

Holly Sándor (1929-2005), a rezgési spektroszkópia hazai szerkezetkutatói alkalmazásának egyik úttörője

JALSOVSZKY György*

MTA Központi Kémiai Kutatóintézet, Pusztaszeri út 57-69, 1025 Budapest, Magyarország (1966-1998)

Immár több, mint 15 éve nincs közöttünk Holly Sándor, aki 1956 szeptemberétől kezdve egészen 2005-ben bekövetkezett tragikus haláláig a rezgési spektroszkópia szerkezetkutatói alkalmazásainak szentelte munkásságát, és egyike volt azoknak, akik ezt a szerkezetfelderítési módszert Magyarországon meghonosították, annak elterjedését ösztönözték és segítették. Szakmai ismereteit, teljesítményét és közkedvelt személyiségét tekintve szinte önként adódott az igény, hogy személyéről és munkásságáról e lap hasábjain megemlékezzünk. Minthogy 1969 és 1998 között Holly Sándor legközelebbi munkatársai közé tartoztam, a Magyar Kémiai Folyóirat szerkesztősége engem kért meg e megemlékezés megírására, amit nagy megtiszteltetésnek tartva elfogadtam.

Holly Sándorral először 1963-ban, harmadéves vegyészmérnök hallgató koromban találkozhattam, amikor tudományos diákköri feladatomhoz infravörös spektrumokat kellett készíteni. Akkor javasolták, hogy a Műegyetem Fizikai Kémiai Tanszékén keressem fel az infravörös spektroszkópiai laboratóriumot, ahol az ország egyik különleges műszerével majd felveszik a spektrumot. Ez a különleges műszer az (akkor) élenjáró keletnémet optikai ipar UR 10-es regisztráló infravörös spektrométere volt, egyik működtető gazdája pedig, aki készséggel tett eleget kérésemnek, Holly Sándor. Akkor még nem tudtam, hogy a hazai alkalmazott infravörös spektroszkópiai kutatások egyik bölcsőjéhez látogattam el, amelyet Holly Sándor, e kutatások avatott művelője ringatott ott, a Budafoki úti laboratóriumban.

Holly Sándor 1929. szeptember 27-én született Nagycenken. Édesapja Holly Imre cukorgyári mérnök volt, édesanyja Krehán Irén, háztartásbeli. A család sokszor volt kénytelen költözni az apa foglalkozásának jellege miatt, így Sándor fiatalokora meglehetősen nehéz volt. Kaposváron érettségizett 1949-ben, egyetemi tanulmányait a Szegedi Tudományegyetem Természettudományi Karának vegyész szakán 1950-ben kezdte el. Harmadévtől kezdve a fizikai kémia szak tanulmányi csoportvezetője volt, vegyész oklevélét 1955 februárjában kapta meg.

1955 márciusától 1956 augusztusáig az Országos Élelmezés-és Táplálkozástudományi Intézetben cukrok papírkromatográfiás és spektrofotometriás vizsgálatával foglalkozott.

1956 szeptemberétől kezdve dolgozott a MTA Központi Kémiai Kutató Intézetben, 1957-től az akkor létrejött Optikai Spektroszkópiai Csoportban, amelynek 1969-ben vezetője lett. A kutatócsoport 1957-ben Varsányi György vezetésével, Holly Sándor és a fájó módon fiatalon eltávozott Szathmáry József részvételével kezdte meg működését.



Holly Sándor

Az optikai spektroszkópiai csoportban a kísérleti infravörös spektroszkópiai munka 1957 tavaszán kezdődött meg a SzUTA-tól ajándékba kapott IKSZ 11 típusú, prizmás, egysugarú infravörös spektrométerrel. Magyarországon, egy azonos típusú, a veszprémi MÁFKI-ban működő műszerrel együtt ez volt az első regisztráló spektrométer, amellyel teljes infravörös spektrumokat lehetett készíteni. Ezt a műszert 1959-ben egy NDK gyártmányú, automatikus prizmaváltású kétsugarú készülék (UR 10) váltotta fel, és ez volt az a műszer, amelynek Holly Sándorral való találkozásomat köszönhettem. A Műegyetem Fizikai Kémiai Tanszékének területén működő csoporttal együttműködött még több akkori és későbbi tanárom (Kiss Árpád, Billes Ferenc és Sztraka Lajos), akik a tanítás mellett végeztek értékes kutatómunkát a rezgési spektroszkópia és más, közeli témák területén. A csoport ebben az időszakban különösen dihalogén-benzolok és monoszubsztituált piridinek normálrezgéseinek és rezgési frekvenciáinak hozzárendelésében ért el figyelemre méltó eredményeket, de folytak a molekularezgések elméletének alapvető kérdéseivel foglalkozó kutatások, amelyekbe Holly Sándor is bekapcsolódott.¹

Időközben Holly Sándor és az optikai spektroszkópiai csoport elköltözött a Műegyetem területéről a Rózsadomb (akkor) elegáns Pusztaszeri úti épületgyűjtésébe, ahol a Magyar Tudományos Akadémia Központi Kémiai Kutató

* Tel.: +36 30 203 6124; e-mail: jalsogy@gmail.com.

Intézete működött Schay Géza akadémikus vezetésével. Varsányi György, aki Schay Géza utódként tanszékvezető lett a BME Fizikai Kémia Tanszéken, 1969-ben átadta az optikai spektroszkópai csoport vezetését Holly Sándornak. Ekkor váltam én is a csoport tagjává, amelyben annak idején Szathmáry József, Imre Lajos és Vinkler Péter dolgozott kutatóként, valamint Szabó Irén („Masuka”) mindent tudó technikusként. Nem sokkal később a friss diplomás Keresztury Gábor is csatlakozott az együtteshez. Ettől kezdve a csoport egy negyed évszázadon át lényegében stabil összetételben dolgozott. Holly Sándor csoportvezetői működése során (1969–1995) a Központi Kémiai Kutató Intézetnek öt igazgatója, ill. főigazgatója volt (Schay Géza, Nagy Ferenc, Holló János, Márta Ferenc, Pálincás Gábor), mialatt Sándor az állandóságot biztosította csoportjának, vezetői munkáját mindvégig nagy sikerrel végezve, közben szilárdan ellenállva az állampárthoz való csatlakozás gyors karriert ígérő csábításainak.

