

FELMÉRÉS ÉS ÉRTÉKELÉS

az 1968 és 1970 között Magyarországon folytatott szerves kémiai szerkesztükutatásban alkalmazott infravörös és magneses rezonancia (mikrohullámu) spektroszkópiai kutatásokról

1.) IR-Spektroszkópia

A felmérő időszakot negelőzően már több mint egy évtizede működtek Magyarországon infravörös spektrométerek, melyek körül kialakult néhány kutatási centrum. A kutatások két fő irányban folytak : egyszerű szimmetrikus, egyszerűbb felépítésű molekulák erőállandójának számítása volt a kutatók célkitűzése, másrészt az IR spektroszkópia szerves kémiai szerkesztükutatásokbeli alkalmazása. A felmérés az alábbi kutatások helyzetére tér ki.

Műszerezettség : A műszerek számát, minőségét és kapacitását tekintve a helyzet a felmért időszakban kielégítő volt. minden jelentősebb szerves kémiaival foglalkozó kutatóhely rendelkezik már egy vagy több infravörös spektrométerrel, s a műszerdílmány mintegy fele UR-10 (Zeiss, Jéna) típusú készülék, melyek felbontása, reprodukálhatósága, stb. megfelel a szerkesztükutatási feladatok tulajomó többsége által tármasztott követelményeknek. Ugyanezzel összefüggésben azonban fokozódó nehézségek várhatók a következő időszakban. A Zeiss u.i. leállította a tipusok gyártását, s ezért a tartozékok és tartalékkalitatások beszerzése egyre inkább aka-

dozik. Például, hogy a következő években érhetővé válik ennek kiros hatása. A hazai gyártmányú MOM-2000 kordkészülék nem alkalmas a legtöbb kutatási feladat megoldására.

Szakember-képzés : A rendszeres szakember-képzés nem elégít ki az igényeket, s ennek hatása kirosan mutatkozik a műszerek kibocsátásában. Az ELTE ill. EME Vegyészkarán rendszeresen ismétlődő speciálkollégiumok és az időről-időre (pl. a Magyar Kémikusok Egyesületében, a EME Szakmérnöki Karán) megrendezett IR-tárgyu tanfolyamok többsége is az elméleti problémákkal foglalkozik. Tudomásom szerint egyedül Láng László speciálkollégiumának (ELTE, Vegyészkar) tárgya – ott is csak az UV-Spektroszkópia mellett – az alkalmazott IR-spektroszkópia. Feltétlenül szükséges lenne az összes vegyészkaréssel foglalkozó egyetemeken az elméleti és alkalmazott IR-spektroszkópia önálló tárgykánti oktatását mielőbb bevezetni. A szakemberképzés nehézségeit valamelyest enyhíti, hogy elég gazdag magyar nyelvű szakirodalom áll rendelkezésre, és hogy az alkalmazott IR kutatások legismertebb centrumaiban (Központi Kémiai Kutató Intézet, Eötvös Loránd Tudományegyetem, Gyógyszerkutató Intézet) hazai ösztöndíjakkánt ismerkedhetnek meg a fiatal szakemberek a tudományterülettel. Nivel azonban korlátozottak az ilyen lehetőségek, rendszerint csak az e területre spe-

cialisálódóknak van lehetőségek ilyen vagy külföldi össztöndíjakkal megvásárolni a szükséges alapismereteket. Ugyanakkor a modern szerkeszetkutatás negköveteli, hogy minden kutatóegyén – tekintet nélkül szűkebb tudományterületre – IR alapismeretekkel rendelkezzék.

A kutatások eszköveneinek igen változó. Néhány kutatócentrumról igen sok és nivéa publikáció lát napvilágot, ugyanakkor a kutatóhelyek nagyobb részénél csak rutinmódszerként alkalmazzák az IR-spektroszkópiát, s a publikációk száma, ill. nívója elmarad az elvárhatótól. E problémát is a rendszeresebb szakembereképzés oldhatná csak meg.

