

will give, in the case of simple aromatic compounds of different types, as well as in several derivatives, almost the same value ( $C$ )

$$\frac{I_{\text{PEG-20 M}} - I_{\text{M}}}{I_{\text{SE-30}} - I_{\text{M}}} = C$$

independently of the structure.

It follows from this correlation that whenever two of the three parameters are known, the third can be estimated.

Graphic representation of this correlation allows an extension of the usability of the retention index coordinate system, since data relating to the molecular weights of the compounds can thus also be obtained.

For example, when „isomolecular weight lines” with slope  $C$  and with the value  $(14Z + 2)$  are drawn from the points  $Z$  of  $n$ -alkanes, the molecular weights of the different compounds can be obtained by interpolation.

The diagram also shows the separation rule for an actual pair of partition phase, according to which the expected deviation of the indices of compounds having nearly identical indices on one phase will be proportional on the other phase with the differences in the molecular weights of the compounds in question.

Budapest, Eötvös Loránd Tudományegyetem Kémiai Technológiai Tanszéke.

Érkezett: 1974. II. 20.

## A röntgen-fotoelektron-spektroszkópia (ESCA) alkalmazása a koordinációs kémia területén, IV.\*

### Átmenetifém—szalicilaldoxim-komplexek vizsgálata

BURGER KÁLMÁN és BUVÁRI ÁGNES

A röntgen-fotoelektron-spektroszkópia (ESCA) koordinációs kémiai alkalmazási körének meghatározása szisztematikusan összeállított, más módszerekkel sokoldalúan tanulmányozott rendszerek ESCA-vizsgálatától várható. Sok különböző típusú fémkomplex vizsgálata<sup>1-6</sup> egyértelműen mutatta, hogy a komplexképződés hatására a központi atom és a donatoratomok elektronszerkezetében (az orbitálok elektronkötési energiáiban) olyan mértékű változás megy végbe, amely e módszerrel mérhető. Előző vizsgálataink<sup>6-8</sup> során bebizonyosodott az is, hogy olyan ún. „gyenge kölcsönhatások”, mint a szolvatáció, hidrogénhid-képződés, külső szférában történő koordináció is akkora változásokat okozhatnak az azokban részt vevő atomok elektronkötési energiáiban, hogy azokat az ESCA segítségével észlelhetjük. Viszonylag kevés olyan vizsgálatot közöltek, amelyek során az ESCA-adatokban komplexkémiai hatásra bekövetkező változásokat más szerkezetvizsgáló módszerekkel (rezgési színkép, ultraibolya-spektrum, stb.) kapott adatokkal vetették volna össze<sup>9</sup>.

Jelen vizsgálataink célja az előző munkáink során egyensúlymérések útján<sup>10</sup> és infravörös-, valamint ultraibolya-spektroszkópiával<sup>11</sup> részletesen tanulmányozott szalicilaldoxim-komplexek és elektrofil vagy nukleofil szubsztituenszt tartalmazó származékaik ESCA-vizsgálata és az ESCA-adatoknak a más vizsgálatok eredményeivel való összevetése.

Egyensúlymérések segítségével korábban meghatároztuk a szubsztituensek hatását a komplexek stabilitására<sup>10</sup>. A spektroszkópiai vizsgálatok<sup>11</sup> megmutatták a szubsztituensek okozta elektronszerkezet-változás hatását az infravörös- és az ultraibolya-spektrumokra. Infravörösspektroszkópia és a komplexek analitikai vizsgálata útján megállapítást nyert az is, hogy míg a nikkellel és rézzel szalicilaldoximmal és annak származékaival képzett komplexeknek nitrogén és oxigén donatoratomjai *transz*-konfiguráció szerint helyezkednek el, addig azok az analóg kobalt(II)- és vas(II)komplexben *cisz*-helyzetűek.

A fentiek alapján e rendszerek ESCA-vizsgálatától várható volt a szubsztituenseknek és az általuk létrehozott komplexstabilitás-változásnak, valamint a *cisz*–*transz* izomériának a komplexek központi atomjai és a donatoratomjai elektronkötési energiáira gyakorolt hatásának a meghatározása.