A csoport munkáját 1967-től egy világszínvonalú, diffrakciós rácsos spektrofotométer (Perkin-Elmer 225) segítette, majd 1976-ban korszerű Raman-spektroszkópai mérések is lehetővé váltak egy Cary 82 típusú tripla monokromátoros, lézer-gerjesztéses Raman spektrométerrel, ezzel teljessé téve a rezgési spektroszkópai mérések akkori műszerarzenálját.

Ettől az időtől kezdve Holly Sándor és csoportja vegyületek azonosításával, kimutatásával, szerkezetfelfedezésével, kémiai reakciók nyomon követésével foglalkozott infravörös és Raman spektrumaik alapján. E témakörben készült Holly Sándor kandidátusi értekezése² is (Szerinszármazékok vizsgálata infravörös spektroszkópai módszerrel, különös tekintettel a Ca-boroxazolidin diklóracetilézésére), amelynek megvédésével 1969-ben megszerezte a kémiai tudomány kandidátusa fokozatot. A kémiai tudomány doktora címet 1994-ben szerezte a triacetil-levoglükózán TiCl_4 komplexeinek szerkezetvizsgálata terén végzett kutatásai alapján.³

A Központi Kémiai Kutató Intézetben végzett alapkutatói tevékenységén túlmenően Holly Sándor több magyar ipari és felsőoktatási intézménynél működött szakértőként illetve konzulensként, mint például a BME Szerves Kémiai Technológia Tanszéken, valamint a Kőbányai Gyógyszerárugyárban és a Chinoin Gyógyszergyárban. Nagy érdemeket szerzett ezen intézmények infravörös spektroszkópai kutatásainak elindításában, és szakértelmét még évtizedekig kamatoztathatta ezen a területen. 1972-től a Bűnügyi Technikai Intézet is szakértőként alkalmazta, és számos nagy súlyú bűnügyben fontos bizonyítékokat szolgáltatott a hatóságok számára az infravörös spektroszkópia alkalmazásával. 1964 és 1967 között az akkori Nehézipari Minisztérium felkért szakértőjeként sikeresen vett részt infravörös spektroszkópai vizsgálataival a klórámfenikol szabadalombitorlási perben, amelyet két külföldi gyógyszergyár (Svédországban és az akkori NSZK-ban) indított az Egyesült Gyógyszer- és Tápszergyár (a későbbi EGIS) ellen.

Pályafutása alatt több ezer vegyület szerkezetfelfedezésében vállalt szerepet. Ezek közül kiemelendő a szterán-, indol-, illetve izokinolinvázas vegyületek, továbbá tiokarbamid és tioszemikarbazid vegyületek területén végzett tevékenysége, amelyről 1969 és 1992 között évente készített kutatási jelentésekben számolt be, és amelyről szabadalmi okokból csak igen korlátozott számban jelenhettek meg közlemények. Holly Sándor munkássága nagyon jó példa arra, hogy mennyi ígéretes tudományos eredmény porlad szabadalmi bejelentések koporsójában. Természetesen az eredmények publikálhatatlan volta fokozottan érvényes a Bűnügyi Technikai Intézetnek végzett szakértői munka részleteire.

Tankönyvek, egyetemi jegyzetek, monográfia-fejezetek mindazonáltal születhettek. 1965-ben Bor Györggyel az infravörös spektroszkópia alapjaival foglalkozó tankönyvet írt.⁴ 1966-ban az „Infravörös abszorpciók spektroszkópia” c. részfejezet megírásával járult hozzá a Kontakt Katalízis c. monográfiához.⁵ 1968-ban jelent meg Sohár Pállal közösen írt könyve,⁶ amely ezután több spektroszkópus-generáció számára szolgált alapvető magyar nyelvű monográfiaként. E generáció képviselőiről bátran állíthatjuk, hogy „valamennyien a Holly – Sohár-könyv köpönyegéből bújtak ki.” A mű népszerűségét jelzi, hogy hosszú időn át komoly kereslet volt rá és a könyvesboltokban hiánycikknek számított, sőt hogy „sorban álltak” (előjegyzések formájában) érte az antikváriumokban. A Műszaki Kiadó ugyan tervezett utánnomást, de ez végül nem készült el. Másrészt viszont az Akadémiai Kiadó, külföldi terjesztés céljából, a szöveget a célnak megfelelően átdolgozva megjelentette angol nyelven egy öt kötetből álló infravörös spektrumtálasz-sorozat bevezetőjeként.⁷

A WOS Citation Index⁸ 2021. márciusi adatai szerint Holly Sándor publikációinak száma: 92, összes idézeteinek száma: 2026 (ebből egy közlemény 797 idézettel!), Hirsch-indexe: 19.

Számos hazai és nemzetközi tudományos konferencián vett részt, előadással illetve poszterrel, közöttük elsősorban a European Congress on Molecular Spectroscopy elnevezésű rendezvényeken. Így előadásokkal szerepelt a Budapesten (1963), Liege-ben (1968), Wroclaw-ban (1977), Norwich-ban (1981) és Szófiában (1983) rendezett kongresszusokon. Felkérésre plenáris előadást tartott Lipcsében (1985), Budapesten (1986) és Offenbach/Main-ban (1988). A konferenciáktól eltekintve is tartotta a kapcsolatot külföldi kollegáival: 1962-ben Bukarestben, 1963-ban Prágában volt 2-2 hetes tanulmányúton, míg 1977-ben a Royal Society vendégeként háromhetes körúton volt Nagybritanniában (Cambridge, Egham, Cardiff, Sheffield és Norwich).

