

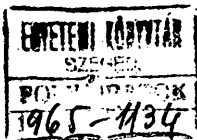
55145

ACTA UNIVERSITATIS SZEGEDINENSIS

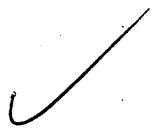
ACTA IUVENUM

SECTIO SCIENTIARUM NATURALIUM

Tomus II.



SZEGED
HUNGARIA
1962



SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM ACTÁJA

IFJÚSÁGI ACTA
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

II. kötet

SZEGED

1962

ACTA UNIVERSITATIS SZEGEDINENSIS

ACTA IUVENUM

TOMUS II.

SECTIO SIENTIARUM NATURALIUM



SZEGED
HUNGÁRIA

1962.

Kiadja a Szegedi Tudományegyetem Tanácsa és a Magyar
Kommunista Ifjúsági Szövetség Szegedi Tudományegyetemi Bizottsága

Szerkesztőbizottság :

Dr. Andó Mihály
Bárány Ferenc
Dr. Kedves Miklós
Kevei Ferenc
Dr. Koczka Károly
Maráz Vilmos
Mucsi Mihály
Pollák György
Végh Gyula

A kiadásért felel : Dr. Koch Sándor dékán

NÉHÁNY CSOPORTELMÉLETI FERDESZORZAT TÍPUS

ÉRTEKELÉS ÉS VIZSGALAT

Megyesi László IV. mat-mat. szak.

BOLYAI INTÉZET

A ferdeszorzatok módszere egyike az algebra legfontosabb eljárásainak. Az alapgondolat lényegében Hamiltontól származik. A strukturák ferdeszorzatának definíciójára nézve lásd Rédei [1] 101-102.

Rédei László professzor a [2] dolgozatában egy igen általános ferdeszorzatot definiál, s egyben ennek alkalmazásait adja a csoportelméletben.

Legyen adva két csoport G és Γ az e, a, b, \dots illetve az $\varepsilon, \alpha, \beta, \dots$ elemekkel (e illetve ε egységelemek és $G \neq e, \Gamma \neq \varepsilon$) Ezek Rédei féle ferdeszorzata a

(1) $G \circ \Gamma : (a, \alpha)(b, \beta) = (a b^\alpha \beta^\alpha, a^\beta \alpha^\beta \beta)$
 szorzásszabállyal van definiálva, ahol $b^\alpha, \beta^\alpha \in G, a^\beta, \alpha^\beta \in \Gamma$
 és ezek a megfelelő változóktól függő kétváltozós függvények.*

Ennek a dolgozatnak a célja a $G \circ \Gamma$ hoz hasonló ferdeszorzat-típusok definiálása, és ezeknek vizsgálata. Ezekhez a ferdeszorzat-típusokhoz a következőképpen juthatunk.

Megtartva az (1) szorzásszabályban szereplő $a, b^\alpha, \beta^\alpha$ illetve $a^\beta, \alpha^\beta, \beta$ függvényeket, ezeket permutálva, vigyázva arra, hogy szorzásszabály szimmetriája megmaradjon, kapjuk a

$$(2) \quad G \circ \Gamma : (a, \alpha)(b, \beta) = (\beta^\alpha b^\alpha a, \beta \alpha^\beta a^\beta);$$

$$(3) \quad G \circ \Gamma : (a, \alpha)(b, \beta) = (a \beta^\alpha b^\alpha, \alpha^\beta a^\beta \beta);$$

$$(4) \quad G \circ \Gamma : (a, \alpha)(b, \beta) = (b^\alpha \beta^\alpha a, \beta a^\beta \alpha^\beta);$$

$$(5) \quad G \circ \Gamma : (a, \alpha)(b, \beta) = (\beta^\alpha a b^\alpha, \alpha^\beta \beta a^\beta);$$

$$(6) \quad G \circ \Gamma : (a, \alpha)(b, \beta) = (b^\alpha a \beta^\alpha, a^\beta \beta \alpha^\beta)$$

szorzásszabályokat. Megmutatjuk, hogy adott G, Γ esetén bármely $G \wr \Gamma$ csoport izomorf egy $G \circ \Gamma$ csoporttal, és fordítva. Ugyanez érvényes a $G \circ \Gamma$ és $G \wr \Gamma$ -ra, illetve $G \circ \Gamma$ és $G \circ \Gamma$ -ra vonatkozóan is.

* A 2. dolgozatban $G \circ \Gamma$ helyett $G \circ \Gamma$ jelölés szerepel.

A $G \circ \Gamma$ csoport.

Mindenekelőtt megjegyezzük, hogy ha a G és Γ csoportok Abel félék, akkor (1) egybeesik (2), (3), (4), (5), (6)-tal és akkor külön vizsgálatra nincs szükség.

Elsőként a $G \circ \Gamma$ csoportot tekintjük. Az alábbi tétel bizonyításának gondolatmenete egyezik a [2] 3 -ban található I. tétel bizonyításával.

Először felhasználjuk a következő állítást:

Ahhoz, hogy az összes $G \circ \Gamma$ csoportot megkapjuk, elegendő a definícióban a

$$(7) \quad G \circ \Gamma : (a, \alpha)(b, \beta) = (a \beta^\alpha b^\alpha, \alpha^b a^b \beta) \quad (e^a = \varepsilon, \varepsilon^a = e)$$

esetre szorítkozni, és csak az (e, e) egységelemmel rendelkező csoportokat megadni.

Bizonyítás céljából vegyük figyelembe, hogy $\beta^\alpha, b^\alpha, \alpha^b, a^b$ függvények nincsenek egyértelműen meghatározva, helyettük $\beta^{\alpha'}, \alpha'^b b^{\alpha'}$, $\alpha^b b'^{-1}$, $b'^a a^b$ -t helyettesítve, ahol $\alpha' \in G, b' \in \Gamma$ egyváltozós függvények, a szorzásszabályban nincs változás. Ha $\alpha'^{-1} = \varepsilon^\alpha$ és $b'^{-1} = e^a$ akkor $e^a = \varepsilon, \varepsilon^a = e$. A függvények most már egyértelműen meghatározottak.

A második rész bizonyításához tegyük fel, hogy adott egy $S = G \circ \Gamma$ csoport (r, ρ) egységelemmel. Ha bevezetjük a

$$(8) \quad \pi : (a, \alpha) \rightarrow (r^{-1}a, \alpha \rho^{-1})$$

permutációt, akkor Rédei [4] 161-162. vagy Rédei [2] 2 § -a szerint az eredetivel izomorf S' csoporthoz jutunk, ha a következő "új" szorzást definiáljuk:

$$(9) \quad (a, \alpha) \times (b, \beta) = \pi(\pi^{-1}(a, \alpha), \pi^{-1}(b, \beta))$$

Mivel $\pi^{-1} : (a, \alpha) \rightarrow (ra, \alpha \rho)$ kapjuk:

$$(10) \quad (a, \alpha) \times (b, \beta) = (a (\beta \rho)^{\alpha \rho} (r b)^{\alpha \rho}, (\alpha \rho)^{r b} (r a)^{r \beta} \beta),$$

amely ismét a (3)-as alakú szorzásszabály, csupán a

(11) $(\beta \rho)^{\alpha \rho}, (\tau b)^{\alpha \rho}, (\alpha \rho)^{\tau b}, (\tau a)^{\tau b}$
 függvények vannak $\beta^{\alpha}, b^{\alpha}, \alpha^{\beta}, a^{\beta}$ helyén.

Tehát S' -nek az egységeleme (e, ε) .

1. tétel. Alihoz, hogy a (3) -mal definiált G_{307} szorzati csoport legyen az (e, ε) egységelemmel, szükséges és elégséges, hogy a $\beta^{\alpha}, b^{\alpha}, \alpha^{\beta}, a^{\beta}$ függvényekre a következő feltételek teljesüljenek.