### Kísérleti rész

Az ESCA-spektrumok felvétele az AEI Scientific Apparatus Limited ES 100 elektronspektrométer készülékén előző dolgozatainkban leírt módon<sup>6, 8</sup> történt azzal a módo-

\* III. közlemény: 6.

<sup>1</sup> C. K. Jørgensen and H. Berthou: Photo-electron spectra induced by X-rays of above 600 non-Metallic compounds containing 77 elements. Kong. Danske Vid. Selsk. Mat.-fys. Medd., 38. 15. 1972. København.

<sup>2</sup> C. K. Jørgensen: Chimia, 25. 213. 1971.

<sup>3</sup> C. K. Jørgensen: Modern Aspects of Ligand Field Theory. North Holland, Amsterdam, 1971.

<sup>4</sup> K. Burger: Coordination Chemistry: Experimental Methods. Butterworths London, 1973.

<sup>5</sup> J. H. Burness, J. G. Dillard and L. T. Taylor: Inorg. Nucl. Chem. Letters, 9. 825. 1973.

<sup>6</sup> K. Burger, E. Fluck, Cs. Várhelyi, H. Binder und I. Speyer: Z. anorg. allg. Chemie, megjelenés alatt.

<sup>7</sup> K. Burger and E. Fluck: Inorg. Nucl. Chem. Letters, 10. 171. 1974.

<sup>8</sup> K. Burger, E. Fluck, H. Binder and Cs. Várhelyi: J. Inorg. Nucl. Chem., megjelenés alatt.

<sup>9</sup> B. Folkesson: Acta Chim. Scand., 27. 287. 1973.

<sup>10</sup> K. Burger and I. Egyed: J. Inorg. Nucl. Chem., 27. 2361. 1965.

<sup>11</sup> K. Burger, I. Ruff, F. Ruff and I. Egyed: Acta Chim. Acad. Sci. Hung., 46. 1. 1965.

1. táblázat

A vizsgált komplexek analitikai adatai (zárójelben a számított értékek)

Ligandum	Fém	N-tartalom, %		C-tartalom, %		Fém-tartalom, %	
Sa*	Ni <sup>2+</sup>	8,45	(8,466)	51,1	(50,81)	17,8	(17,73)
	Cu <sup>2+</sup>	8,29	(8,343)	49,7	(50,07)	18,9	(18,93)
	Co <sup>2+</sup>	7,91	(7,933)	46,9	(47,61)	16,6	(16,69)
	Fe <sup>2+</sup>	7,98	(8,003)	48,0	(48,03)	15,9	(15,95)
CH <sub>3</sub> Sa	Ni <sup>2+</sup>	7,79	(7,805)	52,9	(53,53)	16,3	(16,35)
	Cu <sup>2+</sup>	7,60	(7,700)	52,0	(52,81)	17,4	(17,45)
ClSa	Ni <sup>2+</sup>	7,08	(7,008)	42,3	(42,12)	14,6	(14,68)
	Cu <sup>2+</sup>	6,90	(6,92)	42,0	(41,55)	15,7	(15,71)
NO <sub>2</sub> Sa	Ni <sup>2+</sup>	13,3	(13,31)	39,9	(39,96)	13,7	(13,94)
	Cu <sup>2+</sup>	13,0	(13,16)	39,4	(39,40)	15,0	(14,92)

\* Sa = szalicilaldoxim; a szubsztituensek a szalicilaldoxim 5-ös helyzetű szénatomjához kapcsolódnak.

2. táblázat

A szalicilaldoxim és származékai, valamint fémkomplexeik ESCA- és egyensúlyi stabilitási adatai, és rezgési sávjainak frekvenciája [C 1s-re vonatkoztatott elektronkötési energiák (eV), a protonálódási állandók (K<sub>H</sub>) és a komplexszorzatok (β) logaritmusai, az OH és CN vegyértékfrekvenciák]