Nemcsak publikációs, hanem oktatási tevékenysége is említésre méltó. Az 1960-as években a BME Mérnök-továbbképző Intézete felkérésére előadássorozatot tartott a szakmérnöki és mérnök-továbbképzési tanfolyamokon. Az 1991/92-es és 1992/93-as tanévben speciálkollégiumot, majd gyakorlatot tartott az ELTE Szerkezetkutatási szakágazati képzés

keretében, 1993-ban pedig az ELTE héjfizika + biofizika specializáció emelt szintű laboratóriumi gyakorlatát (infravörös és Raman spektroszkópia) vezette fizikus hallgatók részére.

Az 1990-es évektől az akadémiai kutatás és benne a KKKI anyagi helyzetének romlása miatt nagy szerepet kaptak a külső megbízásos munkák, valamint a különféle (akkoriban leginkább OTKA) pályázatok. Mindkét területen sikeresen képviselte csoportja érdekeit, megteremtve a működés alapvető feltételeit. 1990-ben zárójelentésben számolt be a „Kapilláris GC/FT-IR rendszer kifejlesztése elválasztástechnikát igénylő szerkezetkutatásban” c. OTKA pályázatában elért eredményeiről. 1991-ben négyéves időtartamú újabb pályázatot nyert el „Kis tagszámú, 2-5 aminosavból álló biológiailag aktív oligopeptidek szerkezetvizsgálata kísérleti és elméleti spektroszkópiai módszerekkel” címmel. Bár Holly Sándor az ezekkel járó pályázat- és jelentésírási feladatok megoldásában is nagyszerűen helytállt, a laboratóriumi munka, a műszerek alkotó módon való használata és a spektrumok tanulmányozása bevallottan sokkal közelebb állt a szívéhez.

A tudományos közéletnek is aktív résztvevője volt. Tagja volt az MTA Spektroszkópiái Albizottságának, az MTA Elméleti Szerves Kémiai Munkabizottságának és a MTA Anyag- és Molekulaszerkezeti Munkabizottságának. Két évig részt vett az MTA Műszerügyi Bizottságának munkájában. Tagja volt a Magyar Kémikusok Egyesületének (MKE).

Vezetői munkája részének tekintette, hogy a lehetőségekhez mérten a technika élvonalába tartozó műszerek beszerzésével szilárd kísérleti alapot biztosítson az alapkutatások és alkalmazott spektroszkópiái kutatások számára. Ebben a tekintetben jelentős korszakváltásra került sor 1978-ban, amikor a műszerpark egy gyökeresen új elvi alapon működő, nagy spektrális felbontású és nagy érzékenységű Fourier-transzformációs IR-spektrométerrel (Nicolet 7199) és ahhoz egy átfolyó küvetán (GC-IR interfész) keresztül on-line csatolt gázkromatográfval gyarapodott. A nagyobb felbontás és érzékenység, valamint a digitális mérés technika és a számítógépes adatfeldolgozási módszerekre való áttérés az alapkutatási lehetőségek kiszélesedése mellett (lehetővé vált pl. nagy felbontású gőzspektrumok felvétele révén gőzfázisú molekulák rotációs-vibrációs analízise) gyökeres változást hozott az alkalmazott rezgési spektroszkópiái kutatások területén is. Ezt tovább fokozta az elválasztástechnikával kombinálható, hatékony új analitikai eszköz, a GC/FT-IR módszer alkalmazási lehetősége. Az 1976-ban beszerzett Cary 82-es Raman spektrométert sikerült összekapcsolnunk a Nicolet FT-IR műszert vezérlő dedikált számítógéppel, és így lehetővé vált az eddig csak analóg módon megjeleníthető Raman spektrumok számítógépes feldolgozása is.

Újabb előrelépés történt 1994-95-ben, amikor a műszerpark egy FT-Raman spektrométerrel (Nicolet Raman 950),

valamint az FT-IR rendszer újabb generációjával (Nicolet Magna 750) gyarapodott, majd pedig 2003-ban egy százszor érzékenyebb GC-IR interfészhez illesztett kapilláris gázkromatográfval. Ezek a beszerzések részben már nem Holly Sándor irányítása alatt történtek, de szerves folytatásai voltak az általa követett stratégiának.



1. Kép. Holly Sándor, Lejtoviczné Egyed Orsolya és Varga János a Nicolet GC/FT-IR műszer társaságában

Holly Sándor és az Optikai Spektroszkópiái Csoport kutatási tevékenységében kezdettől fogva kéz a kézben jártak alapkutatási és alkalmazott spektroszkópiái jellegű elemek, amint ezt a publikációk is jelzik, amelyeket Holly Sándor közleményei közül válogattam ki, megkísérelve azt, hogy képet adjak egy életút kutatási tevékenységéről. A válogatás természetesen nem nélkülözi a szubjektív elemeket, amelyek egyike az, hogy előnyben részesítettem az olyan közleményeket, amelyek szerzői között Holly Sándor mellett a csoport valamelyik tagja is szerepelt. Így tehát elnézését kérem azon együttműködő kutatóknak, akik jelentős tudományos eredményekről szóló cikkek szerzői, társszerzői, és közleményük mégis kimaradt a hivatkozott közlemények sorából.

