagyon érdekes megvilágítást ad akár a tápanyagvisszapótlás, akár pedig a minőség vonatkozásában is. A takarmány és élelem tényleges minőségének meghatározásánál közismert, hogy a kémiai és egyéb vizsgálatok nem elegendők, feltétlenül szükséges a takarmányok és az élelem tényleges hasznosulásának kiszélesített vizsgálata. Ahhoz, hogy ebben a kérdésben világosabban lássunk, olyan kutatás válik szükségessé, amelyben mesterségesen biztosítjuk ökoszisztémánkban a szükséges feltételeket, a szűz területet, az ősi feltételezést, mert viszonyítási alap nélkül nem sokat tudunk mondani. Ilyen kutatáshoz a jól megtervezett mesterséges és az eredeti ökoszisztémában termelt terményeknek további vizsgálata kell, mely végeredményben jól megalkotott viszonyítási alapon és ennek sokoldalú megfigyelésén kell, hogy nyugodjék. A minőség sokoldalú vizsgálatai mellett legyen szabad ilyen értelmű javaslatot tennem.

ZÁRSZÓ

BECK MIHÁLY

az MTA rendes tagja, a Kémiai Tudományok Osztályának elnöke

Köszönöm szépen a hozzászólásokat és a javaslatokat. Engedje meg a Tisztelt Osztályülés, hogy először is magunkat dícsérjem meg. Úgy érzem a mai tanácskozás alapján, hogy jó ötlet volt a három osztály együttes tanácskozásának a megrendezése. Talán még jobb lett volna, ha további osztályokat is intenzívebben bevonunk, de kezdetnek talán nem volt rossz az adott keretek közötti rendezés sem.

Nagy intellektuális izgalmat jelentett számomra és valószínű, sok más résztvevő számára is a rendkívül összetett probléma sokoldalú megközelítése, és egyáltalán azt látni, hogy milyen sok problémával kell tulajdonképpen számolni addig, amíg a megtermelt növényből végülis a legkülönbözőbb élelmiszerek lesznek éspedig megfelelő minőségű élelmiszerek: tartósak, nagy biológiai értékűek és gazdaságilag is elfogadható áruak. Az biztos, hogy van bőven tennivaló. Csak a kezdet kezdetén vagyunk akkor, amikor megkíséreljük a kérdést ilyen összetett voltában vizsgálni, persze sajátos eszközeinkkel. Úgy hiszem, hogy különleges jelentőségű az élelmiszeripari termelés vizsgálata, hiszen egyértelműen kiderült, az előadásokból, hogy különleges jelentősége van az egész magyar gazdasági életben az élelmiszeriparnak. És az is kibontakozott talán, hogy ez a különleges gazdasági jelentőség nem tükröződik kellő mértékben az élelmiszeripari termelés és az élelmiszeripari kutatások támogatásában. Úgy hiszem, hogy az illetékes osztályoknak, illetve az Akadémia egészszének ezekkel a kérdésekkel foglalkoznia kell. Most már mi lesz ennek a módja? Egy ilyen ülésnek, mint a mai, csak akkor van igazán értelme azon túl, hogy adta azt az igazán érdekes élményt, amit az előadások nyújtottak, ha megfelelő következményei lesznek. Úgy képzeltük, hogy a három osztály rövidesen zárt osztályülésen foglaljon állást, ugyanis a dolog természeténél fogva csak ott lehet hivatalosan javaslatot kialakítani és szavazással eldönteni, hogy végülis mit javasol a három osztály. Ezt a javaslatot ki fogjuk alakítani és az illetékeseknek el fogjuk juttatni. Illetékesnek gondolom az Akadémia elnökét és főtitkárát, természetesen a mezőgazdasági és élelmezésügyi minisztert, valószínűleg a művelődésügyi minisztert, természetesen az OMFB elnökét és a többi akadémiai osztályt is.

Úgy vélem, hogy a legfontosabb megállapítások, amelyekkel foglalkozni kell, a következők:

Az Akadémia illetékes osztályai fokozott figyelmet kell, hogy szenteljenek a hazai élelmiszeriparral kapcsolatos tudományos kérdéseknek, illetve a felmerült problémák igényes, sokoldalú kutatáson alapuló megoldásának. Az osztályokat — azt hiszem, el fogják fogadni ezt a megállapítást — aggodalommal tölti el, hogy az élelmiszeripari kutatások jelenleg nem részesülnek abban a támogatásban, amelyet jelentőségük megérdemelne és az osztályok megkísérelnek lépéseket tenni, hogy ez a támogatás a lehető legrövidebb időn belül megnyilvánuljon és a vonatkozó kutatások az OKKFT-be bekerüljenek. Szerencsére az OKKFT nem merev kutatási program, abból ki lehet kerülni és abba be lehet kerülni még a tervezési időszak folyamán is. Nagyon remélem, ha az osztályok tényleg ilyen formában fognak állást foglalni, akkor talán nagyobb támogatásban fognak részesülni a jövőben ezek a kutatások. Nyilvánvaló tanulsága az elhangzottaknak, hogy az intézményeknek a jelenleginél sokkal nagyobb mérvű együttműködésre kell törekednie és feltétlenül koordinált együttműködést kell kialakítani a legkülönbözőbb intézmények között. Erre több hozzászóló is rámutatott, és azt hiszem, hogy azzal is egyetérthetünk itt, hogy fokozott figyelmet kell szentelni a táplálkozásélettani kutatásoknak, amelyekkel kapcsolatban ANTONI professzor tett megjegyzéseket és javaslatot. Nem tudom, hogy az Állategészségügyi Kutatóintézet keretén belül kell-e ezeket megvalósítani, erre majd talán azon az ülésen konkrétabb javaslatot lehet tenni.

Említettem a művelődésügyi minisztert, éspedig azért, mert az egyik hozzászólás nyomán nyomatékkal merült fel a képzés problémája. A képzés pedig nemcsak a MÉM intézményeit illeti, hanem a Művelődésügyi Minisztérium, sőt az Egészségügyi Minisztérium oktatási intézményeit is. Lehetséges, hogy még más kérdések is felmerülnek majd a következő megbeszélésen, melynek eredményétől függően fogjuk megszövegezni mindazokat a javaslatokat, amelyek tulajdonképpen már itt értelemszerűen alakultak ki az elhangzott rendkívül értékes előadások és hozzászólások nyomán.

Nem frázis részemről, hogy rendkívül ritkán volt ilyen tudományos intellektuális élményben részem és ezt nagyon köszönöm. Köszönjük mi, akik hallgattuk mindazoknak, akik részesítettek ebben bennünket. Köszönöm az előadásokat, a hozzászólásokat, a jelenlevőknek a részvételt és az együttes osztályülést bezárom.

AZ MTA SPEKTROKÉMIAI MUNKABIZOTTSÁGÁNAK II. SZIMPÓZIUMA A SPEKTROKÉMIA IDŐSZERŰ KÉRDÉSEIRŐL

Mátrafüred, 1980. október 16—19

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 317—327

GEOLÓGIAI ANYAGOK SZÓRT ELEMEI SPEKTROKÉMIAI MEGHATÁROZÁSÁNAK PROBLÉMÁI

EDUARD PLŠKO
a kémiai tudományok doktora

(Geologický Ústav Univerzity Komenského, 811 000 Bratislava, Zadunajská 15, ČSSR)

Geokémiai szempontból az egyes elemek természetben való előfordulását elvileg kétféleképpen osztályozhatjuk. Az első esetben a klark-értékekkel [1] kifejezhető elemtartalom szerinti előfordulást, a második esetben pedig az egyes elemek azon tulajdonságait vesszük figyelembe, amelyek lehetővé teszik, hogy szabad formában vagy különböző ásványok alakjában területileg meghatározott helyeken dúsuljanak (lelőhelyek), s így gazdasági felhasználásuk lehetővé válik.

A kétféle értékelési mód természetesen eltérő eredményt ad. Ez könnyen érthető, mivel az elemek előfordulásának relatív gyakorisága atommagjuk stabilitásától függ, míg a lelőhelyi agglomerációkban való ásványképződés elsősorban az adott elem kémiai és fizikai tulajdonságainak függvénye, s ezeket döntően a külső elektronhéj szerkezete határozza meg.

Az olyan elemek, amelyekkel a mindennapi gyakorlatban is találkozunk (pl. az arany, ezüst, higany), klark-értékeiket tekintve kb. ezerszer kisebb mértékben fordulnak elő a földkéregben, mint a ritkaföldfémek és sokkal elterjedtebbek, mint pl. a volfrám. A tantál, illetve ittrium elterjedtebbek, mint az ólom vagy a nitrogén. A cink és a króm ugyanolyan gyakoriak, mint a gadolínium, prazeodímium vagy a szamárium. Az antimón és kadmium sokkal kevésbé gyakori, mint a hafnium, illetve tantál. A nióbium és szkandium elterjedtebbek, mint az ón vagy bróm stb.

Első ránézésre ezen adatok meglepőek, hiszen olyan elemekkel mint az Sn, Zn, Ni, Co, Cr, Ag, Cd, Sb, Pb, Cu a mindennapi életben gyakran találkozunk. Ezzel szemben a ritkaföldfémek, a nióbium, a tantál, a zirkónium, a hafnium, de a bór és a volfrám is a mindennapi életben a kevésbé ismert elemekhez tartoznak, szinte kuriózumnak számítanak. Ez szórt formában való előfordulásuk következménye, s így technológiai feldolgozásuk is nehezebb és kevésbé gyakori annak ellenére, hogy ezen elemek egyes tulajdonságai rendkívül előnyösek.

Hasonló a helyzet szórt elemek kémiai meghatározása terén is, annak ellenére, hogy az ilyen elemzések iránti igény egyre nő. A kedvező technológiai tulajdonságú szórt elemek iránti érdeklődés a geológiai kutatásban egyre

inkább növekszik, mivel indikátorként jól alkalmazhatók a tipomorfiás, a genetikai és nem utolsósorban a prospekciós problémák megoldásánál.

A geológiai anyagok nyomelemtartalmának meghatározására szolgáló legelterjedtebb analitikai módszer ma is az optikai emissziós színképelemzés. Ez főként egy mintában levő több nyomelem egyetlen analitikai eljárással történő, egyidejű meghatározásával függ össze. Többnyire a minták oldás nélküli ívgerjesztését alkalmazzuk. A minták feloldása sok esetben nehézségekkel jár, s a nagyobb mennyiségű elem oldatban való tartása is problémákat okoz. Ez utóbbi legfőbb akadálya az induktív csatolású plazma-gerjesztés (ICP) alkalmazásának.

Geológiai minták nyomelemeinek meghatározására különféle eljárásokat dolgoztak ki és ismertettek az irodalomban [2]. A spektrokémiai úton egyidejűleg meghatározott elemek kiválasztásánál megfigyelhető, hogy a kidolgozott módszerek túlnyomó többségénél azokat a nyomelemeket vizsgálják, amelyek nagy lelőhely-agglomerációkat képeznek, s ugyanakkor néhány szórtan előforduló nyomelem meghatározása csak kivételesen fordul elő. Ez utóbbi elemek meghatározása többnyire speciális kísérleti körülményeket követel, s ezzel magyarázható, hogy az e területre vonatkozó irodalom is szegényesebb [3, 4]. Összefügg ez a szórtan előforduló elemek rosszabb kimutathatóságával is. Az említett elemek (a bór kivételével) ugyanis igen vonaldúsak. Így a kisugárzott energia, aránylag gyenge összetevőre oszlik el. Mivel ezen elemek a periódusos rendszer harmadik oszlopában, illetve ettől jobbra helyezkednek el, vegyületeikben a kötésjelleg az ionostól a kovalens irányba tolódik el. Ezért gyakoriak közöttük a kémiailag ellenálló hőstabil oxidok és karbidok.

E vegyületek jellegéből következik, hogy ezek az elemek a szénelektród furatából történő elpárolgás sorrendjét leíró Ruszanov-féle [5] táblázat végén találhatók. Ezen elemek kimutatási lehetőségét tehát jelentősen csökkenti az is, hogy a szokásos gerjesztési paraméterek mellett nehezen párolgó, erősen hőálló vegyületek képződnek és így az elektródközbe, ahol a gerjesztés végbemegy, csak a vizsgált elemek kis hányada kerül be.

A szórtan előforduló elemek alacsony szintű migrációs képessége ugyancsak összefügg vegyületeik nagy kémiai és hőstabilitásával, amely megnehezíti transzportjukat és koncentrálódásukat, pl. hidrotermális folyamatokban. Emiatt ezek elsősorban izomorf elemhelyettesítők, illetve járulékos ásványok formájában fordulnak elő és nagyobb, lelőhely nagyságú agglomerációk esetükben nem jellemzőek. A spektrokémiai, illetve a geokémiai tulajdonságok tehát szoros összefüggésben vannak.

Intézetünkben már régóta foglalkozunk a szórtan előforduló elemek meghatározásával. Elsősorban a spektrokémiai módszereket alkalmazzuk. Ezek ugyanis a vizsgált elemek vegyületeinek már említett stabilitása miatt jobb eredményeket adnak, mint pl. a spektrofotometriás, illetve az atomabszorpciós eljárások. Ezenkívül ez utóbbiak egyelemes eljárások, s a minták feloldását is

el kell végezni. Spektrokémiai módszerek esetén az oldás csak akkor szükséges, ha a komponenseket el kell választanunk és dúsítanunk. Az eddig elért eredményeinkből kiindulva rá szeretnék mutatni a geológiai mintákban szórtan előforduló, a nem gyakori, illetve ritkán előforduló elemek spektrokémiai meghatározásának néhány nehézségére és ezek megoldásának lehetőségeire, illetve módszereire.

A szórt elemek spektrokémiai meghatározásának módszerét elvileg néhány egymással kapcsolatban levő lépésére lehet bontani, amelyek a következők:

1. pufferezés (adalékok alkalmazása);
2. gerjesztés;
3. színképvonalak megválasztása;
4. kémiai előkészítés;
5. a vonatkoztató elem megválasztása.

A továbbiakban részletezem ezeket a lépéseket, melyek sorrendje esetenként változhat, illetve nem szükséges mindig az összes lépés alkalmazása. Nem célom azonban az összes, az irodalomban eddig leírt megoldás ismertetése, csak az intézetünkben elért eredmények konkrét ismertetésére szorítkozom, ezen belül azokról az eredményekről számolok be, amelyeket KUBOVÁ [6, 7] ért el bór és volfrám meghatározásával kapcsolatban, továbbá amelyeket KUBOVÁval együtt értünk el Sc és Y spektrokémiai tulajdonságainak tanulmányozásában, s ismertetem KUBOVÁval és POLAKOVIČOVÁval együtt [9, 10] a ritkaföldfémek elemzésénél szerzett tapasztalatainkat, és végül a nióbium, a tantál, a cirkónium és a hafnium spektrokémiai tulajdonságainak tanulmányozása során elért eredményeimet.

1. Tekintettel a szórt elemek ellenálló vegyületek (elsősorban karbidok) képzésére való hajlamára, elemzésükben igen fontos szerepe van a termokémiai reakciók tanulmányozása során szerzett tapasztalatok figyelembevételének [11]. Ezért meghatározásukkor már régóta alkalmaznak különböző spektrokémiai adalékokat. Ezek egyrészt a nehezen párolgó karbidok keletkezését gátolják, másrészt a vizsgált elemek termikusan viszonylag stabil vegyületeit könnyebben párolgó vegyületekké, pl. fluoridokká vagy kloridokká [12] alakítják. Így a párolgás időtartama csökken és hatásfoka javul, azaz a vizsgálandó elem mennyisége (atomos állapotban) növekszik a plazmában.

Irodalmi adatok szerint a bór elemzésekor a legjobb kimutatási képesség különböző fluoridképző adalékokkal érhető el [13]. KUBOVÁ [6] az ultrabázikus kőzetekben való bórmeghatározásnál sikerrel alkalmazott gallium-oxid adalékot.

Irodalmi adatok szerint különböző adalékokat alkalmaztak a volfrám spektrokémiai meghatározásában, pl. szóda és kvarc keverékét; Na_2SO_4, AgCl, PbO, AgCl és $PbCl_2$ keverékét; $CuCl_2$, LiF és ZnS keverékét; teflont stb. A felsorolt és egyéb adalékok befolyásának beható tanulmányozása során KUBOVÁ

megállapította [7], hogy a kimutathatóság szempontjából legjobb eredményeket $AgNO_3$ és $PbCl_2$ adalékokkal érhetjük el, mivel a kloridképző hatás mellett kihasználhatjuk az Ag „hordozó" hatását és a nitrát anion bomlási termékei oxidációs és fúvó hatását is.

Ritkaföldfémek (Sc, Y, lantán, lantanidák) egyidejű meghatározásakor fluoridképzést alkalmaztunk, amelynek körülményeit a minták kémiai előkészítésének leírásakor a későbbiek során ismertetjük.

Az Nb, Ta, Zr és Hf spektrokémiai meghatározásának optimális körülményeit SCHROLL [14] azon tapasztalataiból kiindulva vizsgáltuk, amely szerint ezen elemeknél a megfelelő spektrokémiai adalékok kombinált oxidációs és halogenidképző hatását célszerű kihasználni. A következő adalékok befolyását vizsgáltuk: MgO, SiO_2, Al_2O_3, TiO_2, NiO_2, $(NH_4)_2SO_4$, $AgNO_3+PbCl_2$, Cu_2O; $(NH_4)_2SO_4+Cu_2O$; $CuCl_2+Cu_2O$ 1:1 arányban. A fenti elemeknél a legnagyobb színképvonal-intenzitást — az egyéb kísérleti körülmények állandósága mellett — a $CuCl_2+Cu_2O$ adalék esetében észleltük, ha az adalékot 1:1 arányban kevertük a vizsgált mintákhoz.

2. Az analizált minta effektív mennyiségének növelése érdekében egyesek a szokásosnál nagyobb furatú elektródokat alkalmaztak, mi pedig bevezettük mindkét elektród töltését is, amellyel az analitikai jel további növelését értük el [5]. Ezt a fluor és a volfrám meghatározásánál is sikeresen alkalmaztuk [7]. A gerjesztésnél célszerű minél nagyobb áramerősséget alkalmazni, de ügyelni kell, hogy a háttér ne haladja meg az optimális értékeket [16].

A pufferezés és a színképek gerjesztésének komplex voltát figyelembe véve, az adott esetben nehéz olyan eljárások kidolgozása, amelyek nagyobb számú elem egyidejű meghatározását teszik lehetővé. Ennek következtében intézetünkben az egyes elemek meghatározására, illetve a hasonló spektrokémiai tulajdonságú elemek csoportjának meghatározására szolgáló eljárások kidolgozását tűztük ki célul.

A szórt elemek színképeinek gerjesztésére alkalmas ívgerjesztés típusát sem lehet előre, egyértelműen meghatározni. Ritkaföldfémek meghatározása során, valószínűleg a kalcium alapanyag miatt az egyenáramú ívgerjesztés bizonyult megfelelőnek, míg a volfrám meghatározásában jobb eredményeket értünk el a váltóáramú ívgerjesztéssel. Az elektródok alakjával, a köztük levő távolsággal, az alkalmazott gerjesztés típusával és áramerősségével jellemezhető gerjesztési körülményeket tehát mindig kísérleti úton kell megállapítanunk; különös tekintettel az elektród töltetére, amelynél lehetőleg igyekszünk elkerülni a szénpor-adalékot és ezzel csökkenteni a karbidképződést. Ilyen körülmények között azonban egyes minták adalékokkal való keverésénél a kisülés égésének első fázisaiban térfogati növekedés, a minta „dagadása" áll be, amelyet az elektródtávolság változása, az ív egyenetlen égése, sőt a minta egyes részeinek az elektródból való kihullása kísér. A kisülés későbbi fázisaiban gyakran olvadékgolyó képződik az elektród furatában. A párolgás ekkor az

aránylag kis felület következtében gyenge és kevéssé reprodukálható, s az is előfordulhat, hogy a forrásban levő golyócska az elektródfuratból kihullik, s ennek következtében a párolgási folyamat teljesen megszakad és az elemzést meg kell ismételni.

Az összes felsorolt zavaró hatást figyelembe kell venni a kísérleti körülmények megválasztásakor úgy, hogy azok minél kisebb mértékben befolyásolják az elemzési eredményeket.

3. A szórt elemek elektronszerkezete rendkívül gazdag színképet eredményez. Ez a körülmény egyrészt növeli a koincidenciák fellépésének veszélyét, másrészt megnehezíti a legmegfelelőbb elemző vonal kiválasztását. Az elemző vonal kiválasztása nemcsak a lehetséges zavaró elemek jelenlététől függ, hanem az egyéb kísérleti körülményektől is, figyelembe kell venni pl. az alkalmazott spektrográf felbontóképességét; a kisülés hőmérsékletét, az elektronnyomást és a részecskeeloszlást befolyásoló adalékok spektrokémiai tulajdonságait stb. Ezért nem meglepő, hogy a különböző színképvonal-táblázatokban [17—19] ezen elemeknek más és más vonalait tüntetik fel, mint a legintenzívebb vonalakat. Különböző szerzők a szórt elemek meghatározására különböző színképvonalakat alkalmaznak, ellentétben a „lelőhely" jellegű elemekkel, melyeknek színképei egyszerűbbek és olyan karakterisztikus intenzív színképvonalakat tartalmaznak, amelyeket a szerzők többsége alkalmaz (pl. Cu 324,75; Cu 327,40; Ag 328,07; Ag 338,29; Pb 283,31; Cr 425,14 stb.).

Vizsgálatainkhoz C. Zeiss gyártmányú PGS—2 rácsspektrográfot alkalmazunk, 651 rovátka/mm beosztású ráccsal. Az ilyen körülmények közt optimális színképvonalakat az 1. táblázatban foglaltuk össze.

1. táblázat

Az alkalmazott elemző vonalak

B	I	249,773	La	II	433,374	Dy	I	421,172
W	I	400,875	Ce	II	395,254	Ho	II	345,600
Sc	II	335,373	Pr	II	390,844	Er	II	390,631
Y	II	332,79	Nd	II	430,358	Tm	II	313,126
Nb	I	405,894	Sm	II	388,529	Yb	I	398,799
Ta	I	271,467	Eu	II	420,505	Lu	I	328,174
Zr	II	339,198	Gd	II	342,247	Sc	I	391,181
Hf	II	339,980	Tb	II	332,440	Y	II	437,494

Az ultrabázikus kőzetek bórtartalmának meghatározásakor kétszeres sugármenettel dolgoztunk, de még ilyen körülmények között is egybeesett a bór színképvonala az SiO molekula sávrendszer egyik vonalával. A sávrendszer szomszédos vonala segítségével azonban zavaróvonal korrekciót lehet végezni, s így sikerült a bórt 1 ppm-től meghatározni, míg szokványos sokelemes meghatározással a bór kimutatási határa szilikátásványokban nem jobb, mint 10 ppm [20].

A volfrám meghatározásakor [7] szintén kétszeres sugármenetet alkalmaztunk annak érdekében, hogy a 400,875 nm hullámhosszú, legmegfelelőbb színképvonalat alkalmazhassuk. Ez a színképvonal egyszeres sugármenet esetében a Ti 400,893 nm hullámhosszú színképvonalával koincidál. A vizsgált mintákban a Ti változó koncentrációkban van jelen. Az általunk megadott körülmények között még 0,3 ppm volfrám meghatározása lehetséges, míg a 294,699 hullámhosszú színképvonal alkalmazásán alapuló szokványos eljárással a kimutatási határ nem jobb 30 ppm-nél [21].

A szkandiumnak és az ittriumnak a bal oldali oszlopban feltüntetett színképvonalait a sokelemes módszerhez alkalmaztuk, miután részletes statisztikus értékeléssel [8] megvizsgáltuk, hogy megfelelőek-e? Az Nb, Ta, Zr és Hf színképvonalait a fentebb megadott spektrokémiai adalék alkalmazása mellett és a leírt kísérleti körülmények között találtuk a legintenzívebbnek és jól mérhetőnek. Ezeknél első rendben nem lépett fel zavaró hatás.

Nagy figyelmet szenteltünk a 16 ritkaföldfém egyidejű meghatározására alkalmas színképvonalak megválaszolásának [9, 10]. A ritkaföldfémek színképeinek rendkívüli bonyolultsága miatt az egyes színképvonalak intenzitásán kívül figyelembe vettük minden vizsgálandó elem esetében a csoport többi elemének színképvonalaival lehetséges koincidenciákat is. Mivel ezen elemek legintenzívebb színképvonalai az ultraibolya tartomány végén és a látható színképtartomány elején találhatók, CO_2 védőatmoszférában dolgoztunk, hogy ciánsávok zavaró hatását csökkentsük. Ennek ellenére a Dy esetében a ciánsav struktúrájának maradványaival való koincidencia miatt külön korrekciót is kellett végezni.

4. A szórt elemek vizsgálatakor előfordul, hogy a megkívánt kimutatási határt az optimális színképvonalak kiválasztásával és a megfelelő spektrokémiai adalékok segítségével sem érhetjük el. Ilyen esetekben előzetes kémiai dúsítás szükséges. Ezek az eljárások igen munka- és vegyszerigényesek. Emiatt csak akkor alkalmazzuk ezeket, ha a közvetlen meghatározás nem lehetséges, illetve ha egyéb hatásokat is vizsgálni akarunk, mint pl. ezt a ritkaföldfémek egyidejű meghatározásánál említettük. Tekintettel a ritkaföldfémek kalciummal való izomorf helyettesítésére a kalciumot tartalmazó ásványok ezen elemek természetes kollektorainak tekinthetők. A ritkaföldfém-tartalom ezekben az ásványokban kicsiny és az összmennyiségük is szélsőségesen változik. Ezt figyelembe véve olyan dúsítási eljárást alkalmaztunk, amely egyúttal az alapanyag egységesítését is szolgálta. Így lehetővé vált egy olyan egységes spektrokémiai eljárás alkalmazása, amely biztosította a vizsgált elemek megfelelő párolgását különleges spektrokémiai adalék alkalmazása nélkül. Ez legjobban a ritkaföldfémek fluoridok alakjában való elválasztásával valósítható meg. Ezek ugyanis a legkevésbé oldódó vegyületeik közé tartoznak, s emellett megfelelő spektrokémiai tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezenkívül a kalciummal együtt válnak le, s ez különböző ásványok elemzésekor egységes

CaF_2 alapanyag kialakulásához vezet. Így a megfelelő kémiai kezelés után az összes elem egyfajta eljárással elemezhető. A leírt eljárás jól bevált a gyakorlatban, mert a fentiek szerint egyidejűleg több problémát is megold.

A nem megfelelő kimutatási határ miatt a Ta és a Hf ásványokból való közvetlen meghatározása nem oldható meg, ezért ezeknél is szükség van előzetes kémiai dúsításra.

A nióbium esetében a kimutatási határ kb. 10 ppm, ez általában megfelelő, s így az esetek többségében nem szükséges dúsítási eljárások alkalmazása. Hasonló a helyzet a cirkónium, az ittrium és a szkandium esetében, s így ezek mennyiségét szilikát jellegű kőzetekben közvetlen eljárással megállapíthatjuk. Sajnos, a geológiai, illetve a geokémiai mintákban többnyire a Zr/Hf, illetve az Nb/Ta arány meghatározása a követelmény, ezért az adott minták elemzésekor nem kerülhetjük el az előzetes kémiai dúsítást. A kísérleti körülmények megfelelő megválasztásával sikerült elérnünk a szükséges kimutatási határt a B és W esetén is, s így nem kellett igényesebb kémiai dúsítási eljárásokhoz folyamodnunk.

5. Tekintettel a színképek hagyományos (ív, szikra) gerjesztésének nem megfelelő reprodukálhatóságára, a pontosság növelése céljából minden esetben megfelelően kiválasztott vonatkoztató elem színképvonalának intenzitásához viszonyítottuk az elemző vonalak intenzitását.

A homológ vonalpárok megválasztásának feltételeivel sokan foglalkoztak [22]. Spektrokémiai szempontból az is fontos, hogy a kiválasztott elem-pár az elektród furatából történő elpárolgás során is a lehető legnagyobb hasonlatosságot mutassa. Ez a párolgási görbék vizsgálatával ellenőrizhető [23, 24].

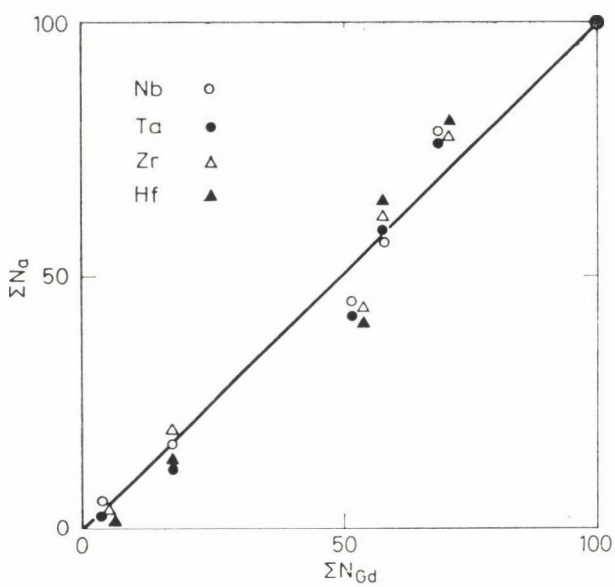
Mint már említettük, a szórt elemek spektrokémiai szempontból a nehezen párolgó elemek közé tartoznak, ezért a megfelelő vonatkoztató elemek kiválasztására külön gondot fordítottunk.

A viszonyító párolgási görbék alapján pl. a bór meghatározásához a legmegfelelőbb „vonatkoztató elemnek" a SiO molekulaszínképe vonalas összetevője bizonyult. Alkalmazásának egyetlen hátránya az a feltétel, hogy az elemzett minták szilíciumtartalmának állandónak kell lennie, vagy előre ismernünk kell az Si mennyiségét, hogy megfelelő korrekciót tudjunk alkalmazni.

A volfrám meghatározásánál többféle vonatkoztató elem (Be, Cd, Pd, Fe, Si) alkalmazásával találkozhatunk. Beható vizsgálatok alapján a nióbium bizonyult [7] a legmegfelelőbbnek, nemcsak a volfráméhoz hasonló párolgási és spektrokémiai tulajdonságai miatt, hanem azért is, mert a felhasznált legintenzívebb színképvonala közelében található a jól mérhető, és más célra is megfelelő Nb 410,092 nm hullámhosszú színképvonal.

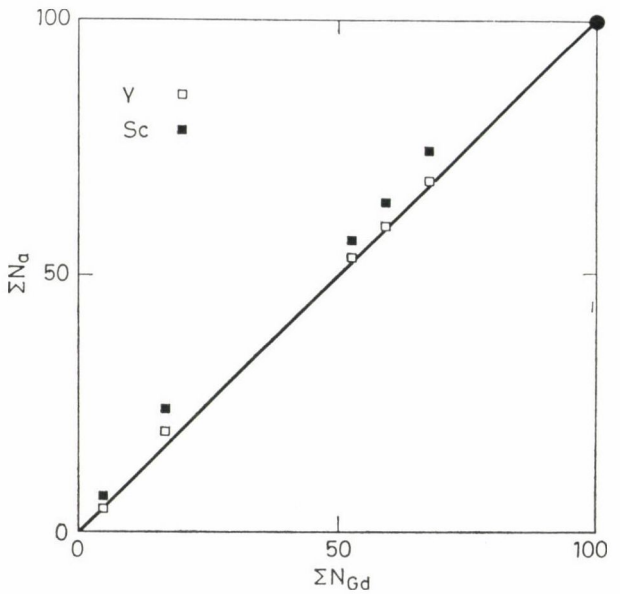
A szkandium és az ittrium meghatározásakor a szilikátásványok nyomelemzéséhez is igen jól bevált palládiumot alkalmaztunk [20]. Szokatlan volt azonban ebben az esetben az, hogy a szkandium és az ittrium legalkalmasabb elemző vonalai ionvonalak, míg az általánosan alkalmazott vonatkoztató Pd-

vonalak atomvonalak. A szórásdiagramos módszerrel vizsgáltuk az ilyen kevert vonalpárok alkalmazásának lehetőségét és azt tapasztaltuk, hogy ez a körülmény nincs jelentős hatással az elért pontosságra [8]. A palládiumot eredményesen alkalmaztuk vonatkoztató elemként ritkaföldfémek meghatározásához is. A párolgási sorrend végén található elemek esetén (Zr, Hf, Nb és Ta) viszonylag jobb párolgása miatt a Pd már nem bizonyult megfelelőnek. Ezért az említett elemek párolgási folyamatait alaposabban is megvizsgáltuk. Elsősorban azt vizsgáltuk, hogy a háttér alkalmazható-e vonatkoztatóként. Az ún. normalizált párolgási viszonyító görbék (1. ábra) alapján megállapítható, hogy a háttér intenzitása a kisülés első fázisaiban gyorsabban növekszik, mint az elemző vonalak intenzitása, ezért a háttér mint „illékonyabb" nem felel meg a vonatkoztató intenzitás szerepének betöltésére. A továbbiakban a szkandium, az ittrium és a gadolínium alkalmazásának lehetőségeit vizsgáltuk. Az Sc 335,971 nm és az Y 319, 561 nm, illetve a Gd 335,86 nm színképvonalak felhasználásával megszerkesztettük a kölcsönös viszonyító párolgási görbéket (2. ábra). Megállapítható, hogy a Gd és az Y egyenletesen párolog, az Sc viszont illékonyabb. Ennek alapján további kísérleteink során gadolíniumot alkalmaztunk vonatkoztató elemként. Ez azért is előnyös, mivel ennek az elemnek az előfordulási valószínűsége a geológiai mintákban kisebb, mint az ittriumé, amely a szilikátásványok többségében viszonylag nagy mennyiségben található. A normalizált viszonyító párolgási görbék a gadolíniumra vonatkoztatott esetekben (3. ábra) a lineáris jellegtől csak viszonylag kis eltérést mutatnak

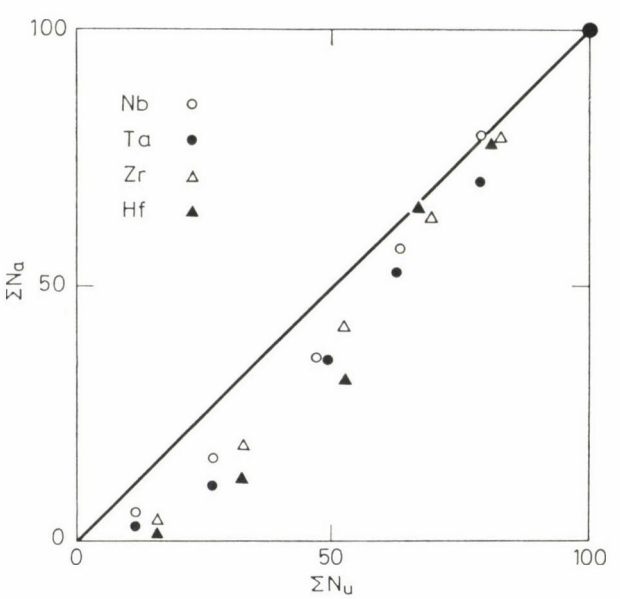


1. ábra. A normalizált párolgási viszonyító görbék különböző elemek esetében

a teljes párolgási folyamat alatt. A gadolínium tehát megfelelő vonatkoztató elem mind a négy nehezen párolgó elem meghatározásakor. RUZSANOV [5] adatai szerint mind a négy feltüntetett elem ugyanazon csoportba tartozik,



2. ábra. Az Sc 335,971 nm, az Y 319,561 nm, illetve a Gd 335,86 nm vonalakkal meghatározott kölcsönös viszonyítási párolgási görbék



3. ábra. A gadolíniumra vonatkoztatott normalizált viszonyító párolgási görbék

de az általa alkalmazott intenzitás-idő változókkal szerkesztett görbék alapján már nem vonhatók le további következtetések a párolgás sorrendjére illetve az elemek illékonyságára vonatkozóan. A több információt nyújtó kölcsönös normalizált viszonyító párolgási görbék megszerkesztésével sikerült megállapítanunk, hogy az adott kísérleti körülmények között a vizsgált elemek közül legkevésbé illékony a tantál, azt követi a közel egyforma illékonyságú cirkónium és a nióbium és a legillékonyabb a hafnium. Ez további lehetőséget nyújt a fenti elemek gerjesztési körülményeinek megjavítására és ezen keresztül a kimutatási határ csökkentésére.

A szórt elemek spektrokémiai elemzése speciális tulajdonságaik miatt további problémákat is felvet, ezek tárgyalására azonban a jelen dolgozat keretei nem elegendőek. E dolgozatban elsősorban saját, eddigi tapasztalatainkat foglaltuk össze, s az ezekből levonható általános következtetéseket, amelyek eddig is hasznosnak bizonyultak, több, a gyakorlatban sikeresen alkalmazott eljárás kidolgozásakor és alkalmazhatók további, nem túlzottan egyszerű feladatok megoldásához is.

Összefoglalás

A szerző a geológiai anyagok szórt elemeinek meghatározásával kapcsolatos spektrokémiai problémákat és megoldási lehetőségeiket tárgyalja. A vonaldús színképek miatt az elemzővonalak megválasztásánál adódnak nehézségek, a nagy hőstabilitású vegyületek képződése pedig az ívben való párolgást nehezíti. Részletesen tárgyalja az adalékok, a gerjesztés és vonalválasztás, a kémiai előkészítés és vonatkoztatóelem helyes megválasztásával elérhető optimálást és ismerteti a kidolgozott elemzési módszereket.

Summary

The paper deals with problems of determination of dispersed elements of geological samples. The complex character of their spectra leads to difficulties in choosing of analytical lines and their evaporation is hindered in the d.c. arc due to the formation of refractory materials (e.g. carbides). The optimations attainable with application of additives and by choosing of experimental conditions (excitation, analytical lines, sample preparation and reference elements) is discussed in details. The developed analytical methods are described.

IRODALOM

1. Handbook of geochemistry, ed. K. H. WEDEPOHL, Springer Verlag, Berlin, 1969.
2. Metodicseszkije osznovi iszledovania himicseszkogo szosztava gornih porod, rud i mineralov, red. G. V. OSZTROUMOV, Nyedra, Moszkva, 1979.
3. RUSZANOV, A. K., ALEKSZEJEVA, V. M., HITROV, V. G.: Kolicsesztvennoje szpektralnoje opregyelenyie redkih i rasszejanih elementov v rudah i mineralah, Goszgeoltehizdat, Moszkva, 1960.
4. BORONYIK-ROMANOVA, T. F., et al.: Szpektralnoje opregyelenyie redkih i rasszejannih elementov, Izd. AN SSSR, Moszkva, 1962.
5. RUSZANOV, A. K.: Osznovi kolicsesztvennogo szpektralnogo analiza rud i mineralov, Nyedra, Moszkva, 1971.
6. HOVORKA, D., KUBOVÁ, J.: Geol. práce, **71**, 167 (1978).
7. KUBOVÁ, J.: VIth Czechoslovak Spectroscopic Conference, Nitra, 1980. Abstracts A-12.

8. PLŠKO, E., KUBOVÁ, J.: Symposium on the Analytical-geochemical Methods for Investigation of Geological Material, Tatranská Lomnica, 1979. Abstracts, 13.
9. KUBOVÁ, J., PLŠKO, E.: Polakovičová, J.: XXI. Coll. Spectrosc. Internat., Cambridge, 1979. Abstracts, 369.
10. KUBOVÁ, J., PLŠKO, E., POLAKOVIČOVÁ, J.: Symposium on the Analytical-geochemical Methods for the Investigation of Geological Materials, Tatranská Lomnica, 1979. Abstracts, 24.
11. TÖRÖK, T., MIKA, J., GEGUS, E.: Emission spectrochemical analysis, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1978.
12. PLŠKO, E.: XVI. Coll. Coll. Spectrosc. Internat., Plenary Lectures, A. Hilger, London, 278, 1972.
13. JANDA, I., SCHAUSBERGER, I., SCHROLL, E.: Microchim. Acta, **1,** 122 (1963).
14. SCHROLL, E.: Analytische Geochemie, F. Encke, Stuttgart, 1975.
15. POLAKOVIČOVÁ, J., KUBOVÁ, J., PLŠKO, E.: Állami kutatási terv, II—4—6/5. GU PFUK, Bratislava, 1980.
16. PLŠKO, E.: XVI. Colloquium Spectrosc. Internat. Madrid, 1969, Plen. Ref. 127.
17. HARRISON, G. R.: Wavelength Tables, J. Wiley and Sons, New York, 1939.
18. ZAIDEL, A. N., PROKOFJEV V. K., RAISZKIJ, S. M.: Tables of spectrum lines, Verlag Technik, Berlin, 1955.
19. MEGGERS, W. F., CORLISS, C. H., SCRIBNER, B. F.: Tables of spectral-line intensities, NBS, Washington D. C., 1975.
20. MEDVED', J., PLŠKO, E., CUBINEK, J.: Acta Geol. Geograph. Univ. Comenianae, Geologica **27,** 183 (1974).
21. PLŠKO, E.: Chemia analityczna, **22,** 603 (1977).
22. PLŠKO, E.: Collection Czechoslov. Chem. Commun., **30,** 1246 (1965).
23. PLŠKO, E.: Chem. Zvesti, **18,** 830 (1963).
24. PLŠKO, E.: Pure and Appl. Chem., **48,** 69 (1976).

Fordította:

HELTAI GYÖRGY

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 329—346

A SZÍNKÉPFELVÉTELEK KIÉRTÉKELÉSÉNEK OPTIMÁLIS LEHETŐSÉGEI

FLÓRIÁN KÁROLY*
a kémiai tud. kandidátusa
HELTAI GYÖRGY**
a kémiai tud. kandidátusa
ZIMMER KÁROLY***
a kémiai tudományok doktora

(Katedra Chémie Hutnickej Fakulty Vysokej Školy Technickej, Košice, ČSSR;*
*** Agrártudományi Egyetem Mezőgazdasági Kémiai Tanszéke, Gödöllő,*
**** Eötvös Loránd Tudományegyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszéke, Budapest)*

Bevezetés

Az analitikai kémia módszereinek fejlődését az utóbbi évtizedben az optikai emissziós színképelemzés területén is új, a korszerű követelményeknek megfelelő eljárások kialakulása kísérte. Új gerjesztési módszerek (pl. ICP) és új típusú érzékelők kifejlesztése, valamint a számítástechnika széleskörű alkalmazása lehetőséget teremtett automatikus spektrometriás eljárások és modern nagyteljesítményű automatikus analizátorok bevezetésére. Nem csökkent azonban a spektrográfiás módszer (fotográfiás detektálás) jelentősége, mert a legmodernebb spektrométerek sem versenyezhetnek a fotoemulzió rendkívül nagy információrögzítő és -tároló kapacitásával és integráló képességével, s ez egyes területeken (pl. geológiai anyagok, környezetvédelmi jellegű minták, biológiai anyagok elemzése) igen jól hasznosítható. A számítástechnika alkalmazásával és a modern, teljesen automatizált mikrodenzitométerek egyidejű bevezetésével a fotoemulzión rögzített információk teljesebb kihasználása is lehetővé vált. Ugyanakkor mindez szükségessé tette a modern mikrodenzitométerekkel szemben támasztott követelmények felülvizsgálatát is.

Jelen dolgozatunk célja a fotográfiai fotometria olyan új eredményeinek kifejtése, amelyek szoros összefüggésben vannak a modern mikrodenzitométerek széleskörű alkalmazásával a spektrokémiai gyakorlatban.

A modern mikrodenzitométerek fejlődési irányai

A színképfelvételek fotometriai kiértékelésekor a főfeladat a fotoemulzión regisztrált nagymennyiségű információ feldolgozása és a hasznos információk kiválasztása. A hagyományos színképvonal-fotométereknél (ezen csoport tipi-

kus képviselője a Zeiss G II színképvonal-fotométere) a hasznos információk kiválasztása — a színképvonalak kikeresése — a műszer kezelőjének a feladata; ez megfelelő gyakorlatnál nem jelent nehézséget. Maga a mérés azonban lassú, fárasztó, s az így nyert információk száma korlátozott. Emellett a hagyományos berendezések csak aránylag szűk határok között (0—2,0) teszik lehetővé a feketedésértékek megbízható mérését; ez a tény szintén rontja az információkihasználás hatásfokát.

Modern mikrodenzitométereknél ezt teljes automatizálással és mikroprocesszorral, illetve számítógéppel való vezérléssel [1—3] növelték. Ilyen jellegű műszerek pl. a SPECSCAN S 3000 (Optronics), COMPARATOR MICROPHOTOMETER L 900 (Hilger), MICRODENSITOMETER 1010 A (Perkin-Elmer), MICRODENSITOMETER MK III CS, illetve MICRODENSITOMETER 6 (Joyce-Loebl). Ezen berendezések alapelveit és spektrokémiai szempontból fontos jellemzőit már részletesen tárgyalták [4, 5]. Ugyancsak ide sorolhatók a házilag modernizált berendezések is, amelyeknek alapja többnyire a hagyományos G II színképvonal-fotométer; ilyenek pl. a WITTMER és munkatársai [6], illetve KOZMA és munkatársai [7] által ismertetett berendezések.

A teljesen automatizált műszerek azonban igen költségesek és alkalmazásuk nagykapacitású számítástechnikai hátteret követel, s egyidejűleg komplikált programozási feladatokat is meg kell oldani. Ezek a lehetőségek a kisebb spektrokémiai laboratóriumok többségében nem állnak rendelkezésre és megteremtésük a jövőben sem indokolt.

Jelenleg a félautomatikus, digitális kijelzésű, széles méréshatárú berendezések alkalmazása a legcélszerűbb.

Ebben az esetben a szükséges információk a berendezés kezelésére alkalmas formában rögzíthetők (pl. lyukszalagon). Így kiküszöbölhető a teljes automatizálás legproblematikusabb és egyben legköltségesebb művelete a vonalkikeresés, illetve azonosítás, a kiértékelés azonban gyorsabb és kevésbé fárasztó. Ilyen típusú berendezések az utóbbi években nagyobbrészt a hagyományos G II színképvonal-fotométer modernizálásával készültek, szilícium fotodióda érzékelővel, s kijelzésre a galvanométer helyett digitális voltmérőt és ehhez csatlakozó adatrögzítő- és feldolgozóberendezést [8, 9, 10], illetve kis számítógépet [11] alkalmazva. Ebbe a műszercsoportba tartozik a Magyar Tudományos Akadémia Műszaki Fizikai Kutató Intézetében kifejlesztett G II — MFKI rendszer félautomatikus változata [7] is, amely széles méréshatárok között, digitális kijelzéssel működik. E műszer teljesítőképességét részletesen összehasonlítottuk a hagyományos G II színképvonal-fotométerével (esetenként más típusú készülékekkel is) [12—16], főleg a fotometrikai hibáknak a spektrográfiás kiértékelés pontosságára és megbízhatóságára való befolyását vizsgáltuk. A legfontosabb elért eredményekre a továbbiakban még kitérünk a Zeiss gyár új mikrodenzitométerével végzett összehasonlító vizsgálatok

ismertetésekor. Az MD—100 a gyártó cég adatai szerint [17] kibővített méréshatárok között (0—3,5), hagyományos futóskálás galvanométerrel, de az MA, illetve TEC jelölésű kiegészítésekkel digitális kijelzéssel és automatizált üzemmódban is működtető. Számítógép csatlakoztatása is lehetséges [18].

A feketedésmérés rendszeres hibáinak csökkentése

A feketedésmérés rendszeres hibái a hagyományos színképvonal-fotométerek esetén két forrásból erednek [12, 19]: a fényelektromos mérési rendszer linearitási hibájából, illetve az optikai rendszerben fellépő szórt fényből. Kis feketedésértékek mérésekor ezek a hibák még elhanyagolhatók, de a mért feketedés növekedésével (főleg a szórt fény miatti hiba) gyorsan növekednek. Emiatt deformálódik a fotoemulzió jelleggörbéje, a feketedési görbe. Az említett hibákat részletesen tanulmányoztuk [12] különböző típusú színképvonal-fotométerek esetében.

Adott műszer esetében nem lehet egyértelműen megállapítani az érzékelőre jutó szórt fény mennyiségét; a különböző berendezések összehasonlításához szükséges adatokat egy elméletileg végtelen feketedésű vékony huzal látszólagos feketedésének mérésével nyertük [14]. E korábban már ismertetett adatokat [14] kiegészítettük az MD—100 mikrodenzitométer és a G II színképvonal-fotométer RFT digitális voltmérővel való összekapcsolásával kialakított rendszer esetében mérhető értékekkel (1. táblázat). Látható, hogy a szórt fény mennyisége a színképvonal-fotométer típusán kívül az alkalmazott előréstől is függ. A megadott S_{max} értékek olyan határértékeknek tekinthetők, amelyek felett, illetve amelyek közelében a feketedésmérés már nem reális.

Néhány színképvonal-fotométer típusnál a linearitási hibát is tanulmányoztuk [14]. A szükséges adatokat az egyenletesen megvilágított rés szélessé-

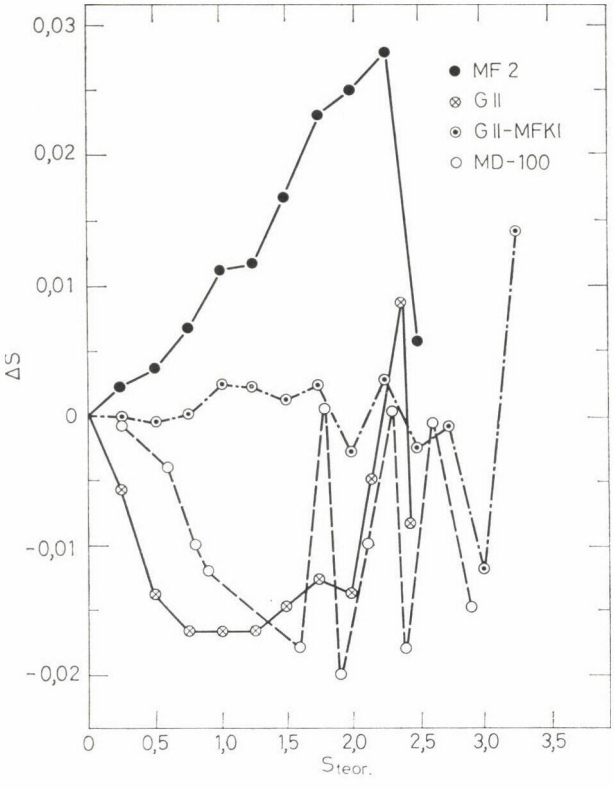
1. táblázat

40 μm átmérőjű huzal látszólagos S_{max} feketedésértékei különböző színképvonal-fotométerekkel meghatározva

Színképvonal-fotométer	S_{max}
MF — 2	1,5—1,8*
G II (zöld előrés)	2,0—2,2*
G II (fém előrés)	2,8
G II — MFKI (zöld előrés)	3,0
G II — MFKI (fém előrés)	4,0
G II + RFT digitális voltmérő (fém előrés)	3,0
MD — 100	3,1
MK III CS (Joyce-Loebl)	4,0

* Ugyanazon típusú több készülékkel nyert adatok

gének változtatásával nyertük, a linearitási hibát mint az elméleti és a valóságban mért feketedések különbségét az elméleti S_{teor} feketedésértékek függvényében ábrázoltuk. Az MD—100 mikrodenzitométerrel kapott adatokkal kibővített eredményeket az 1. ábrán szemléltetjük. Azoknál a berendezéseknél, amelyeknél végkitérést kell beállítani (G II, MF—2 és MD—100) minimum,



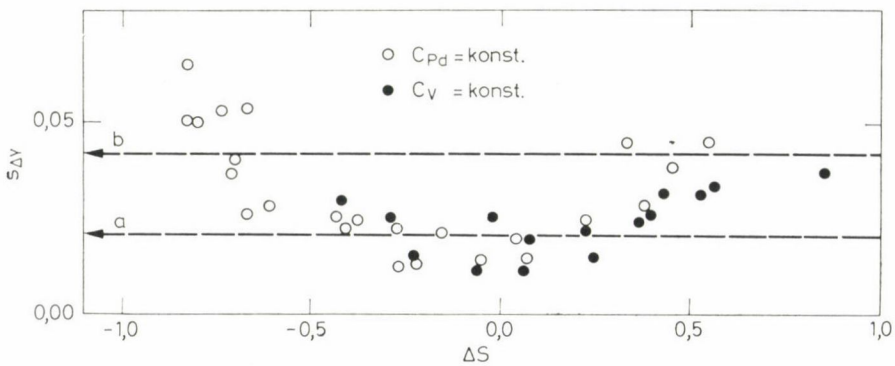
1. ábra. A fényelektromos linearitási hibát jellemző ΔS értékek változása különböző színképvonal-fotométereknél az S_{teor} feketedés függvényében

illetve maximum görbét kaptunk; a G II — MFKI műszernél a kitérések előjele változó és gyakorlatilag 3,0 feketedésértékig nem haladja meg a 0,1% relatív linearitási hibáknak megfelelő értéket. Az MD—100 mikrodenzitométernél 1,7-es feketedésérték felett a méréstartomány-váltás hatása észlelhető; a relatív linearitási hiba itt sem haladja meg a gyártó cég által megadott 2%-os határt.

A fenti tapasztalatok és korábbi vizsgálataink alapján leszögezhető, hogy az alkalmazható méréstartományt elsősorban a fénymérő rendszerek linearitása és zajszintje, illetve a szűrt fény hatása határozza meg [12, 13].