(12) $a^{\varepsilon} = a \quad e^{\alpha} = \varepsilon^{\alpha} = \alpha^{\varepsilon} = e \quad \alpha^{\varepsilon} = \alpha \quad \varepsilon^{\beta} = e^{\beta} = \alpha^{\varepsilon} = \varepsilon$

(13) $c^{\alpha^{\beta}} = c \quad \gamma^{\alpha^{\beta}} = \gamma$

(14) $\gamma^{\alpha^{\beta}} = e \quad c^{\alpha^{\beta}} = \varepsilon$

(15) $b^{\alpha} c^{\alpha^{\beta}} = (b^{\beta})^{\alpha} (b^{\beta})^{\alpha} \quad \gamma^{\alpha^{\beta}} \beta^{\alpha} = (\gamma^{\beta})^{\alpha} (\beta^{\beta})^{\alpha}$

(16) $\beta^{\alpha} c^{\alpha^{\beta}} = (\beta^{\beta})^{\alpha} (c^{\beta})^{\alpha} \quad \gamma^{\beta a} b^{\alpha} = (\gamma^{\beta a})^{\alpha} (b^{\beta})^{\alpha}$

(17) $\beta^{\alpha} \gamma^{\alpha^{\beta}} = (\beta^{\beta})^{\alpha} (\gamma^{\beta})^{\alpha} \quad c^{\beta a} b^{\alpha} = (c^{\beta})^{\alpha} (c^{\beta})^{\alpha}$

(18) $b^{\beta} \gamma^{\alpha} = \gamma^{\alpha} (b^{\beta})^{\alpha} \quad (c^{\beta \gamma})^{\alpha} = (\beta^{\beta})^{\alpha} c^{\alpha}$

(19) $\gamma^{\alpha^{\beta}} b^{\beta} = \gamma^{\alpha^{\beta}} c^{\beta} \quad c^{\beta \gamma} a^{\alpha^{\beta}} = c^{\beta \gamma} c^{\alpha}$

(20) $b^{\alpha} \gamma^{\alpha^{\beta}} = \gamma^{\alpha} b^{\alpha} \quad c^{\alpha^{\beta}} \beta^{\alpha} = \beta^{\alpha} c^{\alpha}$

Megjegyzés : Ezekből még a következő egyszerűbb feltételek következnek :

(21) $c^{\alpha^{\beta}} = c \quad \gamma^{\beta \alpha^{\beta}} = \gamma^{\beta}$

(22) $\gamma^{\alpha^{\beta}} = \gamma^{\beta} \quad c^{\beta \alpha^{\beta}} = c^{\beta}$

mégpedig (21₁) és (22₁) az (16₁) illetve (17₁)-ből $\alpha = \alpha^{\beta}$ helyettesítéssel, és (13₁), (14₁) alkalmazásával. Hasonlóan (21₂), (22₂)

(16₂) illetve (17₂)-ből $a = \alpha^{\beta}$ -val (13₂), (14₂) segítségével következik.

Látható, hogy a fenti feltételek páronként duálisak, ami azt jelenti, hogy az egyik oldalon álló egyenletből a másik oldalon lévőt a görög és a latin betűk felcserélésével és a tényezők sorrendjének a felcserélésével kapjuk. Ez a dualitás a (3) szorzás szabály szimmetriájából következik.

Bizonyítás. A bizonyítás során alkalmazzuk a dualitást. Alihoz, hogy (e, ε) egységelem legyen

$$(23) \quad (a, \alpha)(e, \varepsilon) = (a \varepsilon^\alpha e^\alpha, \alpha^\varepsilon a^\varepsilon) = (a, \alpha)$$

$$(24) \quad (e, \varepsilon)(a, \alpha) = (\alpha^\varepsilon a^\varepsilon, \varepsilon^\alpha e^\alpha \alpha) = (a, \alpha)$$

alapján szükséges és elegendő, hogy

$$(25) \quad \varepsilon^\alpha e^\alpha = e \quad \alpha^\varepsilon a^\varepsilon = a$$

és a duális egyenletek teljesüljenek. Látható, hogy (e, ε) akkor

és csak akkor egységelem, ha (12) teljesül, figyelembevéve azt, hogy

$$\varepsilon^\alpha = e, \quad e^\alpha = \varepsilon \quad \text{mindig fennáll. A következőkben (12)-t}$$

külön megjegyzés nélkül fogjuk alkalmazni.

Az asszociativitás feltétele:

$$(26) \quad (a \beta^\alpha b^\alpha, \alpha^\beta a^\beta \beta)(e, \gamma) = (a, \alpha)(b \gamma^\beta c^\beta, \beta^\gamma e^\gamma \gamma)$$

két egyenletre bomlik, amelyek közül az egyik a következő (az a faktor törlésével)

$$(27) \quad \beta^\alpha b^\alpha \gamma^\alpha e^\alpha a^\alpha \beta \quad c^\alpha e^\alpha a^\alpha \beta = (\beta^\gamma e^\gamma \gamma)^\alpha (b \gamma^\beta c^\beta)^\alpha$$

a másik ennek duálisa.

A bizonyítás oly módon történik, hogy megmutatjuk (13) - (22)

ekvivalens (27)-tel.

Ha (27)-ben $a=e$ -t helyettesítünk, mivel a jobboldal ezáltal nem változott, a kapott egyenletekből (27)-tel való összehasonlítás és $\beta^\alpha e^\alpha$ -val való egyszerűsítés után a

$$(28) \quad \gamma^\alpha e^\alpha a^\alpha \beta \quad c^\alpha e^\alpha a^\alpha \beta = \gamma^\alpha e^\alpha \beta \quad c^\alpha e^\alpha \beta$$

egyenlethez jutunk, amelyből $\gamma=e, \alpha=e$ esetén (21) $e=e, \alpha=e$

esetén (22) adódik. (21) illetve (22) pedig $\beta=e$ -ra (13) -t illetve

(14)₁-t adja.

(27)-ből $a=e \quad \beta=e \quad c=e$ esetén éppen (20)₁ áll elő. A dualitás miatt

(27)-ből következik (13)₀, (14)₀, (20)₀, (21)₀, (22)₀. Fordítva: (21)₁ és (20)₂ illetve

(22)₁ és (20)₂ felhasználásával kapjuk (21)₁ és (22)₁-t b, β helyett b^α, α^β -ra alkalmazzuk):

$$(29) \quad c^\alpha b^\alpha \alpha^\beta \beta = c^\alpha e^\alpha \beta$$

$$(30) \quad \gamma^\alpha b^\alpha \alpha^\beta \beta = \gamma^\alpha e^\alpha \beta$$

Ezek felhasználásával (29)-ből

$$(31) \quad c^\alpha b^\alpha \alpha^\beta \beta = c^\alpha e^\alpha \beta$$

(30)-ból pedig:

$$c^\alpha b^\alpha \alpha^\beta \beta = c^\alpha e^\alpha \beta$$

$$\gamma^\alpha b^\alpha \alpha^\beta \beta = \gamma^\alpha e^\alpha \beta$$

$$(32.) \quad \gamma^{\alpha^b} a^b \beta = \gamma^{\alpha^b} \beta$$

egyenletek állnak elő, amelyek segítségével (27) így alakul:

$$(33.) \quad \beta^\alpha b^\alpha \gamma^{\alpha^b} c^{\alpha^b} \beta = (\beta^c \gamma)^\alpha (b \gamma^{\beta c} \beta)^\alpha$$

Tehát (27) ekvivalens (33), (13), (14), (20), (21), (22)-vel. Most már (27) helyett (33), (13), (14), (20), (21), (22)-t tekintjük. (33)-ból $\beta = \varepsilon$ -ra

$$(34.) \quad b^\alpha \gamma^{\alpha^b} c^{\alpha^b} = (b^c \gamma)^\alpha (bc)^\alpha$$

áll elő, ahonnan először $\gamma = \varepsilon$ esetén (15) adódik, majd (34) baloldali

részt alkalmazva (20₁)-t és az így kapott egyenletbe (15) alapján végezve helyettesítést $(bc)^\alpha$ -val való egyszerűsítés után (18₁) következik. Fordítva, ha érvényes (15), (18), (20), akkor (33)-ban először (20₂)-t használva c , a helyett bc -re a jobboldalon, majd (18₁)-t használva c , γ helyett c^β , $\beta^c \gamma$ -ra alkalmazva szintén (33) jobboldalán, akkor

$$(35.) \quad \beta^\alpha b^\alpha \gamma^{\alpha^b} c^{\alpha^b} \beta = (\beta^c \gamma)^\alpha (b^c)^\alpha (b \gamma^{\beta c} \beta)^\alpha$$

egyenlet jön létre.

Figyelmbe véve, hogy (15₁)-t c helyett $\gamma^\beta c^\beta$ -re alkalmazva

$$(36.) \quad b^\alpha (\gamma^\beta c^\beta)^\alpha b = (b \gamma^\beta c^\beta)^\alpha (b \gamma^{\beta c} \beta)^\alpha$$

hoz jutunk, és azt, hogy (20) és (21₂) miatt

$$(37.) \quad b \gamma^\beta c^\beta = b^c \gamma^{\beta c} = b^c \beta$$

(35) a következő alakra hozható:

$$(38.) \quad \beta^\alpha b^\alpha \gamma^{\alpha^b} c^{\alpha^b} \beta = (\beta^c \gamma)^\alpha b^\alpha (\gamma^{\beta c} \beta)^\alpha$$

Ezen egyenlet mindkét oldalán (20₁) segítségével b^α -t kivihetjük a tényezők közül és egyszerűsíthetünk vele. Így előáll:

$$(39.) \quad \beta^{\alpha^b} \gamma^{\alpha^b} c^{\alpha^b} \beta = (\beta^c \gamma)^{\alpha^b} (\gamma^{\beta c} \beta)^{\alpha^b}$$

Ebből az egyenletből $b = \varepsilon$ -re:

$$(40.) \quad \beta^\alpha \gamma^{\alpha^b} c^{\alpha^b} = (\beta^c \gamma)^\alpha (\gamma^{\beta c} \beta)^\alpha$$

következik, másrészt (40)-ből is következik (39), mert ha (40) minden α -ra fennáll, akkor fennáll az α^b alakú α -kra is.