Ligandum	Központi atom	N 1s	O 1s	M 2p <sub>3/2</sub>	lg K <sub>H</sub>	ν <sub>OH</sub>	ν <sub>CN</sub>
Sa	H <sup>+</sup>	114,7	247,1	—	10,7	3000	1627
CH <sub>3</sub> Sa	H <sup>+</sup>	114,65	247,1	—	11,06	3180	1625
ClSa	H <sup>+</sup>	114,8	247,2	—	10,25	3000	1637
NO <sub>2</sub> Sa	H <sup>+</sup>	115,1	247,5	—	8,72	2900	1640
					lg β <sub>2</sub>		
Sa	Ni <sup>2+</sup>	115,3 (114,2)	247,0	569,7	14,3	2950	1650
CH <sub>3</sub> Sa	Ni <sup>2+</sup>	115,25	247,0	569,7	14,7	2950	1652
ClSa	Ni <sup>2+</sup>	115,4	247,1	569,8	13,7	3000	1649
NO <sub>2</sub> Sa	Ni <sup>2+</sup>	115,7	247,4	570,1	13,8	3100	1633
Sa	Cu <sup>2+</sup>	115,5	247,0	649,15	21,5	3050	1658
CH <sub>3</sub> Sa	Cu <sup>2+</sup>	115,5	247,0	649,0	22,2	3050	1652
ClSa	Cu <sup>2+</sup>	115,6	247,1	649,3	21,4	3100	1651
NO <sub>2</sub> Sa	Cu <sup>2+</sup>	115,65	247,35	649,35	—	3240	1648
Sa	Co <sup>2+</sup>	114,2	246,8	—	13,5	3050	1625
Sa	Fe <sup>2+</sup>	114,8	247,3	—	16,7	3200	1617

sítással, hogy a komplexeket acetonos oldatban vittük fel a réz mintatartó felületére, így a minta az acetone elpárolgata-  
tása után vékony, sima filmet képezett. Ilyen módon kisebb  
félértékességségű és nagyobb intenzitású ESCA-sávokat  
kaptunk, mint rézháló porfelvételek segítségével. Minden  
felvételt 3–4-szer megismételtünk. A mérések reprodukál-  
hatósága minden esetben ±0,1 eV, vagy annál jobbnak adó-  
dott.

A nem egyenértékű atomoktól származó összetett sá-  
vokat előző dolgozatunkban<sup>6</sup> leírt módon számítógéppel szét-  
választottuk.

A komplexek előállítása és analitikai ellenőrzése az előző  
dolgozatunkban<sup>11</sup> leírt módon történt. Az analíziseredménye-  
ket az 1. táblázatban foglaltuk össze.

### Az eredmények és értékelésük

A ligandumok és komplexeik nitrogén és oxigén  
donoratomjai 1s orbitáljainak elektronkötési energiáit,  
valamint nikkell- és rézkomplexeik központi

atomjai 2p<sub>3/2</sub> orbitáljai elektronkötési energiáit a  
ligandumok protonálódási állandóinak és a komp-  
lexek komplexszorzatainak logaritmusával együtt  
a 2. táblázatban foglaltuk össze.

Az elektronkötési energiákat a szalicilaldoxim  
aromás gyűrűje szénatomjainak 1s elektronkötési  
energiájára vonatkoztattuk. Referencia alkalma-  
zására azért volt szükség, mert a gerjesztő sugárzás  
hatására e szigetelő mintákon létrejövő feltöltődés  
az elektronkötési energia abszolút értékeit a külön-  
böző komplexekben különbözőképpen befolyásolta.  
Különösen nagy különbség jelentkezett az elektro-  
mosan semleges *transz*- és az egy negatív töltésű  
*cisz*-izomerek ESCA-adatai között e feltöltődés  
hatására. Mivel azonban ez a hatás egy anyag-  
mintán belül az összes atom ESCA-adataira töké-  
letesen egyforma hatást gyakorol, a C 1s-re vonat-  
koztatott elektronkötési energiák egyértelműen

alkalmasak a komplex összefüggések tanulmányozására.

A 2. táblázat adataiból közvetlenül megállapíthatók az alábbi összefüggések.

1. Az elektrofil szubsztituensek hatására mind a ligandumokban, mind a komplexekben a donoratomokon az elektronsűrűség csökken, az elektronsűrűség csökkenésének a központi atom elektronsűrűségére gyakorolt hatása azonos a donoratomokra gyakorolt hatással, a rézkomplexek központi atomján a hatás kisebb mértékben érvényesül.