Alapkutatásnak minősítettem a molekulaszerkezet valamint a rezgésmódok és a spektrális paraméterek (normálrezgések frekvenciája és intenzitása) közötti összefüggések feltárását, az infravörös elnyelési és Raman szórás frekvenciák hozzárendelését a molekulák normálrezgéseikhez. Ennek egyik útja a molekulák rezgési erőállandóinak számítása a kísérleti frekvenciák alapján. Ezt a csoport munkatársai kiterjedten művelték, főként nemzetközi együttműködésben,⁹⁻¹³ tekintettel a magyarországi számítástechnika korabeli színvonalára. A másik út a kvantummechanikai módszerek alkalmazása az erőállandók rezgési frekvenciáktól elkülönített, ab initio számítására, amely módszerek a számítógépek egyre nagyobb memóriájával és sebességével fokozatosan egyre nagyobb molekulák esetében váltak lehetségessé.¹⁴⁻¹⁶ A rezgési frekvenciák számítása mellett történtek kísérletek oldatfázisú szteroid molekulák elnyelési intenzitásainak mérésére és értelmezésére is.¹⁷

A jellemző kötés- és csoportfrekvenciák és egyéb spektrum-szerkezet összefüggések felhasználásával az Optikai Spektroszkópiai Csoport munkatársai sikerrel járultak hozzá a hazai kémiai kutatások feladatainak megoldásához. E körben például több, mint egy évtizedes szoros együttműködés folyt az ELTE Kiroptikai Szerkezetvizsgáló Laboratóriumával, amelynek eredményeként számos közös publikáció jelzi, hogy az infravörös spektroszkópiai adatok milyen értékes szerepet játszanak a di-, oligo- és polipeptidek valamint fehérjék vizsgálatában, elsősorban a konformáció meghatározásában.¹⁸⁻³⁰ Hasonlóan sikeres infravörös spektroszkópiai vizsgálatok segítettek például hajlott törzű (banán alakú) monomerekből felépülő folyadék-kristályok szerkezetének felderítését,^{31,32} a 2,6-diizopropilfenol konformációs egyensúlyának meghatározását,³³ ion-szelektív elektródokban alkalmazott bisz-koronaéterek szerkezetvizsgálatát,³⁴ vagy a mezokarb metabolitjainak azonosítását.³⁵

Itt kell emlitenünk a GC/FT-IR technika alkalmazását, amely a gázkromatográfia és spektroszkópiai mérés on-line kombinációjának köszönhetően gőzfázisú spektrumokat mér, amelyek sokkal egyértelműbb összefüggésben állnak a kémiai szerkezettel, mint az egyéb fázisokban mért spektrumok.^{36,37,38} Ez a technika kifejezetten alkalmasnak bizonyult metabolitok vizsgálatára.^{39,40}

Holly Sándor vezetése alatt (1969-1995) a csoportban kutatóként Imre Lajos, Jalsovszky György, Keresztury Gábor, Vinkler Péter, Lejtoviczné Egyed Orsolya, Varga János, Mohammedné Ziegler Ildikó és István Krisztina vett részt, technikusként pedig Szabó Irén és Molnár Józsefné. A kutatásokban együttműködő hazai kollegák és nemzetközi szinten együttműködők száma olyan tekintélyes, hogy őket itt felsorolni merész vállalkozás lenne. Az irodalomjegyzékből megbecsülhető az együttműködések terjedelme, de itt figyelembe kell venni, hogy ez Holly Sándor közleményeinek csak kevesebb, mint felét sorolja fel, és hogy az eredmények jelentős része (ezzel a közreműködők személye is) – mint már korábban céloztam rá – szabadalmakban, ill. kutatási jelentésekben öltött testet.

Holly Sándor és az Optikai Spektroszkópiai Csoport tagjai igen eredményes nemzetközi együttműködésekkel alakítottak ki finn (T. Sundius, Helsinki University), bolgár (B. Jordanov, BTA Szerves Kémiai Int., Szófia), horvát (Prof. Z. Meič, Rudjer Bosković Institute és Zágrabi Egyetem) és indiai kollégákkal (G. Aruldas, Kerala University). Holly Sándor személyesen is rendkívül jó kapcsolatot ápolt a műszereket gyártó Nicolet cég Offenbach/Main-i munkatársaival, ami a műszerek zavartalan és magas technikai színvonalon való működésének (azokban az időkben) fontos feltétele volt. Egyébként az összes ilyen technikai jellegű kérdést a „jó gazda” szemlélettel kezelte, talán ez is hozzájárult a csoport negyedszázados zavartalan működéséhez, azt sem elfelejtve, hogy a beosztottak irányában a „jó pástör” szemlélet uralkodott.

1995 januárjában Holly Sándor lemondott csoportvezetői beosztásáról, és én vettem át a teendők ellátását egészen 1996 végéig, amelytől kezdve Keresztury Gábor vezette a csoportot az Intézetben zajló további szervezeti/szerkezeti változásokig. Ezekről függetlenül Holly Sándor tudományos tanácsadóként teljes munkaidőben és elkötelezettséggel tovább működött, segítette a csoport munkáját; különösen István Krisztina LC/FT-IR vizsgálatait kísérte nagy figyelemmel. Munkatervében szerepelt az infravörös és Raman spektroszkópia alkalmazása peptidek, szintetikus vegyületek, izolált természetes anyagok és félszintetikus származékaik szerkezetfelderítésében, valamint a metabolizmus-kutatásban. Közben rendezte és publikációra készítette elő még függőben lévő kutatási eredményeit, amelyben nagy segítségére volt a csoporthoz csatlakozott Vinkler Péterné.

2004-ben az MTA Kémiai Kutatóközpont Pro Arte Chemica díjjal ismerte el munkásságát. 2005. március 31-én vonult nyugdíjba, és még terveit voltak a jövőre...

2005. május 31-én az 51-es főúton tragikus és mindenkit megdöbbentő autóbaleset áldozata lett feleségével, Évával együtt.