Ezáltal adódott, hogy (27) ekvivalens (40), (13), (14), (15), (18), (20), (21), (22)-vel. Ezen egyenletek szétbontása következik a továbbiakban.

(40)-ből adódik $\gamma = \varepsilon$ esetén (16₁), $c = e$ esetén pedig (17₁).

(15₁) -t b, c helyett $c^\beta, \gamma^{\beta^c}$ -ra alkalmazva

$$(41) \quad (c^\beta)^\alpha (\gamma^{\beta^c})^{\alpha^c \beta} = ((c^\beta) \gamma^{\beta^c})^\alpha (c^\beta \gamma^{\beta^c})^{\alpha^c}$$

egyenlethez vezet, ahol $(c^\beta)^{\gamma^{\beta^c}} = \varepsilon$ (14₂) miatt, és $c^\beta \gamma^{\beta^c} = \gamma^{\beta^c} c^\beta$ (20₁)

miatt, s így (40) a következőképpen alakítható (a baloldalon még (58₁) -t is használva) :

$$(42) \quad \beta^\alpha c^{\alpha \beta} \gamma^{(\alpha \beta)^c} = (\beta^c \gamma)^\alpha (c^\beta)^\alpha (\gamma^{\beta^c})^{\alpha^c \beta}$$

Ebben az egyenletben (16₁) alapján helyettesítést végezhetünk, majd az így előálló egyenlet mindkét oldalán (20₁) segítségével $(c^\beta)^\alpha$ -t ki-vihetjük a tényezők közül, és egyszerűsíthetünk vele. Ekkor

$$(43) \quad (\beta^c)^\alpha c^{\alpha \beta} \gamma^{(\alpha \beta)^c} = (\beta^c \gamma)^{\alpha^c \beta} (\gamma^{\beta^c})^{\alpha^c \beta}$$

áll elő. (17)-ből α, β helyett α^c, β^c esetén

$$(44) \quad (\beta^c)^\alpha c^{\alpha \beta} \gamma^{\alpha^c \beta^c} = (\beta^c \gamma)^{\alpha^c \beta^c} (\gamma^{\beta^c})^{\alpha^c \beta^c}$$

egyenlet jön létre, amelyet (43)-mal egybevetve éppen (19) adódik.

Ezzel bebizonyítottuk, hogy (27) (13)-(22) egyenletekkel ekvivalens.

Hátravan az inverz elem létezésének bizonyítása. Könnyen belátható,

hogy

$$(45) \quad (a, \varepsilon) (e, \alpha) = (a, \alpha)$$

továbbá az is, hogy (x^{-y}, x^{-y}) stb. jelöli az x^y , x stb. inverzét) :

$$(46) \quad (a, \varepsilon) (a^{-1}, a^{-a^{-1}}) = (e, \varepsilon)$$

s ha bebizonyítjuk, hogy

$$(47) \quad (e, \alpha) (\alpha^{-\alpha^{-1}}, \alpha^{-1}) = (e, \varepsilon)$$

akkor

$$(48) \quad (a, \alpha)^{-1} = (\alpha^{-\alpha^{-1}}, \alpha^{-1}) (a^{-1}, a^{-a^{-1}})$$

Elegendő (47)-et bizonyítani, illetve a következő egyenletek teljesülését :

$$(49) \quad (\alpha^{-1})^\alpha (\alpha^{-\alpha^{-1}}) = e$$

$$(50) \quad \alpha^{\alpha^{-\alpha^{-1}}} = \alpha$$

Először (50)-et bizonyítjuk.

Legyen $b = \alpha^{-\alpha^{-1}}$, $\beta = \alpha^{-1}$. Mivel

$$b = \alpha^{-\beta} \quad \text{azaz} \quad b \alpha^\beta = e$$

(21₂) felhasználásával :

$$(51) \quad \alpha = \alpha^c = \alpha^{b^a} = \alpha^b = \alpha^{\alpha^{-\alpha^{-1}}}$$

$$(49) \text{ bizonyítása céljából legyen } b = \alpha^{-\alpha^{-1}} \quad c = \alpha^{\alpha^{-1}}$$

$$(51) \text{ miatt } \alpha^b = \alpha$$

$$(14_2)\text{-ből } b^c = \varepsilon$$

s így (15₁)-t alkalmazva:

$$(52) \quad b^a c^a = \varepsilon$$

vagyis

$$(53) \quad (\alpha^{-\alpha^{-1}})(\alpha^{\alpha^{-1}}) = \varepsilon$$

Most (17₁) felhasználva $\beta = \alpha^{-1}$, $\gamma = \alpha$ esetén:

$$(54) \quad (\alpha^{-1})^\alpha = (\alpha^{\alpha^{-1}})^\alpha$$

tehát (53) szerint:

$$(55) \quad (\alpha^{-\alpha^{-1}})^\alpha (\alpha^{-1})^\alpha = \varepsilon$$

ami azt jelenti, hogy G-ben $(\alpha^{-1})^\alpha$ -nak inverze $(\alpha^{-\alpha^{-1}})^\alpha$

tehát (49) is teljesül.

Ezzel a tételt bebizonyítottuk.

Megjegyzés: Az (20)-as egyenletek alapján a szorzásszabály így írható $G_{30} \Pi$ -ban:

$$(56) \quad (a, \alpha)(b, \beta) = (a b^a \beta^{\alpha^b}, a^b \alpha^b \beta)$$

Ez nem tekinthető $G_{10} \Pi$ szorzatnak, mert β^{α^b} és $a^b \alpha^b$ nem csupán β -től és α -tól, illetve a -tól és b -től függenek.

A $G_{50} \Pi$ csoport.

A $G_{50} \Pi$ ferdeszorzat a $G_{30} \Pi$ -hoz hasonlóan vizsgálható meg.

Kapjuk, hogy a $G_{50} \Pi$ akkor és csakis akkor csoport, ha

$$(57) \quad a \gamma^b = \gamma^b a \quad c^b \alpha = \alpha c^b$$

teljesül, vagyis amikor az (5) szorzásszabály (1)-be megy át.

A $G_{20} \Pi$, $G_{40} \Pi$, $G_{60} \Pi$ csoportok.

Ezen ferdeszorzat-típusok vizsgálata is a $G_{30} \Pi$ -éhoz hasonlóan mehet. Megállapítható, hogy ahhoz, hogy az összes $G_{20} \Pi$, ill. $G_{40} \Pi$, ill. $G_{60} \Pi$ csoportokat megkapjuk elegendő arra az esetre szorítkozni, amikor $(\varepsilon, \varepsilon)$ az egységelem.

Felírva az asszociativitást kifejező egyenleteket, látható, hogy a $G_{20} \Pi$ - és a $G_{40} \Pi$ -ékből, a $G_{40} \Pi$ - és a $G_{60} \Pi$ -ékből

a $G_{60}\Gamma$ -é a $G_{50}\Gamma$ -éből úgy áll elő, hogy a tényezők sorrendjét felcseréljük.

Ezért ha ugyanazokat a lépéseket elvégezzük $G_{20}\Gamma$ -val mint $G_{30}\Gamma$ -val, $G_{40}\Gamma$ -val, mint $G_{30}\Gamma$ -val, $G_{60}\Gamma$ -val, mint $G_{50}\Gamma$ -val, a rájuk vonatkozó tétel bizonyítása során, a különbség csupán az lesz, hogy minden egyenletben a tényezők sorrendje fordított lesz, így a feltételeket kifejező egyenleteknél is. A fordított sorrendű tényezőkkel rendelkező egyenletek felhasználása az inverz elem létezésének bizonyításánál nem okoz semmi zavart.

Az 1. tétel megfelelője könnyen megadható a $G_{20}\Gamma$, $G_{40}\Gamma$, $G_{60}\Gamma$ -ra vonatkozóan is. Az eddigiek szoros kapcsolatot mutatnak a $G_{20}\Gamma$ és a $G_{40}\Gamma$, $G_{40}\Gamma$ és a $G_{30}\Gamma$, a $G_{60}\Gamma$ és a $G_{50}\Gamma$ közt. Ezt még inkább mutatja a következő:

2. tétel. Adott G, Γ esetén a $b^\alpha, \beta^\alpha, a^b, \alpha^b$ függvényekkel előálló, (ϱ, ξ) egységelemmel rendelkező $G_{10}\Gamma$ szorzat- csoport izomorf azzal az (ϱ, ξ) egységelemmel rendelkező $G_{20}\Gamma$ csoporttal, amely $(b^{-1})^{-\alpha^{-1}}, (\beta^{-1})^{-\alpha^{-1}}, (a^{-1})^{-b^{-1}}, (\alpha^{-1})^{-b^{-1}}$ függvények segítségével áll elő, és az izomorfizmust $\Pi: (a, \alpha) \rightarrow (a^{-1}, \alpha^{-1})$ leképezés adja meg. Fordítva: adott G, Γ esetén $b^\alpha, \beta^\alpha, a^b, \alpha^b$ függvényekkel előálló (ϱ, ξ) egységelemmel rendelkező $G_{20}\Gamma$ csoport izomorf azzal az (ϱ, ξ) egységelemmel rendelkező $G_{10}\Gamma$ csoporttal, amely $(b^{-1})^{-\alpha^{-1}}, (\beta^{-1})^{-\alpha^{-1}}, (a^{-1})^{-b^{-1}}, (\alpha^{-1})^{-b^{-1}}$ függvények segítségével áll elő, és az izomorfizmust Π adja meg.