A ligandumok esetében az N 1s elektronsűrűség és a protonálódási állandók logaritmusai között közel lineáris összefüggés tapasztalható. Kevésbé egyértelmű a korreláció a komplexstabilitási állandók és az elektronsűrűség között. Az analóg nikkel és rézkomplexek N 1s elektronsűrűségét összevetve látható, hogy a jelentősen nagyobb stabilitású rézkomplexek elektronsűrűségei a nagyobbak. Analóg tendencia az oxigén donoratomoknál nem érvényesül.

A fenti jelenségek azzal magyarázhatók, hogy mind az elektrofil szubsztituensek, mind az erősebb koordináció (kovalensbb koordinatív kötés) a donoratomokon az elektronsűrűséget csökkenti, ami az elektronsűrűség növekedésében jelentkezik. Az adatokból az is kitűnik, hogy a szubsztituensek hatása jelentősen nagyobb, mint az analóg komplexekben a különböző fém által okozott stabilitáskülönbség hatása. Ez arra enged következtetni, hogy a komplexstabilitási állandók nagyságát az adott rendszerben a koordinatív  $\sigma$ -kötésen (és az ezáltal meghatározott elektronsűrűségeken) kívül más tényezők ( $\pi$ -vizontkoordináció, szterikus effektusok, solvatáció stb.) is befolyásolják.

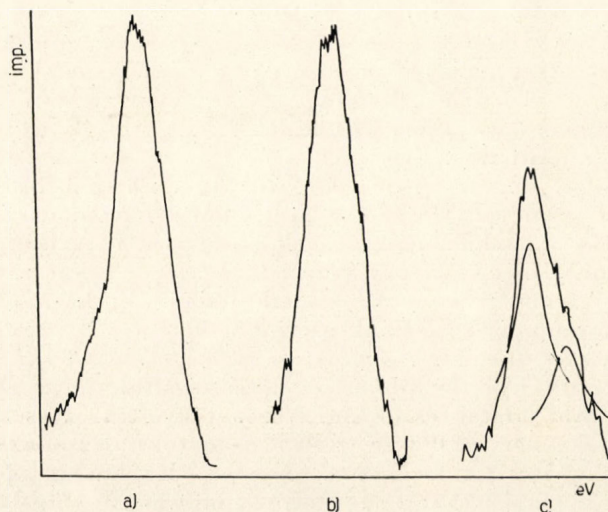
A nitrogén és oxigén donoratomokon az elektronsűrűségnek a fém hatására bekövetkező stabilitásváltozástól való különböző függése egyértelműen mutatja azt is, hogy a rézkomplexek nagyobb stabilitása elsősorban az erősebb fém-nitrogén kölcsönhatásra vezethető vissza.

2. A ligandumok N 1s és O 1s elektronsűrűségeit a komplexekével összehasonlítva látható, hogy míg a komplexképződés a nitrogén donoratomokon az elektronsűrűséget növeli, addig az oxigén donoratomokon csökkenti.

Ez a látszólagos ellentmondás azzal magyarázható, hogy a komplexképződés során a fémion a nitrogénnek a ligandumban eredetileg szabad elektronsűrűségét koordinálja, és így a nitrogénen az elektronsűrűséget csökkenti, az oxigénen azonban a szabad ligandumban protonáltan helyezkednek el, és a komplexképződés a protonnak fémmel történő cseréjével jár. A komplexek központi atomja láthatóan az adott rendszerben kevésbé csökkenti az oxigénen az elektronsűrűséget, mint a szabad ligandumban eredetileg rajta levő proton. Analóg jelenséget tapasztaltak Burness és munkatársai<sup>5</sup> kobalt(II) Schiff-bázis-komplexek ESCA-vizsgálata során.