Halálával nagy veszteség érte a hajdani Optikai Spektroszkópiai Csoportot, a hajdani, Pusztaszeri úton működő Központi Kémiai Kutató Intézetet és a Magyar Tudományos Akadémia, köztük elsősorban a magyar spektroszkópia kutatóinak közösségét. Kifogástalan modorú, csendes, barátságos, udvarias, szelíd, igényes, megbízható, szorgalmas, kitartó és kreatív kollégát veszítettek el. Egy nagyszerű előadót, akinek a német vagy angol nyelv sem volt akadály. Manuális készsége átlagon felüli, és bár egy időben két technikus is segítette a csoport munkáját, nem riadt vissza KBr pasztillák készítésétől, igényes oldatfelvételek előkészítésétől, a műszerek kezelésétől akár rutin feladatok esetében sem.

Olyan munkahelyi légkört teremtett, amely nagymértékben segítette a munkát. Csoportos munkaértekezleteket a reggeli kávézás közben tartott, míg az ebédutáni kávézás idején szeretett visszavonulni dolgozószobájába, ahol egy nyugodtan elszívott pipa mellett egyénileg beszélgetett munkatársaival. Ebbe alkalmanként még egy villám-sakkparti is belefért. Egyébként is szerette a sportot, a természetet, az irodalmat és a klasszikus zenét.

Családszerető, két fiára határtalanul büszke, amint azt fiai – kéresemre írt megemlékezésükben – egyértelműen állítják. „Nagyon családszerető volt, remek Apa, a sok munka mellett, mindig maradt ideje ránk is. Rengeteget kirándultunk, bejártuk a Pilit, a Börzsönyt, a Budai hegyeket, télen pedig sokat sieltünk a Normafánál, Visegrádon (Nagyvillámnál), Mátrában, de Zakopaneba is eljutottunk. Nagyon szeretett minket, mindent megtett értünk és mi is nagyon szerettük, soha nem lehetett érezni rajta, hogy 'tudós ember', a hét-köznapiakban igazi családapa volt.” Hozzátenném, hogy az

intézeti Mikulás-ünnepeken (más kollégákkal együtt) nagy örömmel vett részt fiaival, amint ezt az egyik mellékelt fénykép is megörökítette.



2. Kép. Holly Sándor fiaival, Andrással és Balázssal egy munkahelyi Mikulás-ünnepségen

Sándort barátai és tisztelői körében 2005. június 16-án búcsúztattuk a KKKI azóta elárvult Pustaszéri úti épületének tanácstermében. Emberi és szakmai erőit Tóth József és Keresztury Gábor méltatták. Így ahelyett, hogy folytatnám Sándor kivételes emberi vonásainak sorolását, álljon itt egy részlet Keresztury Gábor ott elhangzott megemlékezéséből:

„Ami Sándort illeti, nála segítőkészebb, előzékenyebb és korrektebb embert nem nagyon ismertem. Ha valaki segítségre szorult – és nem csak a szűkebb környezetéből – azt ő érzékenységgel, kivételes empátiájával azonnal észlelte, saját gondjait feledve elsőként ajánlkozott, hogy segít. (...) Csoportunk belső életéhez – ahogy én láttam – ez adta meg az alaphangot. Kisebb konfliktusok persze előfordultak, de az a mélyen baráti, szinte családias légkör, ami az őszinteségen, nyíltságon, egymás iránti megbecsülésen és feltétlen jószándékon alapult, mindig meghozta a jó megoldást és végeredményben igen kellemes munkahelyet teremtett, amelyet nem véletlenül éreztünk második otthonunknak. (...) Sándor a főnökünk volt, de inkább mint egy tapasztalt kolléga és jóbarát, – ősz haja és a korkülönbség miatt amolyan atyai figura, aki talán nem is szeretett főnök lenni; nem tudott és nem is akart 'főnököt játszani', utasítgatni. Beosztottait, a fiatalabbakat soha nem akarta kihasználni. Hagyott minket önállóan dolgozni, büszke volt eredményeinkre. A közös munka sikerének leartásakor viszont minket tolt előtérbe; ő maga inkább a háttérben szeretett maradni. (...) A generációs problémák kezelésére volt egy jól bevált módszere: a csoport legújabb, egyre fiatalabb tagjaival is hamar összetegeződött; mindenkivel – aki minimális tisztelettel közelített hozzá – közvetlen, baráti viszonyt alakított ki. És szívesen tanult új dolgokat a fiataloktól, vagy velük együtt: könnyen elfogadta, hogy vannak dolgok, amit ők már másképp tanultak, jobban tudhatnak és nem röstelt kérdezni tőlük. Igényelte, hogy tanítsuk meg őt is pl. a legújabb elméleti-számítási módszerek használatára. (...) Hosszasan méltathatnám tovább, de azt hiszem, ha ő most itt ülne közöttünk, valószínűleg nehezen viselné ezt a dolgot és bizonyára kivonulna a folyosóra, egy pipára, amíg befejezzük.”

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom Holly Sándor gyermekeinek, Holly Andrásnak és Balázsnak a nagyfokú segítőkészségért, a szolgáltatott adatokért, családi emlékekért és fényképekért, Lejtoviczné Egyed Orsolyának és Vinkler Péternek a publikációs adatok felkutatásáért és kiegészítő információkért, Keresztury Gábornak pedig számos adatért, emlékért, amelyek nélkülözhetetlen segítséget nyújtottak az emlékezés megírásában. Sohár Pálnak köszönöm – fontos adatok és tények közlése valamint tévedéseim korrigálása mellett – a felkérést ennek az emlékezésnek az elkészítésére, és az ösztönzést, biztatást az írás folyamán.