A feketedésmérés hibáinak befolyása a spektrográfiás módszer pontosságára

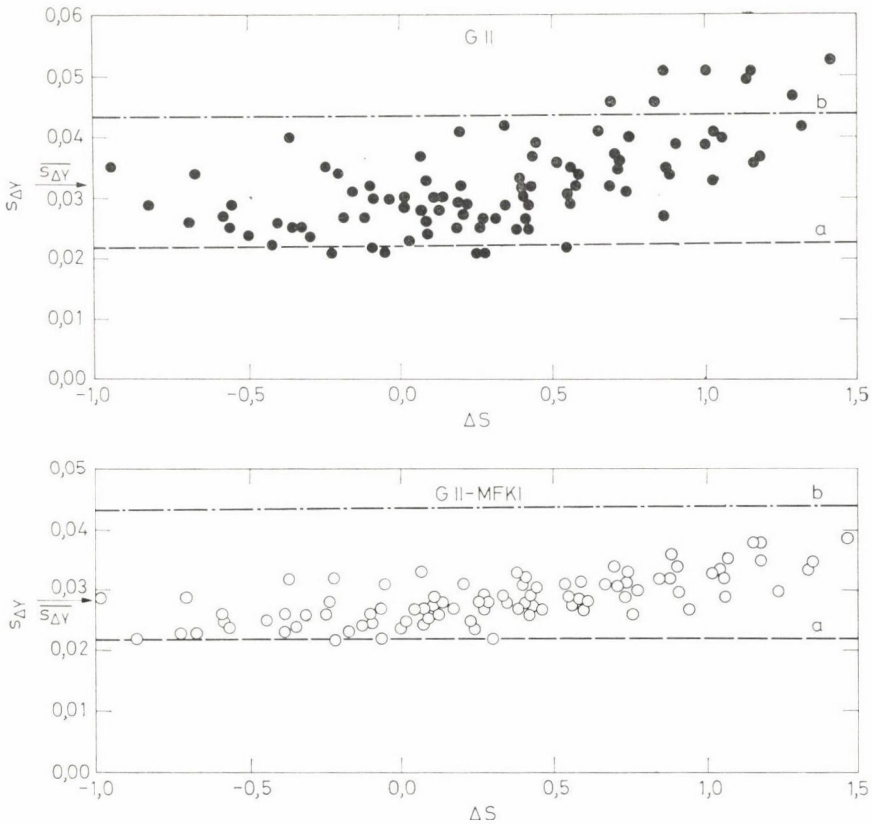
A spektrokémiában az utolsó évtizedben elterjedt, szórásdiagramok alkalmazásán alapuló [20, 22] speciális korrelációs és regressziós eljárásnál, amelyet a spektrográfiás módszerek pontosságának értékelésénél alkalmaztak, bizonyos ellentmondásokat tapasztaltak [23]. Ezekre a módszer részletes ellenőrzésével próbáltunk magyarázatot keresni. Míg a hagyományos eljárásnál a legalkalmasabb színképvonalpárok megválasztására szolgáló értékelő paramétereket ugyanazon minta többszörösen (minimálisan 30-szor) ismételt felvételeiből származó értékek alapján számítják ki, addig az ellenőrzés során az eljárást több, a meghatározandó elemet változó koncentrációban tartalmazó minta felhasználásával végeztük el. Megállapítottuk [24], hogy azon legfontosabb értékelő paraméterek értéke, amelyeken az egész módszer alapszik, jelentősen változik a meghatározandó elem koncentrációjának változásával. Ez a megállapítás azonban lényegesen csökkentené az eddig sikeresen alkalmazott eljárás megbízhatóságát és elvben lehetetlenné tenné szélesebb körű alkalmazását. Megfigyeltük, hogy miután a koncentrációértékek kisebb határok közt változtak, a vizsgált értékelő paraméterek változásai is csökkentek. Ez a megfigyelés ahhoz a megállapításhoz vezetett, hogy a statisztikus értékelő paraméterek változásai összefüggésben lehetnek a mért feketedésértékek nagyságával [25], illetve az analitikai és vonatkoztató színképvonalak feketedéskülönbségeivel. Ezt támasztja alá a 2. ábra, amelyen a legfontosabb statisztikus értékelő paraméter, az $s_{\Delta Y}$ érték (amely a módszer pontosságát jellemzi) változását ábrázolja a ΔS feketedéskülönbségek függvényében. Az ábra minden pontja egy külön szórásdiagramos értékelésnek felel meg, a meghatározott elem (V) különböző koncentrá-



2. ábra. A módszer pontosságát jellemző $s_{\Delta Y}$ értékek változása a ΔS feketedéskülönbség függvényében a meghatározott (V) és vonatkoztató (Pd) elem különböző koncentrációjánál szórásdiagramos kiértékelésnél

ciója, illetve a vonatkoztató elem (Pd) különböző koncentrációja esetén. Az ábra adatai szerint nyilvánvaló, hogy az $s_{\Delta Y}$ paraméter legmegfelelőbb értékei akkor érhetők el, ha az elemzővonalpár feketedéskülönbsége minimális. Ez a rendszeres hibák befolyására mutat.

A koncentrációváltozások által okozott befolyások kiküszöbölésének érdekében az egész kísérletsorozatot megismételtük [24] oly módon, hogy az eltérő feketedésértékeket ugyanazon mintának hatlépcsős szűrővel felvett színképéből nyertük. A hagyományos G II színképvonal-fotométer alkalmazásakor a statisztikus értékelő paraméterek a ΔS-értékek függvényében (3. ábra) most is jelentősen változtak. A modernizált G II — MFKI mikrodenzitométerrel végzett kiértékelés esetében azonban a vizsgált statisztikus paraméterek sokkal kisebb mértékben változtak a feketedéskülönbség függvényében.



3. ábra. A módszer pontosságára jellemző $s_{\Delta Y}$ értékek változása a hatlépcsős szűrő különböző fokozataiban mért feketedésértékek kombinálásával képzett ΔS feketedéskülönbség értékek függvényében

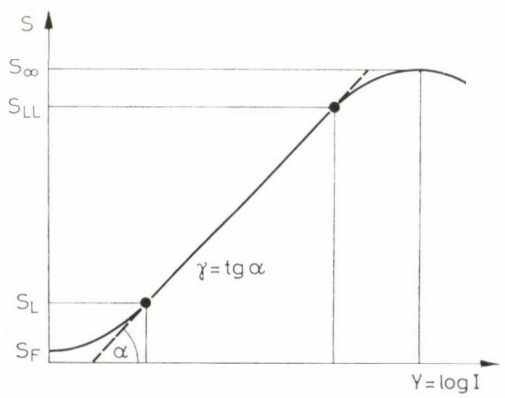
G II, ill. G II — MFKI színképvonal-fotométerrel végzett kiértékelés esetén ($B_X = 1$ feltétellel $s_{\Delta Y}$ = a értéknek $s_{c,r} = 5\%$, $s_{\Delta Y}$ = b értéknek $s_{c,r} = 10\%$ értékek felelnek meg; $s_{c,r} = 230\ (B_{X \cdot \Delta Y})$

Ezt a tényt szemlélteti a 3. ábra. Megfigyelhető, hogy a kapott értékek $s_{\Delta Y}$ ingadozása ebben az esetben már nem haladja meg lényegesebben a fotoemulziónál megszokott értéket.

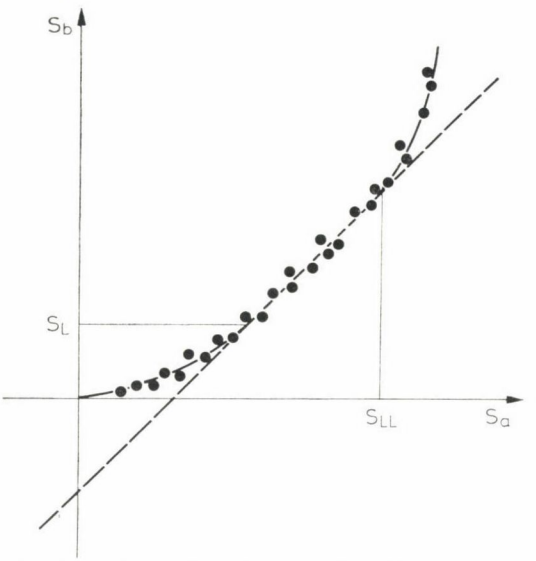
A szórásdiagramok alkalmazásán alapuló, statisztikus értékelő módszer fenti ellenőrzése egyúttal a korszerű mikrodenzitométerek alkalmazásának előnyeit is meggyőzően bizonyította. Ugyanakkor a feketedésmérés rendszeres hibái és a spektrográfiás módszer pontossága közötti lehetséges összefüggésekre is rámutatott.

A színképvonal-fotométer típusának befolyása a feketedési görbék alakjára

Mennyiségi meghatározásokra csak azokat a feketedésértékeket lehet alkalmazni, amelyek a feketedési görbe (4. ábra) lineáris, illetve alexponált alsó részének felelnek meg. A lineáris szakaszt határoló S_L, illetve S_{LL} pontokon kívül a görbe fontos jellemzője a lineáris szakasz iránytangense, a fotoemulzió γ értéke is. S_F a fotoemulzió megvilágítatlan részén az előhívás hatására kialakuló ún. fátyolfeketedés, S_∞ pedig a legnagyobb elérhető feketedésértéket jelenti. A feketedési görbe jellemző paramétereit gyakran ún. előgörbék alkalmazásával határozzák meg. Gyakrabban alkalmazzák a CHURCHILL-féle [26] előgörbés módszert (5. ábra), többnyire PLŠKO [27] szerinti ábrázolás módban. Ezt ugyanazon fényforrásnak kétlépcsős szűrővel készített felvételei segítségével szerkeszthetjük oly módon, hogy a gyengített fokozatban mért feketedésértékeket (S_b) ábrázoljuk a gyengítetlen fokozatban mért feketedések (S_a) függvényében. Ez az előgörbe alkalmas a γ-érték és az I-transzformáció [28] k állandója értékének grafikus meghatározására is. Az így nyert eredmény azonban csak tájékoztató jellegű, pontosabb meghatározás pl. számítógépes eljárásokkal [29, 30] lehetséges.

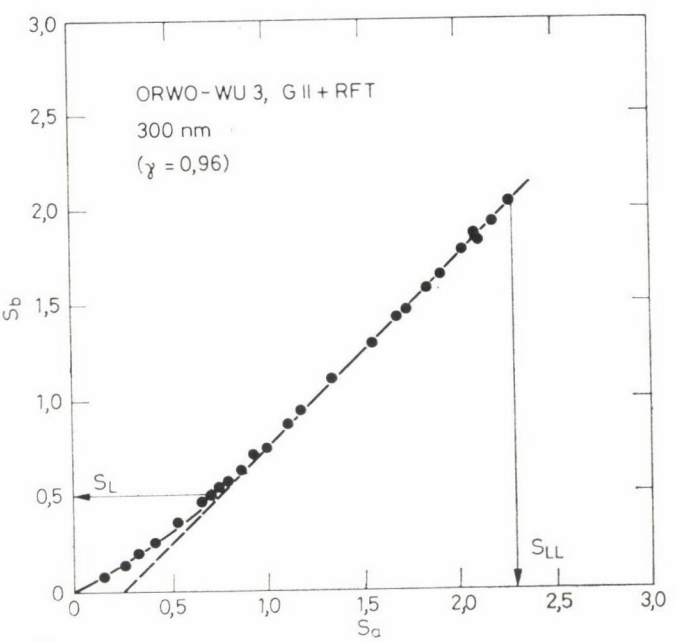


4. ábra. A fotoemulzió jelleggörbéje a feketedési görbe

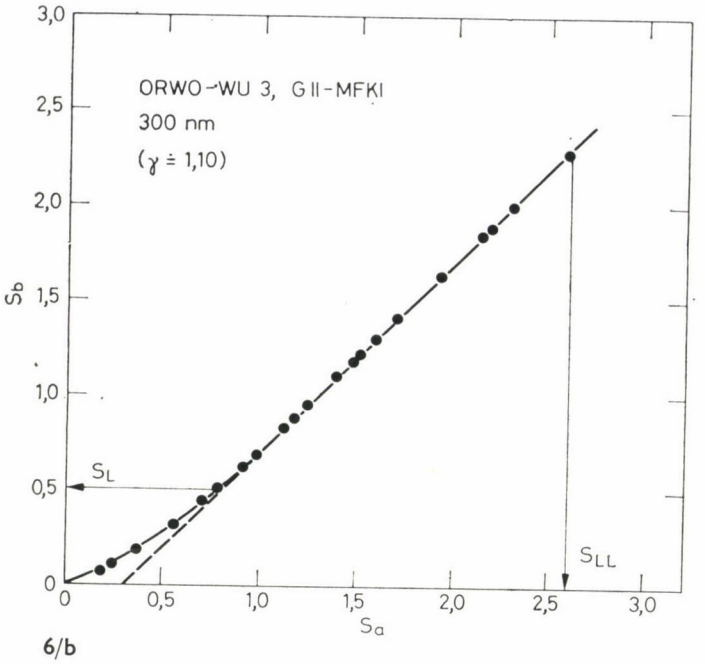


5. ábra. A Plško által módosított Churchill-féle előgörbe

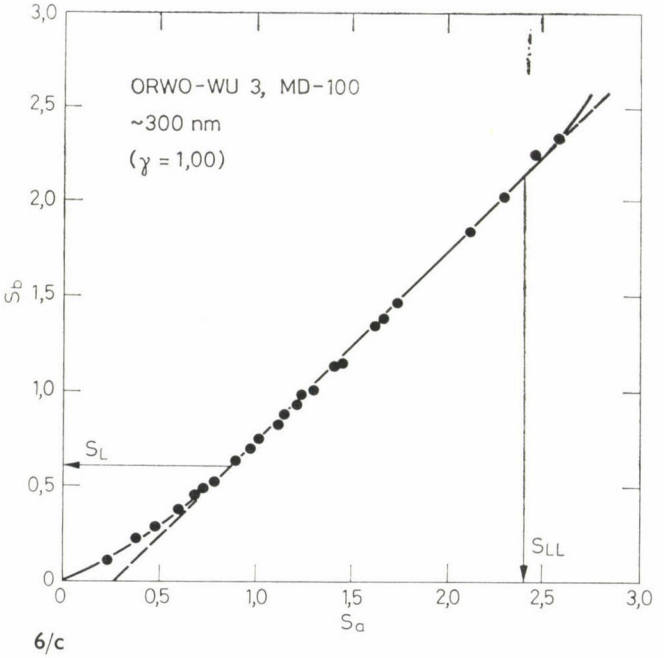
Dolgozatunk előző részeiben rámutattunk arra, hogy az alkalmazott színképvonal-fotométer típusa befolyással van a feketedésmérés pontosságára és megbízhatóságára, s ebből következik, hogy a fotoemulzió jelleggörbéjének alakját is befolyásolja. A legfontosabb a szórt fény hatása, amely a hagyo-



6/a



6/b



6/c

6. ábra. ORWO WU-3 színképlemez, $\lambda = 300$ nm hullámhossznál szerkesztett előgörbéinek alakja: a) G II — RFT mikrodenzitométerrel, b) G II — MFKI mikrodenzitométerrel, c) MD — 100 mikrodenzitométerrel végzett kiértékelés esetén

mányos színképvonal-fotométerek alkalmazásakor (pl. a G II) csökkenti a mért feketedésértékeket és ennek következtében a feketedési görbe a nagyobb feketedéseknél sokkal korábban (kb. $S = 1{,}5-2{,}0$ értékeknél) lehajlik az egyenestől, mint azt a fotoemulzió tulajdonságai alapján várhatnánk [12, 13, 19]. Ilyen körülmények között irodalmi adatok szerint a feketedési görbe lineáris szakaszának feketedésben mért hossza $\Delta S_L = S_{LL} - S_L$ hozzávetőleg 1,25 értéknek felel meg [31]. Szórtfénymentes mikrodenzitométerek alkalmazásakor a feketedési görbe linearitását sokkal nagyobb feketedésértékekig is megőrzi [14, 19, 32]. A fentieket szemléltetik a 6a., 6b. és 6c. ábrákon feltüntetett előgörbék is, amelyeket ugyanazon színképfelvételek különböző színképvonal-fotométerekkel való kiértékelésével nyertünk. A már ismertetett G II—MFKI mikrodenzitométeren kívül (6b. ábra) egy RFT digitális voltmérővel összekapcsolt G II színképvonal fotométert (6a. ábra) és az MD—100 típusú mikrodenzitométert (6c. ábra) alkalmaztunk. A fotoemulzió jelleggörbéjének paramétereit a 2. táblázatban foglaltuk össze.

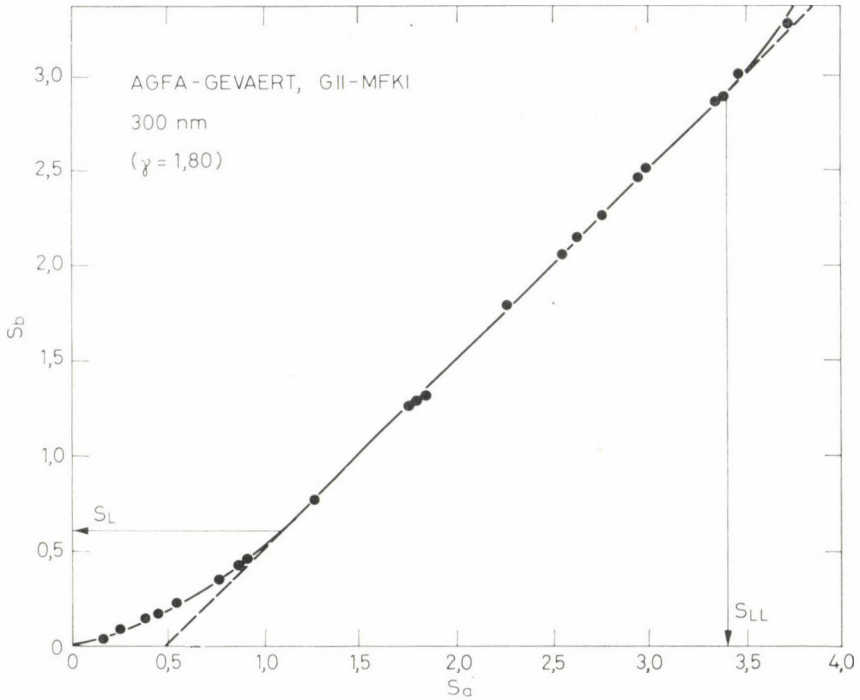
2. táblázat

*A feketedési görbe lineáris szakaszát jellemző adatok (ORWO WU-3 emulzió, $\lambda = 300$ nm)**

Színképvonal-fotométer	S_{LL}	ΔS_L
G II+RFT	(2,30)	(1,80)
G II—MFKI	(2,60)	(2,10)
MD—100	2,40	1,80

* A zárójelben megadott adatok a jelen esetben a mért legmagasabb feketedésértékek, de nem tekinthetők határértékeknek.

Látható, hogy mindhárom szóbanforgó berendezéssel kedvezőbb eredményeket kaptunk, mint a hagyományos készülékekkel. Az is megállapítható, hogy az alkalmazott színképvonal-fotométerek mérési tartománya az adott esetben nincs teljesen kihasználva, hiszen a megállapított S_{max}-értékek nagyobbak, mint a mért S_{LL} értékek. Így például a 7. ábrán szemléltetett előgörbe a G II—MFKI berendezés segítségével megállapított S_{LL} érték (3,4) nagyobb, mint a G II + RFT, illetve az MD—100 mikrodenzitométer esetén kapott S_{max}-érték. A G II—MFKI mikrodenzitométer alkalmazásának előnyeit még jobban példázza a 8. ábrán ismertetett szélsőséges eset, ahol az előgörbe segítségével kapott paraméterek ($S_{LL} = 3{,}9$; $\Delta S_L = 2{,}95$) értéke a feketedési görbének csaknem a 4,0 feketedésig megmaradó lineáris jellegét bizonyítja. A konkrét esetben a színkép látható tartományáról van szó, ahol a hagyományos készülékekkel való kiértékelés során az emulzió jelleggörbéjét csak speciális eljárások alkalmazásával (pl. γ-kompenzáló szűrők segítségével) lehet elvégezni.

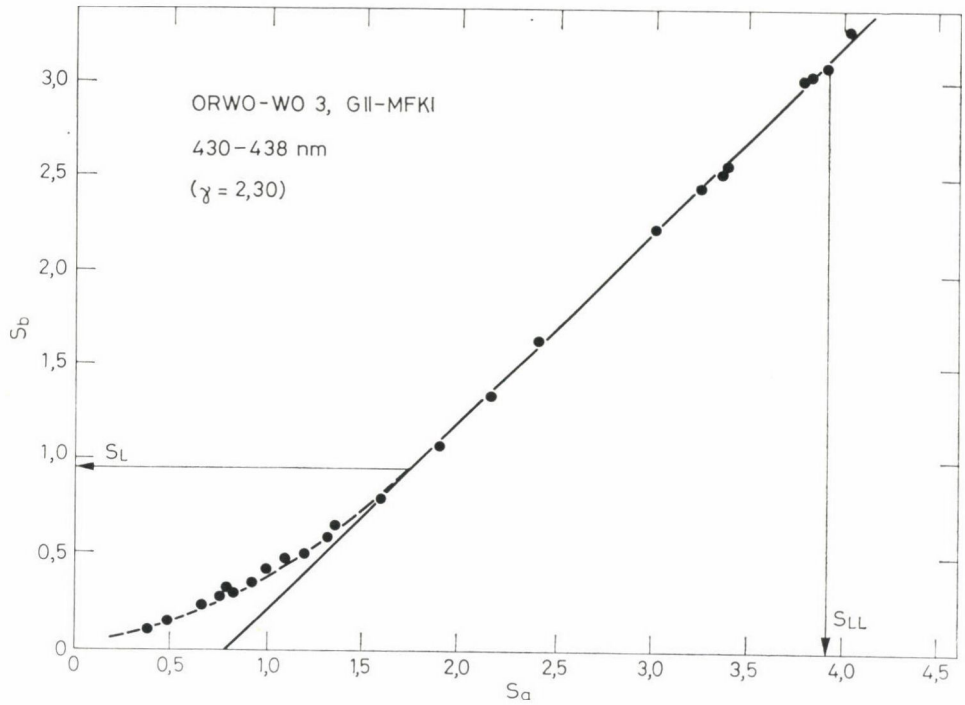


7. ábra. AGFA-GEVAERT 23 D 50 emulzió, $\lambda = 300$ nm hullámhossznál szerkesztett előgörbéjének alakja G II — MFKI denzitométerrel végzett kiértékelés esetén

Az előbbiekben ismertetett néhány példa alapján összhangban a korábbi következtetésekkel [12, 13, 19, 32] leszögezhető, hogy a fotoemulzió hasznosítható megvilágítási tartományát jelenleg nem a forgalomban levő színképlemezek, hanem elsősorban az alkalmazott színképvonal-fotométer tulajdonságai határozzák meg. A megbízhatóan mérhető feketedésértékek méréshatárának bővítésével, modern mikrodenzitométerek alkalmazásával a színképfelvételeken rögzíthető információk kihasználási hatásfoka lényegesen növelhető.

A modern mikrodenzitométerek alkalmazásának előnyei a spektrokémiai gyakorlatban

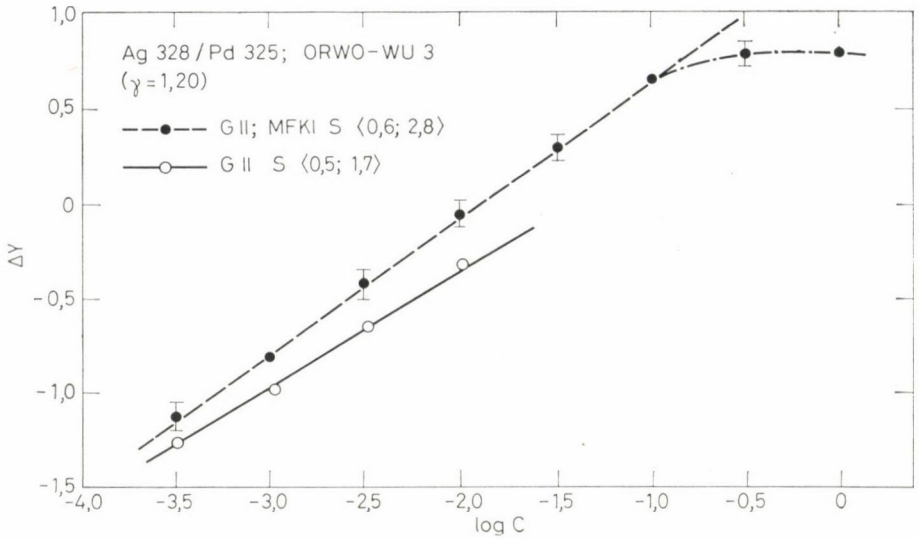
A spektrokémiai analitikai gyakorlat szempontjából a feketedésmérési határ növelésének megfelelő koncentrációtartomány növelés tekinthető a korszerű mikrodenzitométerek alkalmazása legfontosabb előnyének. A nagy feketedésértékek megbízható mérésével egyes esetekben ugyanis néhány nagyságrenddel növelhető az analitikai görbe lineáris tartományának megfelelő koncentrációtartomány. Szükségtelen e tény jelentőségének hangsúlyozása gazdasági szempontból olyan sokelemes feladatoknál, amelyeknél a meghatáro-



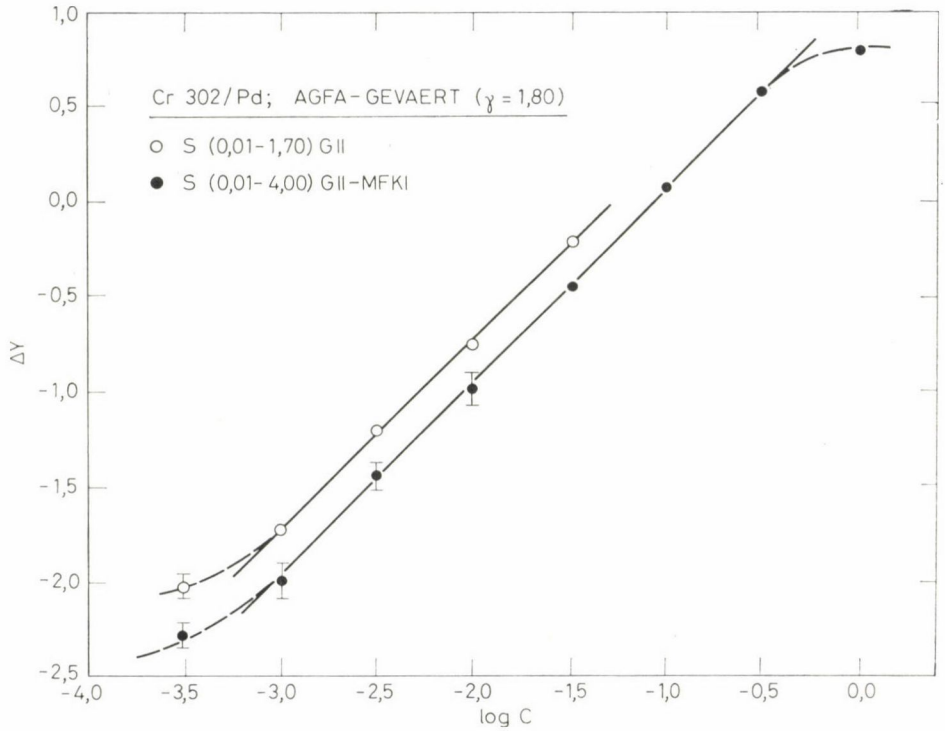
8. ábra. ORWO WO-3 emulzió látható színképtartományban szerkesztett előgörbéjének alakja, G II — MFKI denzitométerrel végzett kiértékelés esetén

zandó elemek koncentrációja tág határok között változhat. Különösen fontos ez a lehetőség olyan esetekben, amikor a vizsgálandó elemnek csak néhány megfelelő színképvonala van. A fentieket szemlélteti az Ag/Pd elemzővonalpár analitikai görbéinek alakjai egy hagyományos (G II) és egy modernizált (G II—MFKI) színképvonal-fotométerrel végzett kiértékelés esetében (9. ábra). A G II—MFKI mikrodenzitométer alkalmazásakor az analitikai görbe egyenes szakasza egy nagyságrenddel hosszabb a nagy koncentrációk irányában, s emellett megbízhatóan definiálható az a koncentrációhatár, amely fölött az önabszorpció fellépése következtében analitikai értékelés már nem végezhető el.

Széles méréshatárú színképvonal-fotométerek alkalmazása különösen előnyös akkor, ha nagyobb gradációjú lemezeket (pl. AGFA-GEVAERT 23 D 50) alkalmazunk. Ilyen esetekben a nagy γ-érték következtében az analitikai egyenessel átfogható koncentrációtartomány a hagyományos színképvonal-fotométerekkel történő méréseknél 1—1,5 nagyságrend között változik. A G II—MFKI mikrodenzitométer segítségével ilyenkor is növelhető a koncentrációtartomány, s az analitikai hitelesítés az egész aktuális koncentrációs tartományban elvégezhető (10. ábra). Itt is figyelembe kell venni a szórt fény által okozott rendszeres hibát. Nagyobb Cu-tartalom meghatározásánál, hagyomá-

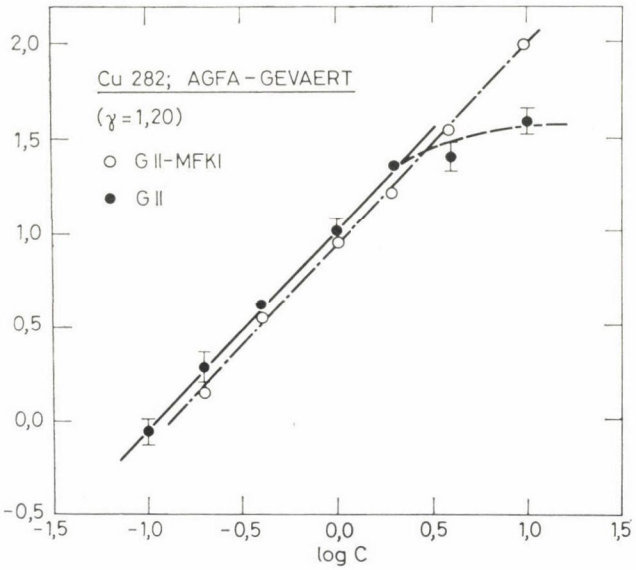


9. ábra. Az Ag/Pd színképvonalpár analitikai hitelesítő egyeneseinek alakja G II, ill. G II — MFKI színképvonal-fotométerekkel végzett kiértékelés esetén

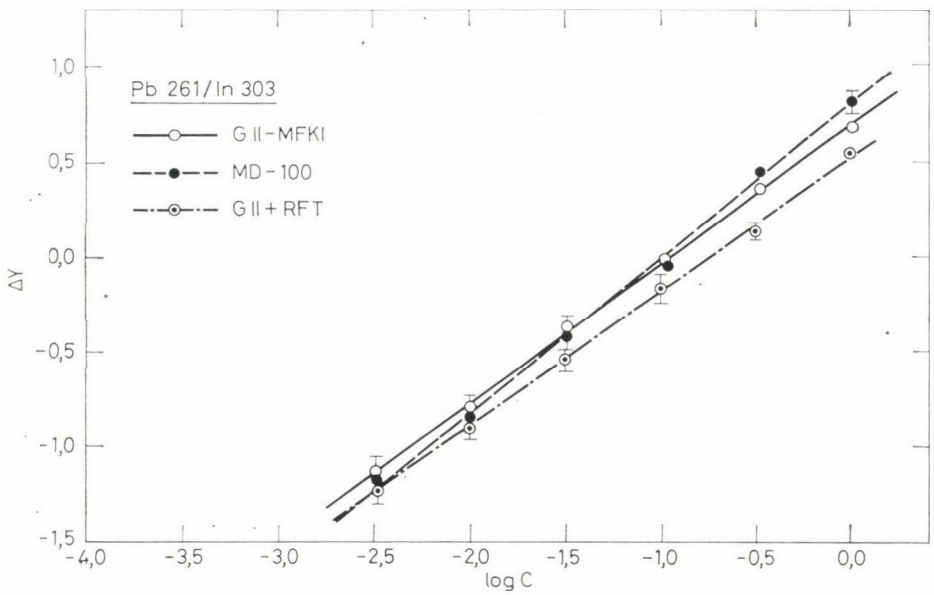


10. ábra. A Cr/Pd színképvonalpár analitikai hitelesítő egyeneseinek alakja G II, ill. G II — MFKI színképvonal-fotométerekkel végzett kiértékelés esetén

nyos színképvonalfotométert alkalmazva [33] azt tapasztaltuk, hogy az 1% feletti koncentrációknál a 282 nm hullámhosszra vonatkozó analitikai egyenes elhajlik, s ezt ismét az önabszorpció fellépésével magyaráztuk. A G II—MFKI



11. ábra. A Cu színképvonal analitikai hitelesítő egyeneseinek alakja G II, ill. G II — MFKI színképvonal-fotométerekkel végzett kiértékelés esetén



12. ábra. A Pb/In színképvonalpár analitikai hitelesítő egyeneseinek alakja különböző színképvonal-fotométerekkel végzett kiértékelés esetén

mikrodenzitométerrel elvégzett ismételt kiértékelés során azonban kiderül [33], hogy a hagyományos készülék esetében (11. ábra) a szórt fény által okozott rendszeres hibákról van szó.

A színképvonal-fotométer típus befolyását az analitikai görbe alakjára ugyanazon színképfelvétel-sorozat különböző színképvonal-fotométerekkel elvégzett párhuzamos kiértékelésével vizsgáltuk. A Pb/In színképvonalpár analitikai görbéit határoztuk meg G II, G II — MFKI és G II + RFT színképvonal-fotométerekkel nyert adatok alapján (12. ábra). Az analitikai görbék alakja, illetve ezek legfontosabb paraméterei (3. táblázat) között nincsenek

3. táblázat

A különböző színképvonal-fotométerekkel végzett kiértékeléssel kapott analitikai egyenesek paraméterei a Pb 261/In 303 vonalpár esetében

Paraméter	Színképvonal-fotométer		
	G II—MFKI	G II+RFT	MD—100
$c_{\text{maximális}}$ %	←	1,0	→
$c_{\text{minimális}}$	←	0,00316	→
$A_{X,R}$	0,715	0,521	0,813
B_X	0,745	0,702	0,820
$s_{c,r}$	8,1	9,1	8,3
$s_{\Delta Y}$	0,055	0,058	0,061

* Analitikai egyenes: $\Delta Y = A_{X,R} + B_X \cdot \log c$

lényegesebb különbségek. Mindhárom esetben 2,5 koncentráció nagyságrenden keresztül analitikai egyenest kaptunk. A G II + RFT berendezéssel nyert adatok alapján szerkesztett egyenes eltérése a nagyobb koncentráció-, illetve feketedésértékeknél (a maximális mért feketedésérték S = 3,0 volt), az adott berendezés legkisebb S_{max} (1. táblázat) értékével magyarázható.

A néhány ismertetett példa alapján összefoglalóan megállapítható, hogy a modern, illetve modernizált színképvonal-fotométerek segítségével az analitikai hitelesítés során is lehetővé válik a fotoemulzión tárolt információk jobb és gazdaságosabb kihasználása.

A színképvonal-fotométer típusának befolyása a spektrográfiás módszer teljesítőképességére

A színképvonal-fotométer típusának befolyását a spektrográfiás módszer teljesítőképességére egy konkrét, sokelemes spektrográfiás módszer példáján vizsgáltuk, amely eredetileg 15 nyomelem meghatározására szolgált ülepedőpor-mintában [34]. A módszer kidolgozásánál még hagyományos színképvonal-fotométert alkalmaztunk, az ismételt kiértékelésnél a G II — MFKI [15], illetve MD—100 [35] denzitométerek alkalmazása tette lehetővé a szük-

séges értékelő paraméterek kiszámítását. Az összehasonlítás alapjául a spektrográfiás analitikai módszert jellemző legfontosabb értékek szolgáltak: a relatív pontosság ($s_{c,r}$), a kimutatási képességet jellemző kimutatási határértékek (c_L) és a módszer megbízhatóságát jellemző Δc-értékek. Ez utóbbi paraméter ellenőrző minták elemzésével nyerhető, a mért és a bemért koncentrációérték relatív eltérését adja meg. Mivel a különböző színképvonal-fotométerek alkalmazásakor különböző az analitikai egyenessel átfogható koncentrációtartomány terjedelme, fontos összehasonlító alapnak tekintettük ezeket a $\Delta \log c$ koncentrációtartományokat is: az analitikai görbék lineáris szakaszának felső, illetve alsó határához tartozó maximális és minimális koncentrációk logaritmusának különbségét. A módszer teljesítőképességét jellemzi még az ún. „totális" hiba [36]: a konkrét minták elemzésénél megállapított $s_{c,tot,r}$ relatív pontosság is.

Az áttekinthetőség érdekében kiszámítottuk a fenti értékelő paramétereknek a vizsgált 15 elemre vonatkozó átlagértékét mindhárom színképvonal-fotométer esetében, részletes adatok a [15, 34, 35] dolgozatainkban találhatók. A 4. táblázatban összefoglalt értékek alapján ismét megállapítható, hogy a

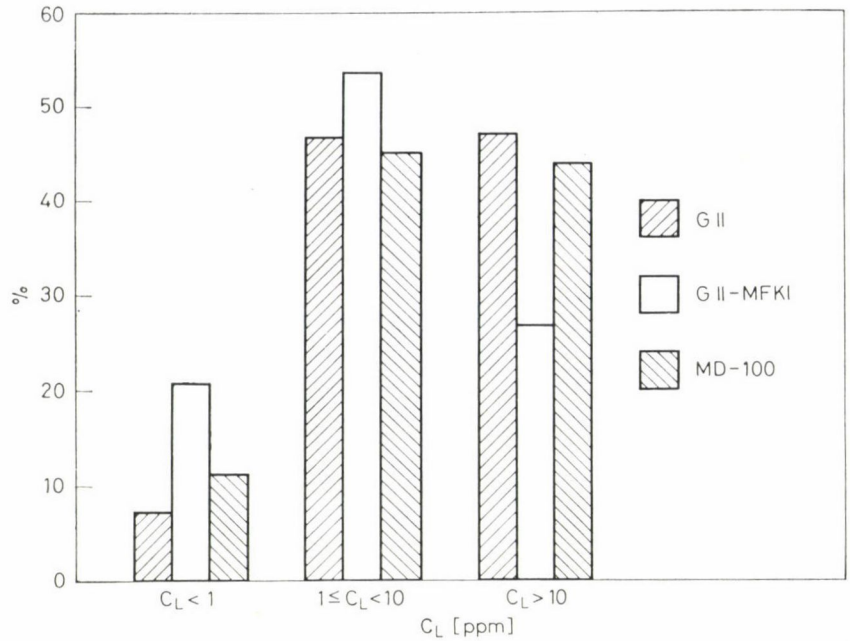
4. táblázat

A sokelemes spektrográfiás módszer teljesítőképességét jellemző adatok, különböző színképvonal-fotométerekkel elvégzett kiértékelés esetén

Paraméter	Színképvonal-fotométer		
	G II	G II–MFKI	MD–100
$\overline{\Delta \log c}$	1,63	2,40	2,22
$\overline{s_{c,r}}$ [%]	1,01	9,6	10,7
$\overline{\Delta c}$ [%]	16,7	13,9	12,4
$\overline{s_{c,tot,r}}$ [%]	—	17,5	17,8
elemzések száma	0	10	83

modern, illetve modernizált mikrodenzitométerek alkalmazásának legfőbb előnye a $\overline{\Delta \log c}$ koncentrációtartomány növekedése. Az $\overline{s_{c,r}}$ relatív pontosság értékek között nincs lényeges eltérés; a G II–MFKI és MD–100 denzitométereknél egyaránt megfigyelhető a $\overline{\Delta c}$ paraméterrel jellemzett megbízhatóság javulása. Ez a tény a már részletesen tárgyalt okokon kívül az analitikai görbék hosszabb lineáris szakaszának köszönhető megnövelt hitelesítési pontossággal, illetve megbízhatósággal magyarázható.

A módszer kimutatási képességét jellemző c_L kimutatási határ-értékek eloszlását a három vizsgált esetben a 13. ábra szemlélteti. Ha figyelembe vesszük, hogy a c_L értékeket a spektrográfiás eljárásoknál MATHERNY [37] számítási módszerével számítottuk, akkor a G II–MFKI és a többi színkép-



13. ábra. A sokelemes spektrográfiás módszer 15 vizsgált elemnél kiszámított c_L értekek eloszlása különböző színképvonal-fotométerekkel végzett kiértékelés esetén

vonal-fotométerrel kapott értékek között fennálló különbségek megmagyarázhatók. Az alkalmazott módszernél ugyanis a c_L-értékre legnagyobb befolyással az ugyanazon színképben az adott vonal környezetében mért feketedések (pontosabban háttérintenzitások) középértékének a szórása van, ha háttérkorrekciót alkalmazunk. A kis feketedésértékek tartományában pedig a legkisebb statisztikus és rendszeres (linearitási) hibát a G II — MFKI denzitométer esetében mutattuk ki (1. ábra) [12, 13].

A modern, illetve modernizált színképvonal-fotométerek alkalmazása tehát előnyös a spektrokémiai gyakorlatban a spektrográfiás módszerek teljesítőképessége szempontjából.

Összefoglalás

A dolgozatban a fotografikusan rögzített színképek kiértékelésének néhány optimálási lehetőségét ismertettük. A modern, széles méréshatárú színképvonal-fotométerek alkalmazása a spektrokémiai gyakorlatban a színképfelvételeken rögzített információmennyiség nagyobb hatásfokú és gazdaságosabb kinyerését teszi lehetővé, s ugyanakkor a kiértékelés gyorsabb, könnyebb és megbízhatóbb.

Summary

In this paper some possibilities of optimization of evaluation of photographically recorded spectra is described. By means of up-to-date microdensitometers with wide dynamic range the utilization (extraction) of information content of spectrograms becomes more effective and economical. At the same time the evaluation will be more accurate and convenient.

IRODALOM

1. MARGOSHES M.: Spectrochim. Acta **25 B,** 113 (1970)
2. BOUMANS P. W. J. M.: Preprints 16th Coll. Spectroscop. Internat., Heidelberg, 1971, Vol. II., 247
3. WEST G. J.: The Joyce-Loebl Digitized Microdensitometer, Ilford Ltd., CRF No 3165, 1970
4. TÖRÖK T., VECSERNYÉS L.: Kémiai Közlemények **49,** 319 (1978)
5. ZIMMER K., HELTAI GY.: X. Kohászati Anyagvizsgáló Napok előadásai, Balatonaliga, 1979, 113
6. WITTMAR A. W., JANSEN J. A. J., VAN GOOL G. H., BROVRER G.: Philips tech. Rev. **34,** 322 (1974)
7. KOZMA L.: Magy. Kém. Folyóirat **85,** 266 (1979); Acta Chim. (Budapest) **102,** 267 (1979)
8. MAI H., STAHLBERG U.: Jenaer Rdschau **21,** 316 (1976)
9. RIESEL G.: Z. angew. Geologie **21,** 513 (1975)
10. VICZIÁN M., PETIK P.: XX. MSZEV előadásai, Gyula, 1977, 183
11. VICZIÁN M., PETIK P.: XXII. MSZEV előadásai, Salgótarján, 1979, 165
12. ZIMMER K., HELTAI GY.: Spectrochim. Acta **33 B,** 417 (1978)
13. ZIMMER K., HELTAI GY.: Magy. Kém. Folyóirat **85,** 170 (1979); Acta Chim. (Budapest) **100,** 319 (1979)
14. HELTAI GY., ZIMMER K.: Magy. Kém. Folyóirat **85,** 403 (1979); Acta Chim. (Budapest) **103,** 171 (1980)
15. HELTAI GY., ZIMMER K., FLÓRIÁN K.: Magy. Kém. Folyóirat **86,** 518 (1980); Acta Chim. (Budapest) **106,** 239 (1981)
16. ZIMMER K., HELTAI GY., FLÓRIÁN K.: Abstracts of Euroanalysis III, Dublin, 1978, 240
17. TEUSCHEL W., HÜTTIG W.: Jenaer Rdschau **22,** 216 (1977)
18. HÜFNER M.: Jenaer Rdschau **22,** 220 (1977)
19. TÖRÖK T., HÁFENSCHER I.: Spectrochim. Acta **33 B,** 283 (1978)
20. HOLDT G.: Emissionsspektroskopie, Akademie-Verlag, Berlin, 1964, 64
21. STRASHEIM A., KEDDY R. J.: Appl. Spectrosc. **12,** 29 (1958)
22. MATHERNY M.: Chem. Zvesti **24,** 112 (1970)
23. KOLLER L., MATHERNY M.: Kémiai Közlemények **48,** 321 (1977)
24. FLÓRIÁN K.: Kémiai Közlemények **48,** 332 (1977)
25. MATHERNY M.: Spectrosc. Lett. **9,** 113 (1976)
26. PLŠKO E.: Chem. Zvesti **23,** 150 (1969)
27. CHURCHILL J. R.: Ind. Eng. Chem. Anal. Ed. **16,** 653 (1944)
28. TÖRÖK T., ZIMMER K.: Quantitative Evaluation of Spectrograms by Means of l-Transformation, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1972
29. MATHERNY M.: Anal. Chim. Acta **112,** 277 (1979)
30. FLÓRIÁN K., HELTAI GY., ZIMMER K.: Magy. Kém. Folyóirat **85,** 271 (1979); Acta Chim. (Budapest) **102,** 277 (1979)
31. ZIMMER K.: Tud. doktori értekezés, Budapest, 1970
32. VECSERNYÉS L., ZÁRAY GY.: Abstracts of Euroanalysis II, Budapest, 1975, 32
33. FLÓRIÁN K., ZIMMER K.: Magy. Kém. Folyóirat **86,** 24 (1980)
34. FLÓRIÁN K., PLIEŠOVSKÁ N.: Magy. Kém. Folyóirat **85,** 413 (1979); Acta Chim. (Budapest) **103,** 301 (1980)
35. FLÓRIÁN K.: Zbornik vedeckých prác VŠT v Košiciach megjelenés alatt
36. MATHERNY M.: Spectrosc. Lett. **5,** 227 (1972)
37. MATHERNY M.: Z. anal. Chem. **271,** 101 (1974)

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 347—356

AZ ICP ÉS AZ AAS MÓDSZER ÖSSZEHASONLÍTÁSA AZ ANALITIKAI TELJESÍTŐKÉPESSÉG SZEMPONTJÁBÓL

MAGYAR BALÁZS

(Laboratorium für Anorganische Chemie, Eidgenössische Technische Hochschule, ETH-Zentrum, 8092 Zürich, Schweiz)

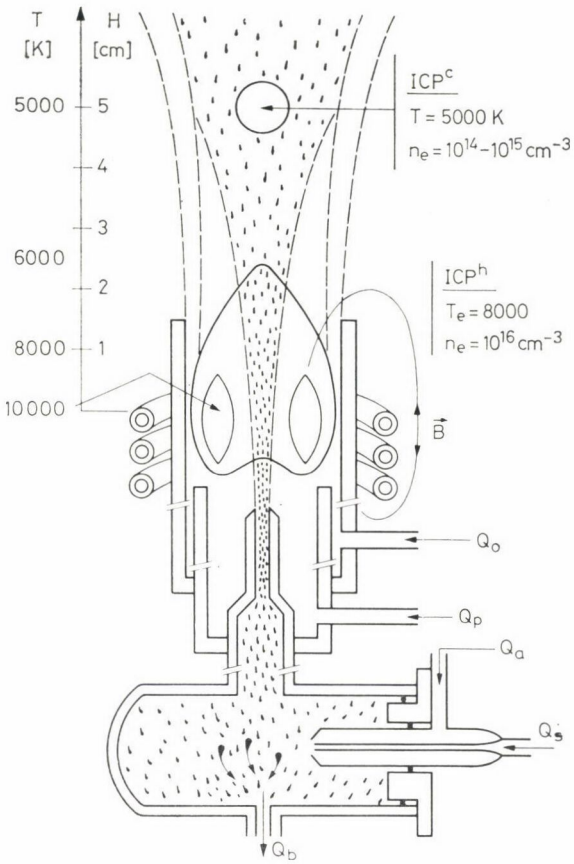
Bevezetés

Az atomspektrometria legrohamosabb fejlődése manapság az ICP—AES módszer tökéletesítése terén zajlik le. Jogos tehát az a kérdés: mivel magyarázható a plazmaemisszió előretörése a lángatomemisszió és részben a lángatomabszorpció rovására? Ennek a kérdésnek a megválaszolásához a láng és az elektromos „láng" (ICP) különleges tulajdonságait kell vizsgálnunk, valamint a lángemissziós EAS módszer érzékenységének növelését, ha a lángot ICP-vel helyettesítjük. A szétszedhető plazmaégőt az 1. ábra mutatja be. Vízzel hűtött rézspirálban nagyfrekvenciás (27 MHz) áram kering és váltakozó mágneses teret tart fent, amelynek az indukcióját $\vec{B}$-vel jelöltük. Az elektromágneses tér a töltött részecskékre, azaz az elektronra (e^-) és az argonionra (Ar^+), a következőket fejti ki:

$$\vec{F} = e \cdot \vec{E} + e \cdot (\vec{v} \times \vec{B}), \qquad (1)$$

ahol $\vec{E}$ az elektromágneses tér elektromos térerő vektora, e az elektron töltése és $\vec{v}$ a töltött részecske sebessége. Az elsődleges ionpárokat nagyfeszültségű kisüléssel állítják elő. Ezeknek a kinetikus energiája rövid időn belül annyira megnő, hogy az argon-atomokkal való ütközéskor másodlagos ionizáció lép fel. Ezzel láncreakció indul el, amely hamarosan stacionárius állapothoz vezet, amelyben az időegység alatt termelt ionpárok száma megegyezik a rekombinációk számával.

Az ICP-plazmában a T hőmérséklet és a szabad elektronok n_e (cm^{-3}) részecskesűrűsége, azaz a koncentrációja függőleges és vízszintes irányban erősen változik. Ezenkívül az analitikai célnak megfelelő atomabszorpciós és atomemissziós méréseknél nem egy bizonyos pontban érvényes értékek mérvadók, hanem arra az effektív térfogatra érvényes átlagértékek, amelyből az analitikai információ származik. Ezen nehézségek miatt két plazmazónát „definiáltunk" [4]: a „meleg" zónában (ICP^h) a termodinamikai egyensúly nem tud beállni, mivel az állandó erőhatás miatt az argonionok és elektronok



1. ábra. Szétszedhető plazmaégő koncentrikus üvegporlasztóval

legvalószínűbb kinetikus energiája $mv^2/2 = kT$ nagyobb, mint a semleges argonatomoké (k = Boltzmann-féle állandó). Ebből következik, hogy a töltött részecskék hőmérséklete (T_e és T_i) magasabb, mint a semleges atomoké (T): $T_e = T_i = 8000$ és $T = 5000$ K. 4—6 cm magasban a rézspirál felett (H = 4—6 cm) „hideg" zónát tételezünk fel, amelyben lokális termodinamikus egyensúly (LTE) uralkodik $T = T_e = T_i = 5000$ K.

Az oldatokat perisztaltikus pumpával tápláljuk a koncentrikus üvegporlasztóba. A percenként betáplált mennyiségből (Q_s, ml/perc) csak kb. 4,3% képez olyan finom permetet, hogy a porlasztógáz (Q_a, l/perc) magával ragadja és a plazmába viszi. Az oldat nagyobb része a lefolyóba jut. A plazmába került folyadékcsepp először beszárad. A szilárd maradék dehidratálódik, megolvad, elpárolog és végül atomokká disszociál. A magas hőmérséklet miatt az atomok egy része tovább „bomlik", azaz ionizálódik.

Mindezen folyamatokat figyelembe véve a következő összefüggést kapjuk a mért emissziós intenzitásra:

$$I_e = I_b + I_a = I_b + S_A^e \cdot c_A \tag{2}$$

$$I_b = f_a \cdot C_b \cdot l_e \cdot J_\lambda^r(\lambda) \cdot \Delta\lambda_m^2 \tag{3}$$

$$I_a = f_a \cdot C_a \cdot C_e \cdot \Delta\lambda_m \cdot \frac{I_e}{f_D} \cdot \frac{f_C(1 - f_I) \cdot \varrho}{M_a} \cdot \frac{(gf)f_{Au}}{\lambda^3} \cdot c_A \tag{4}$$

I_e, I_b = a csúcs-, illetve háttérintenzitás, S_A^e = a hitelesítő görbe kezdeti meredeksége, c_A = a meghatározandó elem koncentrációja a ϱ-sűrűségű oldatban (ng/g = ppb), f_a = erősítési tényező, C_a,C_b = a készülékre jellemző faktorok, l_e = az atomrezervoár effektív szélessége, $J_\lambda^r(\lambda)$ = az atomrezervoár háttérsugárzása ($W \cdot cm^{-3} \cdot nm^{-1}$), $\Delta\lambda_m$ = a monokromátor spektrális sávszélessége, C_e = átszámítási állandó, f_C = kémiai disszociációfok (0—1), f_I = ionizációfok (0—1), M_A = a meghatározandó elem (relatív) atomtömege, (gf) = = a kérdéses atomvonal λ súlyozott oszcillátorerőssége. A további tényezők a hígítási (f_D) és a populációs faktor (f_{Au}) a következő képletekből számíthatók:

$$f_D^h = 10^3 \frac{5000\ K}{300\ K} Q_a \cdot Q_s \cdot f_N \text{ az ICP „meleg" zónájában} \tag{5}$$

$$f_D^c = 10^3 \frac{5000\ K}{300\ K} (Q_a + Q_p) \cdot Q_s \cdot f_N \text{ az ICP „hideg" zónájában,} \tag{6}$$

ahol Q_a, illetve Q_p (l/perc) a porlasztógáz, illetve plazmagáz térfogatáramát és f_N a porlasztás hatásfokát jelenti.

$$f_{Au} = \frac{\exp[-(E_u - E_0)(kT]}{Z_0^{m^*}(2J_m + 1) \cdot \exp[-(E_m - E_0)(kT)]} \tag{7}$$

E_m = az m-ik energiaszint értéke, m = 0, 1, . . ., 1, . . ., u, . . . mT*
J_m = az m-ik term eredő belsőkvantumszáma.

Az állapotösszeg számítását annál az energiaszintnél (m*) zártuk le, amelynek a hozzájárulása kisebb volt, mint 0,001.