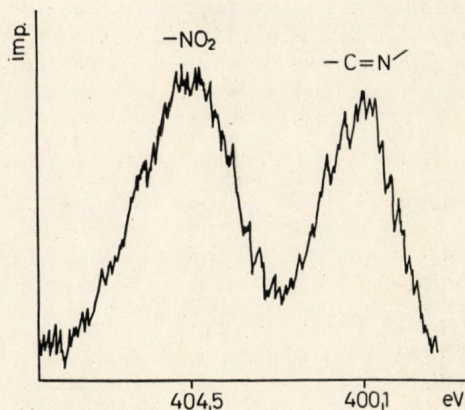
3. A nikkel-szalicilaldoxim kivételével az összes vizsgált komplexekben az N 1s spektrumok egyenértékű nitrogén donoratomok jelenlétét mu-

tatták. Példaképpen az 1. ábrán összevetjük a szabad szalicilaldoxim, valamint kobalt- és nikkelkomplexek N 1s spektrumát. [A nitroszármazékokban a nitroso csoportok N 1s sávja a donornitrogéntől teljesen szétválva jelent meg, így annak értékelését nem zavarta (2. ábra).]



1. ábra

a) A szalicilaldoxim, b) a kobalt(II)-szalicilaldoxim és c) a nikkel-szalicilaldoxim N 1s ESCA-színképe



2. ábra

A nikkel-5-nitro-szalicilaldoxim N 1s ESCA-színképe

A nikkel-szalicilaldoxim összetett N 1s spektrumát számítógép segítségével két vonalra bontottuk [1. c) ábra], és meghatároztuk a két vonalhoz tartozó elektronsűrűségi energiák értékét.

A 2. táblázat adataiból kitűnik, hogy az összes rézkomplex és a nikkel klór-szalicilaldoximmal és nitro-szalicilaldoximmal képezett komplexei N 1s elektronsűrűségi-energiaértékei jelentősen nagyobbak, mint a kobalt- és a vaskomplexeké.

Miután korábbi vizsgálatainkból<sup>11</sup> ismeretes, hogy a réz- és a nikkelkomplexek nitrogén donoratomjai *transz*-konfiguráció szerint helyezkednek el, amíg a kobalt és vaskomplexeké *cisz*-helyeztűek, e vizsgálatok arra utalnak, hogy a *transz*-komplexekben a koordináció jobban csökkenti az elektronsűrűséget a donoratomokon, mint a *cisz*-komplexekben. Ez összhangban van azzal a korábbi infravörös vizsgálatok alapján tett megállapítá-

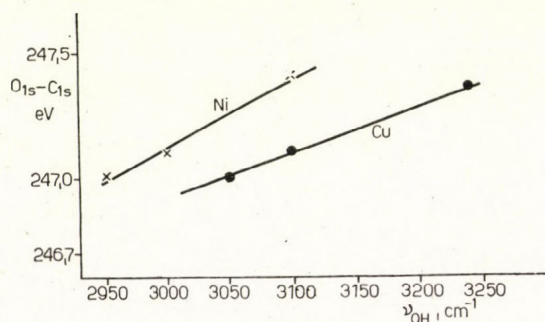
sunkkal is, hogy a *transz*-konfigurációjú nikkell- és réz-szalicilaldoxim-komplexek hidrogénhídjai jelentősen gyengébbek, mint a *cisz*-komplexeké<sup>11</sup>.

A nikkell-szalicilaldoxim N 1s ESCA-sávja arra utal, hogy ez a komplex zömében *transz*-konfigurációjú, de a minta kisebb mennyiségben (kb. 30%) a *cisz*-izomert is tartalmazza. Az O 1s ESCA-sávok a fenti hatást nem tükrözték.

A vizsgálatok azt mutatják, hogy a *cisz*–*transz* izoméria okozta változások a donoratomon levő elektronsűrűségben elég nagyok lehetnek ahhoz, hogy a belső orbitálok ESCA-vizsgálatával kimutathatóak legyenek.