A főbb kutatóhelyeken folyó vizsgálatokról a felmérés 3. részében a színeses magrezonancia vizsgálatokkal együtt adtunk meg egy összeillítést, mivel az IR és NMR módszerek a legtöbb kutatóhelyen együttesen kerülnek alkalmazásra.

2.) NMR-Spektroszkópia

Bár a hazai kutatások ugyanolyan a nemzetközi kutatásokkal egyidőben mintegy két évtizede negindultak hazánkban (Központi Fizikai Kutató Intézet) az eladási NMR-spektroszkópia területén, az alkalmazott kutatások a környező országokhoz nártan is rendkívül elmaradottak voltak a földi időszakban. Ennek az az oka, hogy 1968-ban mindössze 6 (!) NMR spektrométer működött az országban, a technikailag ezek közül is csak egyetlen (Gyógyszerkutató Intézet,

VARIAN A-60D) felelt meg a minimális nemzetközi nívónak. Ugyanakkor amikor a környező országokban kivétel nélkül több 100 MHz-es műszer üzemel, Nyugaton pedig a 220 MHz-es műszerek mellett egyre több 300 MHz-es készülék kerül alkalmazásra (e tipusokat sorozatban gyártja több cég is), nálunk még jelenleg sincs üzemben egyetlen 100 MHz-es műszer sem. A készülékek nagas ára miatt a legtöbb kutatóhely saját erőből nem tud műszerhez jutni, a közös vagy központilag elhelyezett műszerek beszerzése pedig sokszor adminisztrativ okokból lehetetlen.

Igy számosztottan NMR kutatások csak a Központi Kémiai Kutató Intézetben és a Gyógyszerkutató Intézetben folytak ill. néhány további intézetben, elsősorban egyetemi tanárokban a KKFI-val ill. a GYKI-val együttműködésben.

A szakemberképzés nehézségei hasonlóak, mint az IR-re röviden, bár 1969 óta az ELTE Vegyészkarán rendszeres képzés folyik (Sohár Pál : Elmléti és gyakorlati NMR-Spektroszkópia, 2 féléves speciálkollégium). Egyetemi jegyzetektől eltekintve nincs visszont magyar nyelvű szakkönyv a tudományterületről.

3.) Főbb kutatási témaik

Az alábbiakban felsoroljuk a legfontosabb hazai kutatóhelyek főbb kutatási témaikat. Tudományos együttműködések nél annál az intézetnél adjuk meg a témát, ahol a visszalatok

spektroszkópiai része folyik. Mivel a legtöbb téma kapcsán az IR és NMR módszerek együttesen kerülnek felhasználásra, nem választottuk szét az IR és NMR témdíjakat.

Magyar Tudományos Akadémia, Központi Kémiai Kutató Intézet

1. Izokinolin vizes vegyületek szerkezetfelderítése (Chinein Gyár), IR.
2. Polietilén szigetelésű kábelekben az amorf és krisztályos polietilén hatása a törésekre (Magyar Kábel Művek), IR.
3. Szteroidök szerkezetvizsgálata (Kobányai Gyógyszergyár), IR.
4. N-fenil-N-tritilcianamid N-fenil-N¹-tritilkarbodiimidé átrendeződésének kinetikai vizsgálata (Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Tanszék), IR.
5. Tropírvázas származékok konformációs analizise (Kobányai Gyógyszergyár), NMR.
6. Diazepinszármazékok konformációs analizise, konf., energianeghatározás, oldószereffektusok vizsgálata (Egyesült Gy. és Rájai Gyár), NMR.
7. Kvaterner tetrahidro-izokinolinium cikl. térszerkezetének és konformációinak tanulmányozása (József Attila Tudományegyetem Szerves Kémiai Intézete), NMR.
8. Azetidin és származékaiknak konformációs analizise (József Attila Tudományegyetem Szerves Kémiai Intézete), NMR.