Mivel a C_a és C_b tényezők nem ismertek, az intenzitás abszolút értékeit nem lehet kiszámítani. Ha ugyanazon vonal hitelesítési görbéjét egyszer ICP-vel „P", másodszor N_2O/C_2H_2-lánggal „F", mint atomrezervoárral meghatározzuk, a relatív emissziós érzékenységet (REE) kapjuk meg:

$$REE = \frac{[(I_e - I_b)/c_A]^P}{[(I_e - I_b)/c_A]^F} = \frac{[S_A^e]^P}{[S_A^e]^F} = \frac{[f_C(1 - f_I)(l_e/f_D)f_{Au}]^P}{[f_C(1 - f_I)(l_e/f_D)f_{Au}]^F} \tag{8}$$

Ez az összefüggés csak akkor érvényes, ha mindegyik esetben (P és F) ugyanazt a készüléket használjuk (C_a, C_b), és a spektrális sávszélességet, valamint az erősítést változatlanul hagyjuk, vagy a más körülmények között mért értékeket átszámoljuk. Ennek az összefüggésnek a vizsgálatára 10 olyan elemet választottunk ki, amelyeknek a kémiai tulajdonságai nagyon különbözőek. Ezáltal jobb áttekintést kapunk arról, hogy milyen mértékben lehet az REE értékeket becsülni.

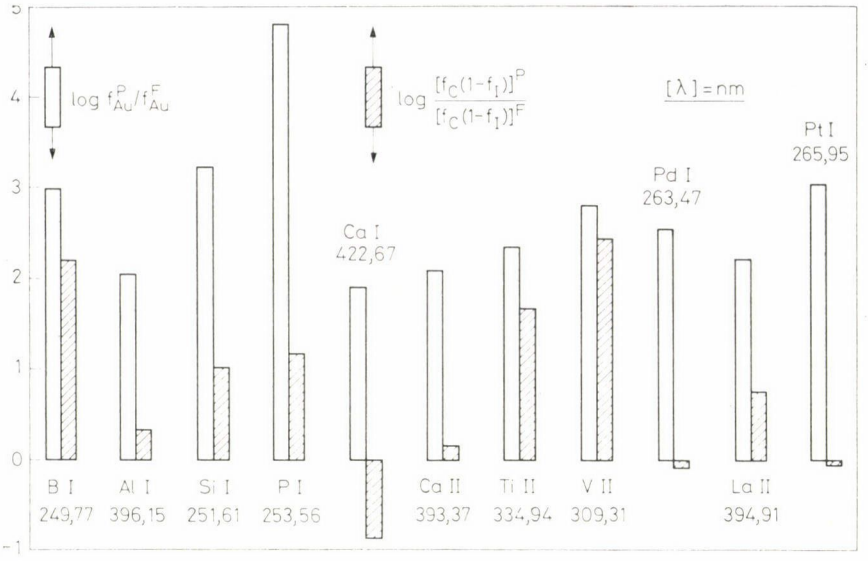
Kísérleti rész

A mérések kivitelezéséhez RADYNE—50 típusú generátorral táplált plazmaégőt és PERKIN—ELMER atomabszorpciós spektrométert (PE—300) kapcsoltunk össze optikailag [4, 5]. A spektrométerből kilépő sugárnyalábot négy tükör és két lencse segítségével először a plazma közepére, majd pedig a belépő résre fókuszáltuk. Az 1. ábrán feltüntetett térfogatáramok átlagértékei $Q_s = 2{,}7$ ml/perc, $Q_a = 1{,}5$ l/perc és $Q_p = 4{,}0$ l/perc, a porlasztó átlagos hatásfoka a következő higítási faktoroknak felelnek meg: $f_D^h = 4{,}6 \cdot 10^5$ és $f_D^c = 1{,}1 \cdot 10^6$. Az érzékenységet meghatározó konstrukciós hányadosok kevésbé különböznek: $l_e^h/f_D^h = 1{,}0 \cdot 10^{-6}$ és $l_e^c/f_D^c = 1{,}9 \cdot 10^{-6}$ cm. Ez abból adódik, hogy a növekvő magassággal (H) nemcsak a hígítás nő, hanem az effektív plazmaszélesség is. Az effektív szélességet közvetlenül lehet becsülni, ha koromképző szerves oldószereket vezetünk be az ICP-be. A láng-AES méréseknél az égőt 90 fokkal elfordítottuk a normál helyzetéhez képest, miáltal a láng szélessége csak 0,9 cm volt. A hígítási faktorral elosztva $l_e^F/f_D^F = 1{,}5 \cdot 10^{-6}$ jön ki, azaz a két plazmafaktor középértéke. Ezért a hányadosok hányadosát $[l_e/f_D]^P/[l_e/f_D]^F$ egynek tételezzük fel minden becslésnél.

Kísérleti eredmények és értelmezésük

Ebben a fejezetben az ICP-AES-nek, mint analitikai módszernek az előnyeit és hátrányait tárgyaljuk.

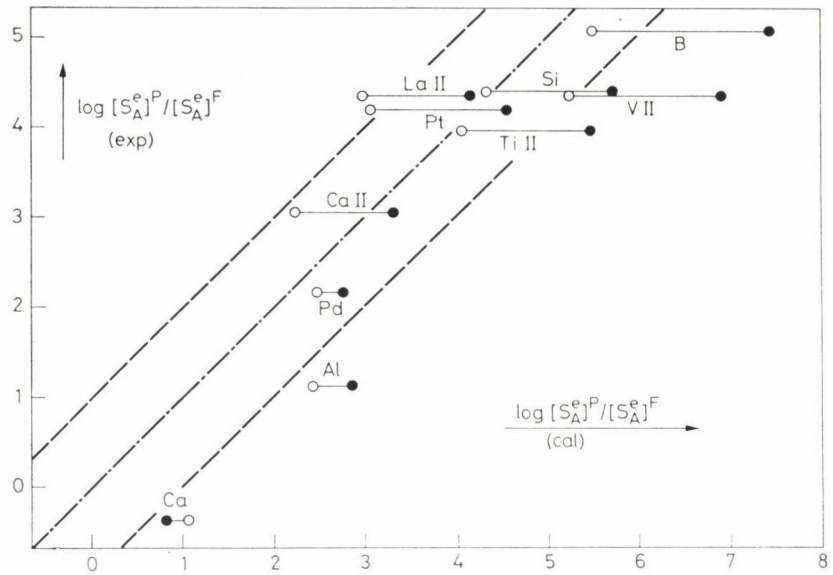
a) A relatív atomemissziós érzékenységet (REE) célszerű 3 részre bontani: 1) a konstrukciós érzékenységi hányados $(l_e/f_D)^P/(l_e/f_D)^F$ a plazma és a láng különböző geometriáját, és a hígítási faktorok különbségét fejezi ki. Középértéke $1 \pm 0{,}3$ volt az általunk használt berendezések és kísérleti körülmények között. Ennek ellenére ez a hányados erősen befolyásolható. A legfontosabb módszerek a hányados növelésére: a centrikus üvegporlasztónak ultrahangos porlasztóval való helyettesítése, ami a hatásfokot (f_N) kb. ötszörösére növeli, és a permet füstté való átalakítása, ami nagyobb térfogatáramot (Q_s) tesz lehetővé anélkül, hogy a plazma instabilissá válna. Az REE-nél a legnagyobb nyereséget a felső energiaszintnek a hőmérséklettel exponenciálisan



2. ábra. A relatív emissziós érzékenység (REE) faktorainak a logaritmusa

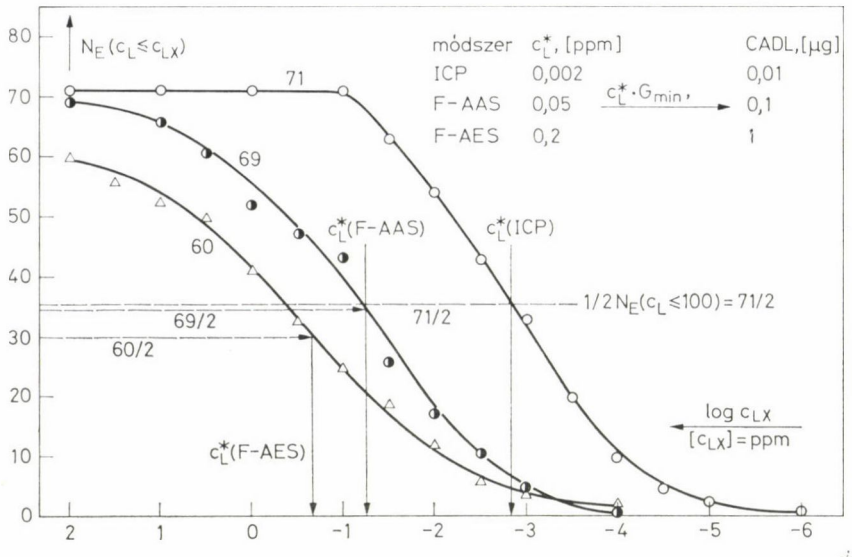
növekvő populációja hozza, amint ez a bal oldali szemléltető oszlopok hosszából a 2. ábrán rögtön feltűnik. A log (f^P_{Au}/f^F_{Au}) értéke mindig pozitív, és különösen akkor nagy, ha a felső energiaszint ($E_u - E_0$) különösen magas az alapszinthez viszonyítva (pl.: P I 253,56 nm). A kémiai érzékenységi hányados $[f_C(1-f_I)]^P/[f_C(1-f_I)]^P$ logaritmusa az atomvonalak esetében negatív értéket is vehet fel, ha az ionizáció erősen megnövekedik: $f_I^P \gg f_I^F$ (pl.: Ca I és Pd I). Ezzel szemben az ionvonalak kémiai érzékenységi hányadosának $[f_C \cdot f_I]^P/[f_C \cdot f_I]^F$ logaritmusa mindig pozitív és különösen nagy, ha a kérdéses elem nagyon stabilis monoxidot (AO) képez.

A számított és a kísérleti eredmények korrelációját a 3. ábrán szemléltetjük. Ha a mért és a számított értékek teljesen megegyeznének, akkor a pontoknak a középvonalra kellene esniük. A két párhuzamos szaggatott vonal a becsült hibaátvitelt adja meg. A hiba egyik fő oka, hogy az abszolút érzékenység nagymértékben függ az erősítéstől (f_a a 4. egyenletben), azaz az elektronsokszorozóra adott feszültségtől, amit a plazmás és lánggerjesztéses kísérletek között meg kellett változtatni. A közös feszültségekre való átszámítás lényeges hibaforrást jelent. A számított értéknél figyelembe kell venni, hogy a publikált disszociációfokok (6) szórása 30%, vagy még több is lehet. Az ionizáció-fokok pontos számítása sem lehetséges, mivel a szabad elektronok koncentrációi csak pontatlanul ismertek. Ezen nehézségek figyelembevételével a mért és a számított értékek közti korrelációt elfogadhatónak tekinthetjük. (Ezen az ábrán a foszfor hiányzik, mivel a mért REE-érték a mérési nehézségek miatt túl bizonytalan volt.) Az érzékenység és a kimutatási határ között a következő



3. ábra. A mért és számított relatív emissziós érzékenységek korrelációja

közismert összefüggés áll fenn: $c_L = k \cdot s(I_b)/S_A^e$ (k a statisztikus biztonságból adódó faktor). A különböző elemek kimutatási határa tudvalevőleg erősen változik egy módszeren belül is. Ahhoz, hogy egy adott módszer érzékenységét vagy kimutatási képességét egyetlen számmal ki tudjuk fejezni, meghatároztuk a karakterisztikus kimutatási határt (4. ábra). A görbék koordinátáit $N_E(c_L \leq c_{LX})$, log c_{LX} publikált kimutatási határokból számoltuk. $N_E(c_L \leq \leq c_{LX})$ azoknak az elemeknek a számát jelenti, amelyeknek a kimutatási határa $c_{L(k=3)}$ kisebb, vagy egyenlő a c_{LX} önkényesen választott kimutatási határnál. Ha pl. az ICP-AES módszert alkalmazzuk, 71 elemet tudunk kimutatni akkor, ha azok legalább 1 ppm koncentrációban vannak jelen. Ha az önkényes határt log $c_{LX} = -2$, -3, -4, illetve -5-nél húzzuk meg, akkor a kimutatható elemek száma 53, 32, 10, illetve 3-ra csökken. Azt a c_L-értéket, amelynél a kimutatható elemek száma éppen a felére csökken, karakterisztikusnak tekintjük a kérdéses módszerre. Ezek szerint az ICP-AES, a láng--AAS(F-AAS), illetve a lángfotometriás (F-AES) módszerek a következő karakterisztikus kimutatási határokkal jellemezhetőek: 0,002, 0,05 és 2 ppm. Ha ezeket a számokat a minimálisan szükséges oldatmennyiséggel megszorozzuk, és az eredményt kerekítjük, akkor a 4. ábra jobb felső sarkában megadott karakterisztikus abszolút kimutatási határokat kapjuk meg, ami 0,01, 0,1 és 1μg a három módszer esetében. Ez az ábra egyértelműen bizonyítja az ICP-AES módszer fölényét az érzékenység, illetve a kimutatási képesség tekintetében.



4. ábra. A karakterisztikus kimutatási határ (c_L^*) és a karakterisztikus abszolút kimutatási határ (CADL) összehasonlítása 3 analitikai módszerre. ICP: indukciós csatolású plazmaégős atomemisszió, F-AAS: láng-atomabszorpció és F-AES: lángfotometria

b) Ha a kémiai és az ionizációs zavaró hatásokat tárgyaljuk, először is tisztáznunk kell, hogy mit értünk ezen hatásokon. A mi értelmezésünk szerint kémiai és ionizációs zavaró hatások csak akkor lépnek fel, ha a kémiai disszociációfok és az ionizációfok a mérendő „m" és a hitelesítendő „h" oldatok esetén nem azonosak. A 4. egyenletből következik, hogy ezek a zavaró hatások nem léphetnek fel, illetve nem tudjuk őket kimutatni, ha a következő feltételek teljesülnek:

$$0{,}99 < f_C < 1, \text{ vagy } f_C^m/f_C^h = 1 \pm 0{,}01 \qquad (9)$$

$$f_I < 0{,}01, \text{ vagy } f_I^m/f_I^h = 1 \pm 0{,}01 \qquad (10)$$

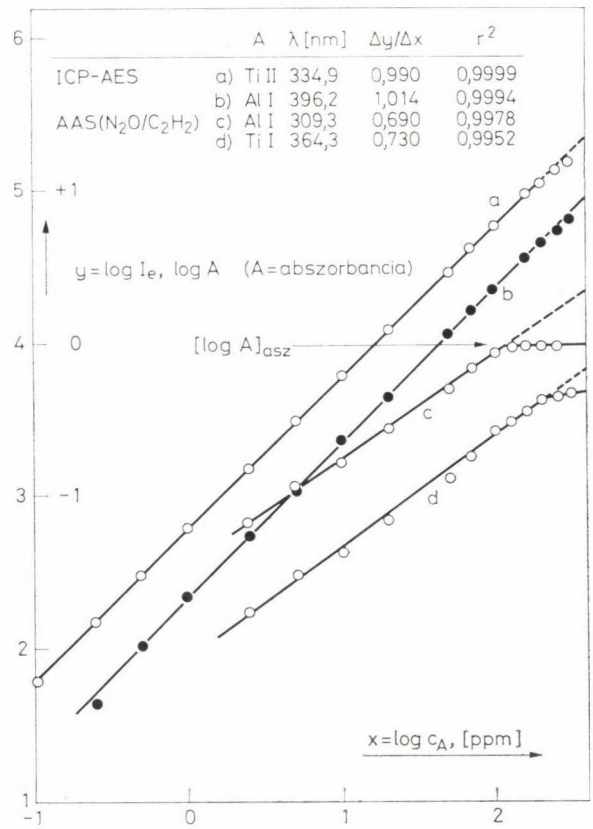
A 9. feltétel a plazmában sokkal könnyebben megvalósítható, mint a lángban, mivel az ICP hideg zónájában már csak a két legstabilisabb monoxid, a BO és a SiO van jelen. Ha az oxigénatom parciális nyomása 2,026 KPa 5000 K fokon $f_{C,B} = 0{,}57$ és $f_{C,Si} = 0{,}67$. 8000 K fokon ezekre is érvényes a $0{,}99 < < f_c < 1$ feltétel. Az ionizációs zavaró hatások pedig azért nem lépnek fel, mert az f_I^m/f_I^h feltétel a szabad elektronok nagy koncentrációja miatt automatikusan teljesül:

$$K_I = n_e \cdot n_i/n_a,\ f_I = n_i/(n_i + n_a) = 1/(1 + n_e/K_I) \qquad (11)$$

Mivel az f_I-függvényben az ionizációs vagy Saha-féle állandó, és a gyakorlatilag nem befolyásolható $n_e(cm^{-1})$ elektronkoncentráció szerepel, f_I konstans

értéket vesz fel. Ha pl. olyan oldatokat vezetünk a plazmába, amelyekben a könnyen ionizálódó fémek koncentrációja 0,001 és 0,1 M között ingadozik, az elektronkoncentráció a plazma meleg zónájában alig változik meg, mivel a bevitt fémek ionizációjából származó elektronkoncentráció $n_{e,A} = 6{,}02 \cdot 10^{20}/A/f_D^h$ csak $1{,}3 \cdot 10^{12}$—$1{,}3 \cdot 10^{14}$ cm^{-3}, ami az argon ionizációjából származó elektronkoncentráció ($n_{e,Ar} = 10^{16}$) mellett elhanyagolható.

c) A hitelesítési görbék széles tartományban lineárisan függenek a koncentrációtól, amit az 5. ábra szemléltet. A lineáris tartomány az ICP-AES esetén legalább 3 nagyságrendet fog át. Ezzel szemben a láng-AAS kvázilineáris tartománya kb. 1,5 nagyságrendre korlátozódik. Ezt alig lehet tovább bővíteni, mivel kis koncentrációknál a fotometrikus hiba, nagy koncentrációknál pedig a szórt fény és a fényforrások korlátozott intenzitása szab határt. Az ICP-AES esetében viszont a lineáris tartományt még tovább lehet azáltal



5. ábra. Hitelesítési görbék összehasonlítása. $\Delta y/\Delta y$: meredekség (ideális esetben 1), r^2: a korrelációs koefficiens négyzete (ideális korreláció esetén 1), I_e: emissziós intenzitás, $A = \log (I_0/I)$: abszorbancia, $[\log(I_0/I)]_{as}$: az abszorbancia aszimptótikus értéke és c_A: a mérendő elemkoncentrációja a betáplált oldatban [μg A/g oldat = ppm]

növelni, hogy a méréseket kisebb spektrális sávszélességnél végezzük. Ez a 3. és a 4. egyenletből következik, amelyek szerint a háttérintenzitás (I_b) négyzetesen, a vonalintenzitás (I_a) pedig lineárisan csökken, ha a spektrális sávszélességet ($\Delta\lambda_m$) csökkentjük. A kimutatási határok és a lineáris tartományok kiterjedése tehát annál kedvezőbb, minél kisebb a $\Delta\lambda_m$.

d) A szimultánanalízis fontos lehet bizonyos területeken, pl. környezetvédelmi és ipari gyártást szolgáló meghatározásoknál. A polikromátorok azonban nagyon drágák és nem flexibilisek. Az ICP-AES fejlődése emiatt valószínűleg inkább a programvezérléses monokromátorok irányában fog folytatódni.

Az ICP-AES hátrányai közül csak egyet elemzünk részletesebben, az atomabszorpcióval szembeni kisebb szelektivitást. Ahhoz, hogy a spektrometriai módszerek szelektivitását számszerűen jellemezhessük, feltételezzük, hogy az emissziós, illetve abszorpciós vonalak az egész rendelkezésre álló tartományban ($\lambda_{max}-\lambda_{min}$) szimmetrikusan oszlanak el. Ebben az esetben annak a valószínűsége, hogy a mérendő vonal és egy zavaró vonal átfedést mutat annál nagyobb, minél nagyobb a vonal félértékszélessége ($\Delta\lambda_{1/2}$), minél nagyobb az átlagos vonalszám elemenként (N_λ) és minél több elem van az analizálandó oldatban (N_E). Ez a valószínűség csökken, ha a vonalak nagyobb tartományban oszlanak meg:

$$P_N = (N_E - 1)N_\lambda \cdot \Delta\lambda_{1/2}(\lambda_{max} - \lambda_{min}) . \qquad (12)$$

Az elemek számát eggyel csökkentettük, mivel a meghatározandó elem saját magára nem válthat ki zavaró hatást. Ezt az összefüggést rozsdamentes acél példáján vizsgáljuk. A főkomponensek (Fe, Cr és Ni) mellett V, Mn, Cu és Mo is van jelen kis koncentrációban. Az elemzést gondolatban az atomabszorpció (AAS), az atomemisszió (AES), a röntgenfluoreszcens spektrometria (RFS) és a molekuláris abszorpció (MAS) módszereivel végezzük. Mivel a minta feloldásán kívül semmilyen kémiai műveletre nincs szükség az első három módszer alkalmazásához, az elemek száma 7. A molekulaabszorpciós spektrometria esetében az oldatot 8-hidroxikinolin olvadékával extraháljuk és a megszilárdult olvadékot kloroformban oldjuk. Ebben az esetben mind a 7 elem együtt marad, tehát $N_F = 7$. A többi szükséges adatot, valamint a számított valószínűséget $P_7(\lambda)$ és $P_2(\lambda)$ az 1. táblázat tartalmazza. Amint ebből a táblázatból kitűnik, az ICP-AES, és egyáltalán az AES még akkor is sokkal kevésbé szelektív, ha viszonylag jó monokromátort vagy polikromátort ($\Delta\lambda_{1/2} = \Delta\lambda_m = 5 \cdot 10^{-3}$ nm) alkalmazunk. Ennek főleg az az oka, hogy sokkal több emissziós, mint abszorpciós vonalat kell figyelembe venni.

Az AAS nagyobb szelektivitásához a grafitkályhás AAS nagyobb érzékenysége fontos előnyt jelent az atomabszorpció számára. E két fontos tulajdonság miatt az ICP-AES sohasem fogja az AAS-t nagyon visszaszorítani, bár a láng-AAS jelentősége az ICP-AES elterjedésével biztosan csökkeni fog.

1. táblázat

Négy analitikai módszer szelektivitásának összehasonlítása

módszer	$\lambda_{max} - \lambda_{min}$ (nm)	$\Delta\lambda_{1/2}$ (nm)	Nt	$P_1(\lambda)$	$P_2(\lambda)$	szelektivitás[b]
AAS	800—200	10^{-3}	5	5.10^{-5}	8.10^{-6}	„nsz": $P_2 \leq 10^{-4}$
AES[a]	800—200	5.10^{-3}	100	5.10^{-3}	8.10^{-4}	„sz": $10^{-2} > P_2 > 10^{-4}$
RFS[a]	1—0,02	10^{-3}	3	2.10^{-2}	3.10^{-3}	„sz":
MAS	800—200	10^{2}	1	1	0,2	„ksz": $P_2 > 10^{-2}$

[a] a műszeres vonalkiszélesedést kell behelyettesíteni a 12. egyenletbe
[b] „nsz" = nagyon szelektív, „sz" = szelektív, „ksz" = kevésbé szelektív

Összefoglalás

Az induktív csatolású plazmaégős atomemissziós spektrometria (ICP-AES) és a láng-atomabszorpciós spektrometria (AAS) teljesítőképességét hasonlítjuk össze. Az ICP-AES előnyei a láng-AAS-sel szemben: a) nagyobb érzékenység és kimutatási határ, b) kémiai és ionizációs zavaró hatásoktól való mentesség, c) a koncentráció és a mért intenzitás között 3—4 nagyságrenden belül észlelhető lineáris összefüggés és d) 20—30 elem szimultán meghatározásának a lehetősége. Az ICP-AES hátrányai a láng-AAS-sel szemben: a) a kis szelektivitás miatt vonalegybeesés léphet fel, b) több az üzemeltetési zavar és c) nagyobb a vételár és az üzemeltetés költsége. A meghatározás szelektivitását és érzékenységét részletesen tárgyaljuk. Különösen egy egyenletet elemzünk, amelynek a segítségével az ICP-AES és a N_2O/C_2H_2 láng-AAS módszerek viszonylagos érzékenységét becsülhetjük.

Summary

The analytical power of the inductively coupled argon plasma (ICP) atomic emission spectrometry (AES) and the atomic absorption spectrometry (AAS) are compared. The advantages of the ICP-AES with respect to the flame AAS are: a) an enhanced sensitivity and detection power, b) the absence of chemical and ionization interferences, c) a large linear working range of 3—4 orders of magnitude and d) the possibility of simultaneous determinations of 20—30 elements. The disadvantages of ICP-AES with respect to the flame AAS are: a lower selectivity causing spectral interferences, b) more working trouble and c) a higher cost price and higher operating costs. The selectivity and sensitivity of determinations is discussed in more detail. Especially, a formula is discussed, wich makes possible the estimation of the order of magnitude of the relative sensitivities of determinations by ICP-AES and N_2O/C_2H_2-flame AES.

IRODALOM

1. R. M. Barnes, "CRC Critical Reviews in Analytical Chemistry" **1978** (szeptember), p. 203—296
2. G. R. Kornblum, L. De Galan, Spectrochimica Acta **32B,** 71 (1976)
3. D. J. Kalnicky, V. A. Fassel, R. N. Kniseley, Applied Spectroscopy **31,** 137 (1977)
4. B. Magyar, F. Aeschbach, GIT-Fachzeitschrift für das Laboratorium **22** (9) 756 (1978)
5. F. Aeschbach, Diss. ETH Nr. 6404 (Eidgenössische Technische Hochschule, Zürich)
6. G. F. Kirkbright, M. Sargent, "Atomic Absorption and Fluorescence Spectroscopy" Academic Press, (1974).

Fordította:

Kultsár Emilia

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 357—364

A TÖMEGSPEKTROMETRIA ALKALMAZÁSI LEHETŐSÉGEI A LEVEGŐSZENNYEZETTSÉGI VIZSGÁLATOK TERÜLETÉN

GÁL TIBOR
a kémiai tudományok kandidátusa
(Pedagogická fakulta, Katedra fizike, Nitra, ČSSR)

Bevezetés

Az a tény, hogy a környezet fokozódó szennyezettsége modern korunk emberisége életének egyik komoly veszélyeztetőjévé vált, kezd átmenni a köztudatba. A levegő és vizeink szennyezettsége sokszor és sok helyütt, sajnos, már szemmel is jól látható, s vannak területek, ahol a levegő szennyezettségét minden egyes lélegzetvételnél közvetlenül is érezzük.

Természetes tehát, hogy világszerte előtérbe lépett a környezetvédelem problémája. Ennek megszervezéséhez azonban ismerni kell a szennyező komponenseket, minőségileg és mennyiségileg. A védekezés módszereinek megválasztása és hatékonyságának folyamatos ellenőrzése egyébként nem lehetséges, s esetenként a szennyezés forrása nem deríthető fel a szennyezésekre vonatkozó analitikai adatok nélkül.

Kialakulóban van tehát a környezetvédelem analitikája. A következőkben azzal foglalkozunk, milyen szerepet vállalhat a tömegspektroszkópia a levegő szennyezettségi vizsgálatokban.

A levegő szennyezéseit az összes kontinensekre vonatkoztatva — 300 millió családiház fűtése, 22 millió gyárkémény, 1 millió gőzmozdony, 230 millió gépkocsi, 150 millió diesel- és benzin motor, továbbá naponta 1 millió erdőtűz, sztyeppetűz és más tűzvész okozza. Az utóbbi néhány évtizedben megjelentek rádióaktív szennyezések is.

Csehszlovákia összterületéből 7000 km^2 felett a levegő túlszennyezett; ezen a területen kb. 3,8 millió lakos él [1]. Az ezzel kapcsolatos és általában a környezetvédelmi problémák megoldásának irányításával a Cseh Szocialista Köztársaság és a Szlovák Szocialista Köztársaság kormányai mellett működő környezetvédelmi tanácsok foglalkoznak, melyeknek a kormány, a minisztériumok és a kerületi nemzeti bizottságok képviselői a tagjai. E két tanács felett a Csehszlovák kormány környezetvédelmi bizottsága áll. A levegőszennyezettség területenkénti folyamatos vizsgálata a járási higiéniai állomások közvetlen feladata. Tanszékünk a nyitrai higiéniai állomással áll kapcsolatban, egyelőre városunk levegője porszennyezéseinek vizsgálatával kezdtünk foglalkozni.

Levegőszennyezés, főbb összetevők

A levegő szennyezőit gyakorlati analitikai szempontból is három csoportra osztjuk:

a) porszennyezés: szilárd szemcsék, átmérő $> 10\mu m$

b) aerosol szennyezők: szilárd szemcsék és folyadék cseppek, átmérő $< 10\ \mu m$,

c) gáz-szennyezők: gázok és 200 °C-nál alacsonyabb forráspontú vegyületek gőzei.

Ezek közül a gázszennyezők meghatározásának analitikai feladatai tekinthetők át legegyszerűbben. A lényeges káros komponenseket s azok maximális megengedett értékeit az 1. táblázatban adjuk meg. Az analitikai feladat

1. táblázat

Szennyező komponens	Maximális eltűrhető koncentráció (gm^{-3})	
	rövididejű (30′)	napi átlagos (24 h)
CO	6,00	1,00
SO_2	0,50	0,15
NO_2	0,30	0,10
NH_3	0,30	0,10
fenol	0,30	0,10
Cl_2	0,10	0,03
formaldehid	0,05	0,01
HF	0,03	0,01
CS_2	0,03	0,01
H_2SO_4	0,01	—
HNO_3	0,01	—
HCl	0,01	—
H_2S	0,008	0,008

kívánatos, hogy a megadott maximális értéknél még egy nagyságrenddel kisebb koncentráció kimutatható legyen.

A levegő porszennyezettségének elemzése esetében nagyon sokféle vegyület és ezeken belül igen sok elem meghatározására lehet szükség. Utcai porszennyezés vizsgálatára végzett első kísérleteink során [2] 48 elemet határoztunk meg mennyiségileg (2. táblázat), köztük pl. az összes lantanidát. (Az AAS jelzéssel ellátott koncentrációsadatokat atomabszorpciós módszerrel határoztuk meg, a többit szikraionforrás-tömegspektrométerrel.) Még sokkal bonyolultabb a helyzet, ha az egyes vegyületeket kell meghatározni. A szennyezettség esetében ezért az analitikai feladatot nem lehet olyan egyértel-

2. táblázat

Elem	Koncentráció Tömeg ‰	Tömeg — ppm	Elem	Koncentráció Tömeg ‰	Tömeg — ppm
Na	0,95		Y		9,3
	1,75 AAS		Zr		31,1
Mg	4,04		Nb		3,0
	4,06 AAS		Mo		1,6
Al	2,04		Sn		1,7
	1,87 AAS		Sb		1,5
Si	3,71		Cs		0,3
P		610	Ba		156
S	0,10		La		10,0
Cl	0,14		Ce		14,0
K	0,28		Pr		2,9
Ca	19,4		Nd		8,6
	18,4 AAS		Sn		3,2
Sc		3,7	Eu		0,4
Ti	0,12		Gd		2,1
V		16,5	Pb		0,9
Cr		8,9	Dy		1,2
Mn		130	Ho		0,45
		500 AAS	Er		0,78
Fe	1,38		Tm		1,9
	1,43 AAS		Yb		5,4
Co		3,7	Lu		0,4
Ni		7,7	W		10,0
Cu		39,3	Tb		472
		140 AAS			460 AAS
Zn		118	Bi		0,38
Br		1,6	Th		3,5
Rb		6,6	U		1,8
Sr		89,1			

műen definiálni, mint a gáz-szennyezőkkel kapcsolatban megmutattuk. A gyakorlati környezetvédelem is csak néhány maximálisan eltűrhető koncentrációt kísér figyelemmel (3. táblázat). Elemekre ugyan ismeretesek biológiai toxicitási határok (pl. [3] ezekből azonban nem következnek a levegőszennyezési tűrési határok.)

3. táblázat

Káros porszennyezés	Maximális eltűrhető koncentráció (gm^{-3})	
	rövididejű (30′)	napi átlagos (24 h)
összes por	0,50	0,15
korom (amorf C)	0,15	0,05
MnO_2	—	0,01
ólom	—	0,007
arzén (szervetlen vegyület)	—	0,003

Tömegspektrométeres módszerek levegőszennyezés-vizsgálatokra

A tömegspektrométeres analitika jellemzői a sokoldalúság (szilárd, folyékony, gáz állapotú; szerves és szervetlen anyagok; nagytisztaságú és sok — komponensű minták stb.) a nagy érzékenység és alacsony kimutatási szintek, a nagy felbontóképesség és az azonosítás viszonylagos egyszerűsége és megbízhatósága. A tömegspektrometria ezért a környezetvédelmi kutatásokban már ma jelentős szerepet játszik. Alford összefoglaló dolgozata — „A tömegspektrometria környezetvédelmi alkalmazásai" 1977-ben 272 az 1974—75-ben megjelent közleményre hivatkozik [4], következő összefoglalása 1978-ban már 349 publikációt sorol fel [5], melyek túlnyomórészt az 1976-os évben jelentek meg.

A tömegspektrometria alkalmazási lehetőségeit a légszennyezés-vizsgálatok területén a tömegspektrométeres analitika megfelelő módszerei szerint csoportosítva mutatjuk be.

Gázanalitika

A levegőt szennyező gázkomponensek száma aránylag nem nagy, problémát tulajdonképpen csak a meghatározandó koncentrációk esetenként nagyon alacsony szintje okoz.

Érthető tehát, hogy egyes komponensek meghatározására egyedi, de nagy érzékenységű módszereket dolgoztak ki, melyek többnyire klasszikus kémiai módszerek, sokszor nagy érzékenységű műszeres detektálással kombinálva.

A tömegspektrométeres gázanalitika előnye e módszerekkel szemben az, hogy egyetlen mérési folyamattal több — esetleg minden kívánt-komponens egyszerűen és gyorsan meghatározható és szükség szerint folyamatos elemzésre is alkalmas. Vegyipari, kohászati termelő üzemekben ezért gyakran alkalmazzák technológiai folyamatok elemzésére. A környezetvédelem számára azonban a készülék beszerzése költségesnek mutatkozott, pl. a levegő gázszennyezéseinek teljes elemzésére szintén alkalmas gázkromatográfokkal szemben.

Viszonylag olcsó gázanalitikai tömegspektrométerek megjelenése azonban reálissá teszi a tömegspektrometriás módszer versenyképességét ezen a területen is. A környezetvédelmi szerves analitikára növekvő mértékben igénybe vett gázkromatográf tömegspektrométer rendszerek tömegspektrométerei pedig eleve rendelkezésre állanak majd.

A közeljövőben ezért tanszékünkön elkezdtünk foglalkozni a teljes gázszennyezés-elemzés tömegspektrométeres megoldásának, a módszer fejlesztésének problémáival. Az 1 térfogat ppm kimutatási határ elérése reális lehetőség, meg kell vizsgálni a porkoncentráció gyakorlati lehetőségeit [6]. A fő

előny a nagy érzékenységű áttekinthető teljes elemzés gyors lehetősége: új, esetleg nem is várt szennyező komponensek detektálása és megbízható azonosítása.

Érdemes megemlíteni, hogy az Egyesült Államok haditengerészete atommeghajtású tengeralattjáróinak légtere ellenőrzését 1976-ban, az eddig használt gázkromatográfiás módszer helyett, tömegspektrométerrel dolgozó rendszerre bízta.

Szerves analitika

A gázkromatográfiás-tömegspektrometria (angol rövidítéssel GC/MS módszer) ma a legnagyobb teljesítőképességű módszer: egyesíti a gázkromatográfia nagy elválasztóképességét a tömegspektrometria nagy érzékenységével és kiváló azonosítási képességével, amit számítógépes kiértékelés alkalmazásával újabban tovább növeltek. Alkalmazási területe közismerten a szerves analitika.

Sikerrel alkalmazzák ma már felsorolhatatlanul nagy számú környezetvédelmi probléma megoldására. Teljesítőképességét jellemezze néhány példa a levegőszennyezések területéről.

Antwerpen egyik lakónegyedének légteréből egy hónapon át vett aeroszol mintában több mint 100 szerves komponenst tudtak kimutatni, köztük alifás szénhidrogéneket, policiklikus aromás szénhidrogéneket, ezek közül a nagy koncentrációban jelenlévők nitrogént is tartalmazó analogonjait, zsírsavakat, aromás karbonsavakat [8]. A koncentrációk kvantitatív becslése referencia-vegyületekkel való kalibrálással történt.

Nagyfelbontású tömegspektrométerrel Németország különböző iparvidékei és lakóterületei légterének porszennyezésében közel 300 különböző szerves vegyületet azonosítottak a 90 . . . 370 molekulasúly tartományban [9].

Környezetvédelmi szempontból különös figyelmet szentelnek egyes speciális vegyület-csoportoknak. Ilyenek pl. klórtartalmú szerves anyagok. Tokió légterében 26 mintavételi helyen klórozott szénhidrogének után kutatnak. Négy ilyen vegyületet azonosítottak, közel 1 ppb körüli koncentráció értékkel [10]. Térbeli eloszlásuk azonban eltérő volt, s meg lehetett állapítani, hogy a széntetraklorid vegyi üzemekből, a triklóretán és triklóretilén vegyipari és metallurgiai üzemekből származott. A perklóretilén nem volt kapcsolható valamely meghatározott ipari tevékenységhez.

Részletes vizsgálatokat végeztek gépkocsi kipufogó gázainak szervesanyag-tartalmára vonatkozóan [11], kutatják rákkeltéssel gyanúsított vegyületek jelenlétét települések légterében s korrelációt keresnek ezek koncentrációeloszlása és a rák mortalitási statisztikák adatai között [12], igyekeznek meghatározni a szmog-képződés során a légtérben lejátszódó reakciókat [13] stb. A kutatási irányok száma, a nyert adatok, információk mennyisége rohamosan növekszik.

Szilárd szervetlen analitika

A levegőszennyezés kutatás szempontjából nagy fontosságú annak ismerete is, milyen kémiai elemekből épülnek fel a különféle ipari, mezőgazdasági területek felett a levegőben jelenlevő aeroszol részecskék.

Ilyen elemzés céljára olyan módszert kell választani, amelynek segítségével igen kis mennyiségű porminták elemzése megfelelő pontossággal elvégezhető, éspedig lehetőleg sok komponens — a periódusos rendszer elemei túlnyomó többségének — egyidejű egyetlen minta előkészítéssel és mérési folyamattal történő meghatározásával, nem túlságosan eltérő kimutatási határral. Az utóbbi követelmény abból adódik, hogy különösen egy adott területen végzendő kutatás kezdeti stádiumában előre nem tudhatjuk, milyen elemekkel kell számolnunk. Lényeges szempont az is, hogy ezek az igényes elemzések aránylag rövid időn belül elvégezhetők legyenek. Ezeknek a követelményeknek együttesen jelenleg a szikraionforrás-tömegspektrometria felel meg a legjobban.

Tulajdonképpen csak a pontosság vonatkozásában lenne kívánatos javítani a módszer teljesítőképességét. A rutin elemzéseknél átlagosan várható pontosság jelenleg mintegy $\pm 30\%$, belső standard alkalmazása esetében. Különböző szuperpozíciós interferenciák egyes eseteiben lényegesen nagyobb hiba léphet fel, ha a hibaforrást nem ismerjük fel. A fotolemezen regisztrált tömegspektrumok helyes kiértékelése ezért meglehetősen nagy gyakorlatot igényel.

A legnagyobb hátrányt azonban a szikraionforrással dolgozó kettős fókuszálású tömegspektrométerek nagy beszerzési költsége jelenti. Ezért ezt a módszert a környezetvédelmi kutatások területén főleg helyzetfölmérési, első tájékozódási céllal alkalmazzák. A rutin ellenőrző elemzéseket a tömegspektrometriásan felderített és fontosnak tartott egyes elemekre egyéb módszerrel (pl. optikai spektroszkópiai módszerekkel) célszerű elvégezni. A szikraionforrás tömegspektrometria általános alkalmazhatóságának igazolására megemlítjük, hogy ezzel a módszerrel környezetvédelmi mintákban összesen 82 elem egyidejű meghatározása lehetséges [14].

A legtöbb alkalmazás különféle vízminták (felszíni vizek, ivóvizek, ipari szennyvizek stb.) szervetlen oldott komponenseinek meghatározásával foglalkozik. A levegő porszennyezésének elemösszetétele meghatározásáról 1970-ben jelent meg az első közlemény [15], a szerzők összesen 28 elemet határoztak meg.

Saját munkánk célja Nyitra légtere porszennyezéseinek elemi összetételét meghatározni (a szerves komponensek elemei: C, H, O és N nélkül) négy különböző ponton (Zobor oldal, központi útkereszteződés, cukorgyár, azbeszt-cement gyár). A vizsgálat összesen 48 elemre terjedt ki, az első elemzések során ennyit sikerült kimutatni. Főkomponensek a magnézium, alumínium,

szilícium, kalcium, kálium, titán, vas, továbbá a klór, kén és foszfor. Jelentős még a réz, cink, mangán és bárium koncentrációja is. Minthogy a mért adatok a porminták átlagos koncentrációját adják, nem adnak képet a szennyezettség mértékéről az egyes területeken, de az elemeloszlás maga is eltérő lehet e területek között; erre elsősorban a nyomelemek esetében lehet számítani. Azt találtuk pl. hogy a cirkónium, a bróm, az ón és lantanidák relatív mennyisége kisebb a zöld területen. Vizsgálatunk folytatásával megkíséreljük az egyes területtípusokra jellemző elemösszetétel meghatározását.

Megemlíthetjük még, hogy szilárd minták elem-koncentrációinak nagyon pontos tömegspektrométeres meghatározása lehetséges az ún. izotóphigításos módszerrel, a hiba $\pm 2\%$, vagy kisebb. Azonban alkalmazásához sajnos minden meghatározni kívánt elemből megfelelően dúsított mintára van szükség és monoizotópos elemeknél nem alkalmazható.

Összefoglalásként elmondható: A tömegspektrometria fontos módszer levegőszennyezés vizsgálatára, szerves szennyezők esetében pedig a legfontosabb. Ezen az analitikai területen is érvényes azonban az a tétel, hogy bármely feladat optimális megoldása csak több módszer együttes alkalmazásával érhető el.

Összefoglalás

Megmutatjuk, hogy a tömegspektrometria sikeresen alkalmazható a levegőszennyezettségi vizsgálatok mindhárom területén. A porszennyezések szervetlen komponensei és a gázszennyezők esetében a tömegspektrométeres módszerekkel végezhetjük el a leggazdaságosabban az összes szennyezők áttekintését: az „első" vizsgálatot, adott probléma felmérését. A szerves szennyezők meghatározása területén a rutin, a rendszeres ellenőrző vizsgálatokat is célszerű tömegspektrométerre — a gázkromatográf-tömegspektrométer rendszer nagy teljesítőképességének kihasználásával — bízni. Érveléseinket számos konkrét példával támasztjuk alá.

Summary

It is shown that mass spectrometry can be sucessfully applied in all three fields of air pollution investigations. In the case of the inorganic components of aerosols and the gas phase pollutants mass spectrometry provides the most economic method of survey analysis necessary to have a good grip on the overall situation. In the field of the organic pollutants even the routine control is most reasonabl made by the use of mass spectrometry, taking the advantage of the very powerful performance of the GC-MS systems. Our reasoning is supported by many illustrative examples.

IRODALOM

1. Gábriš, L., et. al.: Ochrana a tvorba krajiny a nauka o životnom prostredí, Príroda, Bratislava, 1979, 66.
2. Cornides, I.: „Spark Source Mass Spectrometry" in Physical analysis of airborn Particles, ed. M. Malissa,
3. Dulka, J. J., Risby, T. H.: Anal. Chem. **48,** 644 A. 1976
4. Alford, A.: Biomed. Mass Spectrom. **4,** 1. 1977
5. Alford, A.: Biomed. Mass Spectrom. **5,** 259. 1978
6. Cornides, I.: Gyakorlati tömegspektroszkópia, Műszaki könyvkiadó, Budapest, 1975. p.

7. WYATT, J. R. et al.: Proc. Am. Soc. for MS 24th Annual Conf. on Mass Spectrometry and Allied Topics. San Diego, 1976.
8. CANTREELS, W., VAN CANWENBERGHE, K.,: Atmos, Environ. **10,** 447. 1976
9. HERLAN, A.: Staub-Reinhalt. Luft, 35. 45. 1975
10. OKTA, T., et al.: Atmos. Environ. **10,** 557. 1976
11. BOYER, K. W., LAITINEN, H. A.: Environ. Sei. Technol. **9,** 1107. 1975
12. PELLIZZARI, E. D., et al.: Biomed. Mass Spectrom. **3,** 196. 1976
13. SCHETZLE, D.: Biomed. Mass Spectrom. **2,** 288. 1975
14. TAYLOR, C. E.: Int. Conf. Environ. (Proc.) **1,** 22. 1976
15. BROWN, R., VOSSEN, P. G. T.: Anal. Chem. **42,** 1820. 1970.

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 365—371

TÖMEGSPEKTROMÉTERES IZOTÓPADATOK GEOLÓGIAI ÉRTELMEZÉSÉNEK PROBLÉMÁI SZÉN-DIOXID-GENETIKAI VIZSGÁLATOK PÉLDÁJÁN

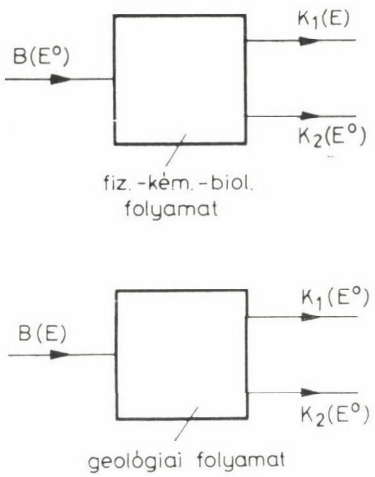
KECSKÉS ÁRPÁD
a kémiai tud. kandidátusa
IZSÓF KLÁRA
CORNIDES ISTVÁN*
a kémiai tud. kandidátusa
(Pedagogická fakulta, Katedra fizike, Nitra, ČSSR)

E dolgozat témája csak nagy jóakarattal tekinthető spektrokémiainak. A mérési adatok helyes értelmezése: ez mindenféle kutatás egyik legfontosabb problémája. Az viszont igaz, hogy a geológiai-geokémiai kutatások mérési adatainak túlnyomó részét spektrokémiai módszerekkel kapjuk, a geológiai értelmezés gondjaiban így elsősorban spektrokémikusoknak kell osztozniok a geológusokkal.

Esetünkben geológiai minták meghatározott (könnyű) eleme, esetleg elemei, két stabilis izotópjának koncentrációarányát mérjük azzal a céllal, hogy információt nyerjünk geológiai folyamatokról, esetleg azok paramétereiről, különösen pl. adott geológiai képződmény eredetéről, keletkezési mechanizmusáról. Ez az ún. izotópgeokémiai kutatási módszer lényegében a fizikai-kémiai-biológiai folyamatok vizsgálata jól ismert stabilizotópos nyomjelzési módszerének geológiai változata: mesterségesen dúsított izotóp alkalmazása helyett az izotópdúsítást (ill. hígítást) maga a vizsgált folyamat végzi [1] amint azt — vázlatosan — az 1. ábra szemlélteti. A B(E*), illetve B(E) belépő anyagok tartalmazzák a szóbanforgó elemet — az első esetben egyik izotópjában már dúsítva (E*), a másodikban természetes izotópösszetétellel — s azzal együtt részt vesznek a kérdéses folyamatban. Az információt a folyamatról az szolgáltatja, hogy az abban keletkező „kilépő" K(E) anyagok közül, melyikben vagy melyekben s milyen mennyiségben, találjuk a dúsított izotópot, illetőleg, hogy a kilépő anyagok melyikében jön létre izotópdúsulás (E*), illetve hígulás (E$^\circ$) és milyen mértékben. (A vázlaton — az egyszerűség kedvéért — csak egy belépő és két kilépő anyagot tüntettünk fel; valójában többnyire több anyag vesz részt a vizsgált folyamatokban.)

Például: mészkő kiválásánál vizes oldatából az oxigén nehéz izotópja (^{18}O) feldúsul a kiváló kalcium-karbonátban s ennek mértéke függ a folyamat

* Cím: 1037 Budapest, Mikoviny út 2/4

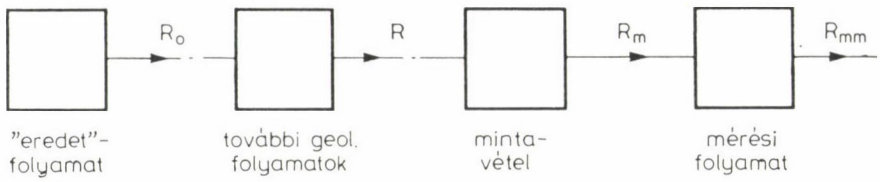


1. ábra

hőmérsékletétől. Ha tehát meghatározzuk adott mészkő minta („kilépő" anyag) oxigén izotópösszetételét és ismerjük (ha lehet, megmérjük) az eredeti izotóparányt (amit gyakorlatilag a túlnyomó mennyiségű „belépő" anyag, a víz határozott meg), kiszámíthatjuk a folyamat legfontosabb paraméterét, a hőmérsékletet. Ez a geológiai hőmérséklet-mérés elve; lásd pl. a Kárpát-medence első paleohőmérséklet-méréseit [2]. Ha valamely anyag eredetét nyomozzuk — tehát tulajdonképpen a legfontosabb folyamatot, mely kialakulására vezetett — megfelelő eleme izotóparányának értéke több-kevesebb biztonsággal választ ad a kérdésre — a probléma természetétől függően.

Méréstechnikai szempontból a feladat a minta kérdéses eleme izotóparányának nagypontosságú meghatározása. (Tipikus pontossági adat az izotópgeokémiában a $\pm$ 0,1‰ — egy tized ezrelék! — hibahatár: a geológiai izotópfrakcionáló folyamatok többnyire csak néhány ezrelék, maximálisan néhány százalék eltolódást hoznak létre az izotóparányban). Rendkívül fontos ezért nagyon gondosan megtervezni az egész mérési folyamatot, nehogy valamelyik lépésnél a pontosságot már veszélyeztető izotóptfrakcionáció lépjen fel. E lépések: a mintavétel — a minta kémiai előkészítése — a minta bevezetése az ionforrásba — ionizáció és az ionok kiszívása — az ionáramok mérése. Az el nem kerülhető frakcionálás hatását — pl. az ionforrásban — azzal küszöböljük ki, hogy párhuzamosan és pontosan azonos módon megfelelő standard izotópelemzését is elvégezzük s valójában a standardhez viszonyított relatív izotóparányeltérést határozzuk meg.

Minthogy azonban geológiai vizsgálatokról van szó tudomásul kell vennünk azt is, hogy a kérdéses eredet-definiáló folyamat és a mintavétel és mérési folyamat között pl. évmilliók teltek el, s ezalatt további olyan folyamatok játszódhattak le, melyek az eredeti információt hordozó izotóparányt meg-



2. ábra

változtathatták. A kapott adatok értelmezésénél ezért azt a teljes folyamatot kell értékelnünk, melyen a kérdéses anyag keletkezésétől kezdve a tömegspektrométer detektoráig, illetve kijelző egységéig végighaladt s amelynek a szorosabb értelemben vett mérési folyamat csak egy része. Ezt szemléltetjük a 2. ábrán. R_0 az „eredeti" izotóparány, melyet további geológiai folyamatok R-re változtatnak, R_m a vett minta és R_{mm} a minta mért izotóparánya.

Az értelmezés feladata az R_{mm} értékből az eredeti R_0 értékre visszakövetkeztetni és az eredetet meghatározni. Tulajdonképpen: a lehetséges R_{o1}, R_{o2}, R_{o3}, . . ., R_{on} értékek s az azok által reprezentált lehetséges eredet-lehetőségek közül R_{mm} ismeretében és egyéb geológiai stb. információk alapján választani.

Példaként lássuk a szlovákiai szén-dioxid-előfordulások eredetével kapcsolatos vizsgálatainkat. A 70-es években Szlovákia egész területéről származó mintegy 90, szén-dioxidban gazdag ásványvíz-forrás $^{13}C/^{12}C$ szénizotóparányát határoztuk meg. A PDB standardhoz viszonyítva megadott relatív szénizotóparányok (a ^{13}C izotóp gyakoriságára jellemző $\delta(^{13}C)$ értékek), $-6{,}5 \ldots -0{,}4‰$ értékek közé eső tartományába esnek, a következő csoportosítás szerint:

Terület	$\delta(^{13}C)$ értékek terjedelme	Előfordulások száma
1. Neogén vulkanikus terület	$-6{,}5 \ldots -3{,}0‰$	28
2. Középső Vágvölgye-Felső Nyitravölgye-	$-6{,}4 \ldots -3{,}0‰$	15
3. Felső Garamvölgye-Felső Vágvölgye	$-6{,}4 \ldots -3{,}1‰$	15
4. Északkelet-Szlovákia	$-4{,}9 \ldots -0{,}4‰$	29

Ez a csoportosítás többé-kevésbé önkényes. A neogén vulkanikus területekről (nagyrészt azok szélső részeiről) származó szén-dioxid-előfordulásokat egy csoportba soroltuk geológiai alapon, a további csoportosítás során pedig három földrajzilag összefüggő területet vettünk alapul. Az északkelet-szlovákiai terület elhatárolásánál figyelembe vettük a $\delta(^{13}C)$ adatok növekvő értékét, s egyben a mért mintáink közül kihagytunk 6 adatot, mivel izotóparányuk értéke a fenti csoportosítások terjedelmén kívül esik. Megjegyezzük, hogy az izotópadatok értelmezésénél ezekkel az esetekkel külön kell majd foglalkozni.