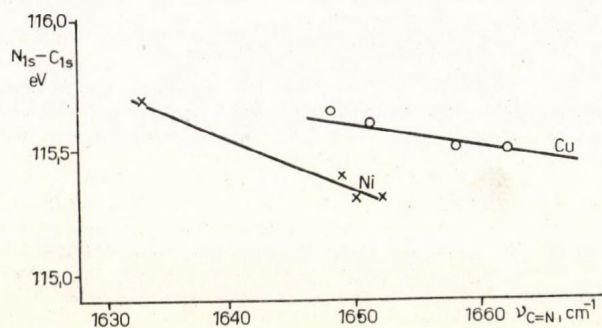
4. Mint a fentiekből kitűnik, a röntgen-fotoelektron-spektroszkópia segítségével követni tudtuk a komplexképződésnek, a ligandum szubsztituenseinek és a *cisz*–*transz* izomériának a hatását a komplexek elektronszerkezetére. E hatások korábbi vizsgálataink szerint a komplexek infravörös- és elektronrészterjesztési színekében is jelentkeztek<sup>11</sup>. A továbbiakban megvizsgáltuk, hogy az ESCA-adatok és az infravörös vegyértékrezgések frekvenciája, illetve az ESCA-adatok és az elektronrészterjesztési színeképek néhány elnyelési maximumának energiája között milyen kvalitatív összefüggés mutatható ki. Megvizsgáltuk továbbá, hogy az ESCA-adatok mennyiben egészítik ki az egyéb vizsgálatokból leszűrhető következtetéseket.

A 3. ábrán (a C 1s-re vonatkoztatott) O 1s elektronsűrűségi energiákat ábrázoltuk az OH vegyértékrezgés frekvenciájának függvényében. Látható, hogy mind a réz-, mind a nikkellkomplexeknél a  $\nu_{OH}$  növekedésével nő az oxigénen az elekt-



3. ábra

Szalicilaldoxim-komplexek (C 1s-re vonatkoztatott) O 1s elektronsűrűségi energiái az OH-vegyértékrezgés frekvenciája függvényében ábrázolva



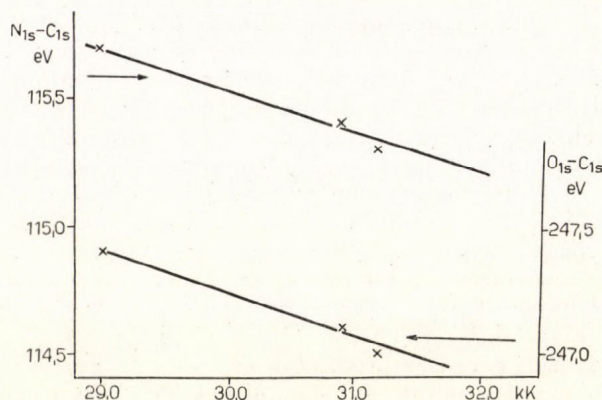
4. ábra

Szalicilaldoximkomplexek (C 1s-re vonatkoztatott) N 1s elektronsűrűségi energiái a CN vegyértékrezgés frekvenciája függvényében ábrázolva

ronkötési energia. A korreláció mindkét rendszernél közel lineáris. Ha figyelembe vesszük, hogy az OH-rezgések intramolekuláris hidrogénhídban kötött protontól származnak és a hidrogénhíd erősségének növekedése a  $\nu_{OH}$  csökkenésével jár, továbbá azt is, hogy az elektronsűrűségi energia növekedése az elektronsűrűség csökkenését mutatja, látható, hogy e rendszerekben az elektronsűrűség csökkenése az oxigénatomon a hidrogénhíd erősségének csökkenésével jár.

A réz- és nikkellkomplexek adatai két egymástól független egyenest képeznek, ami azt mutatja, hogy a hidrogénhíd erőssége nem kizárólag az oxigén pillératomon levő elektronsűrűség nagyságától függ. Látható, hogy az oxigénatomon levő ugyanazon elektronsűrűséghez a nikkellkomplexekben nagyobb stabilitású hidrogénhíd tartozik. Ez, összevetve a N 1s elektronsűrűségi energiákkal, arra utal, hogy a rézkomplexekben a hidrogénhíd kisebb stabilitásának oka a nitrogén pillératomon levő kisebb elektronsűrűség (nagyobb elektronsűrűségi energia).