9. Vinkrisztin és származékainak szerkezetvizsgálata (Kőbányai Gyógyszerárugyár), NMR.
10. Tetrazolo-piridin származékok szerkezetvizsgálata, NMR.
11. Tetrasubstítuált etánezármazékok konformációs analizise, NMR.
12. Morfinvázas vegyületek térszerkezetének vizsgálata, ^5J típusú long-range kapcsolási állandók meghatározása (Kossuth Lajos Tudományegyetem Szerves Kémiai Intézete), NMR.

Gyógyszerkutató Intézet

(IR és NMR témák)

1. Tiazin- és tiazolin-származékok szerkezettelderítése.
2. Kéntartalmú cukorszármazékok szerkezettelderítése és konformációs analizise.
3. Imidazo-pirimidonok. Szerkezet és tautomeria.
4. Mukonsav-származékok IR és NMR spektrumának elnáleti értelmezése.
5. Szimmetrikus molekulák IR-színképének elnáleti értelmezése.
6. Mono- és biciklikus izocitosin-származékok tautomer szerkezetének vizsgálata (Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Tanszék).

7. α -Triazino-3,1-benzoxazepinek szerkezetfelderítése (Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Tanszék).
8. Hidantoinek, tichidantoinek és származékaik tautomériaproblémáinak tisztázása (Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Tanszék).
9. β -Oxo-savszármazékok tautomériája (Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Tanszék).
10. Oxo-csoportot tartalmazó kinolizidin-származékok hidratációjának ill. acetalképzési hajlamának vizsgálata (Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémiai Tanszék).
11. Ftalasin-származékok szerkezete és tautomériája (Béla Horváth Tudományegyetem, Szerves Kémiai Intézet).
12. β -Emanino-észterek szerkesete, konformációja (Rheinische Friedrich Wilhelm Universität Szerves Kémiai Intézete).
13. Ditiokarbonsav-származékok szerkesete, tautomériája (Növényvédői Kutató Intézet).
14. Kalkon- és acetofenon-származékok szerkezetvizsgálata (József Attila Tudományegyetem Alkalmazott Kémiai Tanszék).
15. Karbxi-cikloalkanciklók térszerkezete (József Attila Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszék).

Bótvös Loránd Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszék

(IR és NMR témák)

1. Szerves kénvegyületek (tioéterek, szulfoxidok, szulfiliminek) elektron és térszerkezete, reakciókénsége,
2. Isobenzpiriliumok szerkezetük és arómás jellegük vizsgálata,
3. Ftálsavhidrasid származékok szerkezetvizsgálata,

Kossuth Lajos Tudományegyetem Szerves Kémiai Tanszék

1. Flavonoidok és származékaik szerkezetvizsgálata, IR,
2. Mákalkaloizidok és származékaik szerkezetvizsgálata, IR,
3. O- és N-glükosidok és származékaik, valamint heterociklusos cukorszármazékok szerkezetvizsgálata, IR,
4. Antibiotikumok infravörös spektroszkópiai vizsgálata,
5. Virusellenes hatóanyagok és azintézisük küsti terüleinek vizsgálata, IR.

Veszprémi Végzettségi Egyetem Szerves Kémiai Tanszék és

Magyar Ásványolai és Földgázipari Kutató Intézet

1. Pénykarbonil-vegyületek térszerkezete, Inzerció, IR,
2. Kobalt-komplexek szerkezetvizsgálata, IR,
3. Komplex-elegyek analízise, IR,

Budapesti Műszaki Egyetem Szerves Kémia Tanszék

1. IR spektroszkópiás módszer kidolgozása disszubszt., karbanidok és trikarbanidok szerkezetfelderítéshez,

AKADÉMIAI
LEVÉLTÁR

- 9 -

További intézetek, mint kooperációs partnerek a fenti témák után szírőjelben szerepelnek.

Budapest, 1971. május 24.


(Dr. Schair Pál)