Mérési adataink értelmezésére abból kell kiindulni, hogy a Szlovákia területéről származó szén-dioxid-előfordulások nagy többségének (80%) az izotópösszetétele a $\delta(^{13}C)$ értékek $-6{,}5 \ldots -3{,}0‰$ terjedő szűk tartományába

esik, s ennek következtében eredetüket gyakorlatilag azonosnak tekinthetjük. A nagyobb mértékben különböző nehezebb szén-dioxid ($\delta(^{13}C) > -2{,}0‰$) csak Északkelet-Szlovákia területén található.

A szén-dioxid eredetét illetően a következő lehetőségeket kell figyelembe venni:

a) karbonátos kőzetek (metamorfózis), melyeknél a $\delta(^{13}C)$ érték $+1{,}0‰$ körül ingadozik,

b) szerves anyagok (oxidáció), ebben az esetben $\delta(^{13}C) < 20{,}0‰$,

c) a Föld köpenyének gázkomponensei (szén-dioxid-kipárolgás), ebben az esetben $\delta(^{13}C) = -5{,}0 \pm 2{,}0‰$, (vagy $-6{,}0 \pm 2{,}0‰$).

Figyelembe véve ezeket a potenciális szén-dioxid forrásokat és a mért izotópadatokat a szlovákiai szén-dioxid-előfordulások keletkezését a következő két modell alapján képzelhetjük el:

1) A karbonátos kőzetek metamorfózisa és a keletkező szén-dioxid különböző mértékben történő keveredése szerves eredetű szén-dioxiddal.

2) A Föld köpenyéből kipárolgott szén-dioxid különböző mértékben történő keveredése karbonátos eredetű szén-dioxiddal.

Elképzelhető azonban az is, hogy a felületre érkező gázban előfordul a szén-dioxid mindhárom összetevője. Meg kell említenünk, hogy a szén-dioxid-előfordulások eredetének problémája globálisan sem megoldott. Szlovákia területével kapcsolatban az izotópadatok alapján két elképzelést publikáltak.

Barnes és O'Neil 1976-ban közölt dolgozatukban [3], saját izotópos méréseikre hivatkozva, a szén-dioxid keletkezésével kapcsolatban a fenti modellek közül lényegében véve az elsőt fogadták el. Tekintettel arra, hogy a $\delta(^{13}C)$ átlagos értékét 0 körülinek vették nem volt szükséges a szerves eredetű széndioxid létezésének feltételezése. Dolgozatukban azonban Szlovákia területéről csak 18 adatot közölnek, s a valóságban ezek közül is 4 adat Csehország (Morvaország) területéről származik. További 6 előfordulás esetében pedig az adatok — tekintettel a vizsgált ásványvizek kicsiny szén-dioxid tartalmára — nem szolgáltathatnak megbízható eredményt. Ezért úgy gondoljuk, hogy a 8 megmaradt adatból nem lehet megbízható következtetésekhez jutni.

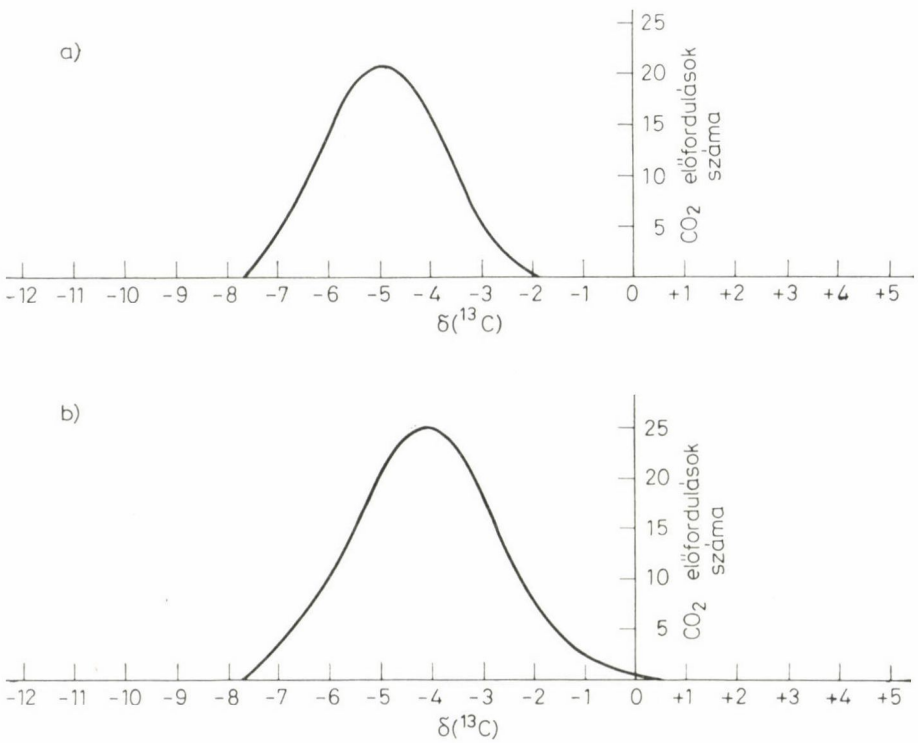
Saját adatainknak, melyeknek a száma csaknem egy nagyságrenddel nagyobb [4], csak egy kis részét tekinthetjük olyannak, amely a karbonátos eredetre utal. Másként fogalmazva a $\delta(^{13}C)$ adatok eloszlási görbéjének maximuma aránylag távol esik a $\delta(^{13}C) = +1{,}0‰$, illetve 0 értékektől, amelyek a karbonátos kőzetekre jellemzők. Ebből következik, hogy a szén-dioxid-előfordulások nagy többségénél vagy kis gyakoriságú könnyű karbonátokból való eredetet kellene feltételezni, vagy pedig olyan szekunder folyamatokat, amelyek a ^{13}C koncentrációját csökkentik.

Már 1974-ben felhívtuk a figyelmet arra, hogy a Kárpát-medencében a szén-dioxid eredetének problémája csak a magmatikus (juvenilis) eredetű szén-dioxid figyelembevételével oldható meg [5].

A $\delta(^{13}C)$ adatok eloszlási görbéjének elemzése alapján úgy gondoljuk [6], hogy az említett modellek közül a másodikkal a kapott kísérleti eredmények elfogadhatóbban értelmezhetők.

Az eloszlási görbe, ha eltekintünk az északkelet-szlovákiai területtől, jó megközelítésben normális, s ez a szén-dioxid homogén eredetére utal. Az eloszlás terjedelme jó megközelítésben megegyezik a juvenilis szén-dioxidhoz rendelt eloszlási terjedelemmel (3. a ábra).

Az északkelet-szlovákiai területen — természetesen a vulkanikus Slanské vrchy figyelembe vétele nélkül — az eloszlási görbe aszimmetrikus. A $\delta(^{13}C)$ értékek a pozitív oldalon szélesebb tartományban oszlanak meg, s egyben az egész görbe eltolódik a pozitív értékek irányában, aminek következté-

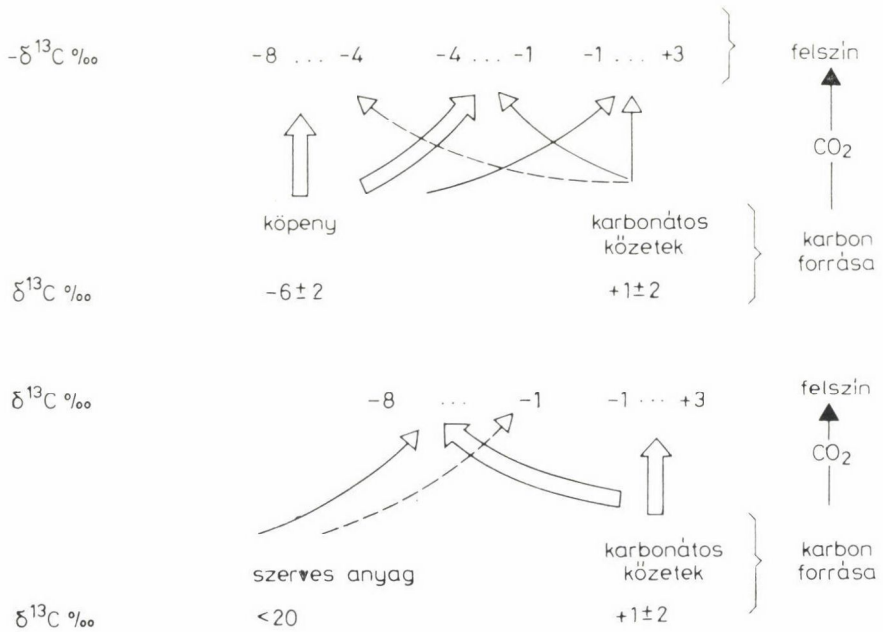


3. ábra

ben az átlagértékek is pozitívabbak lesznek. Ezek a sajátságok megjelennek akkor is, ha a két eloszlást egyesítjük (3. b. ábra).

Ennek magyarázatára kézenfekvőnek látszik feltételezni karbonátos eredetű szén-dioxid keveredését az eredeti szén-dioxidhoz, amelyet Szlovákia egyéb fent említett területein találtunk.

Az általunk javasolt modellt a 4. ábra felső részén szemléltetjük. Az ábra alsó részén pedig az előbbiekben említett második modell sémája látható. A két modell szerinti értelmezés között a lényeges különbség abban áll, hogy az általunk javasolt modell alapján, amely a köpenyből származó szén-dioxidot tételezi fel, az adatok nagy része egyszerűbben értelmezhető. A második modell alkalmazása esetében viszont az adatok nagy részének értelmezéséhez



4. ábra

vagy szekunder frakcionáló effektusok fellépését, vagy pedig két különböző forrásból származó széndioxid keveredését kell feltételezni. A saját modellünk szerinti értelmezéssel kapcsolatosan meg kell említenünk, hogy a Föld köpenyéből származó szén-dioxid létezését nem mindenki fogadja el, s annak $\delta(^{13}C)$ értéke sem elég megbízhatóan ismert.

Az általunk közölt értelmezéshez megpróbáltunk elképzelést kialakítani a karbonátos eredetű szén-dioxidnak a juvenilis eredetű szén-dioxiddal történő keveredéséről. Laboratóriumi modell-kísérletekkel próbáljuk követni a szén-dioxidot tartalmazó vizekben a teljes széntartalom izotópösszetételének változását kalciumkarbonát oldódása során. Az eddigi eredmények alapján úgy látszik, hogy a természetben talált $\delta(^{13}C)$ értékek változásai így értelmezhetők. További kísérletek elvégzése után esetleg bizonyítható lesz, hogy az ásványvizek szén-dioxid-tartalmának karbonátos eredetű része metamorfózis feltételezése nélkül is megjelenhet.

Összefoglalás

Szlovákia szén-dioxid előfordulásainak eredete problémájával kapcsolatban rámutatunk a tömegspektrométeres izotópgeokémiai vizsgálatok adatai értelmezésének nehézségeire. Két modellt mutatunk be a mélységi szén-dioxid keletkezésének mechanizmusára és saját adataink s azok gyakoriság eloszlási görbéinek elemzése alapján a juvenilis szén-dioxid szerepének fontosságát emeljük ki.

Summary

As an example the problem of the origin of the carbon dioxide occurencies in Slovakia is presented to point out the difficulties encountered when the results of the mass spectrometric isotope geochemical investigations are to be interpreted. It is shown that two mechanisms may be responsible for the occurence of deep seated carbon dioxide. By analyzing our data and their frequency distrubution curves the importance of the juvenile CO_2 in this area is emphasized.

IRODALOM

1. Cornides, I., Publ. Hung. Mining Res. Inst., **12,** 27. 1969.
2. Cornides I., Császár G., Haász J., Jocháné Edelényi E., Földtani Közlöny, **109,** 101. 1979.
3. Barnes, I., O'Neil, J. R., Internat. Symposium on Water-Rock Interaction Proc., 1974. Prague, p. 309.
4. Kecskés, Á., „A tömegspektrométeres izotópanalitika néhány problémája és alkalmazása a szlovákiai széndioxidelőfordulások genetikájának vizsgálatában." Kandidátusi értekezés, Budapest—Nitra, 1974.
5. Cornides, I., Kecskés, Á., Publ. Hung. Mining Res. Inst., **17,** 263. 1974.
6. Cornides, I., "On the origin of the deep seated carbon dioxide in the Carpathian Basin." Előadás a Tokyo Inst. of Technology Geokémiai Szemináriumában, 1980. március, kézirat.

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 373—380

A TÖBBSZÖRÖS IONIZÁCIÓ TÖMEGSPEKTROMÉTERES VIZSGÁLATA VÁKUUMSZIKRA ESETÉBEN

MORVAY LÁSZLÓ,* NOVÁKOVÁ PAVLA**
CORNIDES ISTVÁN***
a kémiai tud. kandidátusa

(Pedagogická fakulta, Katedra fizike, Nitra; ČSSR;*
*** ZSNP VVÚ Žiar nad Hronom, ČSSR)*

Bevezetés

Mint ismeretes a szikraionforrás-tömegspektrometriában elemek koncentrációjának meghatározására csaknem kizárólag egyszeresen töltött ionok spektrumvonalait használjuk. Ennek ellenére a kétszeres, illetve többszörös töltésű ionok szerepe sem elhanyagolható: egyrészt speciális elemzési feladatok esetében szükségünk van ezeknek az ionoknak a vonalaira, másrészt esetenként szuperpozíciós interferenciával zavarhatják bizonyos elemek meghatározását.

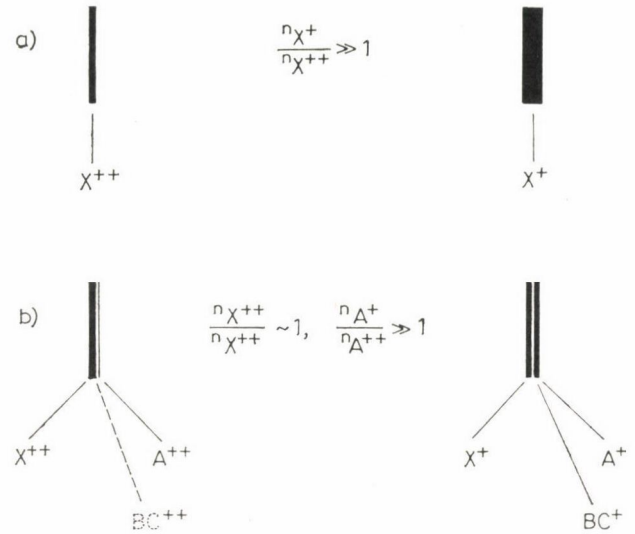
Az 1. ábrán két alkalmazási lehetőséget szemléltetünk.

a) Amikor a meghatározandó X elem monoizotópos, és a minta egyik fő komponense, az egyszeresen ionizált atom vonalának feketedése — rövid expozíciók esetében is — a telítési tartományba esik. Ilyenkor, ha a kétszeresen ionizált atomok gyakorisága lényegesen kisebb, ezeket használhatjuk fel az elemzés során (esetleg többi, többször ionizált atomok vonalait). Különösen hasznos ez a lehetőség, ha az adott főkomponenst belső standardként használjuk.

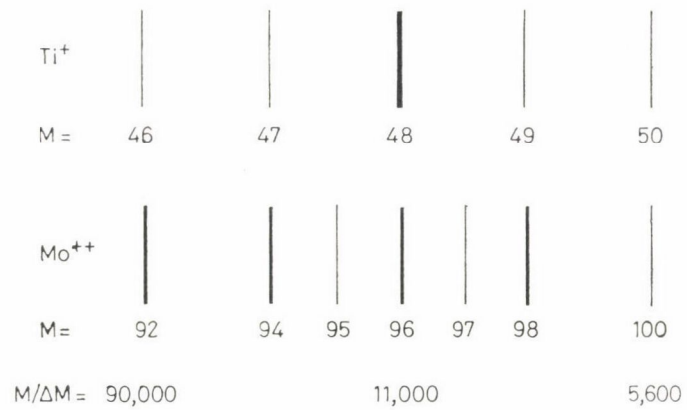
b) Még fontosabb alkalmazási lehetőség adódik akkor, ha valamely elemző vonalra más atom, illetve atomcsoport vonala szuperponálódik s zavarja az elemzést. Ha a meghatározni kívánt elem kétszeresen ionizált atomjainak száma megközelítőleg egyenlő az egyszeresen ionizáltak mennyiségével, és ez nem áll fenn a szuperponálódó ionok esetében, akkor az elemzést az X^{2+} ionok vonalai segítségével végezhetjük el.

Másrészt a kétszeresen ionizált atomok zavarhatják is az elemzést. Ha pl. molibdént is tartalmazó mintában kell titánt meghatároznunk, azt tapasztaljuk, hogy az utóbbi minden egyes vonalára szuperponálódik a kétszeresen ionizált molibdén atomok egy-egy vonala, és kellő felbontás ($M/\Delta M$) legfeljebb csak az 50-es tömegszámú Ti izotóp esetében remélhető (2. ábra).

*** Cím: 1037 Budapest Mikoviny 2/4



1. ábra



2. ábra

Az említett analitikai problémák jó megoldásához nélkülözhetetlen a vákuumszikrában lejátszódó ionizációs folyamatok, az egyszeres és többszörös ionizáció mértékét meghatározó fizikai-kémiai paraméterek pontosabb ismerete. Ezen túlmenően ilyen vizsgálatoktól a szikra-ionforrás működési mechanizmusának minden vonatkozásban jobb megértését várhatjuk.

Ezzel kapcsolatban célszerű figyelembe vennünk azokat a tapasztalatokat, melyeket az optikai spektroszkóposok az ugyancsak villamos kisülésekkel dolgozó fényforrások ionizációs folyamatairól összegyűjtöttek. Tudjuk, az optikai ionszínképek (a szikraspektrumok) alapvető felvilágosítással szolgáltak az atomok elektron szerkezetének felderítéséhez, gyakorlati jelentőségük

azonban sokkal kisebb. Míg a tömegspektroszkópiában a kulcsszerep az ionizált atomoké, az optikai spektroszkópiában a gerjesztett atomoké; az utóbbiakban az ionok másodlagos analitikai szerepe a tömegspektroszkópia kétszeres-többszörös töltésű ionjaira emlékeztet. Közös probléma ezért például az a tény, hogy az 1-gyel magasabb ionizációs állapotú atomok veszteséget jelentenek az 1-gyel alacsonyabb szinten ionizált atomok s az ezekkel végzett elemzés szempontjából. A villamos kisülés mechanizmusában az ionizált részecskék elsőrendű jelentősége pedig egyaránt nyilvánvaló és a két spektroszkópia tapasztalatainak egybevetése, az egyezések és eltérések értelmezése — mint általában is — kölcsönösen hasznos lehet.

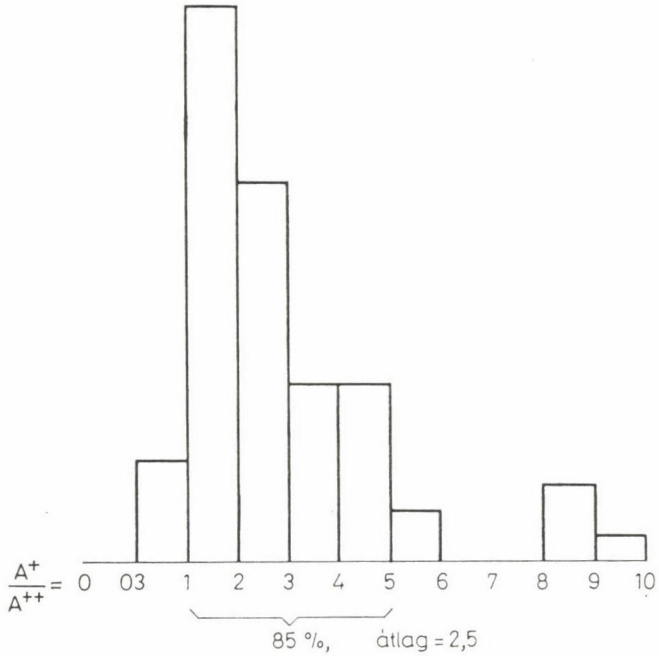
Kísérleti eredmények

Vizsgálataink első szakaszában először általános áttekintést akartunk szerezni a kétszeres töltésű ionok relatív mennyiségéről minél több elem esetében. Adatainkat ehhez korábban, egymástól nagyon eltérő időpontokban végzett rutinmérések lemezeinek kiértékelésével nyertük. Minthogy az ionforrás egyes paramétereinek értékei nem voltak azonosak s nem vizsgáltunk azonos mintákat szisztematikusan változtatott paraméter-értékekkel, ezek az eredmények valóban a mindennapi gyakorlatnak megfelelő képet adnak az A^+/A^{2+} arány alakulásáról. Ezen belül nem tanulmányoztuk részletesen a mátrixhatást sem, viszont külön vizsgáltuk a problémát fém-minták és különféle, sok fő komponensű préselt por-elektródok (pl. vízminták szervetlen anyaga, kőzetek) esetében, e két csoport eleve szembetűnő eltérései miatt.

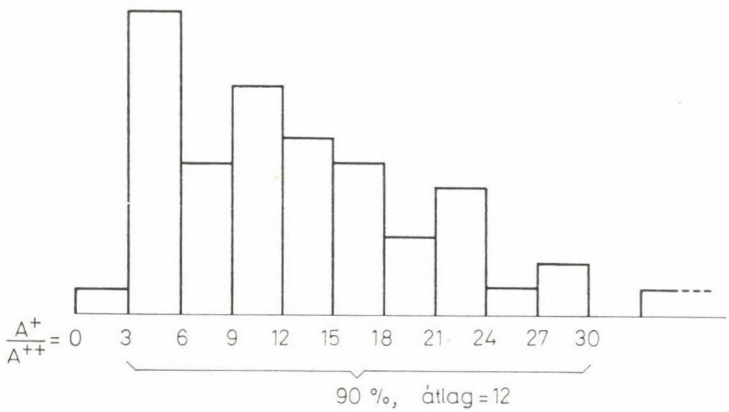
A 3. ábrán hat különböző fém-minta tömegspektrumából kimért, összesen 61 n_A+/n_A2+ adat hisztogramját ábrázoltuk. Mint látható az adatok kereken 85%-a esetében az egyszer és kétszer ionizált atomok aránya 1 és 5 közé esik, az átlagértéke 2,5.

A grafitos porminták esetében az adatok szórási tartománya jóval nagyobb: az adatok közel 90%-a 3 és 30 közé esik. Ezek átlaga kereken 12, tehát a porminták esetében lényegesen kisebb a kétszeres töltésű ionok relatív mennyisége (4. ábra). Minthogy ez az eltérés külön-külön megtalálható mindazoknál az elemeknél, melyek vizsgálatát mind fém-, mind por-elektródok esetében elvégeztük, az n_A+/n_A2+ arány eltérésének oka nem lehet az elemek két csoportja között eltérő ionizációs viselkedés. Magnézium esetében pl. 3,5, ill. 9,3 átlagértékeket kaptunk fém-, ill. por-elektródokkal. Kálium esetében a különbség még sokkal nagyobb. Az 1. táblázatban zárójelben a mért adatok számát is megadtuk.

Nyilvánvaló tehát, hogy a kétféle ionizációs viselkedést a kétféle elektródtípus eltérő fizikai vagy kémiai sajátossága okozza. Érdekes ebből a szempontból, hogy hasonló eltérést állapítottunk meg a nagytisztaságú fém-gallium mintából, illetve gallium-arzenid és gallium-foszid mintákból kapott gallium-



3. ábra



4. ábra

1. táblázat

	fémelektród	préselt porelektród
Mg^+/Mg^{++}	3,5 (5)	9,3 (17)
K^+/K^{++}	3,3 (5)	83,2 (6)

	Ga (fém)	GaAs	GaP
Ga^+/Ga^{++}	4,1 (11)	19,3 (3)	19,0 (4)

ionok esetében; e méréseink összefoglalása ugyancsak az 1. táblázatban található. Minthogy a galliumötvözeteket tömör félvezető elektródokként szikráztattuk, a kétszeres töltésű ionok viszonylag kis száma nem porból préselt elektródok esetében is jellegzetes lehet.

GREGORY, aki biológiai minták esetében figyelt fel a kétszeres töltésű ionok relatív mennyiségének csökkentésére, ezt mátrix-hatásként tekintette [1]. A tömegspektrométeres analitikában az egyes elemek érzékenységi együtthatójának a többi komponenstől (gyakorlatilag a főkomponenstől vagy főkomponensektől) való függését nevezzük mátrix-hatásnak [2], a megfelelő belső standard elemre vonatkoztatott relatív érzékenységi együtthatók esetében azonban a mátrix-hatás gyakran elhanyagolható, mint pl. grafitos porelektródok esetében [3].

A kétszeres (többszörös) töltésű ionok relatív mennyisége az egyszeres töltésű ionok mennyiségére vonatkoztatva („relatív érzékenységi együtthatójuk") szempontjából a fentiek szerint mátrixok két nagy csoportja különböztethető meg — noha nem egészen élesen, hiszen az n_A+/n_A2+ értékek két tartománya részben átfedi egymást. További méréseinkkel azt vizsgáltuk, mutatkozik-e ilyen „mátrix-hatás" e csoportokon belül is.

Fém-minták esetében mátrix-hatást bizonyítanak a sárgaréz, illetve a vas-alapú mintákkal kapott adatok eltérései. A 2. táblázatban a vasra, antimónra és ónra vonatkozó eredmények átlagát, valamint az összes mért n_A+/n_A2+ adatok átlagát hasonlítjuk össze e kétféle mátrixban. Az azonos elemekre eddig mért adatok száma azonban még nem elegendő, hogy a mátrixhatásra vonatkozóan részletesebb megállapítást tehessünk.

Grafitos por-minták esetére is elvégeztünk egy kísérletsorozatot. Káliumhidrokarbonát és bárium-karbonát mátrixban meghatároztuk káliumra az n_K+/n_K2+ arányt s ugyanezt megmértük olyan elektródok esetében is, melyek anyagában a bárium-karbonátot bárium-kloriddal cseréltük fel. A méréseket mindkét mátrixszal 6-szor végezve el a bárium-kloridos esetben minden alkalommal viszonylag kevesebb kétszeres töltésű kálium-iont kaptunk, vagyis nagyobb, átlagértékben 2,85 n_K+/n_K2+ arányt.

Megemlítjük még, hogy azonos mátrix esetében is végeztünk néhány vizsgálatot a kétszeres töltésű ionok relatív mennyiségének szórására. Nagytisztaságú gallium és gallium-arzenid minták esetében egyes elemekre (pl. Cu, Ga, Sn, Te) az n_A+/n_A2+ hányados hibája a 10 . . . 30% tartományba esett, az alkáliák s a higany esetében a hibák tartományát 50 . . . 120%-nak találtuk.

Az eddigi eredmények értékelése és értelmezésének lehetőségei

A kétszeres (többszörös) töltésű ionok analitikai alkalmazhatóságának kérdésére eddigi tapasztalataink alapján azt válaszolhatjuk, hogy adott mátrix és elemek bizonyos csoportja esetében — ti. ha az A^{2+} ionok relatív meny-

nyisége a 10 . . . 30% hibahatáron belül reprodukálható — az analitikai alkalmazás lehetséges a szikraionforrás-tömegspektrometria szokásos hibahatárain belül. A gallium-analitikával kapcsolatban példaként említett Cu, Ga, Sn és Te elemeken kívül ez volt megállapítható kőzet-minták ritkaföldfém elemeinek meghatározása esetében is [4]. Vannak viszont elemek (pl. a fentebb említett alkálifémek, higany) melyekre a válasz negatív a nem kielégítő reprodukálhatóság miatt, esetleg a mátrixtól függetlenül is. Egyelőre szélesebb körű tapasztalatok híján a problémát esetenként kell megvizsgálni, ellenőrizve adott elemek viselkedését az adott mintában (mátrixban); egyébként az, hogy szükség van-e egyáltalán a kétszeres töltésű ionokra, szintén a kérdéses mátrixtól függ.

Rendkívül hasznos lenne természetesen az is, ha ismernők azokat a folyamatokat, melyek a kétszeres (többszörös) töltésű ionok relatív mennyiségét meghatározzák. Fontos lépést jelentene ebben az irányban, ha értelmezni tudnók a mátrixok két nagy csoportja között tapasztalt lényeges különbséget. Biológiai minták (grafitos préselt elektródok) esetében EVANS és MORRISON szerint a viszonylag nagy mennyiségű, könnyen elpárologtatható és ionizálható elemek — Na, P, S, K, Ca — s ezek oxidjai mintegy pufferként hatnak, azaz lekötik a felhasználható energia jelentős részét és ezzel visszaszorítják a többi elem többszörös ionizációját [5]. Gregory is olyan hasonló mátrix-effektust tételezett fel, aminőt az optikai emissziós spektroszkópiában pufferekkel szokás ellensúlyozni, illetve kiküszöbölni [1].

A biológiai és más hasonló komplex minták (kőzet- és talajminták, vízminták szervetlen anyaga) másik jellegzetes eltérése a fémes mintáktól a nagyszámú cluster, illetve ezek ionjainak (komplex vagy „molekula"-ionok) megjelenése a tömegspektrumban. Minthogy ezeket részben éppen az előbb említett illékony elemek s az ezekkel a szóbanforgó mintákban együttjáró elemek (pl. halogének) atomjai, továbbá szénatomok alkotják, a két „anomália" (a fém-mintákkal ellentétben kevés kétszeres töltésű ion és sok komplex ion) párhuzamosan jelentkezik. Ez vetette fel közvetlen ok-okozati kapcsolat lehetőségének gondolatát a két jelenség között. Feltételezzük, hogy pl.

$$A^{2+} + B \rightarrow AB^{2+}$$

$$AB^{2+} + e \rightarrow AB^{+}$$

$$\text{ill. } A^{2+} + B_2 \rightarrow AB^{+} + B^{+}$$

reakciókkal képződnek az AB^+ (és AB^{2+}) komplex ionok s ezzel együtt — ennek következtében — csökken az A^{2+} ionok koncentrációja, nő az n_A+/n_A2+ hányados értéke [6].

Minthogy kétszeres töltésű ionok reakcióival eddig szinte egyáltalán nem foglalkoztak, a feltételezett reakciók energetikájával, mechanizmusával kap-

csolatban semmiféle információra nem támaszkodhatunk. Megemlítjük, hogy pl. az

$$Ar^{2+} + N_2 \rightarrow ArN^{2+} + N$$

vagy:

$$\rightarrow ArN^{+} + N^{+}$$

reakciók elméleti lehetőségét megállapították, de e reakciókat kísérleti úton nem igazolták [7].

Saját kísérleti eredményeink értelmezhetők a kétszeres töltésű ionok feltételezett reakcióival. A bárium-kloridos kísérlet esetében pl. a kétszeres töltésű kálium-ionok mennyiségének csökkenése együtt jár a KCl^{+} komplex ionok megjelenésével, a Ga^{2+} ionok relatív mennyiségének csökkenése a gal-

2. táblázat

Mátrix	átlag A^{+}/A^{++} értékek			
	Fe	Sb	Sn	összes adat
Sárgaréz	9,0	3,3	2,7	5,0
Vas	2,1	1,1	1,1	2,0

lium-arzenid és gallium-foszfid esetében (szemben a gallium fémben kapott értékkel) pedig a $GaAs^{+}$ és GaP^{+} komplex ionok mennyiségével. Pontosabb felvilágosítást a folyamatban levő további és mennyiségileg is kiértékelhető kísérleteinktől várunk.

Összefoglalás

Áttekintjük a kétszeres (többszörös) töltésű ionok alkalmazásának lehetőségeit a szikra-ionforrás- tömegspektrometriában, majd ezekre tekintettel ismertetjük kísérleti eredményeinket, a kétszeres töltésű ionok relatív gyakoriságára végzett vizsgálataink tapasztalatait. Rámutatunk arra, hogy ezek értelmezhetők a poliatomos komplexek képződésére vonatkozó egy korábbi feltevésünkkel: kétszeres töltésű ionok és semleges atomok reakcióival.

Summary

The possibilities of utilizing the doubly (multiply) charged ions in the spark source mass spectrometric analysis are surveyed, and in view of these applications an account is given of our results and experiences collected in the course of some investigations dealing with the relative abundances of the doubly charged ions. It is shown that these results may be interpreted on the basis of an earlier hypothesis concerning the formation of polyatomic clusters by the way of reactions of doubly charged ions and neutral atoms.

IRODALOM

1. GREGORY, N. L., Anal. Chem. **44**, 231. 1972.
2. CORNIDES I., „Gyakorlati tömegspektroszkópia", Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1975. p. 275.
3. CORNIDES, I., KADA, T. I., INTERAN—76 Proc. Prague, 1976. p. 43.
4. KADA I. T., GÁL T., XII. Magyar Színképelemző Vándorgyűlés előadásai, Salgótarján, 1979. p. 215.
5. EVANS, C. A., MORRISON, G. H., Anal. Chem. **40**, 869. 1968.
6. CORNIDES, I., „On the formation of polyatomic (cluster) ions in the spark plasma", előadás a Tokiói Műszaki Egyetemen, 1980. márc. Kézirat.
7. NEUSCHAFER, D., et al., Int. J. Mass Spectrom. Ion. Phys. **31**, 345. 1979.

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 381—389

SZÍNKÉPELEMZÉSI TAPASZTALATOK AZ IKERPLAZMA-GERJESZTÉSSEL I. AZ IKERPLAZMA SUGÁRFORRÁS KIFEJLESZTÉSE ÉS TULAJDONSÁGAI

MIKULÁS MATHERNY*
a kémiai tudományok doktora

HUBERTUS NICKEL**
*(*Katedra chémie HF—VŠT, Košice, ČSSR,*
***Institut für Reaktorwerkstoffe der KFA, 5170 Jülich, BRD)*

Az atom-emissziós színképelemzési analitikai eljárások kimutatási határa — több más tényezőn kívül — jelentős mértékben függ az egyes elemek atomjainak a plazmában eltöltött tartózkodási idejétől (τ). A további tényezők, mint a relatív vonalintenzitás vagy a kiválasztott gerjesztési folyamat, természetesen szintén lényegesen módosíthatják a kimutatási határt. Amennyiben a gerjesztési folyamatok komplex optimálása után a megvilágítási idő meghosszabbításával sem lehet a kimutatási határ értékét tovább javítani, csak egy mód áll rendelkezésre, éspedig a tartózkodási idő (τ) olyan irányú befolyásolása — növelése — hogy a relatív nettó vonalintenzitás (I_L) és az alapbesugárzás (háttérintenzitás I_U) aránya (I_L/I_U) növekedjen, többnyire egy telítési görbének megfelelően. Folyamatos növekedés nem várható, mert az alapsugárzás nem egyenes arányban növekszik a vonalintenzitással. A tartózkodási idő azonban csak úgy növelhető lényegesen, ha az egész gerjesztési folyamatot, beleértve a kísérleti berendezést is, lényegesen megváltoztatjuk.

A kimutatási határ értékének kiszámításánál a következő egyenlet (1) a mérvadó:

$$c_L = 10^{(Y_N - A_{X,R}) \cdot 1/B_X} . \tag{1}$$

Ha mindkét vonal Y-értéke háttérkorrigált, akkor

$$Y_N = \log (3 \cdot s_{I_{X,U}}) - Y_R \tag{2}$$

$$A_{X.R} = (Y_{X.L})_{c_X=1} - (Y_{R,L}) \tag{3}$$

A behelyettesítés után a c_L-érték számára a következő egyenlet adódik:

$$c_L = 10^{[\log(3 \cdot s_{I_{X,U}}) - (Y_{X,L})c_X = 1] \cdot 1/B_X} \tag{4}$$

és a c_L-érték függvénykapcsolatát a következőképpen lehet felírni [2]:

$$c_L = f\{s_{I_{X,U}};\ I_{X,L};\ 1/B_X\} \tag{5}$$

A (4) függvény paramétereinek tanulmányozásából kitűnik, hogy c_L-értéke a legnagyobb mértékben éppen $I_{X,L}$-értékétől függ, mivel $Y_{X,L} = \log I_{X,L}$. Egy bizonyos gerjesztési folyamatnál azonban az $I_{X,L}$-érték, a nettó intenzitásérték, elsődlegesen az abszolút vonalintenzitás függvénye. Az $s_{I_{X,U}}$-szórásérték általában két nagyságrenddel kisebb, mint $I_{X,L}$-értéke. Ha c_X-értékét ppm formában fejezzük ki a kimutatási határ értéke körülbelül 0,01 ppm lesz, amennyiben $B_X \div 1$ és ha $\div 1$. Ez azt jelenti, hogy a konkrét analitikai optimálásoknál az 1 ppm-nek megfelelő vonalintenzitások lehetőleg kb. 2,0 S értéket hozzanak létre.

A fotográfiai rögzítés feltételei

A fotográfiai úton rögzített színképeknél egy meghatározó feketedésértéket kell elsődlegesen számításba venni [3]: ez az úgynevezett optimális alapfeketedés $S_{\mu,opt}$, melynek értékét különböző módon lehet kiszámítani [3, 4]. Ha azonban csak kisebb mintamennyiség áll rendelkezésre, alkalmasabb Doerffel és Demuth [3] által ajánlott egyenlet (6):

$$S_{U,opt} = 0{,}183 \cdot \gamma . \tag{6}$$

Az $S_{U,opt}$ -értékeknél lényegesen nagyobb feketedésértékekkel nem tanácsos dolgozni, mert ezen határértéken felül lényegesen megnő az alapfeketedés szórása. Azáltal, hogy az alapfeketedés szórása (s_{I_U}) megnő, a kimutatási határ értéke is kedvezőtlenebb lesz. Nem szabad elfelejteni, hogy ha a vonalintenzitásértékek az alapsugárzás intenzitásértékeire korrigálva vannak, akkor a kimutatási határ értéke — a relatív vonalintenzitás mellett — s_{I_U}-értékétől is függ.

Ezzel szemben az $S_{U,opt}$-értékénél lényegesen kisebb alapfeketedésértékekkel ($S_U < S_{U,opt} \cdot 0{,}5$) szintén nem tanácsos dolgozni, mert ebben a feketedéstartományban a kimutatási határ kiszámítása már a feketedéstranszformációs műveletek bizonytalansága miatt teljesen problematikussá válhat. Ezen kívül, ha az $S_{U,I}$-értékek lényegesen kisebbek mint az $S_{U,opt}$-érték, az azt mutatja, hogy az alkalmazott gerjesztési és spektrográfiás módszerrel még meg sem közelítettük a maximális kimutatási határ eléréséhez szükséges munkafeltételeket.

Természetesen az optimális alapfeketedésértékek a γ-értékek függvényei és ezért az optimálási folyamatnak ez a része még a hullámhossz (λ) függvénye is. Ez a tény azonban a felhasználható feketedéstartományt ($eS = S_{LL} - S_{U,opt}$) korlátozza. Ha azonban a kimutatási határ számításánál, és az analitikai egyenesek felvételénél háttérsugárzással nem-korrigált Y-értékeket használunk, a kimutatási határ kiszámítása problematikussá válik. A nem-korri-

gált Y-értékekből szerkesztett analitikai kalibrációs függvények ugyanis csak ritkán lineárisak [5]. Ezekben az esetekben a (5) függvénykapcsolat a következőképpen alakul:

$$c_L = \{f\ I_{X,U};\ s_{I_{X,U}};\ I_{X,L};\ I/B_X\}. \qquad (7)$$

Az előbbiek alapján kitűnik, hogy csak olyan mértékű tartózkodási idő növelés vezethet az analitikai kimutatási határ előnyös változásához, amelynél lehetőleg magas $(S_X)_{c_x=1}$ értékek lépnek fel, de a feketedésértékek kisebbek, mint a S_{LL}-érték. Az alapfeketedésértékek ezzel szemben nem lehetnek lényegesen nagyobbak mint az $S_{U,opt}$-értékek.

A tartózkodási idő növelése a kísérleti berendezés változtatása révén

A tárgyalt problémát több úton lehet a kísérleti paraméterek változtatásával megoldani. Igen jó eredményekhez vezetett a homogén [6] és az inhomogén [7] mágneses térben égő egyenáramú ív alkalmazása. Eredményesnek bizonyult a mágneses tér felhasználása az ikerplazma [8] gerjesztés esetében is.

Mágneses terek színképelemzési alkalmazása

Az egyenáramú ív általánosan elismert előnyei mellett bizonyos hátrányos tulajdonságokkal is bír, amelyek nemcsak a kimutatási határ értékeit befolyásolják — de a koncentráció meghatározás relatív pontosságát is csökkentik. Főleg a plazmageometria idő- és térbeli változása befolyásolja döntő mértékben a fentemlített két igen lényeges, a színképelemzési módszert jellemző paramétert. A mágneses tér alkalmazása azért vezet pozitív eredményekhez, mert stabilizálja a plazmán átmenő áramokat. A vertikális elektród elhelyezésnél a konvekciós áramok stabilizálása a katód és az anód égésfolt vándorlását gátolja, ezáltal megnehezíti magának a plazmacsatornának térbeli áthelyezkedését is [9]. Ez a jelenség stabilizálja még a gerjesztett részecskék ívben való tartózkodását is. Ezáltal megnő a gerjesztett részecskék statisztikai tartózkodási ideje (modusza) a gerjesztett plazmában, ami analitikai szempontból főleg a kimutatási határ értékét befolyásolja kedvezően [10]. Mivel az ív vándorlásának stabilizálása a spektrográf résének időbeni egyenletesebb megvilágítását is biztosítja, a mágneses tér alkalmazása a koncentráció meghatározás relatív pontosságának növelését is elősegíti.

A mágneses terek alkalmazásának utolsó változata a váltakozóáramú ív kombinálása szinkronizáltan forgó mágneses térrel [11].

2.1.1 Homogén mágneses terek felhasználása színképelemzési feladatokhoz.

LEUSHACKE, LUMMERZHEIM és NICKEL [12—14] kutatásai bebizonyították, hogy a vertikálisan felállított elektródok körül elhelyezett elektromágnesek által indukált kvázi homogén mágneses tér lényegesen befolyásolja a plazmastabilitást. A plazmageometriát, a plazmagáz áramlását és a plazmacsatorna kiszélesedését interferometrikus megfigyeléssel is vizsgálták [15]. A legelőnyösebb színképelemzési paramétereket 3,2 10^{-2}T intenzitású térben érték el. A plazmacsatorna kiszélesedett, és stabilisabban sugárzott mint a mágneses tér nélküli plazmák. Gyorskamerás felvételekkel az úgynevezett „hélix" jellegű rotációt is kimutatták [16, 17]. Az optimált mágneses térben a vonal/zaj (I_L/I_U) viszony elemspecifikusan javult. Ez a javulás a háttérintenzitás (I_U) csökkenéséből és a bruttó vonalintenzitás (I_L) növekedéséből adódik. Az elemspecifikusságot főleg a háttérintenzitás hullámhossz szerinti változása okozza. Ezzel a jelenséggel párhuzamosan csökken a vonalintenzitásértékek ingadozása és a feketedésértékek szórása is. Szórásértékben kifejezve ez a javulás igen jelentős volt, mert a mágneses terek nélkül a szórás átlagosan ± 25 és $\pm 30\%$ értéket is elérte, ezzel szemben a 3—4 10^{-2}T intenzitású mágneses terek esetén ez az érték egészen $\pm 5\%$-ra is lecsökkent. Mágneses tér használata révén a kimutatási határ értékét kb. egy nagyságrenddel csökkenteni tudták [18, 19].

Az argon, hélium és az argon+oxigén védőgáz-atmoszférák alkalmazása esetén [20, 21] kimutatták, hogy argon atmoszférában a legkisebb (kb. 17 V) és hélium atmoszférában a legnagyobb (kb. 32 V) az egyenáramú ív égési feszültsége. Argon+oxigén keverék (4:1) használatakor az egyenáramú ív feszültsége a két említett határérték között (kb. 25 V) helyezkedett el és a a feszültségértékek ingadozása éppen ebben az esetben a legkisebb. A hőmérsékletmérések bebizonyították, hogy héliummal üzemeltetett plazmákban lépnek fel a katódtérben a legmagasabb hőmérsékletértékek (kb. 8000 K) és ez a plazma térbelileg a „legszűkebb". Az argonnal és az argon+oxigénnel üzemeltetett plazmák katódtérbeli hőmérséklete kb. 1000 L-nál alacsonyabb volt és ezek a plazmák lényegesen kiszélesedtek. Ezáltal főleg az atomvonalak axiális intenzitása [21] vált egyenletesebbé, ami a koncentráció meghatározás relatív pontosságát megnövelte.

SCHAEPS, NICKEL és MAZURKIEWICZ [22, 23] a homogén mágneses tér hatását még a színképelemzési adalékhatás szempontjából is vizsgálta. Kimutatták — a „hélix" karakterű plazmarotáción kívül —, hogy az egyenáramú ívben a nyomelemek párolgása nemcsak elemspecifikus, de ez a specifitás lényegesen befolyásolható a mágneses tér intenzitása által. A spektrokémiailag aktív adalékok alkalmazása még azzal a további előnnyel jár, hogy csökkentik az elemek fajlagos párolgáshőjét. A kb. 3 10^{-2}T intenzitású mágneses tér igen nagy mértékben kiegyenlíti az elemspecifikus kipárolgást; ami végső fokon a mátrixhatások kiküszöböléséhez vezet. Gallium-oxid adalék esetén, annak koncentrációjától függően a 7.5 eV-nál nagyobb ionizációs

potenciálú elemeknél a relatív vonalintenzitások lényegesen megnőttek. Még egy részleges elemspecifikus anódtérbeli nyomelemdúsulást is észleltek [23], ez a folyamat az említett optimális mágneses térben éppen az adalékok spektrokémiai aktivitásától függ. Ilyen módon a gerjesztés még tovább javítható más, aktívabb adalékok felhasználásával.

Inhomogén mágneses terek felhasználása színképelemzési feladatokhoz

Az inhomogén mágneses terek színképelemzési alkalmazása VUKANOVIĆ [7] kezdeményezéséből született. Ebben az esetben is az íváram stabilizálása volt az elsődleges cél, mert ezáltal lehet az analitikai paramétereket optimálni. Gyorskamerás felvételek [24] bebizonyították, hogy a homogén és az inhomogén mágneses terek különböző módon szélesítik ki a plazmákat és azáltal más-más mértékben és főleg elemspecifikusan változnak meg a színképvonalak intenzitásértékei. Az adott kísérleti berendezésnél azonban a plazmakiszélesedéshez még a vívő elektród nagyobb átmérője (∅ 10 mm) is hozzájárult. További kutatások [25, 26] kimutatták, hogy a színképelemzési aktív adalékok hatása a vonalintenzitásokra — a kifejezetten nagy ionizációs potenciálú elemeknél ($E > 8{,}5$ eV) — negatív. Az intenzitások csökkenése — az adott esetben — csakis a plazma átlag hőmérsékletének csökkenésével és az önabszorpció növekedésével magyarázható. Inhomogén mágneses terekben a vonalintenzitásértékek átlagosan 2—4-szeresen növekedtek és ennek megfelelően javultak a kimutatási határ értékei is [27]. A mágneses tér geometriai inhomogenitásának is igen nagy szerepe van a vonalintenzitások növelésében [28], valamint a plazma stabilizálásában.

KRASNOBAEVA, HARIZANOV és ZADGORSKA [29] a Scheibe-Rivas-féle oldatos módszerrel készített elektródok egyenáramú ívben történő gerjesztése esetén tanulmányozták a mágneses terek hatását. Kutatásaik bebizonyították, hogy a vonalintenzitásértékek aránya (I_1/I_0, I_1 vonalintenzitás a mágneses térben; I_0 vonalintenzitás mágneses tér nélkül) ebben az esetben is lényegesen nagyobb a katódként kapcsolt vivő elektród közvetlen közelében, mint az elektródok közötti térben és főleg az anódként kapcsolt ellenelektród közelében. Az ellenelektród helyettesítése egy anódként kapcsolt vivő elektróddal nem változtatott lényegesen a helyzeten. A vonalintenzitások növekedési tényezője még az elektródok közötti térben is átlagosan 3-as értéket ért el. HARIZANOV és ZADGORSKA [30] a Scheibe-Rivas eljárásnál még a védőgáz atmoszférák (argon, nitrogén, oxigén) hatását is vizsgálták. Mágneses tér és argon atmoszféra alkalmazása esetén volt a plazmahőmérséklet a legnagyobb (kb. 8370 K) és oxigén atmoszférában a legkisebb (kb. 8130 K). Ezzel szemben nitrogén atmoszférában — az argon atmoszférához képest — észlelt plazmahőmérséklet csökkenés (kb. 8370 K) még nem tekinthető jelentősnek. A fent említett szerzők [30] ezeket azzal magyarázzák, hogy argon atmoszférában

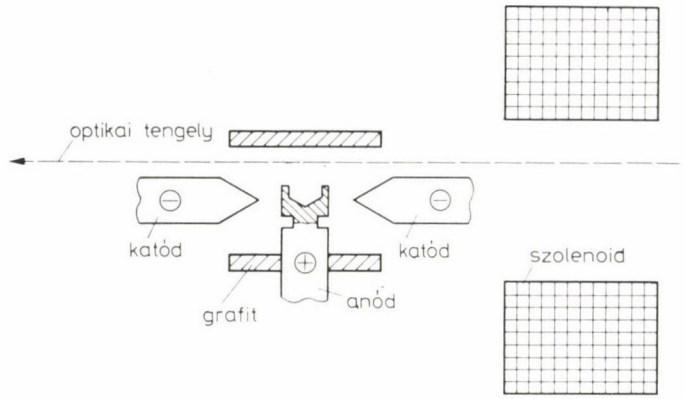
mágneses tér használatakor megnőnek a vonalintenzitások arányai, de megnő az elemek ionozációjának mértéke is. Mágneses tér alkalmazása nélkül viszont, a plazmahőmérséklet argon atmoszférában csak 7650 K és oxigén atmoszférában csak 7380 K. Ez a plazmahőmérséklet-különbség — még a szórásokat is beszámítva — már szignifikánsnak tekinthető. Ezeket az értékeket már az optimált mágneses térben érték el (kb. 0,9 T).

A különböző védőgáz-atmoszférák igen lényegesen befolyásolják az egyes elemek párolgási sajátságát [30], de kb. 60. másodperc expozíciós idő után beáll a teljes elpárolgás. Ezt az időt azonban a védőgáz típusa nem befolyásolja, ami azt bizonyítja, hogy a megnövekedett vonalintenzitásokat a plazmageometria változása mellett a megváltozott tartózkodási idő váltotta ki.

Az elektródok klasszikus vertikális elhelyezése még homogén vagy inhomogén mágneses tér felhasználásakor sem küszöböli ki a plazmagáz konvekciója által előidézett anyagcserefolyamatokat az elektródok közötti térben. Ebben az esetben a gerjesztett részecskék maximálisan csak 10 ms ideig tartózkodhatnak a gerjesztő térközben. Ezt a hiányosságot VUKANOVIĆ és munkatársai [7, 31] úgy próbálták kiküszöbölni, hogy a két elektródot (egy vivő- és egy ellenelektródot) horizontálisan helyezték el egy nagyobb átmérőjű grafit hengerben. Az ív bekapcsolása után keletkező plazma sugárzását az elektródok feletti térből képezték le. Ezáltal csökkent a diffúzió és a konvekció által előidézett transzport és megnőtt a gerjesztett részecskék tartózkodási ideje. Az adalékhatás vizsgálatakor kimutatták, hogy ezek lényegesen csökkentik a háttérsugárzást [7, 31]. A mágneses tér erőssége $1.2.10^{-2}$T volt az elektródközben és ez az intenzitás biztosította a plazmakiszélesedését, valamint részleges rotációját is. A további kutatások főleg a transzportfolyamatok vizsgálatára összpontosultak [31, 32). Már 10^{-3}T intenzitású mágneses térben is megfigyelhető a plazma rotációja, ami főleg az egy- és többtöltésű részecskék radiális transzportját gátolja (a grafit henger falának irányába). Ezáltal megnő a részecskék átlagos tartózkodási ideje a gerjesztett plazmában, ami növeli a színképelemzési kimutatási képességet.

Az ikerplazma gerjesztés inhomogén mágneses térben

A grafithengerben elhelyezett ív sugárforrást tovább módosították [8, 33]. A gerjesztett mintát, egy vertikális vivő elektródba helyezik, melyet a grafitcsőbe egy alsó fúraton keresztül dugnak be (1. ábra). A két ellenelektród horizontálisan és a vivő elektródra merőlegesen van elhelyezve. Ez az egység a grafithenger belsejében van elhelyezve. A vivőelektród és a henger anódosan, a két ellenelektród katódosan van kapcsolva. Ilymódon a két gerjesztő egyidejű bekapcsolása után iker ívpár keletkezik (2×10 A). Az ikerplazma berendezés kísérleti technikájának kidolgozása után, a kutatások főleg a hőmérsékletelosztás és a transzportfolyamatok tanulmányozására, a színképelemzési



1. ábra

adalékok hatásának vizsgálatára öszpontosultak [33—35]. Az elpárolgás az expozíciós idő 5. és 15. másodperce között éri el a maximumot és ennek a folyamatnak az elemspecifitása lényegesen csökken, adalékok hatására. Ezt a jelenséget a szerzők [35, 36] a felhevített grafithenger faláról való „visszapárolgás"-sal magyarázzák. Az adott esetben valószínűleg nem tisztán visszapárolgásról van szó, hiszen a henger fala legfeljebb a grafit szublimációs hőfokát (kb. 3700 K) érheti el. Ezáltal csak azok a komponensek (valószínűleg oxidok) párologhatnának el, amelyek disszociációs vagy párolgási hőfoka kisebb mint az említett határérték. Számításba kell azonban venni azt, hogy a grafitfalról a kondenzált részecskék éppen a plazma rotációja és a konvektív áramlás következtében „visszadiszpergálódhatnak". A tartózkodási idő mérésére [34] kifejlesztették a szerzők egy új berendezést, amellyel összahasonlították az ikerplazma [32] és a horizontális normálplazma [7] paramétereit. Ezek a mérések [34] bebizonyították, hogy az ikerplazmában a háromszor hosszabb tartózkodási idő (kb. 32 ms), mint egy olyan plazmában, amelyik egy grafithengerben két horizontálisan elhelyezett elektródok között jön létre. A mágneses tér intenzitásának optimálása adalékok nélkül és adalékokkal egyaránt azt mutatta, hogy egy olyan kicsiny intenzitású mágneses tér (kb. $1—5 \cdot 10^{-3}$T), amelyik már kiszélesíti a plazmát és csak minimális (úgynevezett lassú) rotációt idéz elő, optimális a vonalintenzitások növelésének szempontjából [36].