Megjegyzés: A fenti állítás igaz marad, ha $G_{10}\Gamma, G_{20}\Gamma$ helyett a szövegben $G_{30}\Gamma, G_{40}\Gamma$ -t vagy $G_{50}\Gamma, G_{60}\Gamma$ -t helyettesítünk.

Bizonyítás: Elegendő a tételt csak a $G_{10}\Gamma, G_{20}\Gamma$ esetén elvégezni. Szorítkozhatunk az első rész bizonyítására. Legyen megadva $S = G_{10}\Gamma$ csoport (ϱ, ξ) egységelemmel, a függvények legyenek $b^\alpha, \beta^\alpha, a^b, \alpha^b$. Rédei ([2] 2. §-a szerint tekintve a $\Pi = \Pi^{-1}: (a, \alpha) \rightarrow (a^{-1}, \alpha^{-1})$ permutációt, S -hez izomorf S' -hez jutunk, ha S -ben bevezetjük a következő "új" szorzást:

$$(a, \alpha) \times (b, \beta) = \Pi (\Pi^{-1}(a, \alpha) \Pi^{-1}(b, \beta)) = \Pi (a^{-1} b^{-1} \alpha^{-1} \beta^{-1} \alpha^{-1} \beta^{-1} \alpha^{-1}) = ((\beta^{-1})^{-\alpha^{-1}} (b^{-1})^{-\alpha^{-1}} a, \beta (\alpha^{-1})^{-\beta^{-1}} (a^{-1}))$$

Látható, hogy $S' (e, \varepsilon)$ egységelemmel $G \rtimes \Gamma$ csoport és a szorzákszabályban szereplő függvények a fent megjelöltek.

Über gewisse Typen des schiefen Produktes in der Gruppentheorie

In der vorliegenden Arbeit werden notwendige und hinreichende Bedingungen angegeben, unter denen die schiefen Produkte (2)–(6) von zwei Gruppen G, Γ eine Gruppe bilden. Die schiefen Produkte (2)–(6) entstehen aus dem Rédeischen schiefen Produkt (1) durch die Permutationen der Faktoren, aber die Symmetrie der Faktoren in G und Γ wird festgehalten.

I r o d a l o m j e g y z é k.

1. Rédei : Algebra I.

2. Rédei : Die Anwendung des schiefen Produktes in der Gruppentheorie, Journal f. d. reine u. angew. Math. 138. /1950/ 201–227.

Bánkfalvi Zsolt és Kalmár Ágota

IV. évfolyam, matematika

BOLYAI INTÉZET

Gráfon mindig irányítatlan gráfot értünk, amelyben nincsenek hurkok és többszörös élek. Fának nevezünk egy összefüggő gráfot, ha nincs olyan éle, amelyet eltávolítva a gráf összefüggő maradna. Ismeretes, hogy a második feltétel a következő kikötésekkel ekvivalens: a gráf n pontot és $n-1$ élet tartalmaz, illetve: a gráf nem tartalmaz kört. k -as koszorúnak ($k \geq 1$) nevezünk egy összefüggő gráfot, ha n pontja és $n+k-1$ éle van. Az utóbbi kikötés azzal ekvivalens, hogy pontosan k él hagyható el a gráfból úgy, hogy még mindig összefüggő maradjon.

Számozottnak nevezünk egy gráfot, ha pontjait megszámozzuk. A továbbiakban mindig számozott gráfokról lesz szó, ha ezt külön nem is jelezzük mindenhol. Az n számozott szögpontról felépíthető fák számát megadó forma Cayley-től származik:

$$C_{n,n-1} = n^{n-2}$$

Az n számozott szögpontról felépíthető k -as koszorúk számát $C_{n,n+k-1}$ jelöljük. Az előbbiekből világos, hogy az első index a pontok számát, a második index az élek számát jelenti. Ez a szám $k=1$ -re ismeretes:

$$C_{n,n} = \frac{n! n^n}{2} \sum_{k=3}^n \frac{n^{-(k+1)}}{(n-k)!}$$

Mi a jelen dolgozatban $C_{n,n+1}$ -et határozzuk meg. A problémát Rényi Alfréd professzortól kaptuk. Szerinte tetszőleges k -ra elegendő volna aszimptotikus formulát csinálni (esetleg k -ra vonatkozó rekurzióval), bár az sincs

kizárva, hogy a pontos formula az eddigiekhez hasonlóan felírható lesz.

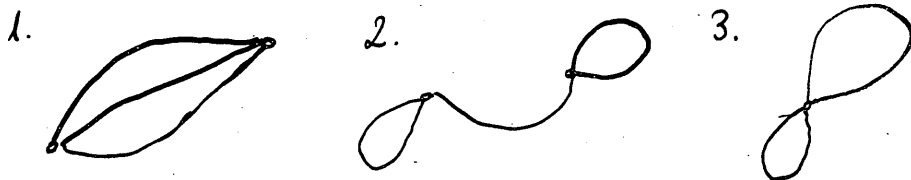
Az ő sejtése :

$$C_{n, n+k-1} \sim \gamma_k n^{n-2 + \frac{3k}{2}} \quad (n \rightarrow \infty)$$

Ezek az eredmények, valamint a továbbiakban felhasznált $T_{n-k+1, k}$ formula megtalálható a dolgozat végén felsorolt cikkeken.

Speciálisnak nevezünk egy kettős koszorút, ha nincs olyan pontja, amelyből pontosan egy él indul ki. Könnyű belátni, hogy n pontból álló kettős koszorú előállítható úgy egy k pontból álló speciálisból és k számu (összesen n pontot tartalmazó) fából, hogy a fák mindegyikében kiválasztunk egy pontot, és e kiválasztott pontokat azonosítjuk (egy-egyértelmű módon) a speciális koszorú pontjaival. A következőkben először az előírt számu pontból álló speciális kettős koszorúk számát állapítjuk meg, és ennek az eredménynek felhasználásával határozzuk meg az általános kettős koszorúk számát.

Tekintsük a k számu élből álló speciális kettős koszorúkat. Ezek az ábrán látható háromféle módon állhatnak elő utakból és körökből :



Az első típus felfogható úgy, mint két pontot összekötő három törtvonal. Válasszuk ki először a két tartópontot. Ez nyilván $\binom{k}{2}$ féleképpen lehetséges. Vegyünk egy rögzített sorrendjét a fennmaradó $k-2$ pontnak. E sort három részre vágva kapjuk a három törtvonalat. A háromrészevágást úgy képzelhetjük el, hogy a sort minden lehetséges módon két helyen elmetszük. Figyelembevéve, hogy elmetszeni a sort két egymást követő szám között lehet, a $k-2$ szám között fellépő $k-3$ számköz $\binom{k-3}{2}$ lehetőséget nyújt a sor kettős elmetszésére. A nyert három törtvonalat illesztjük a tartók közé úgy, hogy előlső végük a kisebb számértékkel jelölt tartóponthoz csatlakozzék. Könnyű belátni, hogy a kiválasztott k pont más és más rögzített sorrendjét tekintve a fenti eljárás különböző kettős koszorúhoz juttat bennünket, kivéve azokat az eseteket, amikor a k számu pontot éppen úgy permutáljuk.

hogy az egyes kettős elmetszéseknél nyert törtvonalak változatlanok maradnak, a csupán sorrendjük cserélődik fel. Mivel három törtvonal hat különböző sorrendben követheti egymást, eljárásunk egy-egy speciális kettős koszorut hatszor állít elő. Előfordulhat az az eset is, hogy egyik törtvonal egyetlen állé fajul. Nyilván erre az esetre fenti megfontolásunk nem terjed ki. Ilyenkor a $k-2$ pontból álló sort csak egy helyen kell el-
metszeni, mivel csak két törtvonala van szükségünk. Ez $k-3$ féleképpen lehetséges. Ugyanazon speciális kettős koszoru előállításának száma is más lesz most. Mivel csak két törtvonala van szó, a lehetséges sor-
rendek, s így a speciális kettős koszoruk többszörös előállításainak szá-
ma is éppen kettő lesz. Összegezve eredményeinket k szögpontból pon-
tosan

$$\binom{k}{2} \left(\frac{(k-2)!(k-3)}{2} + \frac{(k-2)!(k-3)(k-4)}{6 \cdot 2} \right) = \frac{k!}{24} (k-3)(k+2)$$

számu speciális kettős koszoru alkotható, amely az első típushoz tartozik.