Hivatkozások

1. Varsányi, G.; Holly, S.; Imre, L. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular Spectroscopy* **1967**, 23 (5), pp. 1205-1210. [https://doi.org/10.1016/0584-8539\(67\)80336-2](https://doi.org/10.1016/0584-8539(67)80336-2)
2. Holly Sándor Kandidátusi értekezés, MTA, Budapest, **1969**.
3. Holly Sándor Doktori értekezés, MTA, Budapest, **1994**.
4. Bor György és Holly Sándor: *Az infravörös spektroszkópia alapjai*, Mérnöktovábbképző Intézet, VVe. 19. kiadvány, Tankönyvkiadó, Budapest, **1965**.
5. Holly Sándor *in* *Kontakt Katalízis*, szerk. Szabó Zoltán, Akadémiai Kiadó, Budapest, **1966**; pp.702-710.
6. Holly Sándor és Sohár Pál, *Infravörös spektroszkópia*, Műszaki Könyvkiadó, Budapest, **1968**.
7. Holly, S.; Sohár, P. *Absorption Spectra in the Infrared Region: Theoretical and Technical Introduction*, Akadémiai Kiadó, Budapest, **1975**.
8. <https://clarivate.libguides.com/woscc/citationnetwork>
9. Keresztury, G.; Holly, S.; Marzocchi, M.P. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular Spectroscopy* **1977**, 33 (1), pp. 29-36. [https://doi.org/10.1016/0584-8539\(77\)80144-X](https://doi.org/10.1016/0584-8539(77)80144-X)
10. Holly, S.; Jalsovszky, G.; Egyed, O. *Journal of Molecular Structure* **1982**, 79 (C), pp. 465-468. [https://doi.org/10.1016/0022-2860\(82\)85101-6](https://doi.org/10.1016/0022-2860(82)85101-6)
11. Billes, F.; Mikosch, H.; Holly, S. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* **1998**, 423 (3), pp. 225-234. [https://doi.org/10.1016/S0166-1280\(97\)00143-7](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(97)00143-7)
12. Keresztury, G.; Holly, S.; Sundius, T.; Lóránd, T. *Vibrational Spectroscopy* **2002**, 29 (1-2), pp. 53-59. [https://doi.org/10.1016/S0924-2031\(01\)00177-1](https://doi.org/10.1016/S0924-2031(01)00177-1)
13. Keresztury, G.; Holly, S.; István, K.; Sundius, T.; Lóránd, T. *Journal of Biochemical and Biophysical Methods* **2004**, 61 (1-2 SPEC. ISS.), pp. 107-118. <https://doi.org/10.1016/j.jbbm.2004.04.012>
14. Császár, P.; Császár, A.; Somogyi, Á.; Dinya, Z.; Holly, S., Gál, M.; Boggs, J.E. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular Spectroscopy* **1986**, 42 (4), pp. 473-486. [https://doi.org/10.1016/0584-8539\(86\)80043-5](https://doi.org/10.1016/0584-8539(86)80043-5)
15. Endrédi, H.; Billes, F.; Holly, S. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* **2003**, 633 (1), pp. 73-82. [https://doi.org/10.1016/S0166-1280\(03\)00329-4](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(03)00329-4)
16. Keresztury, G.; Holly, S.; Besenyi, G.; Varga, J.; Wang, A.; Durig, J.R. *Spectrochimica Acta – Part A Molecular Spectroscopy* **1993**, 49 (13-14), pp. 2007-2017. [https://doi.org/10.1016/S0584-8539\(09\)91012-1](https://doi.org/10.1016/S0584-8539(09)91012-1)
17. Egyed, O.; Jalsovszky, G.; Holly, S. *Journal of Molecular Structure* **1983**, 99 (1-2), pp. 133-136. [https://doi.org/10.1016/0022-2860\(83\)90164-3](https://doi.org/10.1016/0022-2860(83)90164-3)
18. Hollósi, M.; Kövér, K.E.; Holly, S.; Radics, L.; Fasman, G.D. *Biopolymers* **1987**, 26 (9), pp. 1555-1572. <https://doi.org/10.1002/bip.360260908>