Végül meg kell még említeni, hogy az ikerplazmagerjesztést eredménysen felhasználták az oldatos színképelemzésben is [37—39] éspedig egy módosított Scheibe-Rivas eljárással. Különösen előnyös kimutatási határokat értek el, ha a mintához alkoholt adtak [37].

Az adalékhatás vizsgálatok [40, 41] gallium (III) oxid és a nátriumklorid esetében azt mutatták, hogy az optimális adalékkoncentráció (4% Ga_2O_3; 4—10% NaCl) nem függ a vizsgálandó elemektől és pozitívan befolyásolja mind a jel/zaj viszony alakulását, mind a vonalinzentitások növekedését.

Összefoglalás

Az atomemissziós színképelemzési eljárások kimutatási képességének javításához a klasszikus egyenáramú ívgerjesztés esetében elsősorban az elemzővonalak intenzitását kell növelni. Ez elérhető az ívplazma homogén vagy inhomogén mágneses térbe való helyezésével. A mágneses tér stabilizálja a plazma konvektív áramát és a gázáramlást. Kis intenzitású mágneses terek csupán kiszélesítik a plazmát, erősebb terek azonban spirális plazmaforgást is előidéznek. Ezáltal növekszik az atomok és ionok tartózkodási ideje a plazmában, ami javítja a kimutatási képességet. Ha a horizontális ikerplazma-kisülés grafitcsőben keletkezik, ez a plazma-gázkonvekciót tovább csökkenti, és ezáltal legalább egy nagyságrenddel növeli a gerjesztett részecskék tartózkodási idejét a plazmában.

Summary

In the classical D. C. arc excitation the improvement of the detectibility of atomic emission spectrochemical methods requires an increase of the intensity of analytical lines. This can be achieved by generating an arc plasma in a homogeneous or inhomogeneous magnetic field. The magnetic field stabilizes the convective current of the plasma and the gas flow. Low intensity magnetic fields only broaden the plasma, higher fields, however, cause also the helical rotation of the plasma. Thus the residence time of atoms and ions in the plasma increases an therefore the detectibility is improved. If the horizontal double plasma discharge occurs in a graphite tube this reduces further the gas convection in the plasma and by this the residence time of the excited species is increased with at least of an order of magnitude.

IRODALOM

1. Matherny, M.: Z. Anal. Chem. **271,** 101 (1974)
2. Flórián, K., Matherny, M.: Acta Chim. (Budapest), **94,** 183 (1977)
3. Doerffel, K., Demuth, E.: Spectrochim. Acta **24B,** 167 (1969)
4. Plško, E.: Proc. 15th Coll. Spectrosc. Int., Madrid 1969, Vol. Plenary Conferences, p. 127, Iberica, Madrid, Tarragona (1970)
5. Flórián, K., Lavrin, A., Matherny, M.: Chem. Zvesti. **28,** 760 (1974)
6. Lummerzheim, D., Nickel, H.: Z. Anal. Chem. **245,** 267 (1969)
7. Vakanović, V., Georgijević, N., Konjević, D.: Proc. 12th Coll. Spectrosc. Int., Exeter 1965, p. 193 (1966)
8. Simić, M., Vukanović, D., Vukanović, V.: Preprints 17th Coll. Spectrosc. Int., Florence 1973, Vol. 1, p. 371 (1973)
9. Decker, R. J., Eve, D. J.: Spectrochim. Acta **24B,** 411 (1970)
10. Laqua, K.: Preprints 17th Coll. Spectrosc. Int., Florence 1973, Vol. III — Supplement, p. 1 (1973)
11. Pavlović, B. V.: Kémiai Közlemények **52,** 75 (1979)
12. Lummerzheim, D., Nickel, H., Leushacke, D. F.: Proc. 15th Coll. Spectrosc. Int., Madrid 1969, Vol. IV, p. 19 Iberica, Madrid, Tarragona
13. Nickel, H., Leushacke, D. F., Lummerzheim, D.: Z. Anal. Chem. **247,** 196 (1969)
14. Nickel, H., 3rd Internat. Symposium „Rheinstoffe in Wissenschaft und Technik" Dresden 1970
15. Leushacke, D. F., Lummerzheim, D., Nickel, H.: Z. Anal. Chem. **250,** 225 (1970)
16. Leushacke, D. F., Nickel, H.: Preprints 16th Coll. Spectrosc. Int., Heidelberg 1971, Vol. I, p. 36 Hilger London (1971)
17. Bril, J., Duverneuil, G., Leushacke, D. F., Nickel, H.: Spectrochim. Acta **27B,** 35 (1972)
18. Leushacke, D. F., Nickel, H.: Spectrochim. Acta **26B,** 391 (1971)
19. Leushacke, D. F., Nickel, H.: Spectrochim. Acta **26B,** 409 (1971)
20. Nickel, H., Mazurkiewicz, M.: Z. Anal. Chem. **268,** 1 (1974)
21. Nickel, H., Mazurkiewicz, M.: Z. Anal. Chem. **268,** 9 (1974)
22. Nickel, H., Schaeps, R.: Z. Anal. Chem. **281,** 193 (1976)
23. Schaeps, R., Mazurkiewicz, M., Nickel, H.: Z. Anal. Chem. **281,** 273 (1976)
24. Vukanović, V., Georgijević, V. M.: Z. Anal. Chem. **225,** 137 (1967)
25. Vukanović, V., Georgijević, V. M.: Proc. 14th Coll. Spectrosc. Int., Debrecen 1967, Vol. 2, p. 525. Hilger London (1968)

26. VUKANOVIĆ, D., VUKANOVIĆ, V., GEORGIEVIĆ, V. M.: Proc. VIII. Int. Conf. Phenomena in Ionized Gases, Wiena 1967, p. 248
27. VUKANOVIĆ, V., GEORGIEVIĆ, V. M., VUKANOVIĆ, D., TODOROVIĆ, M.: Spectrochim. Acta **24B**, 555 (1969)
28. TODOROVIĆ, M., VUKANOVIĆ, V., GEORGIEVIĆ, V. M.: Spectrochim. Acta **24B**, 571 (1969)
29. KRASNOBAEVA, N., HARIZANOV, JU., ZADGORSKA, Z.: Spectrochim. Acta **24B**, 473 (1969)
30. HARIZANOV, JU., ZADGORSKA, Z.: Spectrochim. Acta **25B**, 29 (1970)
31. VULKANOVIĆ, V., SIMIĆ, M., VUKANOVIĆ, D.: Spectrochim. Acta **29B**, 33 (1974)
32. VUKANOVIĆ, D., SIMIĆ, M., VUKANOVIĆ, V., NICKEL, H., MAZURKIEWICZ, M., MÖLLER, H.: Physik of Ionized Gases — Contributions, Dubrovnik 1976, p. 355
33. NICKEL, H., MAZURKIEWICZ, M., MÖLLER, H., VUKANOVIĆ, D., SIMIĆ, M., VUKANOVIĆ, V.: Preprints 18th Coll. Spectrosc. Int., Grenoble 1975, Vol. II, p. 512. GAMS Paris (1975)
34. MÖLLER, H., MAZURKIEWICZ, M., NICKEL, H., SIMIĆ, M., VUKANOVIĆ, D., VUKANOVIĆ, V.: Contemporary Inorganic Materials 1976 — Proc. 2nd. Yugoslav—German Meeting on Materials Science and Development, Bled 1976, p. 121
35. VUKANOVIĆ, D., VUKANOVIĆ, V., SIMIĆ, M., NICKEL, H., MAZURKIEWICZ, M., MÖLLER, H.: Contemporary Inorganic Materials 1976 — Proc. 2nd Yugoslav—German Meeting on Materials Science and Development, Bled 1976, p. 125
36. VUKANOVIĆ, D., SIMIĆ, M., VUKANOVIĆ, V., NICKEL, H., MAZURKIEWICZ, M.: Spectrochim. Acta **32B**, 305 (1977)
37. KOVAĆIĆ, N., VUKANOVIĆ, V., VUKANOVIĆ, D., SIMIĆ, M., NICKEL, H.: Contemporary Inorganic Materials 1976 — Proc. 2nd Yugoslav—German Meeting on Materials Science and Development, Bled 1976, p. 129
38. VUKANOVIĆ, D., SIMIĆ, M., KOVAĆIĆ, N., VUKANOVIĆ, V., NICKEL, H., MAZURKIEWICZ, M.: Spectrochim. Acta **32B**, 445 (1977)
39. TRIPKOVIĆ, M., TODOROVIĆ, M., VUKANOVIĆ, V., SIMIĆ, M.: Euroanalysis III Dublin 1978 Abstracts 1978, p.
40. VUKANOVIĆ, V., SIMIĆ, M., VUKANOVIĆ, D., NICKEL, H., MAZURKIEWICZ, M.: Techn. Fizika — J. Eng. Physiis (Beograd), Vol. XVIII, p. 17 (1978)
41. VUKANOVIĆ, D., Kémiai Közlemények **52**, 91 (1979)

Fordította:

VECSERNYÉS LAJOS

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 391—400

AZ ÜREGKATÓDOS ÉS GLIMMKISÜLÉSES SUGÁRFORRÁSOK ANALITIKAI ALKALMAZÁSÁNAK LEHETŐSÉGEI

SERGIO CAROLI

(Laboratorio di Tossicologia, Istituto Superiore di Sanità, Viale Regina Elena 299, 00161 — Roma, Italia)

Bevezetés

Az optikai emissziós spektroszkópia (OES) újjáéledésének lehetünk tanúi az utóbbi évtizedben. Az OES módszerek alkalmazásának virágkora a két világháború közti időszakra esik. Az ezt követő évtizedekben általános volt az a nézet, hogy ezen a területen semmi igazán új nem várható. A kutatók és analitikusok érdeklődését a spektroszkópiának ebben az ágában az új sugárforrások felfedezése ébresztette fel, azok a lehetőségek, amelyekről bebizonyosodott, hogy alapvető fontosságúak. Ebből a szempontból kétségkívül az induktív csatolású plazmaégő (ICP) a legígéretesebb és legsokoldalúbb eszköz számos analitikai probléma megoldására, amely lényegében univerzális emissziós sugárforrásnak tekinthető.

Másrészt sajátságaik miatt a katódporlódáson alapuló sugárforrások is népszerűségre tettek szert, jóllehet a gyakorlatban nem terjedtek el nagyobb mértékben. Alkalmazási lehetőségeik lényegesen nagyobbak, mint az általában tartják.

Jelen munka rövid áttekintést szeretne adni a katódporlást hasznosító emissziós sugárforrásokról, hogy az alkalmazási területeket jobban meghatározhassuk. Amint általánosan ismert, ezek a sugárforrások két csoportra oszthatók: parázsfény (glimm-) kisüléses vagy síkkatódos és az üregkatódos (vagy vájtkatódos) sugárforrásokra. Mindkét sugárforrás ugyanazon fizikai törvényeken alapszik, de kivitelezésükben lényeges különbségek vannak. A következőkben ezek jellegzetességeit tárgyaljuk.

A kisülések mechanizmusa

Kisnyomású nemesgázzal töltött csövekben elhelyezett elektródok között egyenfeszültség hatására lejátszódó elektromos jelenségekkel már a múlt században foglalkoztak. HITTORF, CROOKES és GEISSLER neve minden kutató számára ismert. Mégis, a felismert jelenségek analitikai alkalmazására csak a 20. század kezdetén került sor.

Ismeretes, hogy az alkalmazott feszültség hatására a gáz ionizálódik a csőben az elektródok közötti térben három jól elkülöníthető zónát különböztethetünk meg. Ezek sorrendben: a Hittorf-féle sötéttér, a negatív ködfény és a pozitív oszlop zóna. Az utóbbi kettőt egy nem lumineszkáló tár választja el az első zónától.

A gerjesztés mechanizmusának alapjául szolgáló folyamatok ezekben a csövekben ma már lényegében jól ismertek, azonban számos részletkérdés még nem teljesen tisztázott. Talán nem tűnik feleslegesnek mindkét típusú sugárforrás főbb tulajdonságainak rövid ismertetése.

Ha a kis nyomású nemesgázzal töltött kisülési cső feszültség-áramerősség jelleggörbéjét megnézzük, láthatjuk, hogy a síkkatódos kisülésre jellemző tartományban az áramerősség kismértékű megváltoztatása csak a feszültség nagymértékű változtatása révén lehetséges (az ún. abnormális parázsfény kisülés). Nagyon sematikusan, amikor az elektródok között feszültségkülönbséget létesítünk, a katódból elektronok lépnek ki, amelyek a katódesés tartományán (gyakorlatilag a Hittorf-féle sötéttéren) való áthaladás során jelentősen felgyorsulnak. A gáznyomástól és így a részecskék közepes szabad úthosszától függően az elektronok bizonyos számú ütközést szenvednek, ily módon ionizálják a töltőgázat és további elektronokat hoznak létre, amíg az egyensúly ki nem alakul az ionok és atomok között. Az elektronok kinetikus energiájuk jelentős részét a negatív ködfény tartományában veszítik el, az anódon történő ütközés azonban nem károsítja az anód felületét. Másrészt pozitív töltésű gázionok gyorsulnak fel a katód irányában. Mivel tömegük sokkal nagyobb az elektronokénál, nagyobb kinetikus energiával rendelkeznek, mely a katódon ütközéskor részben hővé alakul, részben részecskéket taszít ki a katód felületéből. A hő és fizikai effektusok együttesen egy pseudogáz-állapotot hoznak létre. A porlódási folyamat során a katód atomjai a kisülési zónába jutnak, ahol elektronokkal és gázrészecskékkel ütközve gerjesztődnek, emittálják a karakterisztikus sugárzást, majd jelentős részük újra eljut a katódfalra.

Az üregkatódos kisülésben a gerjesztési mechanizmus alapjában véve azonos, azonban az elektródgeometria következtében a kisülés a katódüregbe koncentrálódik, ahol az elektronok faltól-falig terjedő oszcilláló mozgást végezhetnek. Ez a gyakorlatban azt jelenti, hogy a porladt anyag ismételten résztvesz a porlódási, gerjesztési, emissziós és leválási ciklusokban, tehát a porladt részecskék csak nehezen tudnak kilépni a katódüregből, s ily módon többször is résztvesznek a teljes folyamatban.

Mindkét gerjesztési módra a nagy stabilitású emisszió és a vonalszegény spektrumok a jellemzők, így az azonosítás könnyebbé válik. A színképvonalak profilja éles, mert nincs Doppler- és Stark-effektus és az önabszorpció elhanyagolható. A háttérsugárzás általában kis intenzitású és a mátrix, valamint a harmadik elem hatás csekély. Végül, a katódporlódáson alapuló sugárforrások

a vákuumspektrométerekhez közvetlenül csatlakoztathatók. Ily módon azok a metalloid elemek is nehézség nélkül meghatározhatók, melyek rezonáns vonalai a vákuumultraibolyában vannak.

A fenti tulajdonságok miatt ezek a sugárforrások előnyösen alkalmazhatók nemcsak a nyomelemek, hanem a főalkotók és a kísérőelemek széles koncentrációtartományban történő elemzésére, továbbá izotóparányok és felületi rétegek összetételének meghatározására is.

Az alkalmazási lehetőségek jobb megismerése céljából a következőkben a kétféle típusú kisülés legfontosabb alkalmazási területeiről adunk rövid összefoglalást.

A katódporlódást hasznosító sugárforrások alkalmazása

Síkkatódos kisülés

A sugárforrásban lejátszódó jelenségeket már korábban részletesen tanulmányozták. Alapvető megállapításokat tett a síkkatódos kisülés mechanizmusának vizsgálatában LANGMUIR és MOTT-SMITH Jr. [1], valamint HOLM [2], míg annak elméleti vonatkozásaival WEIZEL és OLMESDAHL [3], továbbá SEELIGER [4] foglalkozott. FISCHER [5] részletesen tanulmányozta a hőmérsékleteloszlást, mint az energiaeloszlás függvényét az üreg- és síkkatódos kisülésben H_2, He, Ne, Ar és levegő munkagáz alkalmazásánál. LAEGREID és WEHNER [6] a fémek porlódási arányát vizsgálta Ar és Ne munkagáz esetében. Azonban elsősorban GRIMM [7, 8] munkássága révén ismerték fel egészében a síkkatódos kisülés analitikai alkalmazásának lehetőségeit. A Grimm által kifejlesztett sugárforrás tulajdonképpen gátolt síkkatódos kisülés, mivel a csőalakú anód olyan mélyen benyúlik a síkkatód negatív ködfény tartományába, hogy a kisülés csak az anód belső fala és a katód szembenlevő felülete között történik (ezért szokás ezt „vájtanódos kisülésnek" is nevezni). A Grimm-féle lámpának sok gyakorlati előnye van. Nem csoda tehát, hogy felkeltette a spektrokémikusok érdeklődését és hogy a publikációk száma gyorsan növekszik e témakörben. DOGAN és munkatársai [9] részletesen tanulmányozták a kisülési paraméterek közti összefüggéseket, valamint a katód erózióját és elektromos viselkedését befolyásoló tényezőket. BOUMANS [10] ismertette a síkkatódos kisülés alkalmazási lehetőségeit vékonyrétegek vizsgálatában. JÄGER és BLUM [11] érdekes megfigyeléseket tett a minta porlódási jelenségeinek tanulmányozásában. WAITLEVERTCH és HURWITZ [12] értékelte a módszer felületvizsgálatában való alkalmazhatóságát. NAGANUMA és munkatársai [13] a felületi egyenetlenségnek, a szemcseméretnek és a falvastagságnak a katódporlódásra és a vonalintenzitásra gyakorolt hatását tárgyalták. A porladt katódanyag lerakodásával kapcsolatban jelenségeket BLUM és munkatársai [14] tanulmányozták. BRUHN és HARRISON [15] nyitott végű félhengeres kató-

dot használt, amikor a katód felületében az ionbecsapódás hatására létrejövő finomszerkezeti (mikrostrukturális) változásokat tanulmányozta a kisülési paraméterek függvényében (a katód speciális felépítése miatt a kapott információk érvényesek az üregkatódos sugárforrás esetében is).

A síkkatódos kisülés analitikai alkalmazásában Rollwagen és Ruthardt [16] az első, aki megbízható eredményeket ért el a S, As, és P fémekben történő meghatározásában. Újabban Dieudonné és Bril [17] a Grimm-féle lámpát acélok és ötvözetek Cu, Mg, Si, Zn, Ti és Ni-tartalmának a meghatározására alkalmazta. Jäger [18, 19] Au-tartalmat határozott meg Au-ötvözetekben. El Alfy és munkatársai [20] nemvezető porok főalkotóinak elemzésére a mintákat réz-, ezüst- vagy grafitporral keverte és nyomással pasztillázta. Az eredmények nagyon bíztatóak Si, Ca, Mg, Mn, Fe, Al, Ti, Na, K, P, S és C elemekre. Hirokawa és Takada [21] egyszerű eljárást közölt oldatok vizsgálatára, melynek során az oldatot a katódra cseppentettek és infralámpával beszárították. A módszer megfelelőnek bizonyult Sc, Y és ritkaföldfémelemekre. Rézalapú ötvözetek elemzését végezték Kruger és munkatársai [22], a főalkotók esetében jobb mint 0,2% relatív pontossággal. Human és munkatársai [23] jó megbízhatósággal és pontossággal vizsgáltak acélt, öntöttvasat, alumíniumot és aranyat. Ferreira és Butler [24] a síkkatódos kisülést alkalmazhatónak találta Au, Pt, Pd és egyes bázikus fémek ezüstben való meghatározására. Vandorpe és Durr [25] acél és nikkel nyomelemzésénél összehasonlította a síkkatódos módszerrel és a szikragerjesztéssel kapott eredményeket és az előbbi gerjesztési módot sokkal előnyösebbnek találta. Acéltermékek felületi rétegeinek összetételét vizsgálta Berneron [26]. Lowe [27] módosította a Grimm-féle lámpát, és egy nagy áramsűrűségű másodlagos kisülés segítségével fokozta a katódon porladt részecskék gerjesztését. Cough és Sullivan [28] ilyen típusú lámpát acélok, sárgaréz és más ötvözetek elemzésében alkalmazott jó eredménnyel.

Ez a néhány példa elegendőnek látszik arra, hogy képet kapjunk a sokféle analitikai problémáról, melyek megoldásában a síkkatódos sugárforrás előnyösen alkalmazható.

Üregkatódos kisülés

Kétféle típusú üregkatódos kisülési cső létezik, aszerint, hogy hűtéssel ellátott-e vagy sem. Mindkét típusnak ugyanaz az alapvető karakterisztikája. A forró üregkatódos kisülési csövek különösen akkor alkalmazhatók, ha a mintát intenzíven kell elpárologtatni, bár ez a Doppler-effektus miatt a vonalak kiszélesedését is okozza.

Az üregkatódos sugárforrást már a század elején ismerték és tanulmányozták. Paschen [29] üregkatód segítségével tudta az atomspektrumokat nagy pontossággal meghatározni. Később Frerichs [30] és Takahashi [31]

tovább mélyítette az ismereteket az üregkatód gerjesztési mechanizmusáról. SAWYER [32] részletesebben foglalkozott a kérdéssel és azt is pontosan leírta, milyen hatása van a kisülési paramétereknek és a katód anyagának a gerjesztési zónába szállított anyag mennyiségére. Néhány évvel később KONOVALOV és FRIS [33], valamint SCHÜLER és GOLLNOW [34] bebizonyították, hogy az üregkatódos kisülési cső analitikai célokra jól alkalmazható. A katódesés katódátmérőtől való függését LOMPE [35] tárgyalta. MAIERHOFER és munkatársai [36] megállapították, hogy nagy áramerősségű üregkatódos sugárforrással 2A áramerősség is elérhető. BRETON [37] olyan üregkatódot készített, mely mágneses mezőben és konstans axiális gázáramban működött. HELM és munkatársai [38, 39] elméleti modellt dolgoztak ki az elektromos tér eloszlására a katódesés zónában, valamint az áramerősség-feszültség karakterisztikára, és kísérletileg tanulmányozták az ún. „ingaelektronok" kisülésre gyakorolt hatását. A katódáram axiális eloszlását és a radiális potenciáleloszlást vizsgálta HOWORKA és PAHL [40]. Forró üregkatódot tanulmányozott STEINBERG [41] és BROEKAERT [42]. Az üregkatódos kisülés sokoldalúságát és széleskörű analitikai alkalmazását a sugárforrások felépítésének sokféleségével magyarázhatjuk. Így TÖRÖK és munkatársai [43—46] a kisülési paraméterek és a radiális hőmérsékleteloszlás tanulmányozására cseppfolyós levegővel hűtött kettős (iker) üregkatódos kisülési csövet alkalmaztak. Ez a nagyon speciális típusú üregkatód különösen használhatónak bizonyult stabil izotóparányok meghatározására. Átmeneti típusú üregkatódos csöveket először EICHHOFF [47] készített, és hangsúlyozta az olyan katódok előnyös voltát, melyekben a hőmérsékletet a tengely mentén tág határok között lehet változtatni. CZAKOW [48] olyan mikro-üregkatódot készített, mely a mikroanalízis követelményeinek megfelelt. PEVCOV és KRASZILSCSIK [49] olyan üregkatód készítését javasolta, melyben a párolgási és a gerjesztési zóna elkülönül. Az üregkatódos, kisülés és a mágneses tér együttes alkalmazása RUDNYEVSZKIJ és munkatársai [50] szerint az érzékenység és a pontosság jelentős növekedését eredményezte. Oldatok üregkatódos vizsgálatával [51] foglalkozott. DYULGEROVA és ZECHEV [52] a vonalintenzitások megnövekedését tapasztalta konikus furatú üregkatód esetében. ALIMONTI és munkatársai [53], valamint CAROLI és munkatársai [54] a Grimm-féle síkkatódos lámpa módosítását javasolták változtatható elektródtávolságú szétszedhető üregkatódlámpa formájában. Ezek a vizsgálatok tanúsítják, milyen lehetőségeket nyújt az üregkatódos sugárforrás a különböző területeken. Analitikai alkalmazására az irodalomban számos példát találunk. CSAJKA [55], FALK [50], KARJAKIN és munkatársai [57] halogéneket határozott meg különböző mátrixokban (oxidok, üvegek, kőzetek). GOLEB és BRODY [58], LEE és munkatársai [59], valamint ROSSI és MOL [60] U elemzését végezték ötvözetekben és ásványokban. ZAHAROV és munkatársai [61, 62] módszert dolgoztak ki radioaktív anyagok elemzésére és Am-ben szennyező elemeket határoztak meg. Fémek gáztartalmát ROSEN [63] és ZAKO-

RINA [64] vizsgálta. THORNTON [65], ANZANI és TRUCCO [66], valamint CAROLI és munkatársai [67] eredményesen alkalmazták acélok vizsgálatára. MILAZZO és SOFRANZI [68—71] kiemelték, hogy a módszer nemesfémes elemek meghatározására is alkalmas. Javasolták egy szétszedhető üregkatód lámpa használatát, mely megfelelőnek bizonyult As és I_2 elemzésére. OSZTROUMENKO [72] tanulmányozta a Cu gerjesztési folyamatait He és Ar munkagáz alkalmazásával. PEVTSOV és munkatársai [73] oldatok beszárított maradékában Al, Ga, In, Fe, Ca, Cd elemeket mértek. PICHUGIN és munkatársai [74] egyszerű eljárást dolgoztak ki porok közvetlen vizsgálatára és alkalmazták grafit szennyezőelemeinek meghatározására. PECOV és KRASZILSCSIK [75] a brikettált Be-oxid mintát a katódüregbe helyezték és annak Mn, Mg, Si és Ni-tartalmát határozták meg. Az üregkatódos kisülés alkalmazhatóságának általános problémáit fémek és üvegek elemzésében KNERR [76] tárgyalta. BROEKAERT [77—79] ritkaföldfémeket és Y-ot tartalmazó oldatokat, valamint szállópor minták Pb és Cd-tartalmát határozta meg. PRAKASH és HARRISON [80] biológiai mintákat elemzett, CAROLI és munkatársai [81] Pt-t és Ga-ot határoztak meg szerves anyagokban.

További megjegyzések

Az előző részben tárgyaltak alapján a kétféle típusú emissziós sugárforrás az 1. táblázat szerint osztályozható.

1. táblázat

A katódporlódásos sugárforrások fő változatai

	Glimm-kisülés	Üregkatódos kisülés
Típus	Normális Abnormális Grimm-féle (*)	Forró Vízhűtésű (átmeneti) Mélyhűtésű Mágneses mezővel kombinált

* Abnormális és gátolt

Fontos még megemlíteni a katódporlódásos sugárforrásokkal kapcsolatosan egy problémát, ti. a színképatlaszok kérdését, amelyek lehetővé teszik az összes emittált vonal azonosítását. Azok az atlaszok, melyek a hagyományos fényforrások alapján készültek ritkán használhatók, mert ezek spektrumai a katódporlódásos sugárforrások által előállított spektrumoktól jelentősen eltérnek. Ugyanakkor a színképek összetétele nemcsak az alkalmazott sugárforrás típusától, hanem a munkagáztól is függ. JUNKES és munkatársai [82], valamint CAROLI és munkatársai [83, 84] színkép-táblázatokat készítettek, melyek azonban a problémát nem oldották meg teljesen mert ahhoz megfelelő, részletes spektrumatlasz lenne szükséges.

Következtetések

A felsorolt példák egyrészt bemutatták a két sugárforrás teljesítőképességét és alkalmazási lehetőségeit, másrészt levonható belőlük az a következtetés, hogy a bennük rejlő lehetőségeket még nem aknáztuk ki teljes mértékben és még sok tennivaló van, hogy pontosan lássuk az összes alkalmazási területet.

A hagyományos sugárforrásokkal, az ívvel vagy szikrával összehasonlítva a katódporlódásos sugárforrások által emittált vonalak intenzitása nem mindig megfelelő. Ezt a hátrányt kiegyenlíti a nagyon kedvező jel-háttér intenzitásviszony, amely lehetővé teszi, hogy az elemzést a ppm nagyságrendben végezzük. Az elemzési mód egyszerű módosításai útján a kimutatási határt gyakran nagyságrendekkel lehet javítani, amint ezt egyes idézett szerzők hangsúlyozzák. Megállapítható továbbá, hogy az üregkatódos kisülés sok tekintetben jobbnak tűnik a síkkatódos kisülésnél. Amint említettük, az üregkatódnak sok különböző változata ismert, melyek alkalmazhatók egyes speciális analitikai problémák megoldására. A katód például tartályként szolgálhat, s így oldatok elemzését is végezhetjük. Lapos vezető anyagból álló mintákat közvetlenül vizsgálhatunk, ha azokat az üregkatód hengeres részének (mely grafitból vagy más megfelelő anyagból készül) végén helyezzük el. Ha az elemzés gyorsasága nem alapvető feltétel, az üregkatódot magából a vizsgálandó ötvözetből lehet készíteni. Megfelelő kötőanyaggal keverve porból is készíthető a katód, vagy a szemcsézett mintát elhelyezhetjük a hordozókatódban és így is elvégezhető az elemzés.

Az üregkatódnak azonban nemcsak a sokoldalúság az előnye. Úgy tűnik, az intenzitásarányok reprodukálhatósága is jobb, amint ezt Caroli és munkatársai [85—88] megállapították. Ez, valamint az a tény, hogy a porlódás és a porladt részecskék újralerakódása állandó folyamat, amely megnöveli a részecskék tartózkodási idejét a katódüregben, alapfeltételei a nyomelemzésnek. A síkkatódos kisülés is kedvező tulajdonságokkal rendelkezik, így például gyorsasága és egyszerűsége miatt választási lehetőségként jöhet számításba ötvözetek mikro- és makroösszetevőinek elemzésére. Hátránya ennek az eljárásnak, hogy oldatok vizsgálatára nem alkalmazható.

Összefoglalva megállapíthatjuk, hogy az üregkatódos kisüléssel mindazokon az alkalmazási területeken, amelyek a síkkatódos kisülés jellegzetes alkalmazási területei is, egyenértékű eredményeket lehet elérni, miközben az elemzés relatív hibája kisebb és az elérhető kimutatási határ alacsonyabb. Emellett az üregkatódot számos más területen is előnyösen lehet alkalmazni.

A 2. táblázat összefoglalja a két módszer alkalmazhatóságát.

A katódporlódásos sugárforrások kiváló tulajdonságait más nem az OES területéhez tartozó példákkal is lehet demonstrálni. Alig kell hangsúlyozni, hogy az üregkatód kedvező sajátságai tették lehetővé az atomabszorp-

2. táblázat

A síkkatódos és az üregkatódos kisülés alkalmazhatósága különböző típusú minták vizsgálatánál (x, gyenge; xx jó; xxx kitűnő)

	Alkalmazhatóság				
	Ötvözetek Fémek	Szemcsék Porok	Oldat bepárlási maradék	Izotóp-arányok	Felületi összetevők
Sikkatódos kisülés	xxx	xx	x	xx	xxx
Üregkatódos kisülés	xxx	xx	xxx	xxx	xxx

ciós spektrometria születését és fantasztikus növekedését; a síkkatódos kisülésnek pedig nagy perspektívája lehet a tömegspektrometriában.

A jövő kutatásaiból nem hiányozhat ezeknek az emissziós fényforrásoknak továbbfejlesztése, és a gyakorlatban való még szélesebb körű alkalmazása, elsősorban a biológiai eredetű anyagok nyomelemvizsgálatában.

Összefoglalás

A dolgozat áttekintést ad a glimm-kisülés és az üregkatódos kisülés sajátosságairól és analitikai alkalmazásuk lehetőségeiről. Rövid bevezetés után a nevezett sugárforrások emissziójának elvi kérdéseit tárgyalja, majd a legfontosabb alkalmazási területeket vizsgálja. Megállapítható, hogy mindkét sugárforrás nagyon sokféle analitikai probléma megoldására használható. Az üregkatódos eljárás valamivel sokoldalúbbnak és reprodukálhatóbbnak bizonyul, mint a glimmkisüléses módszer.

Summary

A survey is presented on the properties and analytical capabilities of the glow discharge and hollow cathode sputtering source. After a brief introduction devoted to the basic principles of emission in these radiation sources, the main applications described in literature are reviewed. The conclusion is drawn that both emission sources are capable of solving analytical problems of very different origin. The hollow cathode is shown to be to a certain extent more versatile and reproducible than the glow discharge. 88 References.

IRODALOM

1. I. Langmuir, H. Mott—Smith, Jr.: Gen. Elec. Rev., **27,** 449 (1924)
2. R. Holm: Phys. Z., **25,** 497 (1924)
3. W. Weizel, W. Olmesdahl: Z. Phys., **114,** 719 (1939)
4. R. Seeliger: Z. Phys., **115,** 111 (1940)
5. H. Fischer: Z. Phys., **113,** 360 (1939)
6. N. Laegreid, G. K. Wehner: J. Appl. Phys., **32,** 365 (1961)
7. W. Grimm: Naturwissenschaften, **54,** 586 (1967)
8. W. Grimm: Spectrochim. Acta, **23B,** 443 (1968)
9. M. Dogan, K. Laqua, H. Massmann: Spectrochim. Acta, **26B,** 631 (1971)
10. P. W. J. M. Boumans: Anal. Chem. **44,** 1219 (1972)
11. H. Jäger, F. Blum: Spectrochim. Acta, **29B,** 73 (1974)
12. M. E. Waitlevertch, J. K. Hurwitz: Appl. Spectrosc., **30,** 510 (1976)
13. K. Naganuma, M. Kubota, J. Kashima: Anal. Chim. Acta, **98,** 77 (1978)
14. F. Blum, P. A. Büger, N. P. Ferreira: Z. Naturforsch., **32a,** 785 (1977)
15. C. G. Bruhn, W. W. Harrison: Anal. Chem., **50,** 16 (1978)

16. W. Rollwagen, K. Ruthardt: Metallwirtschaft, 187, **1935**
17. H. Dieudonné, J. Bril: Report 10 077 (1970), Projet DS 775, Pechiney (Voreppe)
18. H. Jäger: Anal. Chim. Acta, **58,** 57 (1972)
19. H. Jäger: Anal. Chim. Acta, **60,** 303 (1972)
20. El Alfy, K. Laqua, H. Massmann: Z. Anal. Chem., **263,** 1 (1973)
21. K. Hirokawa, K. Takada: Bunseki Kagaku, **26,** 141 (1977)
22. R. A. Kruger, L. R. P. Butler, C. J. Liebenberg, R. G. Böhmer: Analyst (London), **102,** 949 (1977)
23. H. G. C. Human, N. P. Ferreira, R. A. Kruger, L. R. P. Butler: Analyst (London), **103,** 465 (1978)
24. N. P. Ferreira, L. R. P. Butler: Analyst (London), **103,** 607 (1978)
25. B. Vandorpe, J. Durr: Report 11.345 (Ecole Nationale Technique des Mines de Douai)
26. R. Berneron: Spectrochim. Acta, **33 B,** 665 (1978)
27. R. M. Lowe: Spectrochim. Acta, **31 B,** 257 (1976)
28. D. S. Cough, J. V. Sullivan: Analyst (London), **103,** 887 (1978)
29. F. Paschen: Ann. Phys. (IV), **50,** 901 (1916)
30. R. Frerichs: Ann. Phys., **85,** 362 (1928)
31. Y. Takahashi: Ann. Phys. (V), **3,** 49 (1928)
32. R. A. Sawyer: Phys. Rev., **36,** 44 (1930)
33. V. A. Konovalov, Sz. E. Fris: Zs. Teh. Fiz. Sz.Sz.Sz.R. **4,** 523 (1934)
34. H. Schüler, H. Gollnow: Z. Phys., **93,** 611 (1934)
35. A. Lompe: Z. Phys., **109,** 310 (1938)
36. J. Maierhofer, A. Reis, G. Setz: Z. Instrumentenk., **74,** 165 (1966)
37. C. Breton; Bibliographie CEA n^0 88 (1967), Centre d'Etudes Nucléaire de Fontenayaux-Roses
38. H. Helm: Z. Naturforsch., **27 a,** 1812 (1972)
39. H. Helm, F. Howorka, M. Pahl: Z. Naturforsch., **27** a, 1417
40. F. Howorka, M. Pahl: Z. Naturforsch., **27 a,** 1425 (1972)
41. A. N. Steinberg, Zs. Prikl. Him. (Leningrád), **2,** 385 (1965)
42. J. A. C. Broekaert: Spectrochim. Acta, **34 B,** 11 (1979)
43. T. Török, Gy. Záray; Spectrochim. Acta, **30 B,** 157 (1975)
44. T. Török, A. Buzási, Gy. Záray: Spectrochim. Acta, **31 B,** 501 (1976)
45. T. Török, Gy. Záray: Spectrochim. Acta, **33 B,** 101 (1978)
46. T. Török, Gy. Záray: Spectrochim. Acta, **33 B,** 115 (1978)
47. H. J. Eichhoff: Fys. Chem. Rada, **13,** 7 (1964)
48. J. Czakow: Kém. Közlem., **45,** 159 (1976)
49. G. A. Pecov, V. Z. Kraszilscsik: Zs. Anal. Him., **21,** 863 (1966)
50. N. K. Rudnyevszkij, D. R. Makszimov, T. M. Sabanova, L. P. Lazareva: Zavod. Lab., **38,** 1338 (1972)
51. P. Zanzucchi; Thesis, **1967** (University Microfilms, Ann Arbor, Michigan, 68—8278)
52. R. B. Dyulgerova, D. Z. Zechev: Spectrosc. Lett., **12,** 615 (1979)
53. A. Alimonti, S. Caroli, O. Senofonte: Spectrosc. Lett., **13,** 307 (1980)
54. S. Caroli, A. Alimonti, O. Senofonte: Spectrosc. Lett., **13,** (1980) (in press)
55. M. I. Csajka: Opt. i Szpektroszk., **2,** 421 (1957)
56. H. Falk; Spectrochim. Acta, **21,** 23 (1965)
57. A. V. Karjakin, E. A. Zaharov, V. Z. Kraszilscsik: Zs. Anal. Him., **23,** 1418 (1968)
58. J. A. Goleb, J. K. Brody: Appl. Spectrosc., **15,** 166 (1961)
59. T. Lee, A. L. Hallowell, L. H. Rogers: Appl. Spectrosc., **14,** 39 (1960)
60. G. Rossi, M. Mol: Spectrochim. Acta, **24 B,** 389 (1969)
61. E. A. Zaharov, B. F. Miaszojedov, A. V. Karjakin: Zs. Anal. Him., **28,** 2306 (1973)
62. E. A. Zaharov, B. F. Miaszojedov, A. V. Karjakin: Zs. Anal. Him., **28,** 879 (1973)
63. B. Rosen: Appl. Spectrosc., **5,** 26 (1951)
64. N. A. Zakorina, G. Sz. Lazejeva, A. A. Petrov: Zs. Anal. Him., **23,** 1688 (1968)
65. K. Thornton: Analsyt (London), **94,** 958 (1969)
66. R. Anzani, R. Trucco, XIV Sem. Spettrochim. AIM, **1968**
67. S. Caroli, A. Alimonti, P. Delle Femmine: Spectrosc. Lett., **12,** 871 (1979)
68. G. Milazzo; Proceedings of the XIV CSI, Debrecen, **1967**
69. G. Milazzo, N. Sopranzi: Appl. Spectrosc., **21,** 172 (1967)
70. G. Milazzo: Appl. Spectrosc., **21,** 185 (1967)
71. G. Milazzo, N. Sopranzi: Appl. Spectrosc., **21,** 250 (1967)
72. P. P. Osztroumenko: Zs. Prikl. Szpektroszk., **5,** (1966)
73. G. A. Pecov, V. Z. Kraszilscsik, A. F. Jakovleva: Zs. Anal. Him., **23,** 1785 (1968)
74. N. G. Picsugin, N. K. Rudnyevszkij, D. E. Makszimov: Zs. Anal. Him., **32,** 12 (1977)

75. G. A. Pecov, V. Z. Kraszilscsik: Zs. Anal. Him., **19,** 1106 (1964)
76. G. Knerr, J. Maierhofer, A. Reis: Fresenius' Z. Anal. Chem. **229,** 261 (1967)
77. J. A. C. Broekaert: Bull. Soc. Chim. Belg., **85,** 261 (1976)
78. J. A. C. Broekaert: Bull. Soc. Chim. Belg., **85,** 471 (1976)
79. J. A. C. Broekaert: Bull. Soc. Chim. Belg., **85,** 755 (1976)
80. A. J. Prakash, W. W. Harrison: Anal. Chim. Acta, **53,** 421 (1971)
81. S. Caroli, A. Alimonti, N. Violante: Spectrosc. Lett., **13,** 313 (1980)
82. J. Junkes, E. W. Salpeter, G. Milazzo: Atomic Spectra in the Vacuum Ultraviolet, **1965** (Specola Vaticana, Citta del Vaticano)
83. S. Caroli, G. Milazzo, M. Benincasa, C. Alvarez-Herrero: Opt. Pura Apl., **11,** 1 (1978)
84. S. Caroli, G. Milazzo, M. Benincasa, C. Alvarez-Herrero, Opt. Pura Apl., **11,** 19 (1978)
85. S. Caroli, G. Milazzo: Kém. Közlem., **45,** 137 (1976)
86. S. Caroli, G. Milazzo, M. Benincasa: Spectrosc. Lett., **8,** 655 (1977)
87. S. Caroli, P. Delle Femmine: Spectrosc. Lett., **11,** 299 (1978)
88. S. Caroli, O. Senofonte: Can. J. Spectrosc., **25,** 73 (1980)

Fordította:

Varjú Mihály

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 401—420

KATALÍZIS A KOORDINÁCIÓS KÉMIA SZEMSZÖGÉBŐL*

H. NOLLER

(Institut für Physikalische Chemie, Technische Universität Wien, A-1060 Wien, Getreidemarkt 9)

Érkezett 1981. január 3-án

Véleményem szerint a világ egyre bonyolultabbá válik. Az összetettség növekedése egy mindjobban gyorsuló folyamat és hamarosan eléri azt a mértéket, mely már túlságosan is nagy semhogy úrrá lehessünk rajta. A tudományban, így a katalízis tudományában is sokkal gyorsabb az adatok felhalmozása, mint az adatok elemzése, az összefüggések feltárása. Nagy a veszélye annak, hogy elmerülünk ebben az adattengerben.

Azt gondolnánk, hogy az elméletnek kell e tendencia ellen hatni, de maga az elmélet is oly mértékig bonyolult, hogy már nehéz kézben tartani. Mindezek alapján — úgy vélem — ajánlatos keresni a katalízisnek egy viszonylag könnyen kezelhető leírását, amely természetesen kvalitatív és — mindenek előtt — kémiai leírás kell hogy legyen.

Nem igyekszem megtalálni azt, amit jobbára az igazságnak, vagy a korrekt elméletnek neveznek, hanem egy olyan modellt keresek, amellyel a kísérleti eredmények a lehető legkövetkezetesebben, ellentmondásmentesen értelmezhetők.

Általánosan elfogadott, hogy a katalízist kinetikai jelenségnek tekintsük. Magam a kinetikai megközelítés helyett inkább a katalízis koordinációs kémiai szempontjait kívánom hangsúlyozni [1]. Remélem, hogy ez jelentősen egyszerűsítheti a katalízis leírását és egyben hasznos megközelítés lehet, különösen a kémikusok számára.

A katalízis intermolekuláris jellegű (a katalizátor és a reaktáns közötti) kölcsönhatások révén valósul meg. Az intermolekuláris kölcsönhatások viszont a koordinációs kémia hatalmas területének egy részét jelentik. Ez a megközelítés közvetlenül felveti a katalizátor és a reaktáns közötti kötések kérdését [2].

A rövidség kedvéért a következőkben posztulátumokat, kijelentéseket fogunk közölni, indoklás nélkül.

Kiindulási posztulátum: a katalizátor és a reaktáns közötti valamennyi kötés koordinatív kötés, azaz egy elektronpár-akceptor (EPA) és egy elektron-

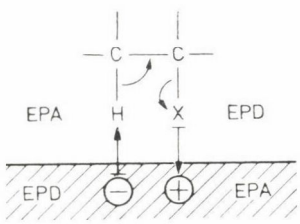
* A Reakciókinetika és Katalízis Munkabizottság 1980. okt. 15-i ülésén elhangzott előadás

pár-donor (EPD) közötti kötés. (Természetesen vannak kivételek, de a vizsgálandó esetek 95, sőt talán 99%-ában ez a helyzet.)

A koordinatív (EPD-EPA) kötés tipikus példája: $H_3N \rightarrow BF_3$. A kötést egy nyíl jelöli, ami nem jelent egy különleges kötéstípust, ez a kötés is normális kovalens kötésnek tekinthető. Az EPD-EPA kifejezések helyett a Lewis-bázis, illetve Lewis-sav megjelölés is használható.

Felmerül a kérdés: melyek az EDP és EPA helyek a katalizátoron? Vegyük észre, hogy csak a helyekről, és nem aktív helyekről beszélünk. Inkább az a célunk, hogy összefüggéseket találjunk a kémiai tulajdonságok és a katalitikus viselkedés között, mintsem hogy ezeket a helyeket a lapokon, éleken, csúcsokon stb. lokalizáljuk. A poláris katalizátorokon — e munkában csak ilyenekről lesz szó — az EPA helyek nyilván a kationok, míg az EPD helyek az anionok. Az anionok bizonyára mindig jelen vannak a poláris katalizátorok felületén, minthogy a kationoknál rendszerint nagyobb méretűek. A reaktáns oldalról viszont a magányos elektronpárt tartalmazó, elektronegatív csoportok EPD jellegűek, míg az EPA jelleget a CH csoportok hordozzák, különösen az elektronegatív csoporttal szomszédos helyzetű csoportok. (A katalizátor vonatkozásában a *hely*, míg a reaktáns esetében inkább a *csoport* kifejezést részesítjük előnyben.)

A reaktáns és a katalizátor közti kölcsönhatás esetében, természetesen mindig egy EPA és egy EPD kölcsönhatásáról van szó. Elektronegatív csoportot tartalmazó reaktáns (pl. egy alkohol) esetében az 1. ábrán bemutatott kölcsönhatási séma valószínű.



1. ábra. Kölcsönhatási szerkezet

Véleményünk szerint a katalitikus hatáshoz legalább ez a kétféle kölcsönhatás mindig szükséges.

A koordinatív kölcsönhatás szerepe

Kulcsfontosságú a katalitikus hatás szempontjából, hogy a koordinatív kötés létrejöttével a szomszédos kötések meggyengülnek. E fontos jelenségre GUTMANN hívta fel a figyelmet [3].

1. táblázat

Kötéshosszak a BF_3-ban és addiciós komplexeiben

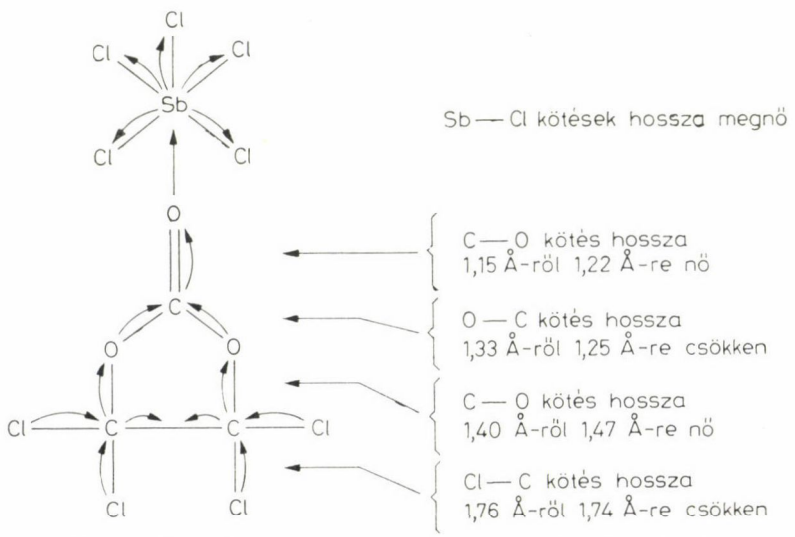
	BF_3	$CH_3CN \rightarrow BF_3$	$H_3N \rightarrow BF^\circ$	$Me_3N \rightarrow BF_3$
N → B távolság (Å)	—	1,63	1,60	1,58
B — F távolság (Å)	1,30	1,33	1,38	1,39

Az 1. táblázatban szereplő addíciós komplexek képződésekor a B—F kötések megnyúlnak (és meggyengülnek). A N—B távolság a magányos elektronpárt szolgáltató molekula elektrondonor (EPD) erősségének kifejezője. A B—F kötések megnyúlása (és gyengülése) nő a partner molekula EPD erősségének növekedésével.

A szomszédos kötések megnyúlásának és gyengülésének szükséges feltétele hogy polaritásuk nőjön a koordinatív kötés létrejöttekor. Másrészt, ha a polaritás csökken, a kötés megrövidül és megerősödik. Mindezt jól mutatják az $SbCl_5$ és a tertaklór-etilén-karbonát addíciós komplexének kialakulásakor fellépő kötéshossz változások (2. ábra) [3].

Mindenesetre megjegyezhetjük, hogy (a katalízis területén) az esetek többségében nő a polaritás és ezáltal gyengül a kötés.

Mivel a kölcsönhatás erőssége és a kötés gyengülése egy adott szubsztrátum esetén a felületi helyek erősségétől függ, rendkívül fontos lenne e helyek erősségének megfelelő jellemzése. Kationoknál az e/r (formális töltés/sugár) érték nyújthat tájékoztatást. Ezen túl az elektronegativitást ajánljuk akár, a PAULING [4], akár a SANDERSON [5] féle megfogalmazásban. Sanderson meg-



2. ábra. A kötéshosszak változása addíciós komplex képződésekor

közelítésének különös használhatósága abban áll, hogy megad egy kifejezést magának a vegyületnek (nemcsak az atomnak) az elektronegativitására. E mennyiséget közepes elektronegativitásnak (S_{int}) nevezte. A $P_pQ_qR_r$ vegyület elektronegativitása:

$$S_{int} = (S_P^p S_Q^q S_R^r)^{\frac{1}{p+q+r}}.$$

Javasoljuk továbbá a vegyértékelektronokra vonatkozó ionizációs energia átlagának ($\overline{E_{ion}}$) a használatát. Példaként az Al három vegyérték-elektronjának egymást követő ionizációs energiái (6):

$$5{,}98 \text{ eV} + 18{,}82 \text{ eV} + 28{,}44 \text{ eV} = 53{,}24 \text{ eV}$$

$$\overline{E_{ion}} = 53{,}24 \text{ eV} : 3 = 17{,}75 \text{ eV}.$$

A katalizátorok aktivitása

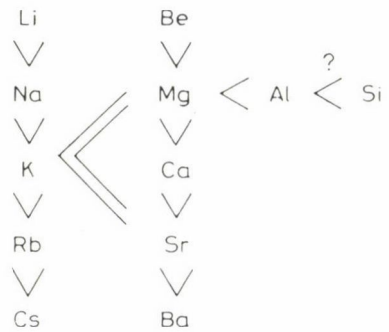
A következő eredmények úgy is értelmezhetők, ha csak az EPA hely hatását vizsgáljuk (jóllehet az EPD hely részvételéről sem feledkezünk meg). A 2. táblázatban közölt eredményeknél az aktiválási energiaértékekkel jellemeztük a katalitikus aktivitást [1].

2. táblázat

Alkáli-fém- és alkáli-földfém-klorid és -szulfát katalizátoron lejátszódó dehidroklórozás aktiválási energiái

Reaktáns	Katalizátor	E_a kcal/mól	Hőmérséklet-tartomány °C
2-klór-propán	LiCl	20	242—271
	NaCl	25	362—393
	KCl	46	295—315
	$CaCl_2$	18	116—189
	$SrCl_2$	20	128—171
	BaCl*c*	28	82—142
	$CaSO_4$	17	72—132
2-klór-bután	$MgSO_4$	13	150—300
	$CaSO_4$	16	180—320
	$BaSO_4$	22	250—400

A zeolit-katalizátoroknál is gyakran ugyanezt az alapvető aktivitási sorrendet találták. A bután-1-ol dehidratálásában a következő aktivitási sorrendet észlelték: LiNaX > NaX > KNaX > RbNaX [7]. SHARF és munkatársai [8] pentán-1-ol esetében hasonló sorrendet találtak: HNaY > ZnNaY > > MgNaY > ZnNaX > MgNaX > NaY > NaX. Analóg aktivitási sorrendet



3. ábra. Általános aktivitási sorrend

találtak a hexán krakkolásában [9]: NaX $\simeq$ NaY $<$ BaY $<$ MgX $<$ SrY $<$ $<$ CaY $<$ MgY, valamint a kumol krakkolásában [9]: NaY $<$ BaY $<$ SrY $<$ $<$ CaY $\simeq$ MgY $\simeq$ BeY.

A periódusos rendszer első csoportjainak kationjai a 3. ábrán bemutatott általános aktivitási sorrendet követik, jó egyezésben a korábban tárgyalt kritériumokkal.

A Si^{4+} különösen erős EPA-nak látszik. Ugyanakkor a SiO_2 aktivitása nagyon kicsi. A SiO_2 problémáját (erre utal a 3. ábrán a kérdőjel) ezúttal nem tárgyaljuk. Biztos vagyok abban, hogy a felületi Si-hely EPA erőssége igen nagy, összhangban a kritériumainkkal [10].