A 4. ábrán (a C 1s-re vonatkoztatott) N 1s elektronsűrűségi energiákat ábrázoltuk a C=N vegyértékrezgés frekvenciájának függvényében. Itt is külön-külön egyenest kaptunk a réz-, illetve a nikkellkomplexek adataiból. Az ábrából látható, hogy a  $\nu_{CN}$  csökkenésével a nitrogénen az elektronsűrűségi energiák nőnek. Korábbi vizsgálataink<sup>10, 11</sup> kimutatták, hogy a szalicilaldoximkomplexek kelátgyűrűjében elhelyezkedő C=N kötés vegyértékrezgése frekvenciájának csökkenése részben a fém–nitrogén koordinatív kötés erősségének csökkenésére, részben a kelátgyűrűben a konjugáció növekedésére vezethető vissza. (A szabad ligandumban, ahol konjugáció nem játszhat szerepet, az elektrofil szubsztituensek hatására  $\nu_{CN}$  értéke nő.) Mivel a koordinatív kötés erősségének csökkenése a nitrogén donoratomon az elektronsűrűség növekedését, tehát az elektronsűrűségi energia csökkenését kell, hogy eredményezze, a 4. ábra által tükrözött korreláció azt mutatja, hogy kelátgyűrű konjugációjának növekedésével az elektronsűrűség a nitrogénatomokon csökken. A nikkellkomplexek adatait összekötő egyenes nagyobb meredeksége arra vezethető vissza, hogy az elektrofil szubsztitu-

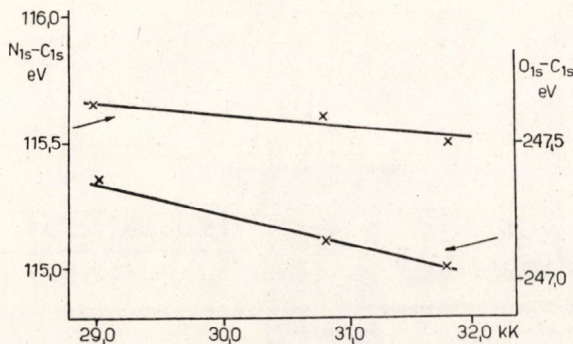


5. ábra

Nikkell-szalicilaldoxim-komplexek (C 1s-re vonatkoztatott) N 1s és O 1s elektronsűrűségi energiái az elektronrészterjesztési sávok frekvenciájának függvényében ábrázolva

ensek a viszontkoordinációra hajlamosabb nikkell-komplexekben nagyobb mértékben növelik a kelátgyűrű konjugációját, mint az analóg rézkomplexekben.

Az 5. és 6. ábrán a nikkell-, illetve a rézkomplexelek egy-egy elektrongerjesztési abszorpciós sávja frekvenciájának függvényében ábrázoltuk a N 1s és O 1s elektronkötési energiákat. Az ábrák mindkét rendszernél közel lineáris összefüggést tükröznek.



6. ábra

Réz-szalicylaldoxim-komplexek (C 1s-re vonatkoztatott) N 1s és O 1s elektronkötési energiái az elektrongerjesztési sávok frekvenciájának függvényében ábrázolva

Köszönettel tartozunk E. Fluck professzornak, aki az ESCA-színképek felvételét a Stuttgarti Egyetem Szervetjen-Kémiai Tanszékén lehetővé tette.

## Összefoglalás

A szerzők szalicilaldoxim és származékai átmenetifém-komplexeinek ESCA-vizsgálata útján kimutatták a komplexképződésnek, a keletkező komplexek stabilitásának, a donoratomok elektronsűrűségét befolyásoló szubsztituenseknek és a *cis-trans* izomériának a hatását a donoratomok és a központi atomok elektronkötési energiájára. Kimutatták az ESCA-adatok és a komplexek egyes rezgési sávjai, valamint elektrongerjesztési színképe sávjai közötti kvalitatív korrelációt.

**X-Ray-photoelectron spectroscopy (ESCA) investigations in coordination chemistry, IV. Study of transition metal-salicylaldoxime complexes.** K. Burger and Á. Buvári

ESCA investigations of transition metal complexes of salicylaldoxime and its derivatives were used to demonstrate how the electron-binding energies of the donor atoms and central atoms are affected by complex formation, by the stabilities of the resulting complexes, by substituents changing the electron densities of the donor atoms, and by *cis-trans* isomerism. A qualitative correlation has been revealed between the ESCA data and the individual vibrational bands of the complexes, and also the bands of their electronic excitation spectra.