19. Hollósi, M.; Kövér, K.E.; Holly, S.; Fasman, G.D. *Biopolymers* **1987**, 26 (9), pp. 1527-1553.
<https://doi.org/10.1002/bip.360260907>
20. Holly, S.; Egyed, O.; Jalsovszky, G. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular Spectroscopy* **1992**, 48 (1), pp. 101-109.
[https://doi.org/10.1016/0584-8539\(92\)80203-9](https://doi.org/10.1016/0584-8539(92)80203-9)
21. Perczel, A.; Majer, Z.; Holly, S.; Machytka, D.; Fasman, G.D.; Hollósi, M. *Tetrahedron: Asymmetry* **1993**, 4 (3), pp. 591-603.
[https://doi.org/10.1016/S0957-4166\(00\)86099-1](https://doi.org/10.1016/S0957-4166(00)86099-1)
22. Holly, S.; Laczkó, I.; Fasman, G.D.; Hollosi, M. *Biochemical and Biophysical Research Communications* **1993**, 197 (2), pp. 755-762.
<https://doi.org/10.1006/bbrc.1993.2543>
23. Holly, S.; Majer, Z.; Toth, G.K.; Varadi, G.; Rajnavolgyi, E.; Laczko, I.; Hollosi, M. *Biochemical and Biophysical Research Communications* **1993**, 193 (3), pp. 1247-1254.
<https://doi.org/10.1006/bbrc.1993.1759>
24. Hollósi, M.; Majer, Zs.; Rónai, A.Z.; Magyar, A.; Medzihradsky, K.; Holly, S.; Perczel, A.; Fasman, G.D. *Biopolymers* **1994**, 34 (2), pp. 177-185.
<https://doi.org/10.1002/bip.360340204>
25. Laczkó, I.; Holly, S.; Kónya, Z.; Soós, K.; Varga, J.L.; Hollósi, M.; Penke, B. *Biochemical and Biophysical Research Communications* **1994**, 205 (1), pp. 120-126.
<https://doi.org/10.1006/bbrc.1994.2638>
26. Hollósi, M.; Holly, S.; Majer, Z.; Laczkó, I.; Fasman, G.D. *Biopolymers* **1995**, 36 (3), pp. 381-389.
<https://doi.org/10.1002/bip.360360311>
27. Jalsovszky, G.; Holly, S.; Hollósi, M. *Journal of Molecular Structure* **1995**, 348, pp. 329-332.
[https://doi.org/10.1016/0022-2860\(95\)08655-F](https://doi.org/10.1016/0022-2860(95)08655-F)
28. Majer, Z.; Holly, S.; Tóth, G.K.; Váradi, G.; Nagy, Z.; Horváth, A.; Rajnavölgyi, E.; Laczkó, I.; Hollósi, M. *Archives of Biochemistry and Biophysics* **1995**, 322 (1), pp. 112-118.
29. Vass, E.; Holly, S.; Majer, Zs.; Samu, J.; Laczkó, I.; Hollósi, M. *Journal of Molecular Structure* **1997**, 408-409, pp. 47-56.
[https://doi.org/10.1016/S0022-2860\(96\)09493-8](https://doi.org/10.1016/S0022-2860(96)09493-8)
30. Csermely, P.; Kajtar, J.; Hollosi, M.; Jalsovszky, G.; Holly, S.; Kahn, C.R.; Gergely Jr., P.; Soti, C.; Mihaly, K.; Somogyi, J. *Journal of Biological Chemistry* **1993**, 268 (3), pp. 1901-1907.
[https://doi.org/10.1016/S0021-9258\(18\)53939-9](https://doi.org/10.1016/S0021-9258(18)53939-9)
31. Fodor-Csorba, K.; Vajda, A.; Galli, G.; Jákli, A.; Demus, D.; Holly, S.; Gács-Baitz, E. *Macromolecular Chemistry and Physics* **2002**, 203 (10-11), pp. 1556-1563.
[https://doi.org/10.1002/1521-3935\(200207\)203:10/11<1556::AID-MACP1556>3.0.CO;2-L](https://doi.org/10.1002/1521-3935(200207)203:10/11<1556::AID-MACP1556>3.0.CO;2-L)
32. Fodor-Csorba, K.; Vajda, A.; Jákli, A.; Slugov, C.; Trimmel, G.; Demus, D.; Gács-Baitz, E.; Holly, S.; Galli, G. *Journal of Materials Chemistry* **2004**, 14 (16), pp. 2499-2506.
<https://doi.org/10.1039/B400246F>
33. Bikádi, Z.; Keresztury, G.; Holly, S.; Egyed, O.; Mayer, I.; Simonyi, M. *Journal of Physical Chemistry A* **2001**, 105 (14), pp. 3471-3474.
<https://doi.org/10.1021/jp0030387>
34. Egyed, O.; Izvekov, V.P.; Toth, K.; Holly, S.; Pungor, E. *Journal of Molecular Structure* **1990**, 218 (C), pp. 135-140.
[https://doi.org/10.1016/0022-2860\(90\)80256-J](https://doi.org/10.1016/0022-2860(90)80256-J)
35. Polgár, M.; Vereczkey, L.; Szporny, L.; Czira, G.; Tamás, J.; Gács-Baitz, E.; Holly, S. *Xenobiotica* **1979**, 9 (8), pp. 511-519.
<https://doi.org/10.3109/00498257909087265>
36. Imre, L.; Danóczy, É.; Jalsovszky, G.; Holly, S. *Journal of Molecular Structure* **1982**, 79 (C), pp. 35-38.
[https://doi.org/10.1016/0022-2860\(82\)85028-X](https://doi.org/10.1016/0022-2860(82)85028-X)
37. Jalsovszky, G.; Holly, S.; Klebovich, I.; Vereczkey, L.; Tóth, E. *Journal of Molecular Structure* **1986**, 143 (C) pp. 533-536.
[https://doi.org/10.1016/0022-2860\(86\)85318-2](https://doi.org/10.1016/0022-2860(86)85318-2)
38. Jalsovszky, G.; Holly, S. *Journal of Molecular Structure* **1988**, 175 (C), pp. 263-270.
[https://doi.org/10.1016/S0022-2860\(98\)80086-0](https://doi.org/10.1016/S0022-2860(98)80086-0)
39. Klebovich, I.; Vereczkey, L.; Tóth, E.; Tamás, J.; Mák, M.; Jalsovszky, G.; Holly, S. *Xenobiotica* **1987**, 17 (1), pp. 1247-1258.
<https://doi.org/10.3109/00498258709167416>
40. Monostory, K.; Kohalmy, K.; Ludányi, K.; Czira, G.; Holly, S.; Vereczkey, L.; Ürmös, I.; Klebovich, I.; Kóbori, L. *Drug Metabolism and Disposition* **2005**, 33 (11), pp. 1708-1716.
<https://doi.org/10.1124/dmd.105.003764>

Sándor Holly (1929-2005), one of the pioneers of the identification of chemical structures by vibrational spectroscopy in Hungary

It is more than 15 years that Sándor Holly has left us due to a fatal car accident. From 1956 to his untimely death in 2005 he devoted his career to the application of vibrational spectroscopy for determining chemical structures, and was one of those who established this technique in Hungary and promoted its propagation. Therefore, the editors of Magyar Kémiai Folyóirat found it opportune to commemorate his popular personality and professional activity. As I was among his closest colleagues in the years 1969-1998, I received the great honour of compiling this commemoration.

Sándor Holly was born in 1929 in Nagycenk, Hungary. His father, Imre Holly was employed as sugar factory engineer, and the family had to move several times when the workplace of the father changed. Sándor graduated in 1949 in Kaposvár, and started his university career in 1950 at the chemistry department of the

University of Szeged. He received his diploma in chemistry in 1955.