Ez az aktivitási (kölcsönhatási) sorrend nem korlátozódik a katalízisre, hanem általánosan érvényesül a kémiában, pl. a hidratációs entalpiákban is. A 3. táblázat összegezi az alkálifémek hidratációs entalpiáit [11]. A feltüntetett értékek „1 mól" ionra vonatkoznak, nem pedig 1 mól vízre.

A 4. táblázatban további hidratációs entalpia értékek találhatók, főképp a magasabb vegyértékű kationokra [12].

A kétértékű ionoknál, mint pl. a Ca^{2+}, az egy mólnyi vízre számított értékek 100 kcal körüli nagyságúak, míg a három-vegyértékű kationoknál 150 kcal feletti értékek. Emlékeztetünk arra, hogy a H_2 kötési energiája 104 kcal/ /mól. Ez azt jelenti, hogy egy kétértékű kation és az első hidratációs szféra

3. táblázat

Alkáli-fém ionok hidratációs entalpiája

Ion	$-\Delta H$ kcal/mól$_{ion}$	r Å
Li^+	122	0,68
Na^+	95	0,97
K^+	76	1,33
Rb^+	69	1,47
Cs^+	62	1,67

4. táblázat

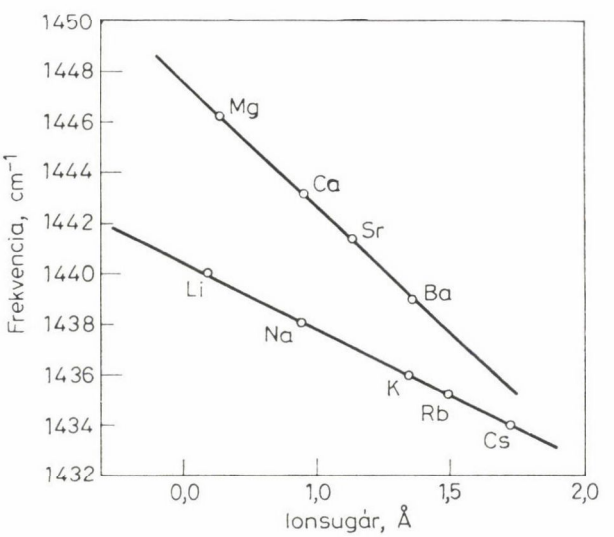
Többértékű kationok hidratációs entalpiája

Kation	$\Delta H_{hidr.}$ (kcal/mól ion)	N*	$H_{hidr.}/N$ (kcal)
K^+	−84	4	−21
Cu^+	−145	4	−36
Ca^{2+}	−389	4	−97
Cr^{2+}	−449	4(6)	−112 (−75)
Fe^{2+}	−467	4(6)	−117 (−78)
Cu^{2+}	−508	4	−127
Sc^{3+}	−960	6	−160
Cr^{3+}	−1054	6	−176
Fe^{3+}	−1055	6	−176

* A ligandumok száma az első koordinációs szférában

egy vízmolekulája között a kötés olyan erős, mint a legerősebb egyszeres kötések esetében. A háromértékű kationoknál ezek a (kation-víz) kötések még sokkal erősebbek. Amennyire megítélhetem, a kémikusok zöme nincs tudatában ezen (koordinatív) kötések erősségének és így kétségbe vonja a (felületi) kationok jelentőségét a katalízisben. Én úgy vélem, hogy a kölcsönhatás egy felületi kation és egy donor molekula (pl. alkohol) között hasonlóan erős, mint a hidratációs kötések esetében; ily módon a kationok a katalízis szempontjából fontos elektronpár-akceptor (EPA) helyek.

A kölcsönhatási sorrend általános érvényessége látszik a különböző 1A és 2A csoportbeli kationokat tartalmazó zeolitokon adszorbeált piridin egy adott



4. ábra. Koordinatíve kötött piridin abszorpciós sávjának frekvenciája az ionsugár (EPA erősség) függvényében

elnyelési sávjának frekvenciáiból [13] is. (4. ábra). A sáv azonosítását tárgyalnunk jelen esetben nem fontos, feltéve, hogy az összes esetben ugyanarról a sávról van szó.

Utolsó példaként álljon itt az 500 °C-on levegőn kezelt zeolitok vízvisszatartó képessége. Az 5. táblázatban [9] e minták 1000 °C-ra való hevítésekor fellépő súlyveszteséget tüntettük fel.

5. táblázat

Víz visszatartása zeolitokban

Katalizátor	Súlyveszteség 500 °C-ról 1000 °C-ra történő hevítéskor ‰
NaX	0,27
MgX	1,04
NaY	0,14
MgY	0,88
CaY	0,88
SrY	0,45
BaY	0,25

Mechanizmus

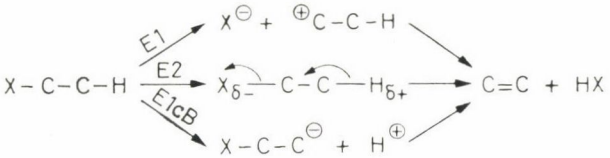
Az aktivitás fenti tárgyalása során, az eredmények értelmezésekor csak az EPA helyeket vettük figyelembe. A mechanizmus vizsgálatához azonban — a következetes leírás érdekében — az EPD helyekre is tekintettel kell lennünk.

A mechanizmus alatt itt csak a kötések felszakadásának időbeli lefolyását értjük. A részletek ismerete nélkül is az időbeli lefutás három típusára számíthatunk:

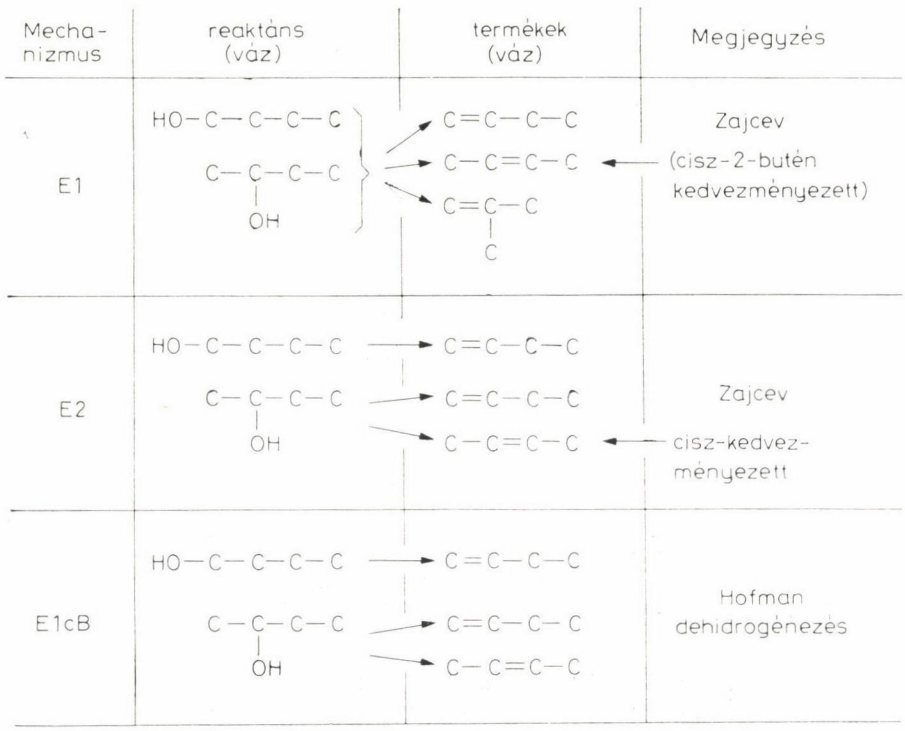
1. Az első lépésben felszakad a C—X kötés, karbóniumion köztitermék képződik, amely a második lépésben elveszít egy protont.
2. Az első lépésben a C—H kötés szakad fel és a karbonion közti termék a második lépésben elveszíti az X^- csoportot.
3. Mindkét kötés egyazon lépésben, egyszerre szakad fel, ami egy köztitermék nélküli összetett reakciót jelent.

Az 5. ábrán látható szkéma e három lehetőséget mutatja be (a folyadéfázisú reakcióknál szokásos E1, E2 és E1 CB jelölésekkel).

A mechanizmus meghatározására nem használtuk fel a kinetikai adatokat. Egyik módszerünk a termékeloszlás vizsgálata. A 6. ábra e módszer — idealizált formában való — alkalmazását mutatja a bután-1-ol és a bután-2-ol esetére. Háromféle butén-eloszlás észlelhető, amelyek a fenti három mecha-



5. ábra. Eliminációs mechanizmusok (időbeli lefutás)



6. ábra. A dehidratáció mechanizmusának meghatározása a termékeloszlás alapján

nizmus-lehetőséggel a következő meggondolások alapján jó összhangba hozhatók.

E1 mechanizmust nagy EPA erősségű (nagyon savas) katalizátorok esetén várhatunk. Az E1 mechanizmus köztiterméke, a karbónium kation könnyen izomerizálódik, így a bután-1-01-ból első lépésben kialakuló primér karbónium ion gyorsan átalakul a stabilisabb szekundér karbónium ionná. A bután-2-01-ból közvetlenül a szekundér karbónium ion képződik. Így mindkét reaktáns alkalmazásakor ugyanaz (2-butil kation) lesz a köztitermék, következésképpen a butének eloszlása is azonos lesz. Izo-bután képződéséhez nagyon savas katalizátorok szükségesek (pl. $SiO_2—Al_2O_3$).

E1 CB mechanizmusra a nagy EPD erősségű katalizátorok esetében számíthatunk, minthogy ekkor a támadás a C—H kötésen történik, ez hasad fel elsőként. Így a legsavasabb hidrogén lehasítása a kedvezményezett, ezért képződik főképp terminális olefin a bután-2-01 esetében. A bután-1-01-ból természetesen csak but-1-én képződhet.

Közepes savasságú katalizátorokon (kiegyensúlyozott EPA és EPD jelleg) a támadás mindkét kötésen közel azonos mértékű, így ezek egy lépésben hasadnak fel.

6. táblázat

Jellegzetes butén-eloszlások nagyon különböző savasságú katalizátorokon

Kat. (Mech.)	Reaktáns váz	C=C—C—C %	C—C=C—C %
BPO_4	COH—C—C—C	30	70
(E1)	C—COH—C—C	30	70
Al_2O_3	COH—C—C—C	85	15
(E2)	C—COH—C—C	20	80
ThO_2	COH—C—C—C	95	5
(ElcB)	C—COH—C—C	90	10

A 6. táblázatban néhány jellemző termékeloszlást adunk meg, igen erősen eltérő savasságú katalizátorokon. Az eredmények egy 300 °C körüli, meglehetősen széles hőmérséklet-tartományra vonatkoznak.

Várakozásunkkal összhangban a BPO_4-nál [14], amely a legsavasabb erőssége a legkisebb — a termékeloszlás azonos a bután-1-01 és a bután-2-01 esetén, és ez az E1 mechanizmusára utal.

Az Al_2O_3 [15] közepes (mérsékelt) savasságú és (következésképp) közepes bázicitású katalizátor. A két alapvető kölcsönhatás erőssége (lásd 1. ábra) körülbelül azonos nagyságrendű (kiegyensúlyozott kölcsönhatás-erősség). A C—O és a C—H kötés tehát hasonló mértékben gyengül. A két kötés egy összetett folyamat közelítőleg egyidejűleg hasad fel köztitermék képződése nélkül. Ezt nevezzük E2 mechanizmusnak.

A ThO_2-on [16], amely a leginkább bázikus katalizátor, azaz a legnagyobb EPD erősséggel és a legkisebb EPA erősséggel rendelkezik, a C—H csoporttal létrejövő kölcsönhatás dominál. A C—H kötés előbb szakad fel, mint a C—O kötés. A C—H kötés azonban legkönnyebben a lánc végén levő, legsavasabb H-nél hasad, ezért a fő termék a but-1-én, nemcsak a bután-1-01, hanem a bután-2-01 esetén is.

A 7. táblázatban szereplő kísérleti eredmények főképpen E1 és E2 mechanizmusú rendszerekre vonatkoznak, (szulfát-katalizátorok: [17], foszfát-katalizátorok: [14]). Minden esetben a savasabb katalizátor erősebb E1 jel-

7. táblázat

Termék-eloszlás (mechanizmus) a kilépő csoport és a katalizátor függvényében

Katalizátor	Hőmérséklet °C	Kilépő csoport	X–C–C–C–C ↙ C=C–C–C %	X–C–C–C–C ↘ C–C=C–C %
$MgSO_4$	240	Cl	10	90
$BaSO_4$	245	Cl	21	79
Li_2SO_4	390	Cl	100	—
$MgSO_4$		CH_3COO	45	55
$BaSO_4$		CH_3COO	100	—
$Mg_3(PO_4)_2$	280	OH	50	50
$Ca_3(PO_4)_2$	340	OH	92	8
BPO_4	260	OH	26	74
$AlPO_4$	320	OH	89	11

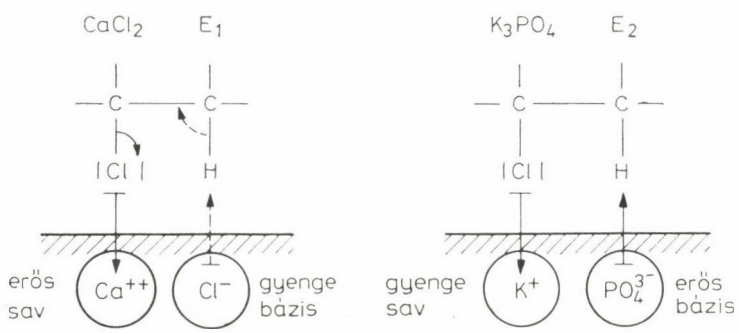
leget mutat, vagyis a bután-2-ol-ból kevesebb but-1-én képződik, mert lejátszódik a but-2-én-re vezető izomerizáció (but-1-én+but-2-én = 100%).

A mechanizmus természetesen nemcsak a katalizátortól, hanem a reagáló anyagtól is függ. A C—Cl kötés könnyebben hasad, mint a C—O kötés, és ez az oka annak, hogy az E1-tendencia a klóralkánoknál nagyobb, mint az alkoholoknál vagy az észtereknél.

A 2,3-diklór-bután-nál $CaCl_2$-on E1, K_3PO_4-on viszont E2 mechanizmus figyelhető meg [18] (7. ábra). Nyilvánvalóan a két katalizátor közül a $CaCl_2$ az erősebb EPA (és gyengébb EPD).

Az itt hangsúlyozott tendencia, miszerint nagyon savas katalizátoroknál az E1, nagyon bázikus katalizátoroknál pedig az E1 CB mechanizmus érvényesül, általánosan megfigyelhető. Az alkoholok dehidratálásakor fellépő háromféle mechanizmus, E1, E2 és E1 CB, nemcsak az olefin eloszlás, hanem a dehidratálás alatt bekövetkező H/D csere alapján is meghatározható [19].

A 8. táblázatban feltüntetett olefin-eloszlási értékek különböző savasságú katalizátorokon végzett alkohol—dehidratálásra vonatkoznak. A bázikus



7. ábra. Mechanizmus és a helyek erőssége

8. táblázat

Szelektivitás 4-metil-pentán-2-01-ból képződő terminális olefinekre

Oxid	Hőmérséklet °C	Olefin termékek %		O—ls eV
		1-alkén	2-alkén	
ThO_2	390	97.5	2.5	530.2
Y_2O_3	412	96	4	529.5
La_2O_3	414	96	4	529.0
CeO_2	350	86	14	529.4
Sm_2O_3	415	94	6	529.2
Dy_2O_3	404	97	3	529.4
Al_2O_3*	270	25	75	531.8
SiO_2*	400	28	72	533.1

* Reaktáns: Butan—2—01

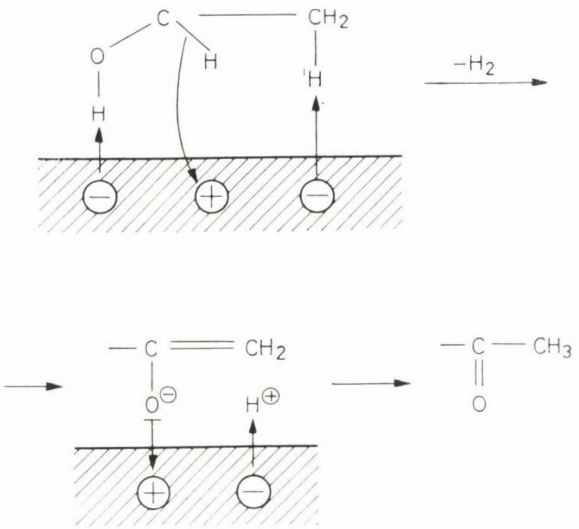
katalizátorokon alkán-2-01-okból szelektíven terminális olefinek képződnek [10a]. Megjegyezzük, hogy az XPS 0-1s kötési energia (alacsony), kb. 530 eV-nyi értéke nagy bázicitásra utal. Az XPS (röntgensugár fotoelektron spektroszkópia) alkalmazását a katalízisben VINEK részletesen leírja [10a].

Dehidrogénezés

Az E1 CB mechanizmus esetén mindig bekövetkezik a dehidrogénezés [15]. Eszerint a dehidrogénezéshez nyilvánvalóan bázikus centrumok kellenek. Ennek oka az lehet, hogy a dehidrogénezésben egy α-hidrogént hidridként kell leszakítani. Hidrid leszakítása egy olyan szénatomról, amelyhez egy oxigén is kapcsolódik, igen nehéz. E hidrogén elektronsűrűsége szükségképpen nagy az átmeneti állapotban. Ezt viszont elősegítheti, ha a molekulába sok negatív töltést viszünk be. A 8. ábrán bemutatott elrendeződés — amely csak a kölcsönhatásokat szemlélteti és nem a térbeli szerkezetet — azt példázza, hogyan valósul meg ez a jelentős negatív töltés-bevitel koordinatív kölcsönhatások révén.

SZABÓ [20] leírta a szelektivitás változását a 9. táblázatban bemutatott oxid-katalizátor sorozat esetében. Mindazon esetekben, ahol a szükséges adatok rendelkezésre állnak, e sorrend kielégítő összhangban van az EPA erősségre általunk felállított kritériumokkal.

A fémek mind a hidrogénezésnek, mind a dehidrogénezésnek kitűnő katalizátorai. Véleményünk szerint a fémeknek nagy EPD erőssége (nagy bázicitása). Szeretném a figyelmet e fontos szempontra ráirányítani, amelynek ezidáig nem szenteltek kellő figyelmet. Mindez természetesen nem jelenti azt, hogy a fémeknek nem kell EPA kapacitással rendelkezniük ahhoz, hogy dehidrogénező aktivitást mutassanak. Mindkét funkcióra szükség van. Az a



8. ábra. Alkoholok dehidrogénezése (kölcsönhatási struktúra)

tény, hogy csak a betöltetlen d pályákkal bíró átmeneti fémek a jó hidrogénező katalizátorok, valószínűleg azzal függ össze, hogy szükség van az EPA kapacitásra is.

9. táblázat

Dehidrogénezési szelektivitás összehasonlítva a közepes elektronegatívitással (S_{int}) és a kation átlagos ionizációs energiájával ($\bar{E}_{ion}$)

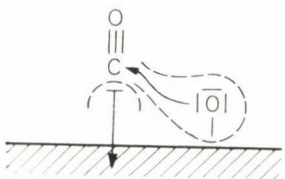
Szelektivitás (de−H_2)	S_{int} —	$\bar{E}_{ion}$ eV
CaO	2,5	9
∨		
MgO	2,8	11
∨		
ZnO	3,9	14
∨		
$FeO \cdot Fe_2O_3$	**	12 18 16
∨		
Cr_2O_3	**	18
∨		
TiO_2	3,4	23*
∨		
Al_2O_3	3,7	18
∨		
SiO_2	4,3	26
∨		
WO_3	**	**

* Ti^{3+}: $\bar{E}_{ion}$ = 16 eV (a Ti egy része háromértékű lehet)
** Nem áll rendelkezésre adat

Oxidáció

Az oxidációt is tekintve, egy további következtetést vonhatunk le. Az elemi kémiában azt tanultuk, hogy a hidrogénezés redukcióinak, a dehidrogénezés pedig oxidációnak tekinthető. A hidrogénezés és a dehidrogénezés tehát a redoxi reakciók csoportjába tartoznak. Mivel a bázisos katalizátorok mind a hidrogénezésre, mind pedig a dehidrogénezésre alkalmasak, felmerül a kérdés, vajon a bázicitás nem szükséges feltétel-e minden redoxi reakcióhoz, tehát az oxidációhoz (oxigén beépüléshez) is.

Tekintsük a CO oxidációját. Feltéve, hogy az oxigén O^{2-} alakban vivődik át, nagy elektronsűrűség növelné az oxigén donor erősségét és így megkönnyí-



9. ábra. Kölcsönhatás és elektron-átvitel CO oxidációnál

tené az átvitelt. A termék elektromos semlegessége érdekében két elektront kell a CO-ról (vagy CO_2-ról) a katalizátorra átvinnünk, amint azt a 9. ábra mutatja.

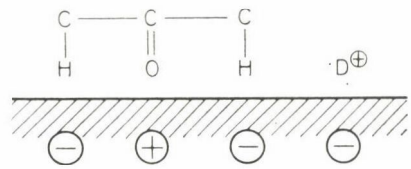
Érdekes Ertl [21] megfigyelése, aki szerint a CO Pd-on történő oxidációjakor a felület nincs teljesen oxigénnel borítva (egy teljes oxigén monoréteg kialakulása nem is lehetséges) és így a CO érintkezhet a felülettel. Ha azonban előzetesen CO-ot adszorbeáltatunk, az a felületet teljesen beborítja, meggátolva az oxigénnek a felülethez jutását. Ilyen esetben az oxigén beadásakor nem is észlelhető oxidáció.

Benyomásom szerint a szakirodalomban sok utalást találhatunk arra vonatkozóan, hogy nem a legnagyobb oxigén borítottságú (legmagasabb oxidációs állapotú), hanem valamely közbülső oxidációs állapotban levő katalizátorok rendelkeznek a legnagyobb aktivitással.

Feltéve, hogy az oxidációs katalízis ilyen leírása helyes, a redoxi reakciók (redoxi katalízis) sajátságai az általában feltételezettnél jobban hasonlítanak a sav-bázis reakciók (sav-bázis katalízis) jellegzetességeihez. A koordinációs kémiai megközelítés tehát alkalmas lenne a redoxi katalízis leírására. Alapvető különbség az lenne, hogy (pl. az oxigénnel történő oxidációs reakcióknál elektronokat kell átvinni a reaktánsról a katalizátorra annak érdekében, hogy az oxigénnel a reaktánsra átvitt elektromos töltést kompenzáljuk.

Az EPD (katalizátor) — H kölcsönhatás közvetlen bizonyítékai

Oxidokon adszorbeált aceton IR vizsgálata szerint (22) a C—H frekvencia lefelé tolódik el. Ez az eltolódás a 10. ábrán látható kölcsönhatási struktúrának tulajdonítható.



	MgO	Al_2O_3
$\Delta r_{CH}(cm^{-1})$	-50	-30

10. ábra. Kölcsönhatás a C—H csoportok és oxidok EPD helyei között

Figyeljük meg, hogy ez az eltolódás a MgO-nál 50 cm^{-1}, azaz nagyobb, mint az Al_2O_3-nál, ahol csak 30 cm^{-1}-et tesz ki. Mivel a MgO bázikusabb, azaz erősebb EPD, indokolt, hogy az eltolódást a katalizátoron levő EPD hellyel való kölcsönhatásnak tulajdonítsuk. Ha az eltolódás a CO csoport és az EPA hely közötti (hosszú távú) kölcsönhatás következtében lépne fel, akkor az erősebb EPA katalizátor (azaz az Al_2O_3) esetén kellene nagyobbnak lennie. Ezt annak bizonyítékául tekintjük, hogy a molekula és a katalizátor közti kölcsönhatás befolyása a távolsággal meredeken csökken. Azt mondanám, hogy a hatásnak jóval több mint a fele a kölcsönhatással szomszédos kötésre lokalizálódik.

Hasonló tendenciát mutat a különböző oxidokon vizsgált metoxi- és etoxi-csoportok C—H frekvenciája is [23], amit a 11. ábrán tüntettünk fel. Jól látható, hogy az eltolódás az oxid bázicitásával nő.

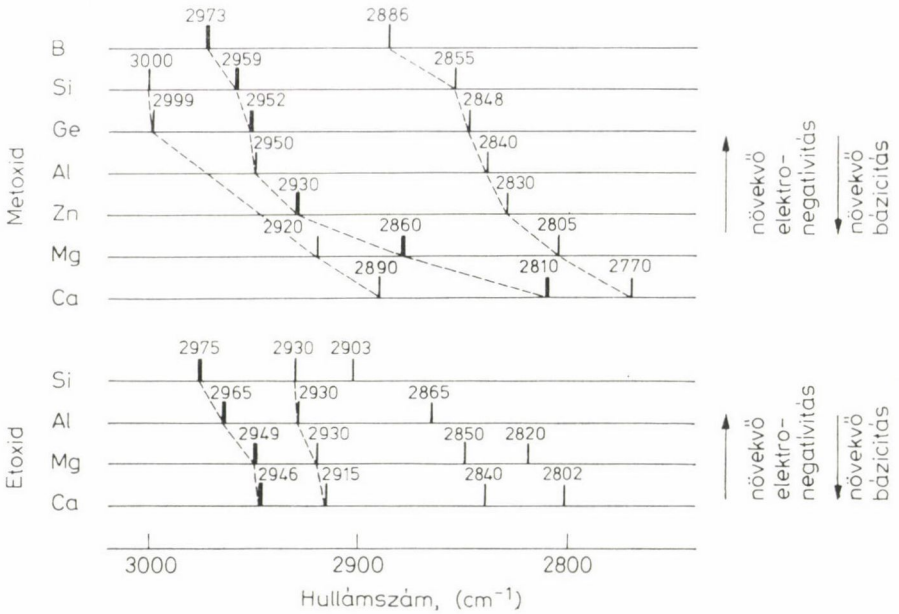
10. táblázat

A bázicitás kritériumai a MgO és az Al_2O_3 esetében

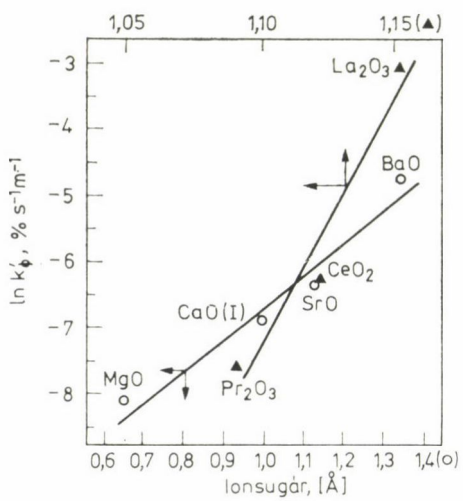
	MgO	Al_2O_3
e/r^*_{kation}	3,03	5,88
S_{int}	2,85	3,70
$\overline{E}_{ion}$ (eV)	11,3	17,75
XPS O-ls (eV)**	530	532

* r Å-ben
** kerekített értékek

A katalizátoron levő hely és a C—H csoport közötti kölcsönhatás H/D cseréhez is vezethet (amit a 10. ábrán is jelöltük), s a csere sebessége nő az oxid bázicitásával. Ez az összefüggés olyan jól teljesül, hogy mi az aceton-d_6-tal mért H/D csere sebességét alkalmazzuk a bázicitás meghatározására [24].



11. ábra. Felületi alkoholátok C—H kötésének frekvencia-eltolódása a bázicitás (elektronegativitás) függvényében



12. ábra. CH_4—D_2 csere sebessége az ionsugár (bázicitás) függvényében

UTIYAMA és munkatársai [25] úgy találták, hogy a $CH_4—D_2$ csereakció sebessége hasonlóképpen nő a katalizátor bázicitásával, mint az a 12. ábrán is látható.

Adalékanyagok, összetett katalizátorok

Az összetett katalizátorok problematikája, az adalékok (esetenként promotoroknak is nevezik őket) hatása a katalízis egyik legizgalmasabb kérdése. A mi modelünk keretein belül az alapvető kérdés a következő: hogyan változik a felületi helyek száma és erőssége az összetétel függvényében? Most csak az erősség változását tárgyaljuk.

Az egyik alapelvet keverési szabályunknak nevezzük [10]. Ez kimondja, hogy a keverékben a helyek erőssége a komponensek erőssége között kell legyen. Más szóval: keverés által soha nem jöhettek létre a (leg)savasabb komponensénél erősebb EPA helyek és ugyanígy, a keletkező EPD helyek sem lehetnek erősebbek, mint a (leg)bázikusabb komponenséi. Ez a szabály egyezik az elektronegativitás és a Sanderson-fordula [5] koncepciójával.

Első példaként tekintsük az Al_2O_3 és kétértékű kationok oxidjai közti keveréket. Ezek spinel struktúrájú keverékek; a kétértékű oxid adalékanyagok bázisosabbak az Al_2O_3-nál. Példaként a 10. táblázatban megadtuk a bázicitásra jellemző számszerű kritériumokat a MgO és az Al_2O_3 esetére.

Következésképp a spinel, $MgAl_2O_4$, EPA helyeinek gyengébbnek, az EPD helyeinek pedig erősebbnek kell lennie, mint az Al_2O_3-éi.

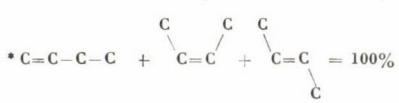
Véleményünk szerint inkább az Al^{3+} helyeket kell a fő EPA-helyeknek tekinteni, nem pedig a Mg^{2+}-ot. A feltüntetett töltések természetesen nem valódi töltések. (A terminológiában még nyitott kérdés, hogy a poláris komponens elemeit ionnak vagy atomnak nevezzük.)

A 11. táblázat néhány bután-1-ol katalitikus dehidratálásra vonatkozó eredményt tartalmaz [26]. A spinel valóban kevésbé aktív, a reakció magasabb

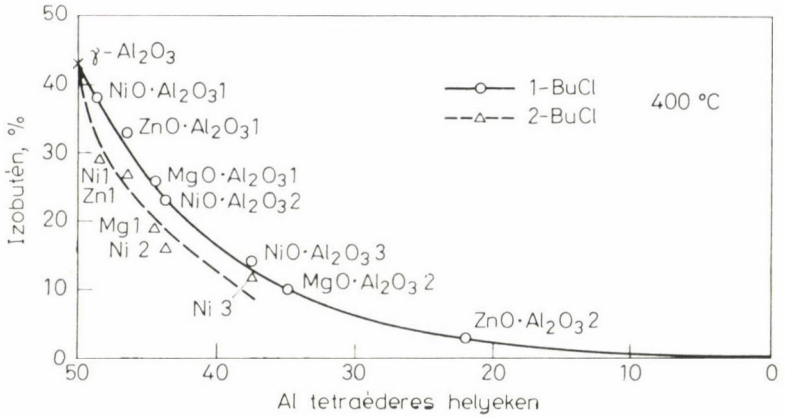
11. táblázat

Aktivitás és szelektivitás Al_2O_3-on és spinelen

Reaktáns	Katalizátor	Hőmérséklet °C	‰ C=C–C–C*
C–C–C–C	$CoAl_2O_4$	280	a reakció kezdete
OH		390	70
	γ-Al_2O_3	240	a reakció kezdete
		350	42



Kémiai Közlemények 56. kötet 1981



13. ábra. Izobutén kitermelés a kétértékű oxid mennyiségének függvényében
A katalizátor összetétele (x: x · Me/100 Al)
$NiO \cdot Al_2O_3$ $ZnO \cdot Al_2O_3$ $MgO \cdot Al_2O_3$

	Ni 1	Ni 2	Ni 3	Zn 1	Zn 2	Mg 1	Mg 2
X	6	30	53	4	28	6	15

hőmérsékleten indul be, mint az Al_2O_3-on. A spinelen továbbá kisebb százalékban keletkezik but-2-én, s ez azt jelenti, hogy a mechanizmus az Al_2O_3-hoz képest inkább E2, mint E1.

Ha az adalék MgO százalékát folyamatosan változtatjuk, folyamatosan csökken az EPA erősség. Ez az oka annak, hogy az 1- és 2-klórbutánból nyert izobután kitermelése csökken [10a, 27], amint az a 13. ábrából kitűnik.

A görbe egy mérgezési görbéhez hasonló lefutású. Elvi különbség nincs a MgO és más oxidok, mint pl. NiO, CoO, ZnO között. Az egyedüli különbség valószínűleg az, hogy e kétértékű kationok a kristályrácsban, és valószínűleg a felületen is, a tetraéderes, illetve oktaéderes helyekhez különböző „affinitást" mutatnak.

Az amszterdami Katalízis Kongresszuson Schwab és Kral [28] beszámolt a különböző adalékanyagoknak az alumíniumoxid krakkoló aktivitására kifejtett hatásáról. Az eredmények (12 táblázat) épp az ellenkezőjét mutatták annak, amit a katalízis ún. elektronelmélete alapján vártak.

A mi megközelítésünk szerint azonban nyilvánvaló, hogy a Li_2O csökkenti az Al_2O_3 EPA erősségét és ezáltal krakkoló aktivitását, a magasabb vegyértékű oxidok viszont növelik az EPA erősséget és az aktivitást.

Schwab és Block vizsgálatai szerint [29] NiO-hoz kevés Li_2O-ot adva, nő a katalizátor aktivitása a CO oxidációjában. Ezt az eredményt a p-típusú félvezető jelleg növekedésével magyarázták. Magyarázhatjuk azonban a mi

12. táblázat

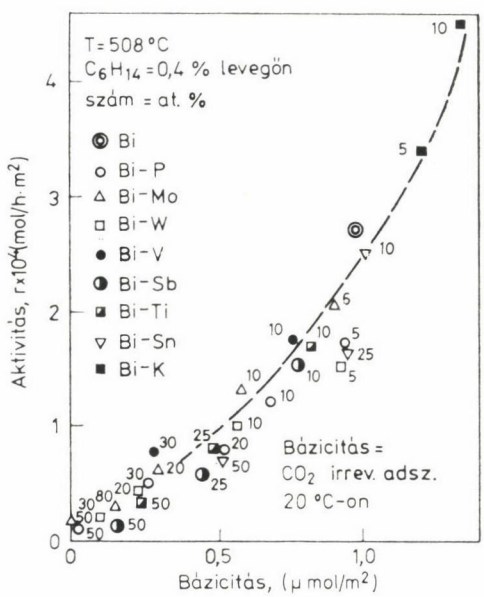
Kumol krakkolása adalékolt (doppolt) alumínium-oxid katalizátorokon

Jelleg	Adalékanyag	atom-‰	E_{akt} kcal/mól
—	—	0	54
p	Li_2O	2	57
p	Li_2O	6	62
n	GeO_2	3	48
n	V_2O_5	1	42
n	WO_3	0,25	41
n	WO_3	0,5	31
n	WO_3	1	26
n	WO_3	2	17,5
n	WO_3	2,5	17
n	WO_3	3	17,5
n	WO_3	4	22

elméletünkkel is, miszerint az oxidáció katalizátorainak bázicitásra van szükségük. A Li_2O természetesen növeli a NiO bázicitását (EPD erősségét).

Az EPD erősségre vonatkozó kritérium szabályszerű érvényessége valóban meglepő. Ai [30] közvetlen összefüggést talált az oxidációs aktivitás és a bázicitás között hexán (14. ábra) és CO oxidációja esetén.

PÄTOW és RIEKERT [31] a következő csökkenő aktivitási sorrendet találta oxidációban: $CuO > CuAl_2O_4 > CuY$. Ez összefüggésben kell, hogy legyen a savasság sorrendjével.



14. ábra. Aktivitás növekedése a bázicitással n-hexán CO_2-dá történő oxidációjakor

Ai [32] szerint K_2O adalék növeli, míg P_2O_5 adalék csökkenti a Co_3O_4 aktivitását a CO oxidációjában.

Végül megemlítjük, hogy MASSON [33] a CO oxidációjában vizsgálta alkáli oxidok hatását egy króm-oxid—alumínium-oxid katalizátorra. Itt éppen az ellenkező sorrendet találta, mint amit ugyanezek a kationok az eliminációs reakcióknál mutattak, nevezetesen: Cs > Rb > K > Na > Li.

Összefoglalás

A katalízis koordinációs kémiai megközelítése abból a feltételezésből indul ki, hogy a katalizátor és a reaktáns közötti minden kötés EPA-EPD kötés és legalább két ilyen kötésre van szükség; ezeket komplementereknek nevezhetjük. Alapvető a katalízis szempontjából, hogy a katalizátor és a reaktáns közötti (EPA-EPD) kötésekkel szomszédos kötések meggyengülnek. Ez a gyengülés nő a kölcsönhatás erősségével, amely viszont egy adott reaktáns esetében a katalizátor helyeinek erősségétől függ. Eliminációs reakciók esetében jó összefüggés van az EPA-hely erőssége és az aktivitás között. Az olyan reakcióknál viszont, ahol csak hidrogén szerepel távozó csoportként — mint például a H/D csere vagy a (de)hidrogénezés — és hasonlóan az oxidációknál is, kedvezőbb a nagy bázicitás, a nagy EPD-hely erősség. Az eliminációs reakciók mechanizmusára vonatkozó eredményeket legjobban úgy értelmezhetjük, ha az EPA és az EPD helyek együttes hatását vesszük figyelembe. Nagy EPA erősségnél El; nagy EPD erősségnél E1 CB; kiegyenlített erősségeknél pedig az E2 mechanizmus a kedvezményezett. A keverék-katalizátorok tárgyalásánál fontos kérdés a helyek erősségének változása az összetétellel. Az erősségen kívül a helyek számát is figyelembe kell venni (de erre itt nem tértünk ki).

Summary

The coordination chemical approach to catalysis starts from the assumption (postulate) that all bonds between the catalyst and the reactant are EPD-EPA bonds and at least two such bonds are needed which may be called complementary. An essential point of catalysis is the weakening of bonds adjacent to the (EPD-EPA) bonds between the catalyst and the reactant. This bond weakening increases with the interaction strength, which, for a given reactant, in turn depends upon the site strength of the catalyst. For reactions of the type of eliminations, there is a good correlation between the EPA site strength and activity, whereas reactions, in which only hydrogen is involved as leaving species, like H/D exchange or (de)hydrogenation, as well as oxidations are favored by high basicity (high EPD site strength). The mechanistic results in elimination reactions are best accounted for taking into consideration the cooperation of both EPA and EPD sites. High EPA strength favors El, high EPD strength E1 CB mechanism, whereas a balanced strength favors E2 mechanism. An important question for discussing mixed catalysts is the variation of site strength as a function of the composition. In addition to the strength, the number of sites should be taken into account (but was not considered in this paper).

IRODALOM

1. H. NOLLER, W. KLADNIG: Catal. Rev. — Sci. Eng., **13** (2), 149 (1976)
2. H. HEINEMANN: Actes 2eme Congres International de Catalyse, Technip, Paris 1961, p. 129
3. V. GUTMANN: Coord. Chem. Rev. **15**, 207 (1975)
4. L. PAULING: The Nature of the Chemical Bond, Ithaka, New York, Cornell University Press — Die Nature der chemischen Bindung, Verlag Chemie GmbH, Weinheim/ Bergstr.
5. R. T. SANDERSON: Chemical Bonds and Bond Energy, 2nd ed. Academic Press, New York, 1976
6. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 58th ed., CRG Press, Inc. 1977—1978
7. P. N. GALICH, I. T. GOLUBSHENKO, V. S. GUTYRYA, V. G., Il'in, I. E. NEIMARK: Dokl. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim., **161** (3), 627 (1965)

8. V. Z. Sharf, L. Kh. Freidlin, G. I. Samokhvalov, I. E. Neimark, E. N. German, M. A. Piontkovskaya, A. S. Nekrasov, V. N. Krutii: Izv. Akad. Nauk SSSR, Ser. Khim. **1968** (4), 780
9. P. E. Pickert, J. A. Rabo, E. Dempsey, V. Schomaker: Proc. of the Third Internat. Congress on Catalysis, 1964, North Holland, Amsterdam, 1965, p. 714
10a H. Vinek, H. Noller, M. Ebel, K. Schwarz: J. Chem. Soc., Faraday Transactions I., **73,** 734 (1977)
b H. Noller, H. Vinek, J. Lercher: Proc. 7° Simposio Ibero-Americano de Catalisis, La Plata 1980 in print
11. V. Guttmann: Chemische Funktionslehre, Springer, New York, 1971
12. G. C. Pimentel, R. D. Spratley: Understanding Chemistry, Holden-Day Inc., 1971
13. J. W. Ward: J. Catal., **10,** 34 (1968)
14. K. Thomke, H. Noller: Proc. of the Fifth Internat. Congress on Catalysis, Miami Beach, Fla, 1972, North-Holland Publ. Comp., 1973, p. 1183
15. H. Noller, K. Thomke: J. of Molecular Catalysis, **6,** 375 (1979)
16. K. Thomke: Proc. of the Sixth Internat. Congress on Catalysis, London, 1976, The Chem. Society Burlington House, London, 1977, p. 303
17. H. Noller, P. Andreu, M. Hunger: Angew. Chem. internat. Edit. **10,** 172 (1971)
18. H. Noller, P. Andreu, E. Schmitz, S. Serain, O. Neufang, J. Giron: Proc. of the Fourth Internat. Congress on Catalysis, Moscow, 1968, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1971
19. K. Thomke: Zeitschrift f. Phys. Chemie Neue Folge, **106,** 295 (1977)
20. I. Batta, S. Börcsök, F. Solymosi, Z. G. Szabó: Proc. of the Third Internat. Congress on Catalysis, Amsterdam, 1964, North-Holland Publ. Comp., Amsterdam, 1965, p. 1340
21. G. Ertl: Proc. of the Seventh Internat. Congress on Catalysis, Tokyo, 1980, in print, P2
22. J. Lercher: to be published
23. N. Takezawa, H. Kobayashi: J. of Catalysis, **28,** 333 (1973)
24. J. Latzel, F. Kaubowetz, H. Vinek: Zeitschrift für Phys. Chemie Neue Folge **105,** 327 (1977)
25. M. Utiyama, H. Hattori, K. Tanabe: J. of Catalysis **53,** 237 (1978)
26. G. Forster, H. Noller, H. Vinek: Proc. of the Fifth Ibero-American Symp. on Catalysis, Lisbon, 1976 Edited in 1979 in Lisbon, p. 138
27. H. Vinek, H. Noller: Zeitschrift für Phys. Chemie Neue Folge, **102,** 247 (1976)
28. G. M. Schwab, H. Kral: Proc. of the Third Internat. Congress on Catalysis, Amsterdam, 1964, North-Holland Publ. Co. Amsterdam, 1965, p. 433
29. G. M. Schwab, J. Block: Zeitschrift für Phys. Chemie Neue Folge, **1,** 42 (1954)
30. M. Ai: Proc. of the Seventh Internat. Congress on Catalysis, Tokyo, 1980, in print, B28
31. H. Pätow, L. Riekert: Ber. Bunsenges. Phys. Chemie **83,** 807 (1979)
32. M. Ai: J. Cat. **54,** 223 (1978)
33. J. Masson, J. Bonnier, P. H. Duvigneaud, B. Delmon: J. Chem. Soc. Faraday Transactions I, **73** (10), 1471 (1977)

Fordította:
Juhász Jenő

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 421—428

AZ ELEKTROLITOK DINAMIKUS RENDEZETTSÉGE*

G. Resch és V. Gutmann

(Institute of Inorganic chemistry, Technical University of Vienna, Getreidemarkt 9, 1060 Wien, Ausztria)

Érkezett 1981. január 3-án

Bevezetés

Az elektrolitokban a folyadék fázist jelentős részben ionok alkotják. Az alkotórészeket gyakorlatilag lehetetlen egymástól elkülöníteni, hiszen mindegyikük kapcsolatban van, összefügg a másikkal [1]. A szolvatáció termodinamikai elmélete bevezeti a termodinamikai függvények koncentráció függésén alapuló extratermodinamikai egyenleteket, az önkényesen választott standard állapotokat és mindazokat a kiegészítéseket, amelyek a nem elektrolitokban való szolvatációnak és az ionos szolvatációnak — mely az ionok között fellépő nagytávolságú Coulomb kölcsönhatások eredménye — összetevéséből adódnak [2]. A folyadék fázis statisztikus termodinamikai modellje erősen közelítő jellegű. A rendezettség statisztikus elméletéből következő szerkezeti megfontolások relatív helyzeteinek statisztikusan számított átlagértékeit adják meg. Nincs megfelelő kísérleti módszer arra, hogy a folyamat dinamizmusára közvetlen adatokat nyerjünk — különösképpen igaz ez a vizes oldatokra [3]. Így a valóságot pusztán a statisztikus eredmények felhasználásával nem lehet leírni.

Bármelyik közelítést alkalmazzuk, a torzulások, eltérések elkerülhetetlenek, így a rendszernek nincs egyetlen olyan része sem, melyet teljesen ismerünk [4]. Ez feljogosít bennünket arra, hogy tudományos ismereteink bővítésére egy másfajta szempontot válasszunk. Az adott elektrolit viselkedésének leírására a szokásos ion és oldószer molekulákkal történő absztrakt leírás alkalmazható, de a megfontolásokat a részecskéknek a rendszer egészén belüli megkülönböztetésére is ki kell terjeszteni. A részecskék kölcsönös átfedése révén ugyanis valószínűtlen, hogy a rendszeren belül gyakorlatilag azonos szerkezetű és sajátságú molekuláris egységek lennének. A közöttük levő különbségeket meg kell állapítani, és rendszerezni kell a folyadék rendszeren valamint a kapcsolatok egészén belüli jelentőségük szempontjából. Ez a részecskéknek (a) a rendszeren belüli idő és hely szerinti jelentőségük (b) az egész rendszeren belüli jelentőségük szerinti csoportosítását jelenti.

* A Koordinációs Kémiai Munkabizottság ülésén elhangzott előadás nyomán.

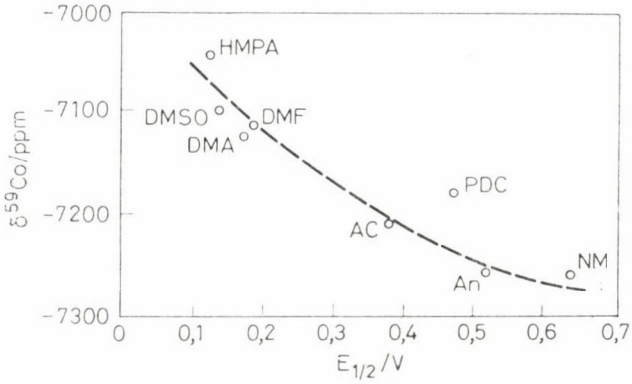
A szilárd fázisra, ahol a rendezettség statisztikus jellege sokkal jellemzőbb, mint a folyadék fázisban, ezeket a megfontolásokat sikerrel alkalmazták. Egy hierarchikus rendszert feltételeztek, melyben az alkotórészecskék különböző, egyre növekvő szinteken helyezkednek el.

Minél magasabb a szint, annál kisebb a rendszert felépítő részecskék tulajdonságainak jelentősége. A szintek: felület > szemcsehatárok > diszlokációk > ponthibák > szabályos rácspontok irányban csökkennek. Ugyanilyen módon változik az egy részecskére jutó relatív energia (csökken), a feszülési tér erőssége (csökkenő), a változtatásokkal szembeni ellenállás (csökkenő), a relaxációs idő (csökkenő) és a szintet alkotó részecskék száma (növekvő). A ponthibákat (intersticiális atomok, lyukak vagy idegen atomok) a rácsszerkezet megváltoztatja, és ezek is változtatják a rács szerkezetét, így rácsszerkezet által módosított és egyben szerkezet módosító központoknak tekinthetők (structure *mod*ified, structure *m*odifying center — SMM-központ) [5]. Vizsgáljuk meg, hogyan alakulnak ki ilyen hierarchikusan rendezett szintek a folyadék állapotban — különös tekintettel az elektrolitikra.

A részecskék idő és hely szerinti jelentősége

Az oldószer molekulák nagyon specifikusan vesznek körül minden egyes iont. A mikroszkópikus szerkezeti jellegzetességek nemcsak az ionok és az oldószer természetéből, hanem a különböző részecskék közötti kölcsönhatásoktól és a koncentrációtól is függnek. A környező oldószermolekulák megváltoztathatják az iont, az ion szerkezete és tulajdonságai függnek az oldat összetételétől. Ez bizonyítható pl. különböző oldószerek azonos mennyiségű $NaClO_4$-t tartalmazó oldataiban a ^{23}Na NMR kémiai eltolódási mérésével [6]. A ^{23}Na kémiai eltolódása és az oldószer donicitása között lineáris összefüggést találtak. Hasonló eredményeket kaptak különböző oldószerekben ^{59}Co-ra vonatkozóan az olyan nagy térkitöltésű kelátkomplexek esetén, mint pl. a triszetilén-diamin-koblat (III) [7]. A donor oldószer és a koordinált ligandum elektroszatikus kölcsönhatása következtében a koordináció középpontjában levő atom elektron sűrűsége megnövekszik, és az oldószer donicitásának megfelelő mértékben megváltozik az ^{59}Co kémiai eltolódása [7]. A fém tulajdonságainak azon változásai, melyek az oldat összetételének megváltozásából adódnak, összefüggésbe hozhatók az EME-méréssel meghatározható aktivitási koefficiens értékek megváltozásaival (1. ábra). Az említett komplex ionok esetén lineáris összefüggés van az ^{59}Co kémiai eltolódásának megváltozása és a redoxipotenciál — ezen keresztül az aktivitás — változások között [8].

Az oldószernek az ionok hatására bekövetkező változása vizes oldatokban követhető pl. a ^1H kémiai eltolódása alapján, mivel ez nagy mértékben függ mind az oldott anyag természetétől, mind annak koncentrációjától [9].



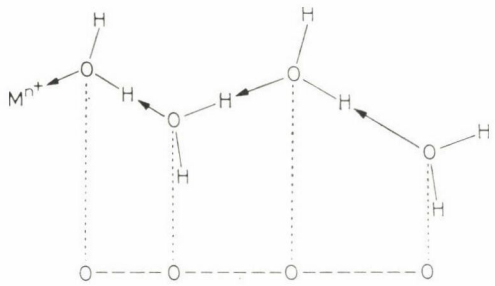
1. ábra. A $Co(en)_3ClO_4$ különböző oldószerekben mért ^{59}Co NMR kémiai eltolódása (0.4 $MK_3Co(CN)_6$ vizes oldatára, mint külső referenciára vonatkoztatva) a biszbifenil-króm (1/0)-mal szemben mért félérték potenciáljának függvényében.
(NM) nitrometán, (An) acetonitril, (PDC) propándiol-1,2-karbonát, (AC) aceton, (DMF) dimetilformamid, (DMA) dimetilacetamid, (DMSO) dimetilszulfoxid, (HMPA) hexametil-foszforsavtriamid

A specifikus ion-víz kölcsönhatások statisztikus vonatkozásai a kibővített donor-akceptor elmélet alapján magyarázhatók. Ismert, hogy a vízmolekulák az oxigén atomok révén koordinálódnak a fémhez. A koordináció következtében a fémion pozitív töltése csökken, ezzel párhuzamosan növekszik az első hidratációs szférában levő vízmolekulák hidrogénjeinek pozitív töltése. Mind a fémion pozitív töltésének vesztesége $\Delta q_{Me}n+$, mind az oxigén atomok negatív töltésének változása Δq_0-, a koordinált vízmolekulák hidrogén atomjai között oszlik meg:

$$\Delta q_{Me}n+ + \Sigma \Delta q_0- = \Sigma \Delta q_H^+ .$$

A további hidratációs szférák kialakulása a töltéssűrűségnek a rendszeren belüli, újbóli átrendezéséhez vezet. Minél nagyobb a hidrátburkok száma, annál inkább rövidülnek a belső szférás koordinációs kötések, s ugyanilyen mértékben csökken $\Delta q_{Me}n+$ is. A fémionhoz viszonyított távolság csökkenésével az O—O kötéstávolságok egyre inkább rövidülnek, az O—H—O kötések szimmetriája és linearitása növekszik, és fokozódnak a töltéssűrűség különbségek is (2. ábra). Bármely időpillanatot is tekintjük, a folyadékrendszert inhomogenitás jellemzi [3]. Az oldószer keverékben az analitikai összetételben van inhomogenitás. Egy víz-alkohol elegyben pl. a fémion közelében több víz molekula, míg tőle távolabb több alkohol molekula helyezkedik el. A kvantumkémiai számítások azt mutatták, hogy az oldószer szerkezetére gyakorolt hatás legkevesebb 15 vízmolekulára — ami kb. 40 nm távolságnak felel meg — terjed ki [12]. A kvarcnak igen szűk keresztmetszetű kapillárisokban való oldékonysága kísérletileg bizonyítja, hogy a hatás 2 μm távolságra is kiterjed [13].

Az ion-ion kölcsönhatásokat a vízmolekulák közvetítik, s az ilyen kölcsönhatások esetleg módosíthatják az egész rendszert. Tekintve, hogy az oldat különböző részecskéi kölcsönösen függnek egymástól, a szerkezet módosíthatja az iont és az ion maga szerkezetmódosító központ is (SMM központ).