Budapest, Eötvös Loránd Tudományegyetem Szervetlen- és Analitikai-Kémiai Tanszéke.  
Érkezett: 1974. II. 22.

## Könyvismertetés

**A kémia újabb eredményei.** 15. és 16. kötet. Szerkesztő: Csákvári Béla. Akadémiai Kiadó, Budapest, 1973.

Az Akadémiai Kiadó 1970-ben kezdeményezte e sorozat kiadását. Az eddigi 16 kötet olyan sokrétű és színes tartalommal bír, hogy elég nehéz e sorozat jellegét meghatározni. Korunk tudományának gyorsuló jellegével függ össze, hogy évtizedek óta mind ritkábbak a nemzetközi könyvkiadásban a tudomány *összefoglaló* kézikönyvei is (Ostwald, Nernst, Eggert, Jellinek, Karrer etc. klasszikus műveit a mai generáció már nem is ismeri), ugyanakkor a szakfolyóiratoknak az ad rangot, ha mindjobban csak konkrét adatok, új mérési eredmények igen szűkszavú közlésére szorítkoznak. Ilyen körülmények között a fiatal szakemberek *továbbképzése* igen nehézé vált. De hasonló nehézségekkel küzd az az egy — mindjobban szűkülő — területen jártas, rutinos szakember is, aki egy rokonterület problémájával szeretne megismerkedni. Márpedig a szükségszerű specializálódás mellett erősödő igényként jelentkezik a „határterületi kérdések” problémája.

A század elején még lehetőség nyílt neves folyóiratok hasábjain is összefoglaló cikkek, sőt polemikus iratok közlésére. Azóta a polemikát a nemzetközi konferenciák, kongresszusok és szimpóziumok biztosítják. Egy részterület vagy jól elhatárolható részprobléma összefoglalására született pl. a Fortschritt der organischen Naturstoffe című folyóirat (1937), de méginkább jellemezte az ez irányú szükséglet kielégítésére hivatott különböző monográfiásorozatok elterjedése (főleg a német irodalomban).

Az eddigi kötetek témája és tárgyalási modora azt a benyomást keltik a recenzorban, hogy a fenti két problémának a fent vázolt kétféle megoldását célozza a sorozat: szol-

gálja a továbbképzés és a határterületi képzés céljait az „újabb eredmények” közlésével és egy szűkebb terület többé-kevésbé teljes monografikus összefoglalásával.

Ezenkívül természetesen jelentkezik a kutatók részéről a közlési igénynek egy harmadik formája is: egy területen sikeresen működő kutató vagy mérnök szeretné eredményeit közkinccsá tenni, még akkor is, ha ez tudományosan *nem kimondottan novum*, de sok fáradságos munkától és másolástól kímélné meg az azonos területen dolgozó szakembereket, vagy csupán évekre elhúzódó cikksorozatnak — esetleg élete művének — összefoglalása.

A fenti sokféle igény és közlési forma mind megtalálható a sorozat eddigi kötetiben.

Konkréten a sorozat 15. és 16. kötetét szeretném ismertetni.

A 15. kötet (303 oldal) *Almásy Gedeon, Benedek Pál, Farkas Margit, Pallai Iván, Simon Ferenc, Szepesváry Pál és Sztanó Tamás: Bonyolult műveleti egységek matematikai szimulációja* című munkája.

A címben jelzett feladat kidolgozása sok évre tekinthet vissza, melyben a szerzőkön kívül négy neves intézet (MTA Automatizálási Kutató Intézet, Magyar Vegyipari Egyesülés Mérnöki Irodája, a VEGYTERV és a Vegyipari Számítástechnikai Csoport) vett részt munkájában. A közzétett ALGOL-program 210 vegyületre épülő, főleg petrokémiai eljárások (műveletek, reakciók) számítógépes tervezésére alkalmas. Külön érdekessége a 210 vegyület és ezek alapparamétereinek számítását lehetővé tevő program ismertetése, mely az ún. „pseudokritikus” adatokon alapszik. A program figyelembe veszi a készülékek, a hálózat, a szimuláció, az optimalás kérdéseit is.