In 1956 he was employed by the Central Research Institute for Chemistry of the Hungarian Academy of Sciences, in the Group of Optical Spectroscopy, lead at that time by professor György Varsányi. Sándor Holly was appointed the head of this group in 1969. The experimental work in this group started in 1957 using an IKS 11 type single beam infrared spectrometer, received as a present of the Soviet Academy of Sciences, which was followed in 1959 by a UR 10 type double beam recording IR spectrophotometer, a product of the eminent East German optical industry (Zeiss). Before the possibility of doing experimental measurements, the group made significant steps in understanding the theory of molecular vibrations, with contributions from Sándor Holly, too.

The experimental possibilities of the group were significantly widened in 1967 by a Perkin-Elmer 225 type grating spectrophotometer, and then, in 1976 by a Cary 82-type laser excited Raman spectrometer. With this experimental background, Sándor Holly and the Optical Spectroscopy Group carried out research on the identification, detection and structural analysis of chemical compounds and investigation of chemical reaction paths on the basis of their infrared and Raman spectra. The Candidate of Chemical Sciences academic degree of Sándor Holly (1969) was received on the basis of the investigation of serine derivatives by infrared spectroscopic methods, and the Doctor of Sciences degree (1994) was granted on the basis of his research on the TiCl_4 complexes of triacetyl-levoglucosan.

In addition to academic research activity, Sándor Holly worked as consultant in a number of Hungarian institutions and firms, like pharmaceutical factories, chemical and pharmaceutical research groups, university departments. He had major contribution to starting, managing, supervising vibrational (mainly infrared) spectroscopic research work in these institutions. In 1972 he was employed as consultant by the Hungarian Institute for Forensic Sciences, where he contributed to the solution of several major criminal cases by means of complex infrared spectroscopic investigations. In a patent infringement case (1964-1967), an international court ruled in favour of the Hungarian side on the basis of infrared spectroscopic evidence presented by Sándor Holly. He had contributed to the identification or structure analysis of several thousand chemical substances, originating mostly from the field of synthetic organic chemistry. The results of these investigations were usually published in annual research reports, mostly confidential for patent law reasons, which made it impossible to publish them in scientific papers. The same holds for the investigations in the forensic area.

On the other hand, university textbooks, reviews, monographs could, and have been published. The most remarkable such publication was a monograph on infrared spectroscopy (1968) written in Hungarian with the co-authorship of Pál Sohár, which proved to be very successful in the education of several generations of physics, chemistry and pharmacy students. After some revision and translation to English, it was published as an introduction volume to a multivolume collection of infrared spectra (Holly, S.; Sohár, P: *Absorption Spectra in the Infrared Region: Theoretical and Technical Introduction*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1975).

According to data of March 2021, Sándor Holly had 92 publications, with 2026 citations. He was regular participant and lecturer of European Congress on Molecular Spectroscopy. In addition to publication and conference lectures or posters, his education activity is also notable, mostly in the form of special colleges and laboratory practices in vibrational spectroscopy for chemistry and physics students. He played a significant role in scientific public life, was the member of several special committees and boards, mostly in the field of spectroscopy, material sciences and theoretical organic chemistry.

Sándor Holly regarded as an important part of his leadership to provide competitive experimental basis for the Optical Spectroscopy Group by trying to buy up-to-date instruments of the possible highest technical level. In this respect it was a huge

leap in 1978, when a Nicolet 7199 type Fourier-transform infrared (FT-IR) spectrophotometer was installed in the laboratory, and then in 1994-1995, when the arsenal of instruments was fortified by an FT-Raman instrument with near infrared laser excitation. In the possession of a gas chromatograph, the fast FT-IR technique made it possible, through a heated flow-through gas cell, to carry out on-line, on-the-fly GC/FT-IR measurements, which opened a new line of research for the group.

During the career of Sándor Holly academic and applied spectroscopic features go hand in hand. This is also reflected by the publications of Sándor Holly and the members of his research group. The wide scope of research starts from the interpretation of vibrational spectra by means of the classical theory of molecular vibrations, normal frequencies, from which vibrational force constants can be estimated. Later, with the advent of fast computers and advanced approximation theories, these force constants were calculated by quantum mechanical methods. In the fields of applied spectroscopy, Sándor Holly had a significant share in solving the problems of Hungarian research partners by using characteristic bond and group frequencies, empirical spectrum-structure correlations and special experimental technics. Just as an example, there had been a close cooperation with the Chiroptical Laboratory of ELTE for over more than a decade, leading to several joint publications on the conformational behaviour of polypeptides. The application of CG/FT-IR technique is also a good example of co-operation with other research groups, supplying important data for the identification of metabolites.

The management mandate of Sándor Holly in the Optical Spectroscopy Group terminated in 1995, but even from this time he continued working in the group with full devotion. He helped the group in all possible ways, and started to sort his pending results for publication. In 2004 he was presented the Pro Arte Chemica award by the Chemical Research Centre of the Hungarian Academy of Sciences for his outstanding and internationally recognized research career in the institute. He retired in 31 March, 2005, still continuing his work in the Institute and having plans for the future...

On 31 May, 2005, Sándor Holly and his wife, Éva, lost their lives in a horrible car crash on Road 51, near Solt...

With his death, the Optical Spectroscopy Group, the Central Research Institute for Chemistry and the Hungarian Academy of Sciences, and first of all the community of Hungarian spectroscopists suffered a painful loss. In addition to being an excellent scientist, Sándor was a perfect gentleman: polite, friendly, honest, reliable, diligent and creative. A very good boss, with whom it was easy to cooperate. He liked sports, arts (first of all classical music and literature). He loved nature, and on weekends he made long tours with his two sons, András and Balázs.

His sons, friends and closest colleagues organized a farewell event on 16th June 2005 in the conference room of the Chemical Research Center of HAS. On this event József Tóth and Gábor Keresztury commemorated Sándor and his wife, Éva, who also played a significant role in the scientific career of her husband by providing a sound family background.