2. ábra. A fémion hidrátburkának szerkezete és jellemzői

O—O	kötéstávolságok rövidülnek
O—H—O	kötések szimmetriája növekszik
O—H—O	kötések linearitása növekszik

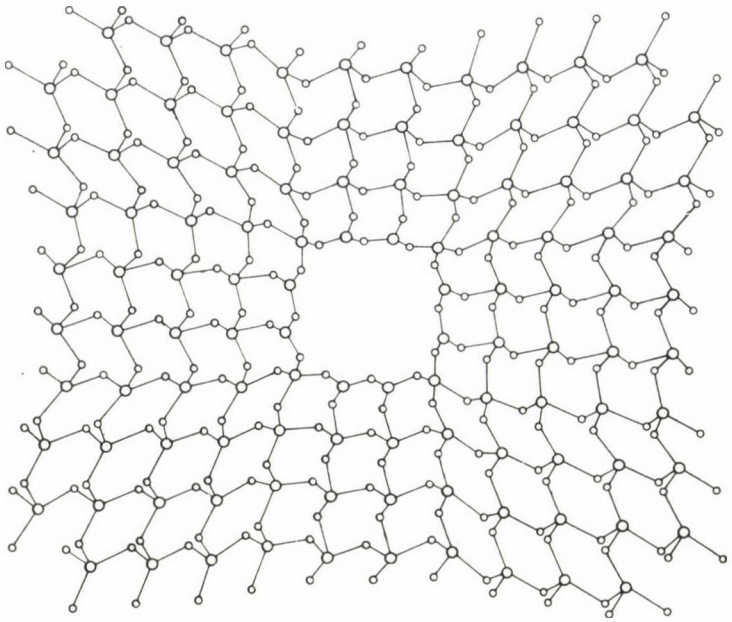
Az SMM központoknak a szerepét részletesen bemutatjuk a tiszta folyadékokban is [14]. Ismert, hogy az SMM központok a rendszeren belül vándorolnak. A hajtóerő a kémiai potenciál gradiense. A vándorlás révén az oldat makroszkópikus tulajdonságai nem változnak, sőt inkább ezáltal állandósulnak.

Az ionok létezése a makroszkópikus tulajdonságokban tükröződik. Egészen kis mennyiségű só feloldásakor mérhető változás jelentkezik pl. a gőznyomásban, felületi feszültségben, viszkozitásban és sűrűségben. Az ionoknak a nagyobb távolságban is észlelhető hatásait a következő tények még jobban alátámasztják.

a) A végtelen híg oldatra történő extrapolációkor minden egyes oldatra rendkívül jellemző értéket kapunk. A rendszer eredeti statikus és dinamikus jellemzői változatlanul megmaradnak a végtelen híg oldatra történő extrapoláció során is.

b) A szolvatáció és a többletértékek elemzése azt mutatja, hogy ez utóbbiak még $c \sim 10^{-6}$ koncentráció esetén sem tünnek el. Ez azt jelenti, hogy egy ionnak a hidrátburokra gyakorolt hatása 100 nm távolságra, azaz kb. 400 hidrátszférára terjed ki [15].

A folyékony vízben igen nagy számú „üres" hely is van. A vándorló lyukak létezése megfelelően bizonyított [16]. Azokra az oldószer molekulákra, melyek ezeket a „belső felületeket" veszik körül, vonzóerő hat, és a környezetükben levő molekulákhoz viszonyítva erősebben kötődnek egymáshoz. A klatrát vegyületek méretéhez hasonló üreg körüli víz szerkezetét mutatjuk be a 3. ábrán.



3. ábra. A „lyukakat" körülvevő víz szerkezete

A szilárd anyagokra jellemző diszlokáció-hálózat analógiája alapján a folyadékban a lyukakat tartalmazó rész egy csatornahálózatnak tekinthető, amely azonban nem ér véget valahol a fázis belsejében, hanem mindkét vége eléri a felületet vagy zárt hurkot képez. A csatornákat körülvevő molekulákra — összehasonlítva a kicsiny lyukakat szegélyezőkkel — feltehetőleg nagyobb vonzóerő hat, s így az „összehúzódás" is jelentékenyebb.

Az „oldószer kontrakció" a folyadék fázishatárain még sokkal inkább jellemző. A felületi részecskékre igen nagy vonzóerő hat, és minél több SMM központ van a határrétegben, annál nagyobb helyi görbület alakul ki. Annak ellenére, hogy a felület makroszkópikusan „sík", mikroszkópikusan sohasem az. A csatornák kiindulási pontjainál a felület helyi görbülettel rendelkező ún. tölcséreket tartalmaz, s ezek a pontok a legreaktívabbak.

A folyadékrendszerre jellemző dinamikus jelleg következtében ezek a „tölcsérek" állandóan változtatják helyzetüket, de a rendszerre ennek ellenére mindaddig ugyanaz a stacionárius modell érvényes, ameddig a rendszer makroszkópikus tulajdonságai nem változnak.

Az alkotó egységeket — idő és hely szerinti jelentőségüket figyelembe véve — a következőképpen osztályozhatjuk: (a) határfelületek, (b) csatornák, (c) lyukak vagy ionok (SMM központok) és (d) a mikroszkópikus környezet azon részecskéi, melyeket „normális" oldószer molekuláknak nevezhetnénk. Minden csoporton belül további megkülönböztetéseket tehetünk oldószermolekulák, kationok, anionok és az oldott anyag molekulái szerint.

A különböző részecskék jelentősége az oldatban

Valamely oldat egészére vonatkozó idő és hely szerinti jellemzők összesítéséhez rendszereznünk kell a különböző részecskék közötti kapcsolatokat. A folyékony víz nagyfokú mozgékonysága révén páratlanul jól alkalmazkodik a változásokhoz (igen jó energia- és információ feldolgozó, raktározó készség). Különösen a felületi molekulák nagyon mozgékonyak s ebben felülmúlják a csatornahálózatok és részben azoknak az SMM központoknak a molekuláiét is, melyek helyváltoztatásukkal nagyon gyorsan megváltoztatják a rendszer inhomogenitását.

Az egy részecskére jutó átlagos relaxációs idők és energiák valamint az oldószer molekulákra ható vonzóerők a határfelület > csatornák > SMM központok > „normális" oldószer molekulák irányában csökkennek. Jelentőségük az oldatban különböző. Kölcsönös átfedésük mértékének megfelelően a részecskék eltérő módon hatnak egymásra, és ezáltal alakulnak ki a hierarchikus rendszert jellemző különbségek. A részecskék fokozatosan növekvő szinteken helyezkednek el; egy szint hierarchikusan annál magasabb, minél nagyobb a jelentősége a rendszer egészére vonatkozóan. A felsőbb szinteken ható erők minden más hatásnál sokkal erősebben irányítják, szabályozzák az alsóbb szinteken levő részecskéket.

A folyadékban a felület a legjelentősebb az egész rendszerben: a felület alkalmazkodik legjobban a változásokhoz, részecskéi nagy energiájúak, hatalmas vonzóerő hat rájuk. A felület szabályozza a rendszer anyag és energia kicserélődését. Ez olyan dinamikus kölcsönhatásokon keresztül valósul meg, amely bármilyen változást megenged a folyadék valamely részében s ez mindenegyes részletben, de különösen a felületen „láthatóvá" válik. A felület minden egyes pontja — amint az a megfontolásokból „látható" — mutatja a rendszer statikus és dinamikus jellemzőit. A rendszer fluktuációja, dinamikája és hasonlóan a statikája is egy három dimenziós rétegben összegeződik a felületen. A „legreaktívabb" pontok a „tölcsérek", melyekből az információk a csatornákon keresztül a rendszer minden egyes pontjához eljutnak.

A különböző felületek és a rendszer belseje közötti dinamikus kölcsönhatások szempontjából a csatornahálózat a legjelentősebb. A legnagyobb felületi energiájú területek, melyeket „tölcséreknek" neveztünk, különböző módokon kapcsolódhatnak össze: (a) a csomópontokat és metszéspontokat tartalmazó csatornákon, melyek csatornahálózatot alkotnak, (b) a tölcsérek közötti felületeken keresztül. Minden terület összefüggésben van a másikkal, és egy egymást összekötő, zárt hurkot képez. Az anyag, energia és információ a felületről a rendszer különböző részecskéjéig, vagy ellentétes irányban is irányulhat, vándorolhat, de megfelelő helyen raktározódhat is. Mivel a csatornahálózat egységeire kisebb erő hat, mint a felületen levőkre, így ezeket a felületen ható erők szabályozzák, azaz a csatornahálózat a felületnek alárendeltje.

Mind a felület, mind a csatornahálózat a külső vagy belső felületek változó görbületű területein képezhet és megsemmisíthet lyukakat. Az oldott molekulákhoz, ionokhoz hasonlóan a lyukak is SMM központok, melyekre a legfelsőbb szinten működő erők gyakorolnak döntő hatást. Mozgásuk oka a kémiai potenciál gradiense, mozgásukkal párhuzamosan új gradiens alakul ki. Megváltozik az analitikai összetétel, az ionok, lyukak vagy oldott molekulák helye, sőt néha a stacionárius szerkezeti modell sem marad állandó. Dinamikus rendezettségről akkor beszélhetünk, amikor ez a szabályozó rendszer kialakul. Ezt közvetlenül megfigyelni ugyan nem tudjuk, de azt leírhatjuk, hogy a rendszer komplex összefüggésein belül milyen szerepük van a különböző részecskéknek. A rendezettség megszűnik, ha a rendszert akár gondolatban, akár fizikailag felosztjuk. Az alacsonyabb szintek egységeinek sajátságaiból ilyenformán nem kaphatók információk a magasabb szintek számára, azaz a dinamikus rendezettség szabja meg a részecskék tulajdonságait és nem fordítva.

Az SMM központok és mozgásuk meghatározzák a rendszer „normális" részecskéinek viselkedését. Az oldószer molekulák legtöbbje, kivéve az ionokhoz koordináltakat, a vizsgált rendszer statisztikus adatait meghatározó, legalacsonyabb hierarchikus szintet töltik be.

A makroszkópikus tulajdonságokkal való kapcsolatok

A különböző szinteken belül és között folytonosan lejátszódó dinamikus kölcsönhatásokkal értelmezhetjük egy adott elektrolit viselkedését, így a gőznyomás, vezetőképesség, az elektród-elektrolit határfelület jellemzőit. A hierarchikus rendezettség a rendszernek nem annyira egy bizonyos állapotát, sokkal inkább a változásokat írja le, melyeket a rendszerben ható erők előidéznek. Mérhető változás mutatkozik például a standard sebességi állandóban, a látszólagos átviteli számban, amikor az elektród vagy az elektrolit megváltozik [17]. Ez az elektród és elektrolit fázishatárain azaz mindkét fázisnak azon hierarchikusan legmagasabb szintjén lejátszódó kölcsönhatások következménye, mely szint minden alsóbbrendű szint változását kiváltja.

Következtetések

Ezek a megfontolások alkalmasak arra, hogy megértsük a folyadék rendszereknek mind statikus, mind dinamikus jellegét. A térhez hasonlóan a rendezettséget sem lehet közvetlenül megvizsgálni, de működése révén azaz a rendszerre ható külső tényezők által előidézett, a makroszkópikus tulajdonságokban mutatkozó változások alapján megismerhető. Az ezekre vonatkozó különböző területeken végzett kísérletekkel vizsgálhatók, és elindíthatnak rendszeres kutatásokat is.

Összefoglalás

Szerzők az elektrolitoldatokban az ionok és az oldószermolekulák dinamikus kölcsönhatását tételezik fel, melynek eredményeképpen a koordináció középpontjában levő atom és a donáló ligandumok elektronsűrűsége változik, következményképpen változnak a koordinációs-szféra kötésviszonyai is. A koordinációs szférát alkotó részecskék között „csatornahálózatot, lyukakat, tölcséreket" tételeznek fel, melyeknek — szerzők szerint — döntő szerepe lehet az elektrolitoldatok makroszkópikus tulajdonságainak alakulásában.

Summary

In electrolytic solutions a dynamical interaction between ions and solvent molecules is presumed which interaction results in a change of the electron density of the atom in the centre of the coordination and the donor ligands. As a consequence of this change, also the bonding conditions of the coordination sphere are changing. A „channel system, holes and funnels" are presumed between the component particles forming the coordination sphere which are assumed to play a decisive role in the development of the macroscopic properties of electrolytic solutions.

IRODALOM

1. Gutmann, V., Resch, G.: Z. Chem. **19,** 406 (1979)
2. Friedman, H. L., Krishnan, C. V.: in „Water", Ed. Franks F., **3** 1, Plenum, N. Y. 1978.
3. Gutmann, V., Plattner, E., Resch, G.: Chimia **31,** 431 (1977).
4. Resch, G., Gutmann, V.: megjelenés alatt.
5. Gutmann, V., Resch, G.: Acta Chimica Hungarica közlés alatt.
6. Erlich, R. H., Popov, A. I.: J. Am. Chem. Soc. **93,** 5620 (1971).
7. Gonzales, G., Mayer, U., Gutmann, V.: Inorg. Nucl. Chem. Letters **15,** 155 (1979).
8. Kotocova, A., Mayer, U., Gerger, W., Gutmann, V.: J. Elektroanal. Chem. **100,** 875 (1979).
9. Például: Tucker, E. E., Lippert, E.: „The Hydrogen Bond — Recent Advances in theory and Experiment", Eds Schuster P. North. Holland Publ. Co. Amsterdam, 1976. 17. fejezet.
10. Gutmann, V.: The Donor-Acceptor Approach to Molecular Interactions, Plenum Press, New York, 1978.
11. Gutmann, V.: Rev. Chim. Roum. **22,** 619 (1977).
12. Roda, B. M., Fujiwara, S., Fukikura, R.: személyes közlés.
13. Schuller, D.: Naturwiss. **60,** 145 (1973).
14. Gutmann, V., Resch, G.: Proc. V. Int. Conf. Solute-Solute-Solvent Interactions, Firenze (1980).
15. Barthel, J.: személyes közlés.
16. Szabó G.: Acta Chim. Hung. **40,** 275 (1964).
17. Baranski, A., Fawcett, W. F.: J. Electroanal. Chem. **94,** 237 (1978).

Fordította:

Kathó Ágnes

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 429—445

ACÉL KORRÓZIÓS KIFÁRADÁSA VIZES OLDATOKBAN — ELEKTROKÉMIAI VIZSGÁLATOK

P. L. Bonora,* G. Cerisola,** P. L. De Anna*

(C. N. R. Centro Studi di Chimica e Chimica Fisica Applicata alle Caratteristiche d'Impiego dei Materiali, Genova, Italia*
***Laboratorio di Chimica per l'Ingegneria, Facoltá di Ingegneria, Universitá di Genova)*

Érkezett 1981. március 16-án

Bevezetés

A korróziós kifáradás az újabb irodalmi nézetek [1—4] szerint több tudományágat érintő jelenség, amelyet nem lehet egy nézőpontból vizsgálni. Átfogóbb értelmezéséhez mind metallurgiai, mind anyagtudományi ismeretek továbbá mechanikai, elektrokémiai és korróziós vizsgálatok szükségesek.

A korróziós kifáradás tanulmányozásakor számos kérdés merül fel:

a) A repedési góc képződésének vagy a repedés terjedésének van-e nagyobb szerepe a korróziós kifáradás kialakulásában? [5, 6, 7]

b) Mi a kémiai és mechanikai hatások relatív szerepe? [4, 8]

c) Található-e szoros kapcsolat a korróziós kifáradás és a feszültség-korróziós repedés között? [9, 11]

d) Mi az alkalmazott terhelés amplitúdójának, szimmetriájának és frekvenciájának befolyása? [10, 12]

Közismert, hogy a korróziós kifáradás szinergetikus mechanikai és elektrokémiai hatások eredménye. Ennek ellenére a kutatások zömét a mechanikai szilárdságtanban elterjedt módszerekkel végzik: így például feszültség-erő diagrammokat, mikrográfiai elemzéseket alkalmaznak. Viszont több más mechanikai-kémiai korróziós jelenséget (mint pl. eróziós-korrózió, kavitáció, feszültség-korróziós repedés) rendszerint elektrokémiai nézőpontból közelítenek meg.

A közelmúltban néhány közlemény jelent meg a korróziós kifáradás elektrokémiai vonatkozásairól. Duquette [1] vizes rendszerekben fellépő korróziós kifáradásról szóló értekezésében néhány példát említ arra vonatkozóan, hogy a lágy acél kifáradása bizonyos katódos potenciálokon gátolható.

Parkins [9] karbonát-bikarbonát oldatokba merített és különböző potenciálokra polarizált lágy-acél mintadarabon vizsgálta a repedés növekedését különböző ciklikus terhelések hatására. A kísérleti körülményektől függően intergranuláris vagy transzgranuláris terjedést állapított meg.

ENDO és KOMAI [11] a korróziós potenciál időbeli változásának jellegét vizsgálta különböző erősségű és változó frekvenciájú ciklikus mechanikai feszültségnek alávetett mintadarabok esetében. A szerzők megállapították, hogy a növekvő amplitúdójú ismételt terhelés hatására a korróziós potenciál gyorsabban tolódik el az aktív tartomány irányába. Minél gyorsabb a korróziós potenciál eltolódása annál nagyobb mérvű korróziós kifáradás várható.

DESESTRET [13] potenciokinetikus mérésekkel és a korróziós potenciál időbeli változásának regisztrálásával vizsgálta különleges rozsdamentes acélok korróziós kifáradását.

Az elmúlt években laboratóriumunkban is vizsgáltuk a korróziós kifáradás során fellépő elektrokémiai reakciókat különös tekintettel a hőkezelés [3] és az inhibitorok hatására [14], továbbá az alkalmazott oldat elektromos vezetőképességének és az alkalmazott ciklikus feszültség alakjának, amplitúdójának, valamint frekvenciájának befolyására [12].

A jelen közleményben néhány példán bemutatjuk a korróziós kifáradás és az elektrokémiai tényezők kölcsönhatását és új eredményeket ismertetünk a vas korróziós kifáradására vonatkozóan lúgos közegben, kloridion-mentes oldatokban és kloridionok jelenlétében.

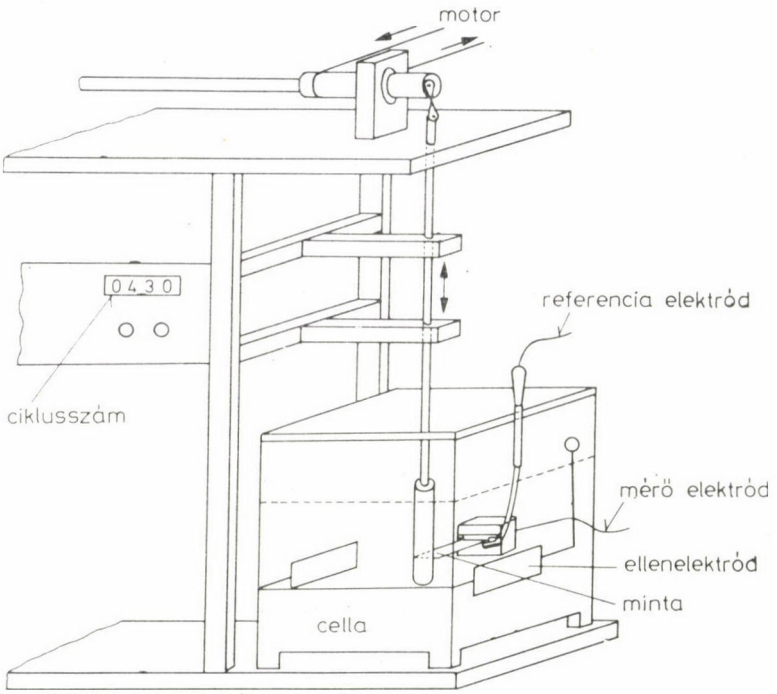
Kísérleti rész

Módszerek és anyagok

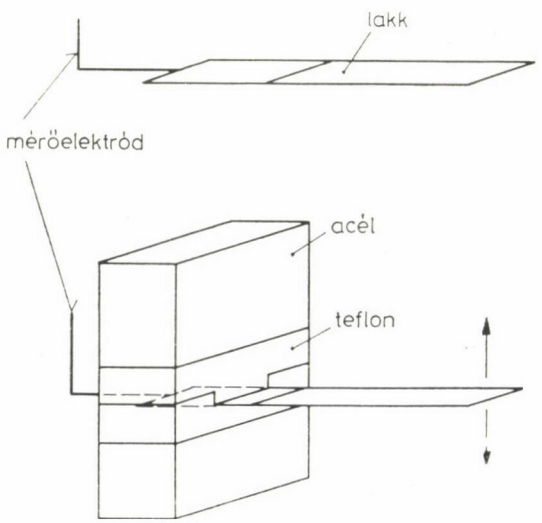
A mintalemezek ($10 \times 60 \times 0{,}2$ mm) korróziós kifáradását az 1. ábrán bemutatott berendezésben vizsgáltuk. A lemezeket 600-as finomságú csiszolópapírral csiszoltuk és alkohollal zsírtalanítottuk. A lemezeket a 2. ábrán bemutatott szerkezettel fogtuk be a készülékbe. A lemez szabad végén szinusz alakú szimmetrikus terhelést hoztunk létre.

Az alkalmazott minták alacsony széntartalmú acélból (0,004% C, 0,34% Mn, 0,01% P, 0,02% S) készültek és különösen alkalmasak a korróziós kifáradás tanulmányozására. Az acél szemcseméretе nagy (25 μm) és egyenletes eloszlású. A szemcsék határfelülete anódos potenciálú a mátrixhoz viszonyítva és így agresszív környezetben, ciklikus feszültség hatására a károsodás preferenciálisan a szemcsék határfelületén lép fel és itt keletkezik a korróziós repedési góc, amely intergranuláris repedéshez vezet. Ugyanez az anyag levegőn végzett feszültség igénybevétel hatására transzgranuláris repedést mutat. A mátrix és a szemcse határfelület között nincs mechanikai rés.

Az elasztikus sugár elmélet [15] szerint a lemez végének elmozdítása kétféle feszültséget idéz elő: a σ hajlító feszültséget és a τ nyíró feszültséget. Ezeknek az értéke a lemez szabad végétől kezdve nő és a rögzített részen éri el a maximális értéket. Következésképpen az elektrokémiai paraméterek hatása is



1. ábra. A kifáradásos korrózió vizsgálatára alkalmazott kísérleti berendezés vázlata



2. ábra. A mintalemez befogása

ezen a helyen a legnagyobb. Ezért a 2. ábra szerint befogott mintalemezek 50 mm hosszú szabad felületét lakkréteggel vontuk be, kivéve a befogás közvetlen közelében levő, legnagyobb feszültségnek alávetett 1 cm^2 nagyságú felületet. A mintalemezek elmozdulása a szabad végükön ± 1 cm volt, amely a befogás mentén $\tau = 0{,}05$ $kgmm^{-2}$ maximális nyírófeszültséget és $\sigma = 25{,}4$ $kgmm^{-2}$ maximális hajlítófeszültséget hozott létre. Ezek az értékek jóval kisebbek mint az anyag törési határa levegőn. Az igénybevételnél alkalmazott frekvencia 8,3, 16,7 és 25 Hz volt.

A következő vizsgálati oldatokat alkalmaztuk:

1. 0,3% Na_2SO_4
2. 0,3% Na_2CrO_4
3. 3% NaCl
4. Telített $Ca(OH)_2$
5. Telített $Ca(OH)_2$+1000 vagy 2000 ppm Cl^-

Az oldatokat ionmentes vízben készítettük.

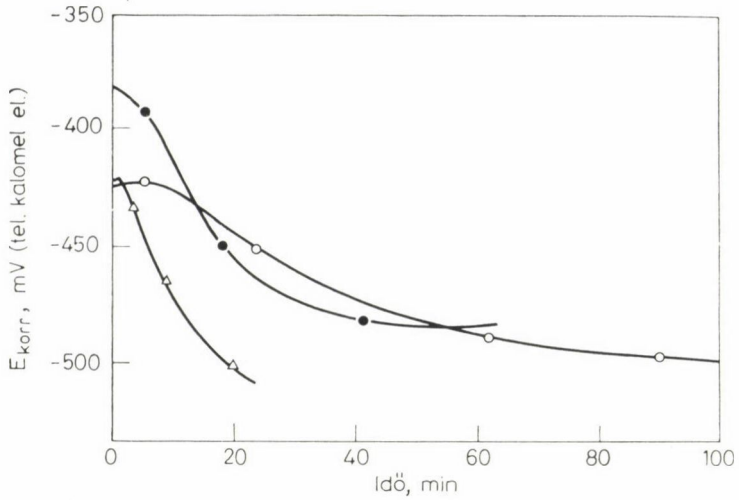
Elektrokémiai jellemzők

Előző közleményünkben kimutattuk a növekvő korróziós kifáradás hatását ciklikus feszültségnek alávetett fémek néhány elektrokémiai paraméterére vizes oldatokban.

A vizsgálatok egyik célja az volt, hogy igazoljuk az elektrokémiai reakciók jelentőségét mind a repedési gócok keletkezésénél mind a fáradásos repedés terjedésénél vizes környezetben. Az eddigi eredmények összefüggést mutatnak az ellenőrzött elektrokémiai tényezők és az acél korróziós kifáradása között. A következőkben a legjellemzőbb példákat ismertetjük:

A) A korróziós potenciál ($E_{korr.}$) változása nyitott áramkörben

A korróziós potenciál változása ciklikus terhelés közben összefüggésbe hozható mind a polarizáció mechanizmusának, mind a katódos és anódos felületek eloszlásának változásával. Ezért nehéz egyértelműen magyarázni az E_{korr} — idő függvényeket. A korróziós potenciál általában negatív irányba tolódik el az első terhelési ciklusok alatt, amikor a dinamikus körülmények valószínűleg depolarizálják a katódos reakciót azaz az oxigén redukciót. Az ezt követő mikrorepedés gócképződése egyrészt fokozza az anódos reakciót, másrészt megnöveli a felületet és következésképpen a korróziós potenciál az aktív irányba tolódik el. A 3. ábrán egy mintalemez korróziós potenciáljának változását mutatjuk be az idő függvényében. A mintadarabot 0,3% Na_2SO_4 oldatban (pH = 7) vetettük alá terhelésnek 8,3, 16,7 és 25 Hz frekvenciával. A korróziós potenciál csökkenése nagyobb frekvencián gyorsabb volt. Ez a jelenség vagy az anódos oldódás sebességének vagy az anódos felületrészek

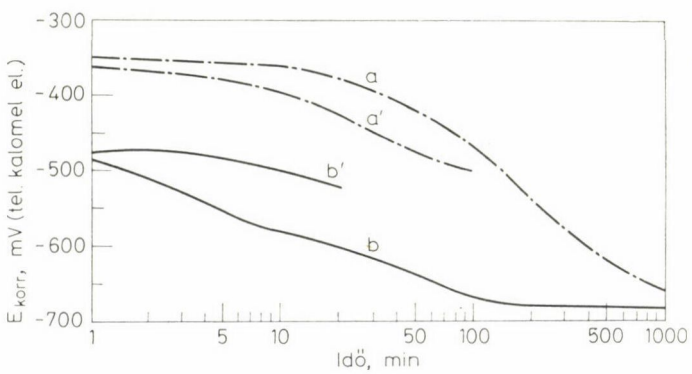


3. ábra. Acél mintalemezek korróziós potenciáljának (E_{korr}) változása az idő függvényében ciklikus terhelés közben 0,3% Na_2SO_4 oldatban

○ — 8,3 Hz
● — 16,7 Hz
* — 25 Hz

nagyságának növekedésével indokolható. Az utóbbi feltevés tűnik valószínűbbnek, mert a repedések száma a mintadarabon nagyobb frekvencián nő.

A 4. ábrán ARMCO acél potenciál — idő diagramját mutatjuk be 25 °C-on 0,5 mol/l NaCl oldatban terhelés nélkül és 16,7 Hz frekvenciával történő terheléssel. A mintadarabokat kétféle hőkezelésnek vetettük alá. Az egyik hőkezelés (az *a* jelű görbe a mintalemez terhelése nélkül, az *a'* jelű görbe pedig, a ciklikus terhelésnél észlelt adatokat tünteti fel) egyenletes korróziót eredményez, a szemcsehatárokat korrózióállóbbá teszi. Ez esetben transzgranu-



4. ábra. A korróziós potenciál változása az idő függvényében Bonora és munkatársai [3] szerint

A) hőkezelés (a görbe — terhelés nélkül
a' görbe — ciklikus terheléssel)
B) hőkezelés (b görbe — terhelés nélkül
b' görbe — ciklikus terheléssel)

láris repedések léptek fel. A másik hőkezelésnél (a *b* jelű görbe a mintalemez terhelése nélkül, a *b'* görbe pedig a ciklikus terhelésnél észlelt adatokat tünteti fel) mind transzgranuláris mind intergranuláris korrózió fellépett és a repedés intergranuláris volt.

A különböző hőkezelések nem gyakoroltak egyforma hatást az anyag korróziós kifáradására, valamint elektrokémiai viselkedésére. Így például a törés bekövetkezésének időtartama között egy nagyságrend különbséget észleltünk a kétféle hőkezelésnél, míg a mintalemezek korróziós potenciáljának változása a ciklikus terhelés alatt hasonló a terhelés nélkül észlelt potenciál-idő összefüggéshez. Összefoglalva tehát, az eredmények arra utalnak, hogy a korróziós hatás szempontjából preferált zóna hasonló reakciómechanizmus szerint lép reakcióba, habár a korrodeáló felületi részek különböző eloszlása igen változatos korróziós morfológiát okoz [3].

B) Potenciodinamikus polarizációs görbék

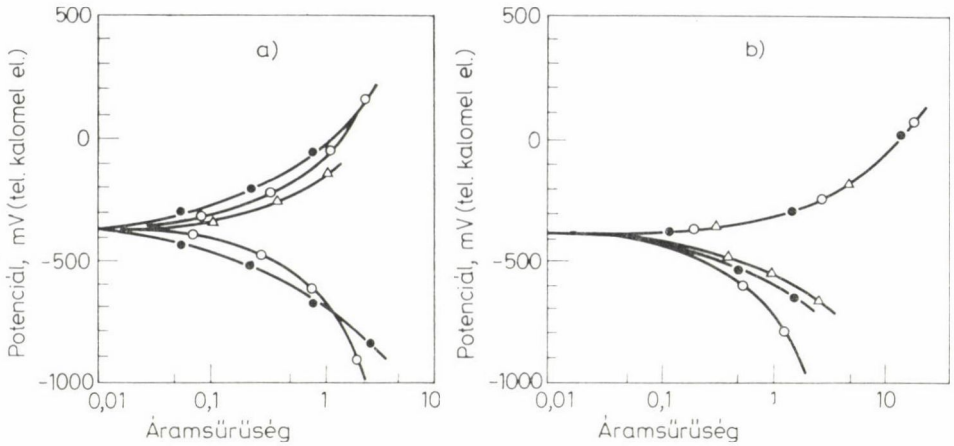
Ciklikus terhelés alatt akkor lehet potenciodinamikus áram-feszültség görbéket felvenni, ha a mintadarabok élettartama lényegesen hosszabb, mint a potenciálváltozás időtartama a potenciodinamikus görbe mérésekor. Mind a lengőkaros felerősítésnél, mind a forgókaros terhelésnél a mintadarab feszültségmentes része sokkal nagyobb, mint a feszültségnek alávetett része. Az utóbbi lényegében a mintadarab befogási helyének környezete. Ezért célszerű a mintadarabot a ciklus igénybevételnek ellenálló lakkal bevonni, természetesen szabadon hagyva a rögzített rész környezetét. Ily módon a hidrodinamikus hatások, a terhelés és a környezet befolyása az anódos és katódos reakcióra jobban követhetők a törésre hajlamos felületen.

Az 5. ábrán [12] a bevonat nélküli (**a**) és a lakkal bevont (b) acél mintalemezek áramsűrűség-túlfeszültség görbéjét tüntettük fel. A mintadarabokat három különböző frekvenciájú ciklikus terhelésnek vetettük alá 0,3% Na_2SO_4 vizes oldatában. A görbék anódos szakaszán nyilvánvaló az áramsűrűség jelentős növekedése és a hidrodinamikai körülmények befolyása a legnagyobb feszültségnek alávetett részeken. A katódos görbéken viszont látható, hogy az áram nagyobb mértékben függ a terhelés frekvenciájától, mint a terhelés nagyságától.

C) Lineáris polarizáció mérések

A lengőkaron oszcilláló acél mintadarabok polarizációs ellenállását különböző kísérleti körülmények között mérték [12, 14, 17].

A legmegbízhatóbb eredményeket a háromszögalakú jellel végzett galvanokinetikus mérések szolgáltatták. A polarizáló jel amplitúdóját és frekvenciáját úgy választották meg, hogy a kvázi-stacionárius potenciál-eltolódás ± 10 mV-ot ne haladja meg. HEITZ és SCHWENK [16] közelítő egyenlete alapján ábrázolhatjuk az I_{korr} időbeli változását ciklikus terhelés közben. Figye-



5. ábra. Potenciodinamikus polarizációs görbék 0,3% Na_2SO_2 oldatban, 750 mV/óra polarizációs sebességgel. Áramsűrűség mA cm^{-2} egységekben

● — 8,3 Hz
■ — 16,7 Hz
▲ — 25 Hz frekvencián
A — bevonat nélküli minta
B — lakkal bevont minta

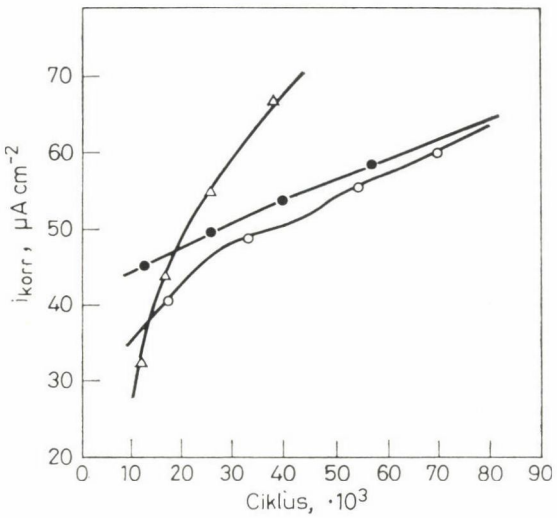
lemre méltó, hogy a korróziós kifáradás vizsgálata közben végzett polarizációs ellenállás mérések nem befolyásolják a mintadarab élettartamát a legtöbb közegben, ha a mintadarab felülete nincs passzív réteggel bevonva és az árammal történő terhelés elég rövid ideig tart. A polarizációs ellenállás mérések eredményei jól alátámasztják azt az elektrokémiai elméletet amely értelmezi a vizes közeg hatását a korróziós kifáradás által okozott repedések keletkezésére és terjedésére.

A 6. ábrán acélra vonatkozó korróziós potenciál értékeket tüntettünk fel a 8,3, 16,7 és 25 Hz frekvenciájú terhelés-ciklusok számának függvényében, 0,3% Na_2SO_4 oldatban. Nagyobb frekvenciájú terhelésnél a korróziós áram változása sokkal meredekebb, mint alacsony frekvenciák esetén. Ezek az adatok összhangban vannak a mintadarabok élettartamának a terhelés frekvenciájától való függésével. A korróziós áram adatok a korróziós áram gradiensének,

$$(dI_{korr}/dn)_{n=n_x},$$

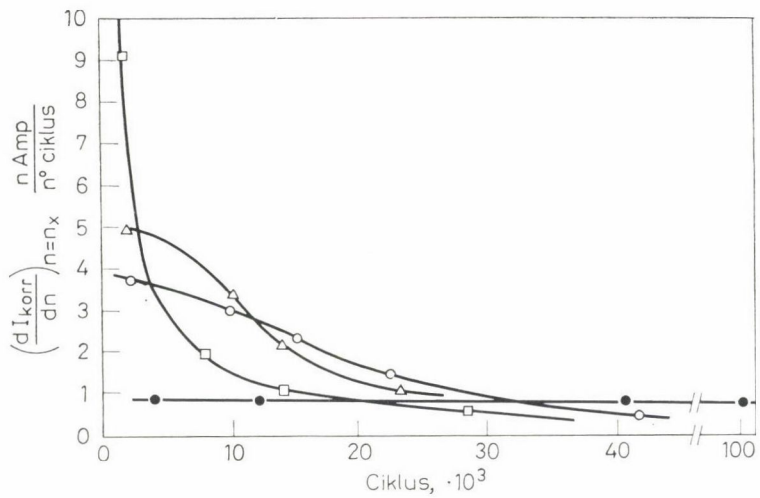
számítására is felhasználhatók. A gradiens szorosan összefügg a repedés terjedésének kinetikájával, különösen, ha a repedés terjedésének útjában különböző szerkezetű részek találhatók [17].

A 7. ábrán bemutatott görbén a dI_{korr}/dn adatokat tüntettük fel a ciklusszám függvényében. A vizsgálatnál alkalmazott acél mintalemezek felületét különböző dózisú nitrogén implantációnak vetettük alá. A fémrétegek szerkezete megváltozik az ion implantáció hatására. A kemény és rideg implantált



6. ábra. Számított korróziós áram értékek a ciklusszám függvényében kis széntartalmú minták esetében 0,3% Na_2SO_4 oldatban

● — 8,3 Hz
■ — 16,7 Hz
▲ — 25 Hz frekvencián



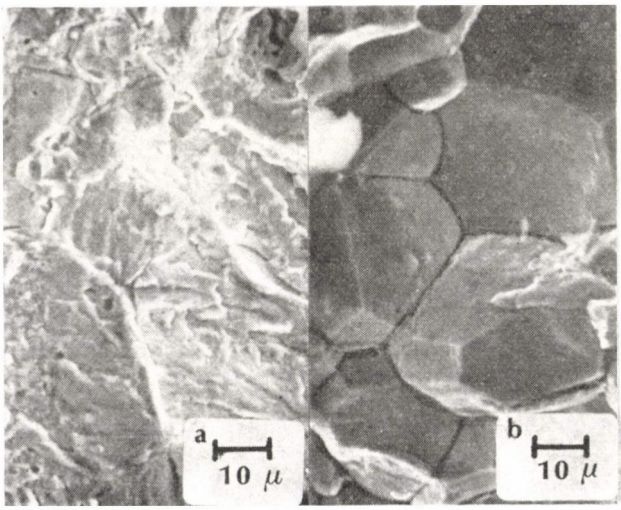
7. ábra. $(dI_{korr}/dn)_{n=n_x}$ számított értékei [17] a ciklusszám függvényében nitrogénnel implantált acélminták esetében 0,3% Na_2SO_4 oldatban 16,7 Hz frekvenciájú ciklikus terhelésnél

■ — implantáció nélkül
▲ — 10^{15} N^+ ion cm^{-2} nitrogén implantációval
□ — 10^{16} N^+ ion cm^{-2} nitrogén implantációval
△ — 10^{17} N^+ ion cm^{-2} nitrogén implantációval

rétegen mikrorepedések keletkeznek rendezetlen eloszlásban és így a reaktív felület jelentősen megnövekszik [17]. A repedések gyorsan terjednek az implantált rétegben. Kb. 10^4 ciklus után, a repedések elérik az implantáció hatásától mentes belső réteget és aktív korróziós folyamat kezdődik. A repedések csúcsa anódot, a külső implantált réteg katódot képez és a repedések terjedése meggyorsul. A repedés csúcsának terjedésével megnő az ohmikus ellenállás a felületen és 20 000 ciklus után már a repedés terjedésének sebessége megközelíti az ion implantáció nélküli lemezek esetén észlelt értéket. A korróziós potenciál gradiensének analízise a szerves festék vagy galván-bevonattal védett fémszerkezetek korróziós kifáradásának tanulmányozására is javasolható.

D) Katódos védelem

Gyakran alkalmaznak katódos védelmet, hogy megakadályozzák a felszín alatti vagy földbe süllyesztett szerkezetek korrózióját agresszív környezet és/vagy kóboráram hatására. Feltehető, hogy a katódos védelem kevésbé hatásos, ha a szerkezetre gyakorolt terhelés feszültség- vagy kifáradásos korróziót okozhat. Az általunk alkalmazott kísérleti körülmények között a potenciosztatikusan 1000 mV (tel. kalomel elektródra vonatkoztatva) katódos potenciálra polarizált mintalemezek igen nagyszámú ciklikus terhelésnek vethetők alá. A fém törését elsősorban a kifáradás határozza meg, a törés transzgranuláris (8/a. ábra) valamennyi alkalmazott terhelési frekvencián. Ugyanebben az oldatban a katódosan nem védett mintalemezek igen rövid idő alatt eltörtek és intergranuláris repedések észlelhetők, amint azt a 8/b. ábra mutatja. A



8. ábra. Pásztázó elektronmikroszkópos felvételek az acél mintalemezek törési keresztmetszetéről
a) katódosan védett minta, transzgranuláris törés
b) katódos védelem nélkül, intergranuláris törés

katódos védelem, valamint két másik korrózió-védelmi módszer, az inhibitor tartalmú oldat, vagy passziváló hatású lúgos közeg alkalmazása érdekes módon befolyásolja a fáradásos korróziós jelenségeket. (Ezeket a hatásokat a 13. ábrán szemléltetjük). Nagyobb frekvenciákon feltehetően a repedési góc képződése a korrózió sebesség-meghatározó folyamata, és ilyenkor a katódos védelem késlelteti a törést. A frekvencia csökkenésekor az inhibitoros védelem és a passziváció hosszabbítja meg a mintadarab élettartamát. 8,3 Hz frekvencián a kromátion a leghatásosabb. Feltehető tehát, hogy a mintadarabra kényszerített áram kis mértékben csökkenti az elektrokémiai hatásokat, de mikroanódok keletkezhetnek a repedésekben, ahol a katódos védelem nem hatásos és ez hozzájárul a törési idő megrövidítéséhez. Az oldat inhibitív és passziváló komponensei meggátolják a korróziós reakciókat. Elősegíti a fém védelmét a periodikus terhelés „szivattyú" hatása is, amely a repedés csúcsába friss oldatot szállít.

Eredmények és következtetések

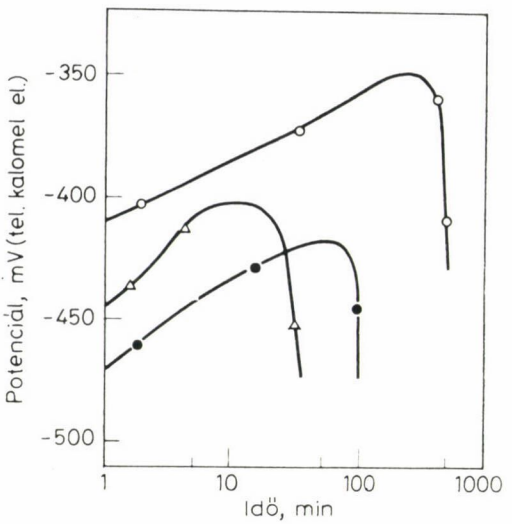
Lúgos közeg

Az acél korróziós kifáradása lúgos közegben kloridion jelenlétében és távollétében egyike azoknak a kutatási területeknek, ahol az elektrokémiai vizsgálatok megbízható eredményre vezettek. Az utóbbihoz hasonló kísérleti körülményekkel kell számolni vasbeton szerkezeteknél is. Az acél passzív állapota megszünhet bizonyos korróziós hatások következtében, amelyek a pH csökkenésekor vagy agresszív ágensek mint pl. kloridok jelenlétében [18] léphetnek fel. Ilyen lehetőséggel gyakran kell számolni hidakon, autópályán vagy autóúton. A terhelés és rezgés korróziós kifáradást idézhet elő, amely veszélyesen megrövidítheti a fém élettartamát.

A 9. ábrán a korróziós potenciál értékeket tüntettük fel, az idő függvényében ciklikus terhelés közben. A korróziós potenciál értékek szórása stacionárius körülmények között, továbbá fokozatos eltolódásuk pozitív irányba, az igen kiváló védőhatású jól tapadó passzív réteg (köbös Fe_3O_4 vagy γ Fe_2O_3) jelenlétével indokolható. A fém és a rozsda egyforma rácsszerkezete, ugyanis, gátolja a mechanikai hatásokat, azaz a réteg elcsúszását és törését.

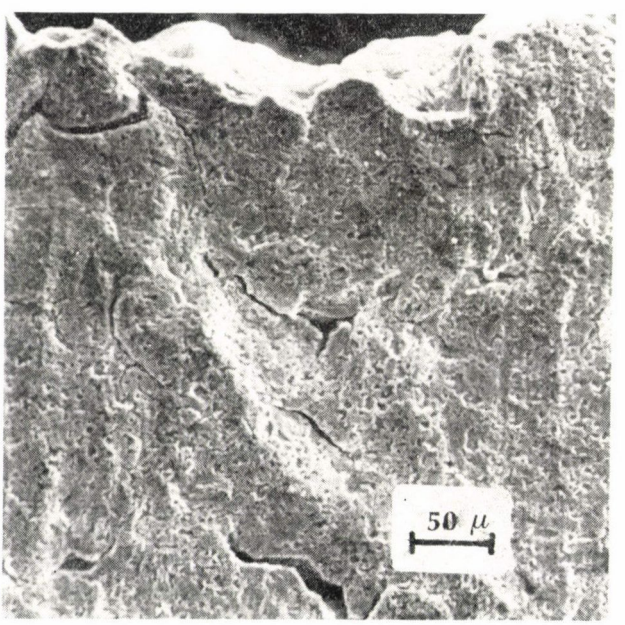
A törés útjának növekedése az utolsó néhány ciklus alatt a korróziós potenciál meredek csökkenését idézi elő. A törés morfológiáját pásztázó elektronmikroszkóppal (Electron scanning microscopy) vizsgáltuk. Az analízis tiszta kifáradási mechanizmusra utal, mert a repedés elsősorban transzgranuláris és elég világosan kivehető a kifáradásos csíkozás. Figyelemreméltó, hogy a csíkozás mérete és a csíkok közötti távolság szorosan összefügg a ciklikus terhelés frekvenciájával (10., 11. és 12. ábra).

A törési idő lényegesen hosszabb lúgos közegben, mint semleges oldatban (13. ábra).

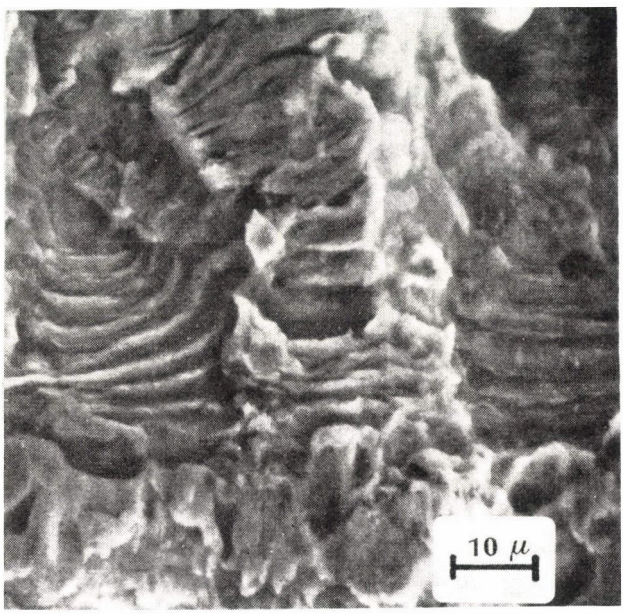


9. ábra. A korróziós potenciálok változása az idő függvényében ciklikus terhelés alatt telített $Ca(OH)_2$ oldatban

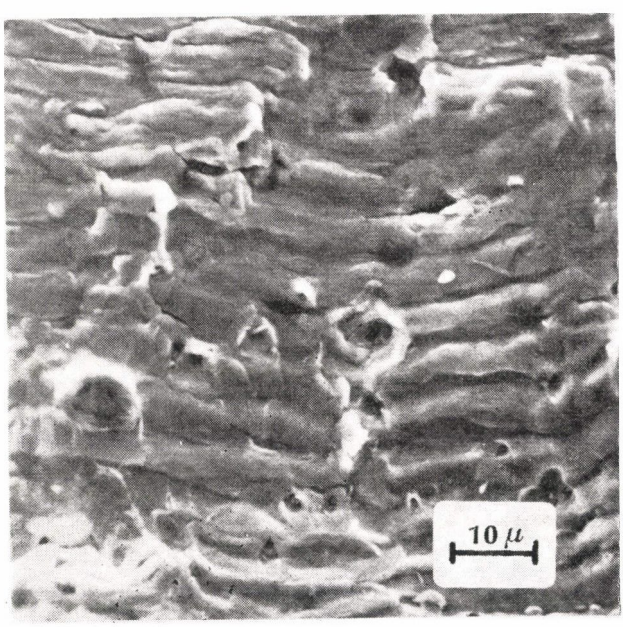
○ — 8,3 Hz
● — 16,7 Hz
× — 25 Hz frekvencián



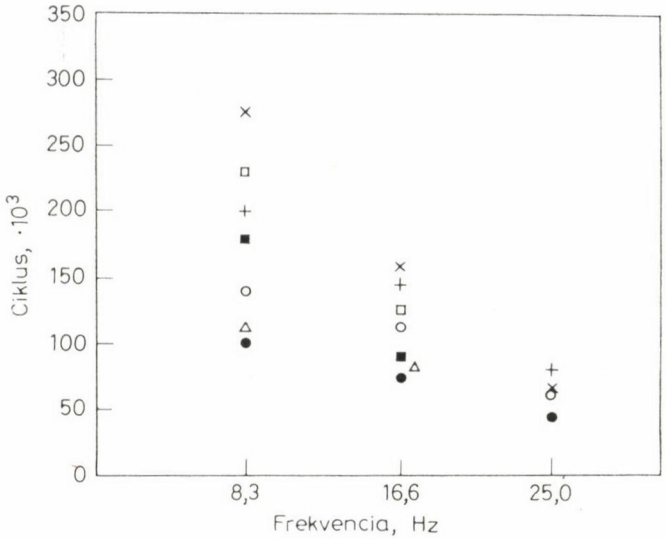
10. ábra. Acél pásztázó elektronmikroszkópos felvétele telített $Ca(OH)_2$ oldatban 8,3 Hz frekvencián



11. ábra. Acél pásztázó elektronmikroszkópos felvétele telített $Ca(OH)_2$ oldatban 16,7 Hz frekvencián



12. ábra. Acél pásztázó elektronmikroszkópos felvétele telített $Ca(OH)_2$ oldatban 25 Hz frekvencián



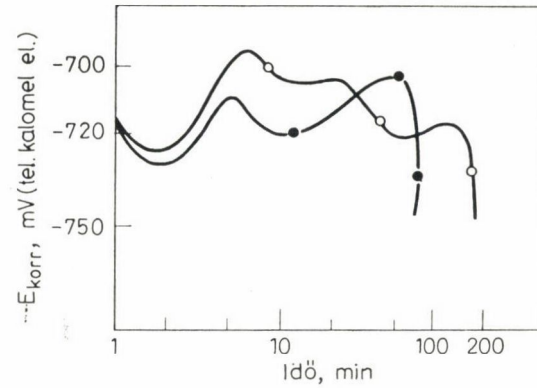
13. ábra. A mintadarab töréséhez szükséges ciklusok száma a frekvencia függvényében acél minták esetében

○ — víz; ● — 0,3% Na_2SO_4; * — 0,3% Na_2CrO_4;
\+ — 0,3% Na_2SO_4 és katódos védelem
□ — telített $Ca(OH)_2$
■ — telített $Ca(OH)_2$ + 1000 ppm. Cl^- ion
△ — telített $Ca(OH)_2$ + 1000 ppm. Cl^- ion
5 napig történő öregítés után

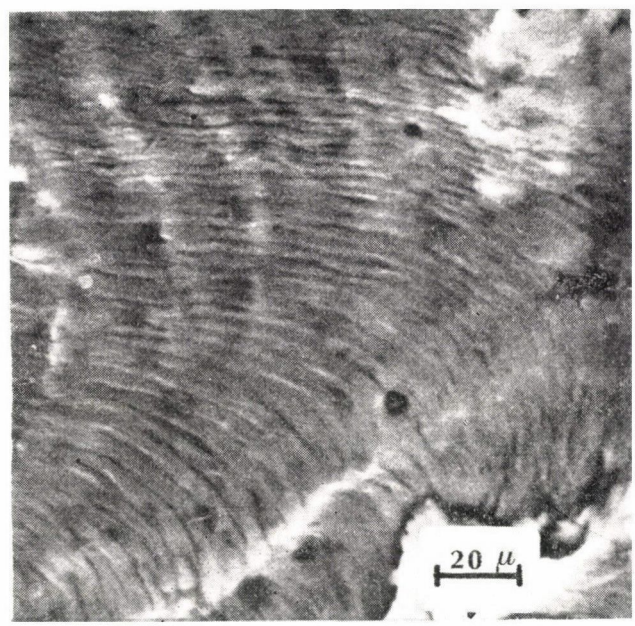
A korróziós potenciál időbeli változása és a törés morfológiájának jellege nem változott, ha közvetlenül a ciklikus terhelés előtt 1000—2000 ppm kloridot adagoltunk az oldathoz. A törési idő azonban határozottan — bár kis mértékben — rövidül, különösen kisebb rezgési frekvencián, ami annak tudható be, hogy a kloridion csak bizonyos indukciós periódus után fejt ki a passziválódást megszüntető hatást. Ez látható a 14. ábrán bemutatott E_{korr}-idő diagrammon, amely 1000 ppm kloridot tartalmazó $Ca(OH)_2$ oldatban öregített acél lemezekre vonatkozik. A korróziós potenciál értékek sokkal negatívabbak és nem észlelhető eltolódás pozitívabb potenciálok irányába, továbbá E_{korr} gyakorlatilag független a feszültség frekvenciájától. A potenciál ingadozás a kloridion jelenléte miatt fellépő depasszivációs ciklusnak tudható be, amelyet a kifáradásos repedés belső falának a lúgos oldatban végbemenő újbóli passziválódása követhet.

A törés morfológiája is jelentős mértékben változik: a lap felületén erős lyukkorózió észlelhető a törés közelében. A törések részben intergranuláris szerkezetűek és a helyi korrózió világos jeleit mutatják. Ez utóbbi kis ciklikus terhelési sebességnél fokozottabban észlelhető (15. ábra).