A második és harmadik típust együtt lehet számolni. Az adott $P_1 P_2, \dots, P_k$ pontokat valamilyen módon sorbaállítjuk, erre $k!$ lehetőség van. Jelölje e pontokat a sorbaállítás sorrendje szerint

$$P^{(1)}, P^{(2)}, \dots, P^{(k)}$$

Ezután éllel összekötjük a sorozat szomszédos pontjait, és még $P^{(1)}$ -et valamely $P^{(a)}$ ponttal, $P^{(k)}$ -t valamely $P^{(b)}$ ponttal, ahol $3 \leq a \leq b \leq k$. Az $a < b$ esetben 2. típusu, az $a = b$ esetben 3. típusu speciális kettős koszoru áll elő. Az utóbbi módon $k-4$ féleképpen választhatjuk ki a $P^{(a)} = P^{(b)}$ pontot, az előző kiválasztási mód $\binom{k-4}{2}$ lehetőséget jelent. Így a második és harmadik típusból

$$\frac{k!}{8} \left[\frac{(k-4)(k-5)}{2} + (k-4) \right] = \frac{k!}{16} (k-3)(k-4) \quad \text{van.}$$

Speciális kettős koszoru tehát összesen

$$G_{k2} = \frac{k!}{48} (k-3)(5k-8) \quad \text{van.}$$

Legyen adva n számozott pont, a belőlük készíthető minden kettős koszoru előáll pontosan egyszer a következőképpen: kiválasztunk k pontot ($4 \leq k \leq n$), ezt $\binom{n}{k}$ féleképp lehet. Ebből képezzük az összes

lehetséges speciális kettős koszorú, ilyen $G_{n,k}$ különböző van. Egyidejűleg képezzük az adott n pontból az összes olyan gráfot, amely k különálló fából áll, és az előbb kiválasztott k pont különböző fákhöz tartozik.

Ilyen

$$T_{n-k+1,k} = k n^{n-k-1} \quad \text{van.}$$

Egy ilyenből úgy kaphatunk kettős koszorút, hogy még egy, a kiválasztott k pontból képzett speciális kettős koszorú éleit is felrakjuk. Ha ezt minden párosításban elvégezzük, kapjuk az összes kettős koszorút.

A kettős koszorúk száma tehát :

$$\begin{aligned} C_{n,n+1} &= \sum_{k=4}^n \binom{n}{k} G_{n,k} T_{n-k+1,k} = \sum_{k=4}^n \binom{n}{k} \frac{k!}{48} (k-3)(5k-8) k n^{n-(k+1)} = \\ &= n! n^n \sum_{k=4}^n \frac{k(k-3)(5k-8)}{48(n-k)! n^{k+1}} \end{aligned}$$

Magántükkelt Leiner 'Klassé' von Graphen.

Zs. Bánkfalvi und Á. Kalmár

Das Problem unserer Arbeit stammt von Professor A. Rényi. Ein zusammenhängender Graph heisst Doppelkranz, falls es zwei derartige Kanten in ihm gibt, dass der Graph nach dem Entfernen beider dieser Kanten zusammenhängend bleibt, und er durch das Entfernen jeder drei Kanten seinen Zusammenhang verliert. In dieser Arbeit haben wir den Zweck, die Anzahl der aus n nummerierten Punkten bestehenden Doppelkränze zu bestimmen. Das Ergebnis :

$$C_{n,n+1} = \frac{n! n^n}{48} \sum_{k=4}^n \frac{k(k-3)(5k-8)}{(n-k)! n^{k+1}}$$

I r o d a l o m.

A Rényi : Some remarks on the theory of trees. A Magyar Tudományos Akadémia Matematikai Kutató Intézetének Közleményei IV, évfolyam I, 1959, 73-85. old.

A. Rényi : On connected graphs L'Ugyanott, IV, évfolyam 3-4, 1959, 335-388, old.

EGY KÉTMAGU KOMPLEX TÁRGYALÁSA AZ MOLEKULA

MÓDSZERREL

Maráz Vilmos

V. éf. mat-fiz.

ELMÉLETI FIZIKAI INTÉZET

Ezen dolgozat a ν, ν' -dihidroxo-oktamin-dikobalt elnevezésű kétmagu komplex elektronenergiáinak meghatározását tartalmazza az MO MÓDSZERREL szer és a csoportelmélet felhasználásával.

1. Bevezetés

Komplex vegyületeken a kémia olyan anyagokat ért, amelyek két vagy több kémiai értelemben telített vegyület egymáshatásakor keletkeznek.

Werner - svájci kémikus - a kémiai reakciók sajátosságainak figyelembevételével, de teljesen spekulatív módon alkotta meg a komplex vegyületek új elméletét, amelynek legfőbb mondanivalója az atomoknak a komplex vegyületeken belüli elrendeződésére vonatkozik. Elmélete szerint a komplex vegyületekben az atomokat két övezetre osztjuk fel. Az egyik övezetben mindig kijelölhető egy, esetleg több olyan atom, amely középponti helyet foglal el és amely megszabja a komplex legfőbb sajátosságait. Ezen középponti atom körül alakul ki az első, a kötési szféra. Az ebbe tartozó egyéb atomokat vagy atomcsoportokat, esetleg ionokat ligandoknak nevezük. Ezt az első kötési szférát szokás koordinációs övnek is nevezni. A koordinációs övön kívül foglal helyet a második kötési övezet, amelyben lévő ionok a koordinációs övtől könnyen elválhatnak.

A koordinációs övön belül a ligandok kapcsolódása a középponti atomhoz különböző természetű és erősségű kémiai kötésekkel jöhet létre. Sidgwick a középponti ion és a gyökök között kovalens kötést tételezett fel olyan módon, hogy a kötés létrejöttéhez szükséges elektronszámot a koordinatív megkötött gyök szolgáltatja. Ezt a gondolatot alkalmazta Pauling

kvantummechanikai számításoknál.

2. Modellalkotás

A vizsgálandó $[(\text{NH}_3)_4\text{Co}(\text{OH})_2\text{Co}(\text{NH}_3)_4] \text{X}_4$ kétmagu komplex ionjában 8 ammónia molekula, 2 hidroxilion, valamint 2 háromszorosan ionizált $\text{Co}(\text{IV})$ szerepel, ez utóbbi 6-os koordinációval. A komplex geometriai elrendeződése közel kettős-oktaéder-szimmetriát mutat, amely elrendeződésben a két oktaédernek egy közös éle van, továbbá a két Co mag az oktaéderek középpontjaiban, az OH gyökök az oktaéderek közös csucsain, az NH_3 molekulák pedig az oktaéderek főbbi csucsán helyezkednek el.

Az alkotórészek adatainak figyelembevételénél látni fogjuk, hogy nem teljesen kettős-oktaéderszimmetrikus a molekula, azonban célszerű ezzel a szimmetriával elvégezni megfontolásaink egy részét egyrészt azért, mert a geometriai adatok figyelembevétele alapján ugyanolyan szimmetriatulajdonságokkal rendelkező geometriai alakzat áll elő.

A ligandok orientációja olyan, hogy a hidroxil-ionok O-atomjai és az ammónia molekulák N-atomjai helyezkednek el a Co magokhoz közelebb. Ez az elképzelés azon alapszik, hogy a koordinációs övben levő gyököket elektromos dipólusnak tekintve azok negatív töltéseinek súlypontja az O, ill. az N atomokon van, így komplex-képződéskor a gyökök úgy állnak be, hogy az O, ill. N-atomok a középponti pozitív töltésű $\text{Co}(\text{IV})$ ionokhoz közelebb, a H atomok pedig távolabb helyezkednek el.

Feltevés :

1. Minthogy a komplexképzésben a H atomok nem vesznek részt, és feladatunk a középponti magok és a gyökök kölcsönhatásának megállapítása, ezért a kölcsönhatás számításánál a H-atomok atomi pályáit nem vesszük figyelembe, hanem csak az O és N atomok atomi pályáit.

2. Tekintettel arra, hogy molekulaképződésnél legnagyobb valószínűséggel a kötést a külső pályán lévő elektronok hozzák létre, ezért csak ezeket az un. valencia elektronokat vesszük figyelembe, a többi elektront az atomtörzshöz csatoljuk. Ennek alapján számításba vesszük a Co ion öt $3d$, egy $4s$ és három $4p$ atomi pályáit, az OH gyök O-atomjának három $2p$ pályáját, valamint az ammónia molekula N-atomjának az N-Co kötéstengelyébe

és $2p_6$ pályáját. Az $N 2p\pi$ pályáit, mivel azokat a H-atomok kötik le nem vesszük figyelembe. Ezek alapján 32 atomi pálya képezi a számítás alapját, s minthogy a Co (IV) ionnak 6. az N-atomnak 2 és az O atomnak 6 elektronja tartozik ezen atomi pályákhoz, 40 elektront kellene figyelembe venni. Azonban a számolások során kiderült, hogy az O-atomnak a Co-O kötéstengelyre merőleges $2p\pi$ pályái nem vesznek részt a kötésben, ezért ezek az atomi pályák és a hozzájuk tartozó 2-2 elektron elhagyható. Így végeredményben 30 atomi pályát és 36 elektront veszünk figyelembe.

3. Az LCAO módszer

Egy több elektronból és atommagból álló rendszer (molekula) Hamiltonoperátorát, ha az atommagokat α és az elektronokat i indexszel látjuk

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha} \frac{1}{m_{\alpha}} \Delta_{\alpha} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \Delta_i + V$$

alakban kell felvennünk. A vizsgálandó molekulánál a figyelembevett magok száma 12, az elektronoké 36, így H esetünkben 144 változóra ható differenciáloperátor. Ezért nem lenne célszerű arra gondolni, hogy a fenti Hamiltonoperátorral felírt Schrödinger-egyenletet egzaktul megoldjuk. Matematikai szempontból már a hidrogén molekula esetében is közelítő megoldást kell alkalmaznunk, ezért bonyolultabb esetekben - és így a fenti komplex esetben is - közelítő eljárásra vagyunk utalva. Leginkább elterjedt közelítés az ún. atomi pályák lineárkombinációjának (LCAO) módszere. Lényege az, hogy a molekulapályákat (MO) atomi pályák lineárkombinációjaként vesszük fel.²

Ha a ψ közelítő függvényt l számú lineárisan független ψ_i atomi pálya $\psi = \sum c_i \psi_i$ alakú lineárkombinációjának tekintjük, ahol a c_i együtthatók a variálandó paraméterek, akkor az ϵ energiáértékek meghatározására a

$$| H_{ij} - \epsilon S_{ij} | = 0 \quad (i, j = 1, 2, \dots, l)$$

un. szekuláris egyenletet nyerjük, ahol

$$H_{ij} = (\psi_i, H \psi_j) \quad \text{és} \quad S_{ij} = (\psi_i, \psi_j) .$$

A vizsgálandó komplexnél 30 atomi pályát veszünk figyelembe. Így ezen módszerrel $405 H_{i,j}$ és $S_{i,j}$ ($i \neq j$), valamint 30 H_{ii} és S_{ii} típusu integrált kellene kiszámítani ahhoz, hogy a szekuláris egyenletet megoldhassuk, amely esetünkben egy 30-adszoros algebrái egyenlet megoldását jelentené. A számolási munkát azonban lényegesen egyszerűbbé tehetjük, ha felhasználjuk a csoportelmélet néhány eredményét.

4. Csoportelméleti megfontolások

Egy adott molekuláris probléma konfigurációja az atomok térbeli elhelyezkedése – bizonyos szimmetriát mutathat. Tekintsük az összes olyan operációk halmazát, amelyek a molekulát önmagába viszik át. Ezek lehetnek tükrözések, forgások stb. Ezek az operációk egy G csoportot alkotnak, amelyet a konfiguráció szimmetriacsoportjának nevezünk.

Ha meghatározzuk a G csoport elemeinek a háromdimenziós tér bázisaira gyakorolt hatását, egy $D = \{D(g)\} \quad (g \in G)$ mátrixhalmazt kapunk, amelyet a G csoport ábrázolásának nevezünk.

Az illető molekuláris problémánál tekintetbe vett, a háromdimenziós térben értelmezett ℓ számú atomi pályát tekintjük az $L^2(R)$ egy ℓ dimenziós altere bázisainak. Definiáljunk operátorokat –amelyeket a továbbiakban indukált operátoroknak fogunk nevezni – az $L^2(R)$ -ben a következő módon :

$$P(g)\psi(r) = \psi(D^{-1}(g)r),$$

ahol r az R háromdimenziós tér egy vektora. Kimutatható, hogy a $P(g)$ operációk a G -t ábrázolják az $L^2(R)$ -ben, valamint a $P(g)$ -k lineárisak és uniterek. Ha tehát megállapítjuk a G csoport elemei által az ℓ dimenziós függvénytérben az indukált operációk mátrixait, ezzel a mátrixreprezentációval a G -nek egy ℓ dimenziós előállítását nyerjük.

Az előállítást reducibilisnek, ill. irreducibilisnek nevezzük asszerint, hogy az $L^2(R)$ ℓ dimenziós alterének G -vel szemben van-e megengedett altere, vagy nincs.

G -nek a fentiekben megadott előállítása általában reducibilis és kiredukálható. A kiredukálás azt jelenti, hogy a választott bázisfüggvények helyett olyan új bázisokat vezetünk be, amelyek már a G csoport egy-

egy irreducibilis előállításának egy-egy sorához tartoznak.

Kimutatható, hogy a különböző irreducibilis előállításokhoz, valamint ugyanazon típusu irreducibilis előállítás különböző soraihoz tartozó függvények ortogonálisak egymásra. Éppen ez az az eredmény, amely a kvantummechanikai számításokat lényegesen leegyszerűsíti. Ha ugyanis az így bevezetett új bázisfüggvényeket választjuk az LCAO módszer közelítő függvényeinek, a H_{ij} és S_{ij} integrálók közül zérusak lesznek azok, amelyek különböző irreducibilis előállításához, ill. ugyanazon típusu irreducibilis előállítás különböző sorához tartozó függvényekkel vannak képezve. Ebből következőleg a szekuláris determináns is egyszerűbb alakot vesz fel, mert több elemének eltünése miatt szétesik alacsonyabbrendű determinánsok szorzatára.³

5. A komplexion szimmetriacsoportja és kiredukálás

Vegyünk fel egy jobb-sodrásu koordinátarendszert, amelynek középpontja legyen a két oktaéder közös élén, z tengelye menjen át az az oktaéderek középpontjain, az x tengely pedig essék egybe a közös éllel. A molekula a következő operációkkal vihető át önmagába: identikus operációval; az x, y, z tengely körüli 180° -os forgatással; a koordinátarendszer origóján való tükrözéssel; az x, y, z tengely körüli 180° -os forgatás, majd a koordinátarendszer origóján való tükrözés segítségével.

Ezekből az elemekből álló szimmetriacsoportot D_{2h} -val szokás jelölni.⁴

Irodalmi adatok szerint⁵ az NH_3 molekulák a Co ionoktól 1,92 Å, az OH gyökök pedig 1,88 Å távolságra helyezkednek el. Ezen eltérés miatt nem állja meg a helyét az az elképzelés, hogy a komplex kettős-oktaéderszimmetrikus, ezért a következőképpen kell módosítani a komplex térbeli elrendeződésére vonatkozó elképzelést. Az O-atomok 1,88 Å távolságra vannak a Co-ionoktól, ebből kifolyólag közelebb kerülnek egymáshoz. Az oktaéderek szempontjából ez azt jelenti, hogy a két oktaéder a közös él mentén egymásba csúszik és az OH gyökök nem a közös él végpontjain, hanem néhány század Å-mel beljebb helyezked-

nek el. Könnyen belátható hogy ez a geometriai alakzat is ugyanazokkal a szimmetriatulajdonságokkal rendelkezik, mint a kettős-oktaéder, így a kettős-oktaéderre végzett megfontolások erre is érvényesek.

A kiindulásul választott 30 atomi pályát tekintsük az $L^2(R)$ egy 30 dimenziós alterének. Az R konfigurációs tér a közönséges háromdimenziós tér. Első feladat a D_{2h} szimmetriacsoport reducibilis előállításának meghatározása az $L^2(R)$ fenti 30 dimenziós alterében, - amelyet jelöljünk Γ -val - amelyhez meg kell állapítani a $P(g)$ indukált operációk hatását a kiindulási függvényekre. Ezek ismeretében a 30 dimenziós alter kiredukálható, amelynek végeredménye a szokásos⁴ előlölésekkel:

$$\Gamma = 7A_{1g} + 7B_{1u} + 4 B_{2g} + 4 B_{3u} + 3 B_{2u} + 3 B_{3g} + B_{1g} + A_{1u}$$

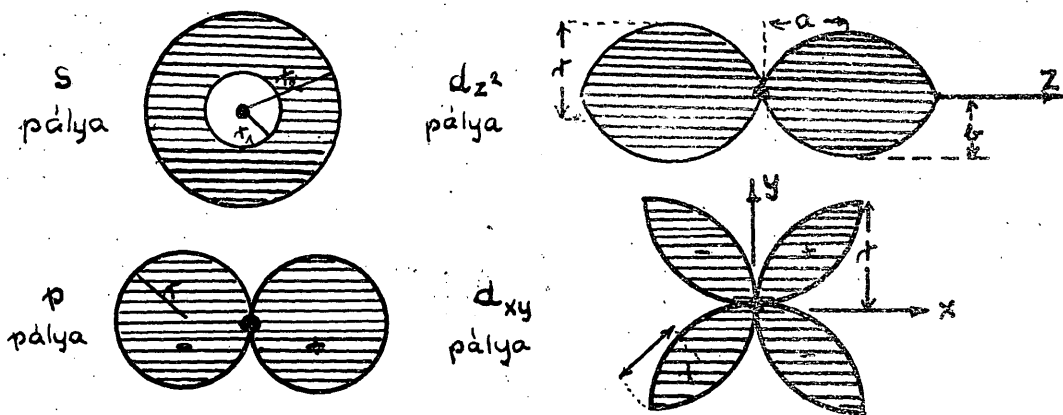
Ezen altereket kifeszítő új bázisfüggvényeket közelítő függvényeknek választjuk, így a további feladat a szekuláris determinánsban szereplő integrálok kiszámítása.