A 16. ábrán acél-lapok potenciokinetikus anódos áram-potenciál görbéit mutatjuk be, amelyeket 12,4 pH-jú kalciumhidroxid oldatban vettünk fel

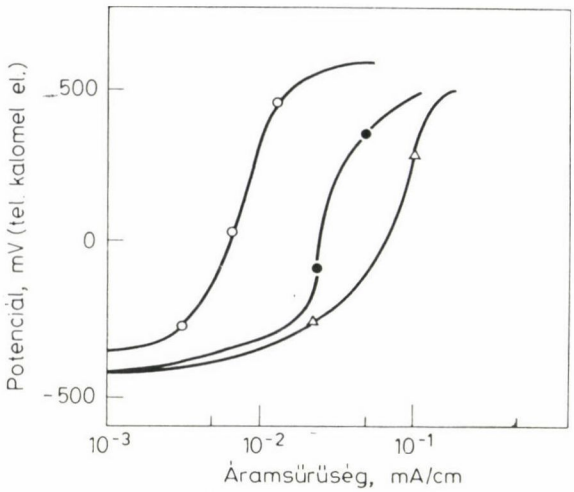


14. ábra. Acél mintalemezek korróziós potenciálja az idő függvényében 1000 ppm. Cl^- iont tartalmazó $Ca(OH)_2$ oldatban, 5 napig történő öregítés után
○ — 8,3 Hz
● — 16,7 Hz



15. ábra. Korróziós kifáradás következtében eltörött acél mintalemezek pásztázó elektronmikroszkópos felvétele. A lemez terhelése 1000 ppm. Cl^- iont tartalmazó $Ca(OH)_2$ oldatban történt

16,7 Hz frekvenciával történt ciklikus terhelés közben. Az O-val jelölt görbe kloridmentes lúgos oldatra, ill. közvetlenül a kísérlet előtt adagolt 1000 vagy 2000 ppm kloridiont tartalmazó lúgos oldatra vonatkozik. A párhuzamos mérések gyakorlatilag egybeesnek. Ennél a kísérletsorozatnál észleltük a legkisebb áramot és a legszélesebb passzivitási potenciáltartományt.



16. ábra. Acél mintalemezek potenciokinetikus anódos áram—potenciál görbéi 16,7 Hz frekvenciával történt ciklikus terhelés alatt, telített $Ca(OH)_2$ oldatban. ○ A görbéket öregítés nélkül vettük fel Cl^--iont nem tartalmazó telített $Ca(OH)_2$ oldatban és 1000 ppm. ill. 2000 ppm. Cl^--iont tartalmazó telített $Ca(OH)_2$ oldatban

● — 1000 ppm. Cl'iont tartalmazó tel. $Ca(OH)_2$ oldatban 5 napig öregített minták

△ — 2000 ppm. Cl'iont tartalmazó tel. $Ca(OH)_2$ oldatban 5 napig öregített minták

A ●, illetve * jelekkel jelzett görbéket 1000, illetve 2000 ppm kloridion tartalmú oldatban, 5 napon át történő öregítés után vettük fel. Az áram kb. egy nagyságrenddel nagyobb mindkét esetben és a passzivitási potenciáltartomány jelentősen kisebb. Hangsúlyozni kívánjuk, hogy a potenciálváltozás sebességét olyan lassúra választottuk, hogy az áram-potenciál görbék a stacionárius görbékkel összehasonlíthatók legyenek, de a kísérlet időtartama ne legyen összemérhető a minta törési idejével. Meg kell jegyeznünk, hogy a nyugalmi állapotban az áram zérus az egész vizsgált anódos potenciáltartományban.

Megfigyelhető a 13. ábrán, hogy semleges oldatban— passzív réteg távollétében — a mintalapok $1{,}10^5$, illetve $7{,}10^4$ ciklikus igénybevételnek álltak ellen két különböző frekvencián. Ezek az adatok nagyságrendileg megegyeznek a lúgos oldatban 11,5-nél kisebb pH értéken észleltekkel. 12-nél nagyobb pH-jú oldatokban a törési idő megnő $2{,}3 \cdot 10^5$, illetve $1{,}2 \cdot 10^5$ ciklusra. Alacsonyabb frekvenciájú igénybevétel esetén a törési idő növekedése nagyobb, mert a repedés terjedése késleltetett, mivel hosszabb idő áll rendelkezésre az oxidréteg képződésére, amely megállítja a lokális korróziót. Ezt igazolják a kloridion jelenlétében végzett kísérletek. Az öregített lemezek, amelyeken az oxidréteg sokkal kisebb védőhatású, egészen más viselkedést mutatnak.

Következtetések

A lúgos oldatban végzett mérések eredményei igazolták, hogy a rezgési frekvencia és a közeg vezetőképessége befolyásolják az oxidréteg kialakulását és tartósságát, továbbá, hogy a kloridionok káros hatást fejtenek ki az utóbbi jelenségekre. A törésfelület vizsgálata bizonyította, hogy korróziós folyamat esetében a törés intergranuláris utat követ, korrózió távollétében viszont a törés transzgranuláris amint ezt a különböző közegekben újabban végzett kísérletek igazolták.

Az acél korróziós kifáradásának elektrokémiai módszerekkel történő tanulmányozása különböző közegekben hasznos és megbízható felvilágosítással szolgálhat a folyamat mechanizmusára és különböző fizikai és kémiai paraméterek befolyására vonatkozóan:

1. A korróziós potenciál változása az időben ciklikus terhelés alatt megbízható összehasonlítható adatokat szolgáltathat homogén fémminták esetében, ha a fém és a vizsgálati közeg közötti reakciók ismertek. Ezek a vizsgálatok a korróziós kifáradás mechanizmusának értelmezéséhez is nyújtanak némi segítséget, de az eredmények értékelése nehéz és bizonytalan, mert igen sok elektrokémiai reakció léphet fel.

2. A gondosan ellenőrzött kísérleti körülmények között felvett potenciosztatikus vagy potenciodinamikus áram-feszültség görbék felvilágosítást nyújtanak arra a hatásra amelyet a terhelés a katódos és anódos reakció polarizációjára gyakorol.

3. A lineáris polarizáció módszere a kifáradásos korróziós folyamatok következtében fellépő pillanatnyi korrózióssebesség változások vizsgálatára használható.

Impulzustechnikai vagy váltóáramú relaxációs módszerek szintén alkalmasak a kifáradásos korróziós vizsgálatok alatt fellépő elektródimpedancia változások vizsgálatára.

Köszönetnyilvánítás

A szerzők köszönetüket fejezik ki F. Guzzo úrnak értékes technikai segítségéért.

Összefoglalás

A szerzők a korróziós kifáradás jelenségét elektrokémiai nézőpontból vizsgálták. Sok esetben jó korreláció található a vizsgált minta kifáradási korróziós viselkedése és a minta terhelése alatt végzett elektrokémiai mérések adatai között (a korróziós potenciál időfüggése, polarizációs görbék, a polarizációs ellenállás időfüggése). A szerzők értékelik a fenti elektrokémiai paraméterek alkalmazásának lehetőségét kifáradásos korróziós vizsgálatokra és új adatokat közölnek acél kifáradásos korróziójára telített $Ca(OH)_2$ oldatokban. Ez utóbbi vizsgálat a vasbetonban fellépő körülményeket szimulálja. A cikk tárgyalja még a kloridionok jelenlétében észlelt káros hatásokat.

Summary

The corrosion-fatigue behaviour of iron was investigated from an electrochemical point of view.

A good correlation was found to exist in many cases between data of electrochemical measurements (E_{corr} vs time, polarization curves, polarization resistance vs time) of a stressed specimen and the corrosion fatigue behaviour of the latter. A discussion of the considered electrochemical parameters and their application to corrosion fatigue studies is also presented.

New data on the corrosion fatigue behaviour of steel in saturated $Ca(OH)_2$ solutions are reported. This environment simulates the conditions existing in concrete. The detrimental effect of the presence of chloride ions is also discussed.

IRODALOM

1. D. J. Duquette: Proc. Conf. on Corrosion Fatigue, NACE (1972), 12.
2. A. J. Mc Evily: Proc. Conf. on Corrosion Fatigue, NACE (1972), 1.
3. P. L. Bonora, G. P. Ponzano, R. Sangiorgi: Werk. u. Korr., **27**, 865, (1976).
4. W. H. Hartt, J. S. Tennant, W. C. Hooper: Corrosion-fatigue Technology, ASTM STP 642, (1978) 5—18.
5. C. Laird, R. F. Steigerwald: Proc. Conf. on Corrosion Fatigue NACE (1972), 87.
6. C. Laird, D. J. Duquette: Proc. Conf. on Corrosion Fatigue NACE (1972), 88.
7. Mc Clintock: Proc. Conf. on Corrosion Fatigue NACE (1972), 289.
8. H. H. Uhlig: Proc. Conf. on Corrosion Fatigue NACE (1972), 270.
9. R. N. Parkins, B. S. Greenwell: Metal Science, II, 405, (1977).
10. R. P. Wei, J. D. Landes: Mat. Res. Standards, **9**, 25, (1969).
11. K. Endo, K. Komai: Corrosion Fatigue Technology, ASTM STP642, (1978) 74—97.
12. P. L. Bonora, G. Cerisola, G. Trombetti: Mat. Chem., **2**, 221 (1977).
13. C. Amzallag, P. Rabbe, A. Desestret: Corrosion Fatigue Technology ASTM STP642, (1978) 74.
14. P. L. Bonora: Proc. EUROCORR 77, London (1977), 539.
15. D. G. Fertis: „Dynamics and Vibration of Structures", John Wiley and Sons, New York (1973) 135—143 old.
16. E. Heitz, W. Schwenk: Brit. Corr. J., II. 74, (1976).
17. P. L. De Anna, G. Cerisola, P. L. Bonora, et al: Werk. u. Korr., (megjelenés alatt).
18. M. Arpaia: Rapp. Tech. CEBELCOR, **239**, 422, (1964).

Fordította:

Garai Tibor

Kémiai Közlemények 56. kötet 1981. p. 447—458

SZERVES INHIBITOROK ALKALMAZÁSA A KORRÓZIÓVÉDELEMBEN

G. TRABANELLI

(Centro di Studi sulla Corrosione Aldo Daccó Universitá di Ferrara, Italia)

Érkezett 1981. március 16-án

Az ipari berendezések súlyos üzemi igénybevétele miatt a legtöbb fém szerkezeti anyag rövidebb-hosszabb idő alatt károsodik és fennáll az a veszély, hogy a korrózió következtében tönkremegy. Ennek megakadályozására különböző korrózióvédelmi intézkedéseket vezettek be. Az egyik ilyen eljárás lényege, hogy az agresszív környezethez adagolnak, kis koncentrációban, olyan vegyszereket, amelyek csökkentik a fém korrózióját. Így a környezet agresszivitásának csökkenése következtében lesz kisebb a fém reakcióképessége.

A korróziós inhibitorok ipari alkalmazásával kapcsolatban számos probléma merül fel. Így például az inhibitoros kezelés és az inhibitor üzembentartása gazdaságos kell, hogy legyen, az inhibitor nem szennyezheti sem a végterméket sem az elfolyó anyagokat, nem lehet mérgező, továbbá hatásosnak kell lennie már korrodeált vagy rozsdás felületen is és nem ronthatja a hőcserélő hatásfokát. Ezen kívül az inhibitor túladagolása, vagy optimális koncentrációjának csökkenése nem fokozhatja a korróziót és végül az inhibitor nem segítheti elő a lyukkorróziót, a víz-vonalon fellépő korróziót, a galvánkorróziót és a helyi korrózió egyéb formáit [1].

A korróziós inhibitorok rendszerint megakadályozzák az általános korróziót, de sokkal kevésbé hatékonyak a helyi korróziós folyamatok elleni védelemben. A különböző vegyipari üzemekben végzett felmérések azonban azt mutatták, hogy a fémek tönkremenetelének 70%-a feszültség-korróziós törés, korróziós kifáradás, lyuk- és eróziós korrózió következménye és csak 30%-a tudható be általános korróziónak.

Ez utóbbi korróziós károsodás okozza a súlyveszteség alapján kimutatható legnagyobb anyagmennyiség pusztulását. Műszaki szempontból azonban nem az egyenletes korrózió a legveszélyesebb, mert a berendezés élettartama előre kiszámítható és az általános korrózió inhibitorokkal megelőzhető. Ez történik a fémek savas kezelésére alkalmazott eljárásoknál, mint pl. tisztítás, revétlenítés, pácolás esetében.

Savas oldatokban alkalmazott inhibitorokkal kapcsolatos kérdések

A rosszul megválasztott szerves inhibitorok alkalmazásakor a következő fő problémák merülhetnek fel: a korrózió fokozódása (stimulátor hatás) és az acél hidrogén-felvétele pácolás közben.

A vas savas közegben végbemenő korróziója gyakran fokozódik, ha az inhibitor koncentrációja túl kicsi. Ez a káros jelenség a sav minőségétől függ, ahogy ezt KUZNYECOV [3] világosan kimutatta bis-(4-dimetil-aminofenil)--antipiril-carbinol és származékai inhibitív tulajdonságainak tanulmányozása során. Ezek a vegyületek — 10^{-4} mol/l koncentrációban — sósavban gátolják, kénsavban pedig fokozzák az acél korrózióját. Az utóbbi hatás 10^{-4} mol/l káliumjodid adagolásával megszüntethető.

Általában a stimuláló hatás nincs kapcsolatban a szerves molekula típusával és szerkezetével. A laboratóriumunkban végzett vizsgálatok során tapasztaltuk, hogy a vas savas közegben végbemenő korróziójára tiolok, szulfidok, azol és triazol származékok, nitrilek és kinolinok egyaránt stimuláló hatást fejtettek ki megfelelő körülmények között [4].

Hasonló jelenségeket tapasztaltak színesfémek esetében is. FOROULIS [5] kimutatta, hogy bizonyos nitrogéntartalmú szerves vegyületek fokozzák a réz korrózióját kénsavban és perklórsavban. Ez a jelenség elsősorban a katódos reakció depolarizációjával magyarázható.

ROSENFELD [6] szerint, ha aminokat (pl. trietilamin) alkalmazunk korróziós inhibitorként savas közegben különös figyelmet kell fordítani az acél mikrostruktúrájára, valamint arra a lehetőségre, hogy az inhibitor növelheti mind a katódos, mind az anódos reakció sebességét és következésképpen fokozhatja a korróziót.

A szerves inhibitorok káros hatásának okait a következőképpen osztályozhatjuk:

a) az inhibitor bomlástermékei fejtenek ki stimuláló hatást [7—16];

b) az elektrokémiai részreakciók az inhibitor hatására olyan preferált mechanizmus szerint mennek végbe, amely fokozza a korróziót [17—20];

c) az inhibitor résztvesz a fémoldódás folyamatában és ezáltal idéz elő stimuláló hatást [21—25].

Az irodalomban számos példát találunk a korróziós folyamat fokozódására, elsősorban kis adalék koncentráció esetében [26—30]. A gyakorlatban könnyen előfordul, hogy az inhibitor koncentrációja váratlanul a kritikus érték alá csökken és ezért a szerves inhibitorok alkalmazása körültekintést igényel [31].

A hidrogén behatolása a fémbe szintén nagy fontosságú kérdés a szerves vegyületek inhibitorként történő alkalmazásával kapcsolatban [32]. Azok az adalékok, amelyek lefedik a fémfelület egy részét, csökkentik a fémen leváló hidrogén összes mennyiségét, azonban viszonylag nagyobb mértékben csök-

kenhet a gáz alakban távozó hidrogén aránya és ebben az esetben több hidrogén hatol be a fémbe. A vizsgálatok bizonyították, hogy $=C=S$ vagy $\equiv C-SH$ csoportot tartalmazó szerves anyagok, bár hatásos inhibitorai a vas és acél korróziójának, elősegítik a hidrogén behatolását a fémbe és ezzel a hidrogénridegedés előfeltételét biztosítják. Feltehető, hogy az előbb említett szerves vegyületek részben redukálódhatnak a fém katódos pontjain és a keletkező kénhidrogén előmozdítja a fém hidrogénfelvételét.

A fenti eredményekkel összhangban, SAITO és NOBE [33] — 4130 és 4340 típusú nagyszilárdságú acél savas oldatban történő vizsgálatánál — igazolták, hogy a kénhidrogén és oldatokban kénhidrogén képződése közben elbomló szerves vegyületek megnövelik a hidrogénfelvétel sebességét. Számos acetilén származék jelentősen csökkenti a kénhidrogén stimulátor hatását. SCHMITT [34] észlelte, hogy benzil-kinolinium-klorid jelenlétében csökken a katódosan fejlődő hidrogén behatolása lágy acélba 16 és 32%-os HCl-ban. Propargilalkohol nem gátolja a hidrogénfelvételt kénhidrogént tartalmazó savakban. Ezekben a rendszerekben a propargilalkohol hozzáadására még a kvaternér ammóniumsók hatásossága is csökkent.

Általában olyan szerves vegyület (mint pl. aminok, aldehidek, nitrilek, szulfidok, vagy szulfoxidok) jelenlétében, amelynek bomlása közben nem képződik kénhidrogén vagy más promotor hatású vegyület, a szerves molekula és a felületi atomok között létrejövő adszorpciós kötés gátolja a korróziót és egyúttal jelentősen késlelteti a hidrogén behatolását a fémbe.

Irodalmi adatok szerint [35] az inhibitor-hatás az acél széntartalmától függ. Így például néhány vízoldható nagy molekulasúlyú piridinbázis szulfátja csökkenti a korrózió sebességét és a hidrogén behatolást 0,23—0,45% karbon tartalmú szénacél esetében, de hatástalan a 0,66% karbon tartalmú szénacélra, nagyobb széntartalmú acéloknál viszont mindkét folyamatot gyorsítja. Ez a jelenség az inhibitor adszorpciós kötésének gyöngülésével magyarázható, amely a fém nagy oldódási sebességének következménye.

Irodalmi közlemények [36] említik, hogy az acél duktilitása fokozódik 10^{-2} mol/l tribenzil-trihidro (szim.) triazin tartalmú sósavban történt pácolás után. Ez a jelenség azzal magyarázható, hogy a felület tulajdonságai megváltoznak (csökken a felületi érdesség, kevesebb a feszültség-góc) és az adszorbeált inhibitor-molekula fokozza a felület képlékenységét. A fém duktilitásának növekedése igen nagy gyakorlati jelentőségű.

Helyi korróziós folyamatok inhibitorai

Galván korrózió

Számos technikai nehézség merül fel, ha szerves inhibitorokat kívánunk alkalmazni két egymással érintkező fém korróziójának csökkentésére. Közismert, hogy egy adott inhibitor, specifikus hatása miatt, csak egy fém védel-

mére hatásos, azonban nem feltétlenül gátolja két különböző egymással érintkező fém korrózióját.

BRASHER és MERCER [37] a cink-acél rendszer viselkedését tanulmányozták nátrium-benzoát oldatban. Ez utóbbi meggátolja az acél korrózióját, de rendszerint hatástalan, ha az acél cinkkel érintkezik, mint pl. galvanikus cinkbevonattal ellátott acél esetében. Az előbbi szerzők értelmezték ezt a jelenséget és hangsúlyozták, hogy a cinkkel érintkező acélfelület rozsdásodása megakadályozható, ha közvetlenül a fémtárgynak az oldatba merítése után, egy vagy két napig levegőt buborékoltatunk át a rendszeren.

VENCZEL és WRANGLEN [38] az acél-réz kombinációt tanulmányozták melegvíz cirkulációs rendszerben. A legjobb inhibitor hatást benzoát és nitrit keveréke biztosította.

Laboratóriumunkban acél-alumínium tartalmú sárgaréz és acél-alumínium bronz csőpárok viselkedését vizsgáltuk áramló szintetikus tengervízben 10^{-3} mol/l benzimidazol-2-tiol jelenlétében és távollétében. 240 órás kísérlet után végzett súlyveszteség mérések azt mutatták, hogy az inhibitor igen hatásosan védi a rézötvözetet. A vascső korróziója is jelentősen csökkent, valószínűleg a rézötvözetben fellépő katódos folyamatok sebességének csökkenése miatt.

Általában hasonló alapösszetevőt tartalmazó ötvözeteket, mint pl. réz és rézötvözetek „kompatibilis"-nek tartanak. Sok esetben valóban kicsiny a galvánkorrózió veszélye, ha ilyen anyagok érintkeznek egymással. Ennek ellenére jelentős galvanikus hatást észleltek, ha Admiralty sárgarezet más rézötvözetekkel (Al-sárgaréz, Al-bronz, réz-nikkel) kapcsoltak össze áramló szintetikus tengervízben [39]. Tíz napon át folytatott kísérlet alatt súlyveszteség méréseket, galvánpotenciál és galvánáram meghatározásokat végeztek. Benzimidazol-2-tiol (10^{-3} mol/l) jó hatásfokú inhibitor a vizsgált anyagok esetében, szabad korróziónál és egymással érintkező ötvözeteknél egyaránt. A fémfelület vékony rétegben történő bevonása az inhibitorral jó módszernek bizonyult, mind az egyes fémek, mind az egymással érintkező fémek korrózió elleni védelmére még igen kis koncentrációjú (10^{-5} mol/l) inhibitort tartalmazó tengervízben végzett vizsgálatoknál is.

Gépjárművek [40] és legújabban a napenergiát átalakító berendezések hűtőrendszerét [41—43] általában szerves és szervetlen inhibitorok komplex keverékével védik korrózió ellen.

Réskorrózió

A különböző berendezések réskorrózió elleni védelmére gyakran alkalmaznak szervetlen inhibitorokat [44]. Javasolják szerves inhibitorok adagolását is az oldathoz, hogy a résen belül kialakult helyielem anódos reakcióját gátolják. Bizonytalan azonban, hogy ezek az inhibitorok bejutnak-e kellő mennyiségben a résekbe [45].

Ahol lehetséges, célszerű megtölteni a réseket inhibitor tartalmú tömítőanyaggal. Így nedvesség nem hatolhat be a résbe.

GODARD [46] javasolta, hogy az alumínium réskorróziós károsodásának megelőzése céljából, az öt évnél hosszabb ideig tengeri atmoszférának kitett szerkezetek felületét vonják be inhibitiv festékréteggel.

Lyukkorózió

Az okkludált helyi elemek kémiájára és az adalékok hatására vonatkozó egyes fent említett megfontolások alkalmazhatók a lyukkorózió elleni inhibitoros védelemre is [45]. A lyukkorózió különböző elméletei azzal a feltevéssel magyarázzák a lyuk keletkezését, hogy agresszív, anionok (mint pl. kloridion) felhalmozódnak a passzív film felületén vagy belsejében és így olyan körülményeket hoznak létre, amely elősegíti a film helyi tönkremenetelét. A lyuk tovább terjedése szempontjából azonban a legjelentősebb reakció a fém anódos oldódása a lyuk belsejében keletkezett helyi elemben. Inhibitorok alkalmazhatók mind a lyukkorózió keletkezésének, mind továbbterjedésének szakaszában. Különös figyelmet fordítottak az inhibitor anionok hatására az agresszív oldatokban [47]. Ezek az inhibitorok meghosszabbítják az indukciós periódust, csökkentik a keletkező lyukak számát és megnövelik a lyukkoróziós potenciált. A fentiekkel összhangban vannak STREHBLOW [48] megfigyelései: pikrátionok adagolása az agresszív oldathoz meggátolja a lyukak gócképződését acélon és nikkelen; nitrátok és szulfátok csökkentik a lyuk belsejében fellépő korróziós áramsűrűséget; továbbá, a pittingpotenciál pozitív irányba tolódik el kaproát hatására.

UHLIG és munkatársai [49, 50] meghatározták, az alumínium és a 18 Cr — 8 Ni acél lyukkoróziójának meggátolásához szükséges minimális inhibitor anion aktivitását. Különböző kloridion aktivitású oldatokban, potenciosztatikus vizsgálati körülmények között a következő általános egyenletet találták érvényesnek:

$$\log a_{A_{Cl^-}} = B \log a_{A_{\bar{a}}^-} + C$$

ahol a_{Cl^-} az inhibitor anion (mint pl. nitrát, perklorát, acetét vagy benzoát) aktivitása.

A fent említett anionok megfelelő koncentrációban inhibitor hatást fejtenek ki a lyukkorózióra, mert a kritikus pitting-potenciált pozitív irányba tolják el. Hatásmechanizmusukat úgy értelmezték, hogy a kloridionok és az inhibitor anion között kompetitív adszorpció alakul ki a felület aktív pontjain.

A szerves molekulák adszorpciója a passzív filmen meggátolja, vagy késlelteti az agresszív anionok hatását. HORVÁTH [51] szerint szerves kationok és a felületen már előzőleg adszorbeált anionok szinergetikus hatása késleltet-

heti a lyukkorróziót. HORVÁTH [51] különböző aminoknak (ciklohexilamin, benzilamin, butilamin) az AISI 304 rozsdamentes acél lyukkorróziójára kifejtett inhibitorhatását tanulmányozta 0,1 mol/l NaCl-ban 25 °C-on és megfigyelte, hogy az ónium só képzésére hajlamosabb aminok fejtettek ki nagyobb mérvű inhibitorhatást a lyukkorrózió ellen. Ezek a vegyületek szinergetikus hatásuk miatt késleltetik a lyukak keletkezését és terjedését, megnövelik a lyuk belsejében levő oldat pH-ját. A fent említett vegyületek molekulái elég nagyok ahhoz, hogy befedjék a lyuk falát és szerkezetük meggátolja az agresszív anionok vándorlását. HORVÁTH [51] szerint ezek az aminok olyan potenciált biztosítanak a fémfelületen, amelynél a lyukkorrózió elkerülhető még kloridion és kénhidrogén együttes jelenlétében is. Laboratóriumunkban néhány tájékoztató vizsgálatot végeztünk 0,2% n-decilamin, ciklohexilamin és piperidin inhibitorként történő alkalmazására AISI 304 rozsdamentes acél lyukkorrózió elleni védelmére 107 °C-on forró, 4 mol/l NaCl oldatban. Az anódos polarizációs görbék tanúsága szerint a fenti vegyületek jelenlétében a kritikus pitting-potenciál nőtt és a passzív szakaszban fellépő áram csökkent.

AHMAD és SCULLY [52] és HORVÁTH [53] polarizációs mérései igazolták, hogy bizonyos szerves vegyületek (kinolin és deciklohexilamin) a rozsdamentes acél hatásos lyukkorróziós inhibitorai kloridiont, illetve kénhidrogént tartalmazó savas közegben. GRIGORJEV [54—55] néhány anilin származék, pirillium perklorát, benzaldehid stb. hatását vizsgálta 18 Cr 8 Ni rozsdamentes acél lyukkorróziójánál NaCl-t tartalmazó kénsav, ecetsav, hangyasav és propionsav oldatban. A szerző szerint a vizsgált adalékok nem befolyásolták a kritikus pitting-potenciált, de a korróziósebességet 1 : 2 és 1 : 10 között változó arányban csökkentették.

ABD EL WAHAB és SHAMS EL DIN [56] a zselatinnak a vas lyukkorróziójára gyakorolt hatását vizsgálták kloridion tartalmú savas és lúgos oldatban. A fenti szerzők potenciosztatikus és galvanosztatikus polarizációs mérései azt mutatták, hogy a zselatin általában csökkentette a lyukkorróziót és híg klorid oldatokban teljesen megszüntette a fém lokalizált korrózióját.

A fenti eredmények arra utalnak, hogy adszorpciós típusú szerves inhibitorok érdeklődésre tarthatnak számot a lyukkorrózió csökkentése és megelőzése szempontjából.

Elcinktelenedés

Az elcinktelenedés — azaz a cink szelektív eltávolítása sárgaréz ötvözetekből valamely korróziós folyamat során — a legismertebb példája a szelektív kioldásnak. Ennek következtében károsodhatnak a sárgaréz ötvözetekből készült hőcserélők, ha klorid tartalmú vízzel érintkeznek. Az elcinktelenedés elkerülhető, ha megfelelő más ötvözetet alkalmazunk szerkezeti anyagként, és a folyamat jelentősen lassul, ha korróziós inhibitorokkal csökkentjük a közeg agresszivitását.

KRAVAJEVA és munkatársai [57] kimutatták, hogy egy- vagy kétfázisú sárgaréz ötvözetek elcinktelenedése 0,5 mol/l NaCl és HCl oldatban meggátolható felületaktív vegyületek, mint pl. szaponin, dextrin vagy benzotriazol adagolásával. Az utóbbi jobb hatásfokú inhibitornak bizonyult.

Laboratóriumunkban a benzimidazol-2-tiol, benzotriazol, o-hidroxikinolin és benzoinoxim adalékoknak a Cu 58/Zn 42 sárgaréz elcinktelenedésére gyakorolt hatását vizsgáltuk 0,1 mol/l NaCl-ban, pH = 4 esetén 50 °C-on [58]. Figyelembe véve, hogy a fém korrózióállósága szorosan összefügg a felületen levő védőfilm jelenlétével és tulajdonságaival, 10^{-3} mol/l benzimidazol-2-tiol vagy benzotriazol oldatban védőhártyát alakítottunk ki a mintalemezeken a vizsgálat előtt. Ez a kezelés fokozta az inhibitorhatást és lehetővé tette, hogy közel egy nagyságrenddel csökkentsük az inhibitor koncentrációt az oldatban. Az inhibitorhatás még anódos polarizációs potenciálokon is észrevehető volt a gyorsított vizsgálatok során.

Kristályközi korrózió

Az irodalomban ritkán találunk részletes beszámolót szerves adalékok alkalmazásáról ötvözetek kristályközi korrózió elleni védelmére valamilyen közegben. A laboratóriumunkban végzett vizsgálatok azt mutatták, hogy olyan szerves anyagok, amelyek az egyenletes korrózió inhibitorai, gátolják a kristályközi korróziót is. Így például 10^{-3} mol /l dibenzilszulfoxid vagy feniltiokarbamid egyaránt inhibitor hatást fejtett ki az AISI 304 rozsdamentes acél általános és kristályközi korróziójára 0,25 mol/l kénsavban, 70 °C-on. Az ötvözetet előzőleg 24 óráig hőkezeltük 650 °C-on. Az említett vegyületek inhibitor hatásfoka 80% felett volt és kristályközi korrózió nem volt észlelhető. Néhány acetilén származék viszont hatástalan a lokalizált korróziós folyamatokra. Ha feltételezzük, hogy a szenzitivizáló kezelés és a krómveszteség következtében a szemcsehatáron helyi galvánelemek keletkezhetnek (vö.: PARKINS [59]) az inhibitorok hatékonysága összefügg azzal, hogy milyen mértékben befolyásolják a helyi elemek működését.

Kavitáció

MERCER [60] a korróziós inhibitorok elvi és gyakorlati kérdésével foglalkozó átfogó tanulmányában hangsúlyozta, hogy különböző mechanikai tényezők együttes hatása következtében felléphet vagy fokozódhat a korrózió. Ennek a jelenségnek jellegzetes példái az eróziós és kavitációs folyamatok, belső vagy külső feszültségek, korróziós kifáradás és kopás. A fenti mechanikai igénybevételek ellen nem nyújtanak feltétlenül védelmet azok az inhibitorok amelyek hatékonyak, ha nem lépnek fel mechanikai hatások.

FONTANA és GREENE [61] szerint az erózió csökkentésére alkalmazható inhibitor hatásfoka sok esetben a fém és az inhibitor reakciójában keletkező és

a fémfelülethez tapadó — film típusától és sajátságaitól függ. A kavitációs inhibitorok hatékonysága attól függ, hogy milyen mértékben képesek újra alakítani a fémet borító felületi réteget, amelyet a cirkuláló folyadékban hirtelen keletkező kavitációs buborékok szétroncsolnak.

PINI és WEBEY [62] hűtővíz rendszerek kavitációs korrózió elleni védelmére alkalmas inhibitorok vizsgálatakor azt találták, hogy a 2-aminopiridin alapú szerves inhibitorok megfelelnek az említett célra, továbbá, hogy borátion és 2-merkapto-benzotiazol pozitív szinergetikus hatást fejtettek ki. Ezzel szemben egy vizsgálatnak alávetett antikorroziv olaj nem volt használható kavitációs korrózió elleni védelemre. A buborékok összeroppanásakor az emulzió szétvált és a korrózióvédő hatás leromlott. Kavitációs inhibitorokat alkalmaztak diesel motorok hűtőrendszerének védelmére. Oldható olajok, valamint nitrit, benzoát és trietanolaminofoszfát keveréke csökkentette a károsodást. Általában az inhibitorok jobban beváltak a gyakorlatban, mint ahogy azt a laboratóriumi kavitációs vizsgálatok alapján várták. Feltehetően, a gyakorlatban előforduló sztatikus időszakban az inhibitorok megakadályozzák, hogy a kavitációs károsodást szenvedett felületek nagymérvű kezdeti korróziója tovább terjedjen [63].

Feszültségkorrózió

A feszültségkorróziós repedés inhibitorainak kutatása változatlanul a kutatások központi kérdése. Mind több, új fém-környezet kombinációt találnak, amelyek feszültségkorróziós repedést idéznek elő. Az utóbbi körülményeit csak különböző mechanizmusok alapján lehet magyarázni. Hasonlóképpen, a feszültségkorróziós repedés meggátolására, különböző viszonyok között, alkalmas inhibitorok működése is különbözőképpen értelmezhető. PARKINS [59] a szerkezettől függő helyi korróziós folyamatokra (mint pl. a feszültségkorróziós repedés, korróziós kifáradás és kristályközi korrózió) gyakorolt inhibitorhatásokat a következő mechanizmusok alapján magyarázta:

— az aktivitás és inaktivitás közötti kritikus egyensúly megváltozása;
— a potenciál nem-kritikus értékre történő eltolódása;
— a hidrogén behatolásának megakadályozása;
— a helyi elemek működésére gyakorolt befolyás.

Az utóbbi jelenséget már említettük a kristályközi korrózióval kapcsolatban.

Az aktivitás és inaktivitás közötti kritikus egyensúly megváltozhat az igen gyors filmképződést vagy a film újraképződését (pl. adszorpció útján) elősegítő adalékok hatására. Mindkét esetben a helyi korrózió valószínűleg meggátolható, bár a film újraképződésének elősegítésekor a korrózió valamilyen általánosabb formája meggyorsulhat.

A film képződése vagy újjáalakulása rendszerint potenciáleltolódást okoz. Ez a tény lehetőséget nyújt a potenciáltól függő lokalizált korrózió, mint

pl. a feszültségkorróziós repedés megelőzésére. A korróziós reakció következtében fejlődő és a fémbe jutó hidrogén káros hatása viszont megelőzhető olyan adalékkal amely csökkenti a fém hidrogén felvételét.

A feszültségkorróziós tönkremenetelt előidéző legismertebb fém-környezet kombináció az ausztenites rozsdamentes acél nagy hőmérsékletű klorid tartalmú közegben. STAEHLE [64] és MOLLER [65] laboratóriumi és üzemi körülmények között vizsgálták az ausztenites rozsdamentes acél korróziójának inhibitorait. Ilyen irányú kutatásokat $MgCl_2$ oldatban COUPER [66], UHLIG [67] és PINARD [68] végezték. A laboratóriumunkban végzett vizsgálatok [69] azt mutatták, hogy AISI 304 huzalok élettartama, állandó terhelés alatt, forró $MgCl_2$ oldatban, jelentősen megnövelhető kis koncentrációjú szerves anyagok, mint pl. piperidin, kinolin és ciklohexilamin jelenlétében. Az inhibitor koncentrációjának befolyását és adalék keverékek hatását szintén vizsgáltuk [70]. A fém potenciáljának időbeli változása és a polarizációs görbék alapján feltételezzük, hogy a szerves anyagok adszorpciója csökkentette a filmképződés sebességét, a film kialakulása után pedig, lelassította a repedés terjedését, mert inhibitor hatást fejtett ki az anódos folyamatra a kloridionnal szemben fellépő kompetitív adszorpció következtében. Karcolásos módszerrel igazoltuk, hogy a feszültségkorrózió ellen hatásos inhibitor, megfelelő koncentrációban, jelentősen meggyorsította a karcolt felület újraképződését.

Különböző szerzők [71—73] bizonyították, hogy az ausztenites rozsdamentes acél intergranuláris vagy transzgranuláris feszültségkorróziós törése meghatározott mennyiségű klorid jelenlétében, szobahőmérsékleten, kénsav vagy perklórsav oldatban is végbemegy. Néhány szerves anyag hatását az ausztenites acél feszültség korrózióját klorid tartalmú kénsav oldatban és 2 mol/l HCl oldatban vizsgáltuk [74, 75]. A polarizációs görbék alapján arra a megállapításra jutottunk, hogy csak az anódos oldást gátló vegyületek képesek teljesen megakadályozni a feszültségkorróziós repedést a fent említett közegekben.

Lágy acélok hajlamosak a feszültségkorróziós repedésre nitrát, karbonát és lúg oldatokban. Szervetlen anionok (NO_3^-) vagy egyes szerves vegyületek (acetátok, benzoátok, vagy Quebracho kivonat) gátolják a lokalizált korróziót [76]. Policiklikus amidinek hatásosan gátolják az acél feszültségkorrózióját vizes CO/CO_2 közegben [77]. Az intergranuláris feszültségkorróziós repedést feltehetően az okozza, hogy a CO_2 által előidézett korrózió a CO adszorpciója miatt nagymértékben lokalizálódik. A fent említett inhibitor azonban elég hatásosan védte az egész felületet. BALEZIN [78] érdekes inhibitor vizsgálatokat végzett kazánok kémiai tisztításakor, olyan esetekben amikor a szénacél agresszív környezet és mechanikai feszültség együttes hatásának volt alávetve. Megfelelő inhibitor keverék (urotropin + PB5) jó inhibitor hatást fejtett ki 4% HCl-ban 60° és 80 °C-on és még vas (III)-ionok jelenlétében sem károsította a fém mechanikai tulajdonságait.

DUNLOP [79] szulfid tartalmú közegben tanulmányozta az alacsony szilárdságú, gyengén ötvözött nikkel-acélok feszültség korrózióját befolyásoló tényezőket. Mind az alapfémen, mind a hegesztési varraton keletkezett repedés kis H_2S parciális nyomás (1 millibár alatt) és kis feszültség esetén is. Inhibitor hatást fejtett ki a szénhidrogént közömbösítő amin (morfolin) és metanol adalék amelyet jég és hidrát képződés megakadályozására használnak kriogén gáz üzemekben.

Kifáradásos korrózió

Közismert, hogy a korróziós kifáradást elsősorban két módszerrel lehet késleltetni: csökkenteni a terhelés amplitúdóját vagy a közeg korrozív hatását. Az utóbbi a pH növelésével (acélok esetében) a hőmérséklet csökkentésével vagy inhibitor adagolással valósítható meg [80]. Inhibitorokat és korrózió-gátló olajokat elsősorban a hűtővíz oldalon levő alkatrészek védelmére használnak. A korróziós inhibitorok közül a kavitáció ellen már alkalmazott benzoátokat és 2-aminopiridint vizsgálták [81] és azt találták, hogy a frekvencia növelése csökkenti az inhibitorhatást. Ez a megállapítás összhangban van SEVERINCHIKnek [82] az acél fúrócsövek kifáradásos korrózió elleni inhibitoros védelmére vonatkozó eredményeivel. Az inhibitor csak bizonyos határig volt hatásos. A terhelés és az agresszív környezet kombinációja miatt az inhibitor alkalmazásának sok előnye elveszett.

Összefoglalás

A szerző ismerteti a szerves inhibitorok néhány alkalmazását általános korróziós jelenségek megelőzésére és néhány példával szemlélteti szerves vegyületeknek a lokalizált korróziós folyamatokra kifejtett hatását.

Summary

Some applications of organic inhibitors for the prevention of general corrosion phenomena are described and the effect of organic compounds on localised corrosion processes is shown by a number of examples.

IRODALOM

1. W. R. PLUDEK: Design and Corrosion Control, Mac Millan Press, London (1977) 247 old.
2. J. A. COLLINS, M. L. MONACK: Perform., NACE-Houston USA. **12**, n. 6, 11 (1973).
3. A. V. PEVNEVA, V. V. KUZNETSOV, E. A. SELEZNEVA, V. C. ZHIVOPISTSEV: Zashch. Met., **13**, n. 4, 455 (1977).
4. A. FRIGNANI, G. TRABANELLI, F. ZUCCHI, M. ZUCCHINI: Proc. 4 SEIC Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V. Suppl. N. 6, 652 (1975).
5. Z. A. FOROULIS: Proc. 2 SETC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. n. 4, 285 (1966).
6. I. L. ROSENFELD, YU. I. KUZNETSOV, A. V. BELOV: Prot. Metals, **13**, n. 4, 375 (1977).
7. A. C. MAKRIDES, N. HACKERMAN: Ind. Eng. Chem., **47**, 1773 (1955).
8. V. A. KUZNETSOV, Z. A. IOFA: Zhur. Fiz. Khim., **31**, 201 (1947).
9. H. KAESCHE: Zeitsch. für Elektr., **63**, 492 (1959).
10. J. HEIDEMEYER, H. KAESCHE: Corros. Sci., **8**, 377 (1968).

11. T. K. Ross, D. H. Jones: Proc. 1 SETC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 3, 163 (1961).
12. G. Oakes, J. M. West: Brit. Corros. J., **4**, 66 (1969).
13. M. Alfandary, et al.: Proc. 2 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 4, 363 (1966).
14. V. Carassiti, G. Trabanelli, F. Zucchi: Proc. 2 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V. Suppl. N. 4, 417 (1966).
15. I. E. Titova, V. A. Guseva: Prot. Metals, **4**, 524 (1968).
16. Z. A. Iofa: Proc. 2 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 4, 93 (1966).
17. G. Davolio, E. Soragni: Proc. 3 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 5, 219 (1971).
18. T. P. Hoar, R. P. Khera: Proc. 1 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 3, 73 (1961).
19. L. Felloni, A. Cozzi: Proc. 2 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V. Suppl. N. 4. 253 (1966).
20. F. Zucchi, G. Trabanelli, A. Frignani: Atti Accad. Sci. Ferrara, **49**, 1 (1971—72).
21. F. M. Donahue, K. Nobe: J. Electrochem. Soc., **114**, 1012 (1967).
22. N. Hackerman: Journées der Corrosion, 5—6 Mai 1969, Paris.
23. G. L. Zucchini, F. Zucchi, G. Trabanelli: Proc. 3 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V. Suppl. N. 5, 577 (1971).
24. E. J. Kelly: J. Electrochem. Soc., **115**, 1111 (1968).
25. H. Yamaoka, H. Fischer: Electrochem. Acta, **10**, 679 (1965).
26. C. C. Nathan: Corrosion, **9**, 199 (1953).
27. R. R. Annand, R. M. Hurd, N. Hackerman: J. Electrochem. Soc. **112**, 144 (1965).
28. N. Hackerman, R. M. Hurd, R. R. Annand: Corrosion, **18**, 37t, (1962).
29. I. N. Poutilova: Proc. 2 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 4, 139 (1966).
30. M. Cappelaere: S. Jeannin, G. Montel: Proc. 1 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 3, 368 (1961).
31. Z. A. Foroulis: Proc. Symposium on Basic and Applied Corrosion Research., NACE-Houston, USA, 24 (1969).
32. G. Trabanelli, V. Carassiti: Mechanisms and Phenomenology of Organic Inhibitors: Adv. in Corr. Sci. and Techn., Vol. 1, Plenum Press, New York (1970) 147 old., G. Trabanelli, F. Zucchi: Rev. Coat. Corros., Vol. 1, N. 2, 97 (1971).
33. Y. Saito, K. Nobe: ECS 77, Paper 126.
34. G. Schmitt, B. Olbertz: Werk. u. Korr., **29**, 451 (1978).
35. A. S. Afanasev, R. A. Eremeeva, S. G. Tyr: Prot. Metals, **13**, n. 4, 382 (1977).
36. E. S. Ivanov, et al.: Piot. Metals, **13**, n. 4, 384 (1977).
37. D. M. Brasher, A. D. Mercer: Proc. 3 rd ICMC, Moscow, Vol. II, 21. (1969).
38. J. Venczel, G. Wranglen: Corros. Sci., **7**, 461 (1967).
39. F. Zucchi, G. Brunoro, M. Zucchini: Materials Chemistry (megjelenés alatt).
40. A. D. Mercer: Corrosion Vol. 2, 18. 2 fej. Ed. L. L. Shreir, Newness, London (1977).
41. P. D. Thompson, M. B. Hayden: Corrosion/77, Paper N. 63.
42. E. Beynon: Corrosion/77, Paper N. 171.
43. J. M. Popplewell: Corrosion/77, Paper N. 170.
44. I. L. Rosenfeld: Localized Corrosion, NACE-3, Houston, USA (1974), 394, old.
45. M. Pourbaix: Rapp. Techn. CEBELCOR n. 230 (1975).
46. H. P. Godard: The Corrosion of Light Metals, J. Wiley, N. Y. (1967) 45. old.
47. S. Z. Smialowska: Localized Corrosion, NACE, Houston, USA (1974), 329. old.
48. H. H. Strehblow: ECS 77, Paper 121.
49. H. Böhni, H. Uhlig: J. Electrochem. Soc., **116**, 906 (1969).
50. H. Leckie, H. Uhlig: J. Electrochem. Soc., **113**, 1262 (1966).
51. J. Horváth et al.: Proc. 4 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 6, 743 (1975).
52. Z. Ahmad, J. C. Scully: Proc. 3 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 5, 195 (1971).
53. J. Horváth, A. Rauscher, L. Hackl, F. Márta: Proc. 3 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V. Suppl. N. 5, 851 (1971).
54. V. P. Grigoriev et al.: Proc. 4 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Suppl. N. 6, 369 (1975).
55. V. P. Grigoriev et al.: Izv. VUZ Khim. khim. Tekhnol. **20**, 10, 1502 (1077).
56. Abd El Wahab, A. M. Shams El Din: Brit. Corros. J., **13**, n. 1, 39 (1978).
57. A. P. Kravaeva et al.: Prot. Metals, **4**, 191 (1968).
58. F. Zucchi, G. Brunoro, G. Trabanelli: La Metallurgia Ital., n. 12, 493 (1977).
59. R. N. Parkins: Proc. 4 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez, V, Suppl. n. 6, 595 (1975).

60. A. D. MERCER: Corrosion Vol. 2, 18. 2 fej. Ed. L. L. SHREIR, Newness, London (1977).
61. M. G. FONTANA, N. D. GREENE: Corrosion Engineering, Mac Graw — Hill, New York, (1967).
62. G. PINI, J. WEBER: Proc. 4 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V. Suppl. N. 6, 110 (1975).
63. D. J. GODFREY: Corrosion Vol., 1, Ed. by L. L. SHREIR 8. 8. fej. Newness, London (1977).
64. R. M. LATANISION, R. W. STAEHLE: Fundamental Aspects of SOC, NACE — Houston — USA (1969) 214 old.
65. G. E. MOLLER: Corrosion/76, Paper N. 53.
66. A.S. COUPER: Mater. Prot., **8,** n. 10, 17 (1969).
67. H. H. LEE, H. UHLIG: J. Electrochem. Soc., **117,** 18 (1970).
68. L. PINARD: Mém. Sci. Rev. Métall., Paris, **69,** 425 (1972).
69. F. ZUCCHI et al.: Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V, Vol. IV, N. 1 (1976).
70. F. ZUCCHI, A. FRIGNANI, M. ZUCCHINI, G. TRABANELLI: EUROCORR 77, The Soc. Chem. Ind., London (1977). 531 old.
71. F. MAZZA, N. D. GREENE: Proc. 2 SEIC, Ann. Univ. Ferrara, N. S., Sez. V. Suppl. N. 4, 491 (1966).
72. G. BIANCHI, F. MAZZA: Proc. 5 ICMC, NACE — Houston USA (1974) 380 old.
73. J. D. HARSTON: J. C. SCULLY: Corrosion, **26,** 387 (1970).
74. G. TRABANELLI, F. ZUCCHI, A. FRIGNANI; Métaux, Corros. Ind. (1974).
75. F. ZUCCHI, G. TRABANELLI, A. FRIGNANI, M. ZUCCHINI: Corros. Sci., **18,** 87 (1978).
76. H. MAZILLE, H. UHLIG: Corrosion, **28,** 427 (1972).
77. A. K. DUNLOP, E. E. OLSON: Preprint 6 ICMC Sydney 2—10, (1975).
78. S. A. BALEZIN et al.: Prot. Metals, **13,** n. 2, 214, (1977).
79. A. K. DUNLOP: Corrosion, **34,** 88 (1978).
80. H. SPAHN: Corrosion Fatigue, NACE — Houston — USA (1972) 40. old.
81. P. L. BONORA: Proc. EUROCORR 77, The Soc. Chem. Ind. London (1977) 539 old.
82. N. A. SEVERINCHIK, B. K., KOPEI: Fiz. Khim. Mekh. Mater., **13,** n. 3, 97 (1977).

Fordította:

GARAI TIBOR

A kiadásért felel az Akadémiai Kiadó igazgatója

Műszaki szerkesztő: Sándor István

A kézirat nyomdába érkezett: 1981. máj. 13. — Terjedelem: 21,70 (A/5 ív)

81.9633 – Akadémiai Nyomda, Budapest — Felelős vezető: Bernát György

СОДЕРЖАНИЕ

Совместная сессия 29-ого апреля 1981 года Отделов Сельскохозяйственных наук, Химических наук, Экономических и Юридических наук 213
Второй Симпозиум Комитета по Спектроскопии АН Венгрии по теме «Об актуальных вопросах спектрохимии» (16—19 октября 1980 г.) 315
Е. Плшко: Проблемы спектроскопического определения рассеянных элементов геологических веществ 317
К. Флориан, К. Циммер, Дь. Хелтаи: Оптимальные возможности оценки спектральных снимок 329
Б. Мадьяр: Сравнение методов ICP и AAS с точки зрения аналитической мощности 347
Т. Гал: Возможности применения масс-спектроскопии в области исследования загрязнения воздуха 357
А. Кечкеш, К. Ижоф, И. Корнидес: Проблемы геологической интерпретации масс-спектроскопических изотопных данных на основе CO_2-генетических исследований 365
Л. Морваи, П. Новакова, И. Корнидес: Масс-спектроскопическое исследование многократной ионизации в случае вакуумной искры 373
М. Матерни: Опыты в спектральном анализе с двойной плазмы. I. Развитие источника излучения двойной плазмы и его свойства 381
С. Каролн: Возможности применения в аналитике источников излучения с полым катодом и с тлеющим разрядом 391

Доклады

Х. Ноллер: Катализ с точки зрения координационной химии 401
Г. Реш, В. Гутманн: Динамиче устроенность электролитов 421
П.Л. Бонора, Г. Керисола, П.Д. Деанна: Коррозионная усталость сталей в водных растворах. Электрохимические исследование 429
Г. Трабанелли: Применение органических ингибиторов в защите от коррозии 447

CONTENTS

Joint session of the Department of Agricultural Sciences, Department of Chemical Sciences and the Department of Economic and Jurisprudence on April 29, 1981 213
IInd Symposium of the Spectrochemical Working Committee of the Hungarian Academy of Sciences "On the Actual Problems of Spectrochemistry" (16—19 October 1980) 315
Plsko, E.: Problems in the spectrochemical determination of the scattered elements of geological materials 317
Flórián, K., Zimmer, K., Heltai, Gy.: Optimal possibilities of the evaluation of spectrograms 329
Magyar, B.: Comparison of the ICP and AAS methods from the aspect of their analytical efficiency 347
Gál, T.: Possibilities of the use of mass spectrometry in the investigation of air contamination 357
Kecskés, A., Izsóf, K., Cornides, I.: Problems of the geological interpretation of data of isotopes obtained by mass spectrometry on the basis of CO_2-genetic investigations ... 365
Morvay, L., Novakova, P., Cornides, I.: Investigation by mass spectrometry of multiple ionisation in case of vacuum sparks 373
Matherny, M.: Experiences in spectral analysis by twin-plasma excitation. I. Development and properties of twin-plasma as radiation source 381
Caroli, S.: Possibilities of the analytical application of hollow cathodes and glimmering discharges as radiation sources 391

Lectures

Noller, H.: Catalysis from the aspect of coordination chemistry 401
Resch, G., Gutmann, V.: Dynamical arrangement of electrolytes 421
Bonora, P. L., Cerisola, G., De Anna, P. L.: Corrosion fatigue of steel in aqueous solutions — electrochemical investigations 429
Trabanelli, G.: Use of organic inhibitors in the prevention of corrosion 447

50,— Ft

TARTALOMJEGYZÉK

Az Agrártudományok Osztálya, a Kémiai Tudományok Osztálya, a Gazdaság- és Jogtudományok Osztálya 1981. évi április 29-i együttes ülése 213
Az MTA Spektrokémiai Munkabizottságának II. Szimpóziuma „A Spektrokémia Időszerű Kérdéseiről" (1980. október 16—19.) 315
Plško, E.: Geológiai anyagok szórt elemei spektrokémiai meghatározásának problémái .. 317
Flórián K., Zimmer K., Heltai Gy.: A színképfelvételek kiértékelésének optimális lehetőségei 329
Magyar B.: Az ICP és AAS módszer összehasonlítása az analitikai teljesítőképesség szempontjából 347
Gál T.: A tömegspektrometria alkalmazási lehetőségei a levegőszennyezettségi vizsgálatok területén 357
Kecskés Á., Izsóf K., Cornides I.: Tömegspektrométeres izotópadatok geológiai értelmezésének problémái szén-dioxid-genetikai vizsgálatok alapján 365
Morvay L., Nováková, P. Cornides I.: A többszörös ionizáció tömegspektrométeres vizsgálata vákuumszikra esetében 373
Matherny M.: Színképelemzési tapasztalatok az ikerplazma-gerjesztéssel, I. Az ikerplazma-sugárforrás kifejlesztése és tulajdonságai 381
Caroli, S.: Az üregkatódos és a glimmkisüléses sugárforrások analitikai alkalmazásának lehetőségei 391

Előadások

Noller, H.: Katalízis a koordinációs kémia szemszögéből 401
Resch G., Gutmann, V.: Az elektrolitok dinamikus rendezettsége 421
Bonora, P. L., Cerisola, G., De Anna, P. L.: Acél korróziós kifáradása vizes oldatokban — elektrokémiai vizsgálatok 429
Trabanelli, G.: Szerves inhibitorok alkalmazása a korrózióvédelemben..... 447

Megjelent 1981. XII. 17-én.

Index: 26.406

ISSN 0022—9814