6. S_{ij} és H_{ij} típusu integrálok

Az eddigi megfontolások során több-kevesebb önkénnyel bíró közelítéssel dolgoztunk. Éppen ezért az S_{ij} ún. átfedési integrálok meghatározására is célszerű lenne egy jól használható közelítő módszert alkalmazni. Ez a közelítő módszer a következőképpen adható meg.²

Az atomi pályáknál egy meghatározott geometriai alakzaton belül a hullámfüggvény értéke legyen konstans, azon kívül pedig mindenütt zérus.

S típusu pályát egy gömbhéjjal reprezentálunk, amelynek középpontjában az atommag van. p típusu atomi pályát két, egymást az atom magjában érintő gömbbel írunk le. d_{z^2} típusu atomi pálya egy kettős, csúcsokban a magnál érintkező szivaralak, amelyeket egy körívvel határolt forgástest hoz létre. A forgástengely a z tengely. d_{xy} típusu atomi pályákat az x, y síkban két egymásra merőlegesen elhelyezett d_{z^2} típusu atomi pályából építünk fel. $d_{x^2-y^2}$ típusu atomi pályát a d_{xy} típusu atomi pályából 45° -os forgatással nyerjük (1 ábra).



1. ábra

Az ábrákon a geometriai testek jellemző adatai is felvannak tüntetve, amelyek értékeit Å-kben az 1. táblázat tartalmazza.

	rádiuszok				
	2p	3d _{z²}	3d _{xy}	4s	4p
Co	-	0,6569	1,0756	0,6819 2,1536	1,4205
O	0,4650	-	-	-	-
N	0,5427	-	-	-	-

1. táblázat

Az adatok egy része az irodalomban megtalálható², az O- és N-atomok 2 p pályáinak adatait azonban számolni kellett. A számolást egy Slater-féle radiális eloszlás⁶ alapján nyerhető formula² felhasználásával lehet elvégezni.

Tehát a hullámfüggvények értékeit a geometriai alakzatokon belül konstansnak vesszük, amely konstans meghatározására vegyük figyelembe

a normálási feltételt :

$$\int_V \psi^2 dv = \psi^2 \int_V dv = \psi^2 \cdot V = 1.$$

Igy :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{V}}$$

Az átfedési integrálok pedig az

$$\int_{V_i \cap V_j} \psi_i \psi_j dv = \psi_i \psi_j \int_{V_i \cap V_j} dv = \psi_i \psi_j (V_i \cap V_j)$$

kifejezéssel számíthatók, ahol $V_i \cap V_j$ a térnek az a része, ahol sem a ψ_i , sem a ψ_j nem tűnik el, azaz a j-edik és az i-edik hullámfüggvényt reprezentáló geometriai test közös része. Így az átfedési integrálok számítása térfogatszámításra redukálódik.

A H_{ij} integrálok értékeül a megfelelő atomi pályákról való ionizációs energiát fogadjuk el. A Co 4s pályájáról - 7.84 eV, 4p6 pályáiról -4.08 eV, 3d pályáiról -9.38 eV, az N 2p6 pályájáról - 13.81 eV, az O-nál pedig a 2p6 pályáról -11.24 eV értéket veszünk figyelembe^{7,8}.

A H_{ij} típusu integrálok számítására Wolfsberg és Helmholtz formuláját⁹

$$\mathcal{H}_{ij} = F_x \mathcal{J}_{ij} \frac{\mathcal{H}_{ii} + \mathcal{H}_{jj}}{2}$$

használjuk, ahol \mathcal{J}_{ij} a megfelelő atomi pályákból alkotott átfedési integrál, F_x variációs paraméter. F_x értéke σ típusú kötésekre 2.20, π típusú kötésekre 2.65.

7. Elektronenergiák

A 30 dimenziós tér kiredukálásának megfelelően a szekuláris determináns szétesik 2 heted-, 2 negyed-, 2 harmad-, valamint 2 elsőrendű determináns szorzatára. Ezekből a determinánsokból közvetlenül az MO-k energiáit nyerjük, amelyeket eV-okban a 2. táblázat tartalmaz.

A_{1g}	B_{1u}	B_{2g}	B_{3u}	B_{2u}	B_{3g}	B_{1g}	A_{1u}
-4,311	8,327	3,896	-4,104	-4,115	-3,993	-9,338	-9,338
-7,934	-3,418	-8,296	-8,094	-9,380	-5,388	-	-
-8,920	-8,659	-12,154	-11,565	-13,811	-13,811	-	-
-9,674	-10,901	-14,691	-14,474	-	-	-	-
-12,140	-11,636	-	-	-	-	-	-
-14,166	-14,193	-	-	-	-	-	-
-14,435	-14,571	-	-	-	-	-	-

A Pauli-elv figyelembevételével az elektronokat a legalacsonyabb nivókra helyezve, valamint tekintetbe véve az un. kiválasztási szabályokat, – amelyek megadják, mely irreducibilis alterek közt lehetséges átmenet- kiszámíthatók a megengedett átmenetek hullámszámértékei. Ezeket a 3. táblázat tartalmazza cm^{-1} -ben.

5817	12 748	23 939	29 296	40 898	43 464	44 940	48 103
8189	15 983	26 375	29 169	41 568	44 246	45 594	48 668
8746	21 018	26 948	32 644	42 479	44 432	46 925	48 991
10 376	21 341	28 086	32 757	42 544	44 811	47 417	49 846
11 667	21 913	28 199	39 461	42 568	44 852	47 579	50 475

3. táblázat

K o n k l u z i ó : A komplexion kloridjának abszorpciós görbéjével¹⁰ való összehasonlítás alapján megállapítható, hogy a számított eredmények összhangban vannak a tapasztalattal.

A számolások során egyértelműen kiderült, hogy a komplexben szereplő Co(IV) ionok között kölcsönhatás lép fel. Az átmenetekből számított hullámszámértékek alapján pedig megállapítható, hogy a komplex 200 $\text{m}\mu$ és 2000 $\text{m}\mu$ között gyakorlatilag teljesen abszorbeál.

In dieser Arbeit werden die Energien der Elektronen eines zweikernigen Komplexions mit der Methode MO-LCAO behandelt. Die sekulare Gleichung des Problems lassen sich auf Grund der Gruppentheorie sehr vereinfachen. Bei den Berechnungen der Überlappungsintegrale und der Hamiltonintegrale war es zweckmässig Näherungsmethode anzuwenden. Die Resultate stimmen mit den empirischen Daten gut überein.

I r o d a l o m

1. Szabó Zoltán : Válogatott fejezetek a modern szervetlen kémiából (Tankönyvkiadó, Bp., 1959)
2. Gilde Ferenc : Disszertáció, Szeged, 1958
3. E. Wigner : Gruppentheorie und ihre Anwendung (Vieweg Ges., Bra. 1931)
4. L. Landau, E. Lifšic : Kvantovaja mehanika (Ogiz, Moskva, 1943)

5. L. Pauling : The Nature of the Chemical Bond (Cornell Univ. Press, New York, 1939)
6. H. Hartmann : Theorie der Chemischen Bindung (Springer, Berlin, 1954.)
7. Landolt, Börnstein : Zahlenwerte und Funktionen, Atom und Molekularphysik I. rész (A. Eucken szerkesztésében, Berlin, 1950)
8. R. S. Mulliken : J. Chem. Phys. 2, 792, 1934.
9. M. Wolfsberg, L. Helmholtz : J. Chem. Phys. 20, 837, 1952.
10. Császár József magánközleménye.

ENERGIAVÁNDORLÁSI VIZSGÁLATOK A KONCENTRÁCIÓS DEPOLARIZÁCIÓ ALAPJÁN FLUORESZCEIN OLDATOKNÁL

Barta Judit és Farkas Éva
IV. évf. kémia-fizika szak

KISÉRLETI FIZIKAI INTÉZET

Az energiovándorlás jelensége –amelynek egyik megnyilvánulása a lumineszcencia koncentrációs depolarizációja –egyre nagyobb mértékben felkeltette a fizikusok, fizika-kémikusok és újabban a biokémikusok figyelmét is.

Mind a fizikában, mind a kémiában és a biológiában nagy szerepet játszanak azok a folyamatok, amelyekben az energia az egyik molekuláról átmegy a másikra. Ennek a jelenségnek igen nagy szerepe van a szcintillációs számlálóknál, amelyek egy részénél a nagy energiájú sugárzásból az energiát az oldószer molekulák veszik fel, majd átadják az oldott molekuláknak és az utóbbiak bocsátják ki szcintilláció formájában. Energiavándorlási folyamat játszik szerepet a biológiai szempontból annyira fontos fotoszintézisnél és az idegekben az ingerként szereplő energia is a molekulák egy során fut végig.

Az említett jelenségek bármelyikéből lehetne következtetéseket levonni az energia-vándorlás törvényszerűségeire vonatkozólag. A koncentrációs depolarizáció tanulmányozása azért látszik előnyösnek, mert viszonylag könnyen megvalósítható kísérleti vizsgálatokat igényel.

A koncentrációs depolarizáció és az energiovándorlás kapcsolatáról.

El Weigert már 1920-ban kimutatta, hogy izotróp viszkozus festékkoldatok lineárisan poláros fényvel gerjesztve parciálisan poláros fényt emittálnak. A polarizációs fok

$$p = \frac{J_{\parallel} - J_{\perp}}{J_{\parallel} + J_{\perp}}, \quad (1)$$

ahol az I_{\parallel} ill. I_{\perp} az emittált fénynek a gerjesztő fény elektromos vektorának irányával párhuzamos ill. arra merőleges elektromos vektorához tartozó intenzitásokat jelentik.

Elméleti számítások szerint a p - bizonyos feltételek fennállásában esetén maximálisan 0.5 lehet². Ezt az értéket elvileg végtelen viszkozitású és nulla koncentrációjú oldatokban lehetne csak elérni, mert különböző, a polarizációs fokot csökkentő, depolarizáló hatás létezik. Az egyik ilyen depolarizáló hatás a koncentráció növekedése. A koncentráció növekedéssel bekövetkező polarizációs fok csökkenést koncentrációs depolarizációnak nevezik.

Szemléletesen a koncentrációs depolarizáció a következőképpen értelmezhető. Fényelnyelés és fénykibocsátás szempontjából a molekulákat lineáris oszcillátoroknak lehet tekinteni. A lineáris oszcillátoroknak izotróp oldatokban egy teljesen rendezetlen halmaza van jelen. Lineárisan poláros fényvel besugározva az oszcillátoroknak ezt a rendszerét a kibocsátott fény polarizációs foka 0.5 lenne, ha valóban ez a fény kerülne megfigyelésre.

Tekintettel arra, hogy az oldatoknál az abszorpciós és az emissziós szinképek metszik egymást fennáll annak a lehetősége, hogy egy A molekula által kibocsátott fényt egy másik, ugyanolyan fajta B molekula elnyelje, mielőtt ez a fény megfigyelésre kerülne és megfigyelésre az említett B molekula részéről kibocsátott másodlagos fény kerül. A B molekula által emitált fényt, a szekundér lumineszcenciát kísérletileg jól lehet észlelni, elméletileg is számításba lehet venni és ennek számos lumineszcencia jelenségnél fontos szerepe van.³ Mivel a B molekula az A-val nem szükségképpen párhuzamos érthető, hogy a reabszorpciót követő szekundér lumineszcenciának a primer lumineszcenciával való együttes észlelése kisebb polarizációs fokot eredményez, mint az említett 0.5. A koncentráció növekedésével a reabszorpció lehetősége megnő, tehát megnő a depolarizáció is. A reabszorpció és a szekundér lumineszcencia azonban egyedül nem magyarázza meg a koncentrációs depolarizációval kapcsolatban nyert kísérleti eredményeket. A 2. ábrán bemutatott kísérleti

eredményekből is látszik, hogy a szekundér lumineszcenciára vonatkozólag elvégzett korrekció után is marad koncentrációs depolarizáció. Éppen ezért az említett szekundér lumineszcencia mellett még fontosabbnak látszik a koncentrációs depolarizáció létrehozásában az a jelenség, amely abban áll, hogy a gerjesztett és gerjesztetlen oszcillátorok között az energia több molekulányi távolságból, rezonanciás kölcsönhatás útján is átmehet. A gerjesztési energiának ezt a rezonanciás átadását nevezik energiavándorlásnak. Az energiavándorlás révén az A molekuláról a B-re átjutott energia fény alakjában a B molekula részéről kerülhet kibocsátásra és ennek a depolarizációként való jelentkezése éppugy érhető, mint a szekundér lumineszcencia esetében. A koncentrációs depolarizációnak ezt az energiavándorlásos elméletét F. Perrin vetette fel és az elmélet kifejlesztéséhez jelentősen hozzájárult S. I. Vavilov, Th. Förster, valamint M. D. Galanyin^{4,2}.

A koncentrációs depolarizáció Förster-féle elméletében becslést találunk arra nézve, hogy az energiaátadás valószínűsége a fluoreszcencia valószínűségével már akkor is egyenlővé válik, amikor a molekulák a ~~környék~~ radiuszuktól jóval távolabb, fluoreszcenciakörnyék kerekén 50 Å távolságban vannak. Ez a kritikus molekula-távolság:

$$R_0 = \sqrt[3]{\frac{9 \kappa (\ln 10)^2 c \tau J_{\bar{\nu}}}{16 \pi n^2 N^2 \bar{\nu}_0^2}} \quad (2)$$

ahol κ a két molekula kölcsönös orientációjától függő, dimenzió nélküli konstans, nagyságrendje 1; n a közeg törésmutatója; c a vakuumban fénysebesség; τ a közepes élettartam; $N = 6.02 \cdot 10^{20}$ a molekulák száma 1 millimolban; $\bar{\nu}_0$ a hullámszám az abszorpció és emisszió maximumok középértéke cm^{-1} -ben; $J_{\bar{\nu}} = \int \epsilon(\bar{\nu}) \epsilon(2\bar{\nu}_0 - \bar{\nu}) d\bar{\nu}$ az abszorpció spektrumának a tükörképével való szorzatintegrálja a hullámhosszkálán és $\epsilon(\bar{\nu})$ a moláris dekadilius extinkciós koefficiens. A szorzatintegrál az abszorpció és emisszió spektrum átfedési területének a mértéke.

Azt is kiszámította Förster, hogy két ugyanolyan fajta A és B molekula között a rezonanciás energiaticserélődés valószínűsége az

R_{AB}^6 -től, a két molekula távolságának a 6. hatványától függ.

Érthető tehát, hogy a kritikus molekula-távolság pontos meghatározásának az energiavándorlás szempontjából nagy jelentősége van. Ez a távolság a koncentrációval is kifejezhető. Förster fluoreszcein vizes oldatánál a kritikus koncentrációra

$$c = 3 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l} \text{ -t adott meg.}$$

az R_0 pedig 50 \AA -nek adódott. Az R_0 kiszámítása a fenti formula alapján nehézségekkel jár, mert a legtöbb anyagnál nem ismeretesek kellőképpen azok az adatok, amelyek a számítások elvégzéséhez szükségesek.

Ez vezette Bojarskit és Kawskit egy olyan összefüggés levezetésére, amelyből a koncentrációs depolarizáció kísérletileg felvett görbéje alapján a kritikus molekula-távolság igen egyszerűen kiszámítható.⁵ Az említett szerzők megállapították, hogy a $c=0$ koncentrációra extrapolált p_0 polarizációs fok és a c_0 kritikus koncentrációhoz tartozó, közvetlenül mért p polarizációs fok között a következő egyszerű összefüggés van:

$$p = \frac{3p_0}{6 - p_0} \quad (3)$$

Ha tehát a koncentrációs depolarizációs görbéből a fenti formula alapján kiszámított p -hez megkeressük a c -t, éppen a c_0 -t adja. Ha n az 1 cm^3 -ben lévő festékmolekulák számát jelenti ennél a $c = c_0$ koncentrációnál, akkor a kritikus molekula-távolság

$$R_0 = \sqrt[3]{\frac{3}{4\pi n}} \quad (4)$$

Bojarski és Kawski, Feofilov és Szvesnyikov mérési adataiból R_0 -ra 55 \AA -t kaptak, a $c_0 = 2,4 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$ volt.

Ha a (3) és (4) formula felhasználásával a különböző koncentrációs depolarizációs görbék alapján határoznánk meg R_0 értékét a következő eredményekre jutnánk: Vavilov adataiból $R_0 = 76 \text{ \AA}$, Clauchois méréseiből $R_0 = 34 \text{ \AA}$, saját mérések alapján $R_0 = 57 \text{ \AA}$. Azt gondoljuk, hogy a helyes érték ez az utóbbi lehet, amely egyébként nagyon közel áll mind a Förster, által, mind a Bojarski és munkatársai által nyert értékhez.

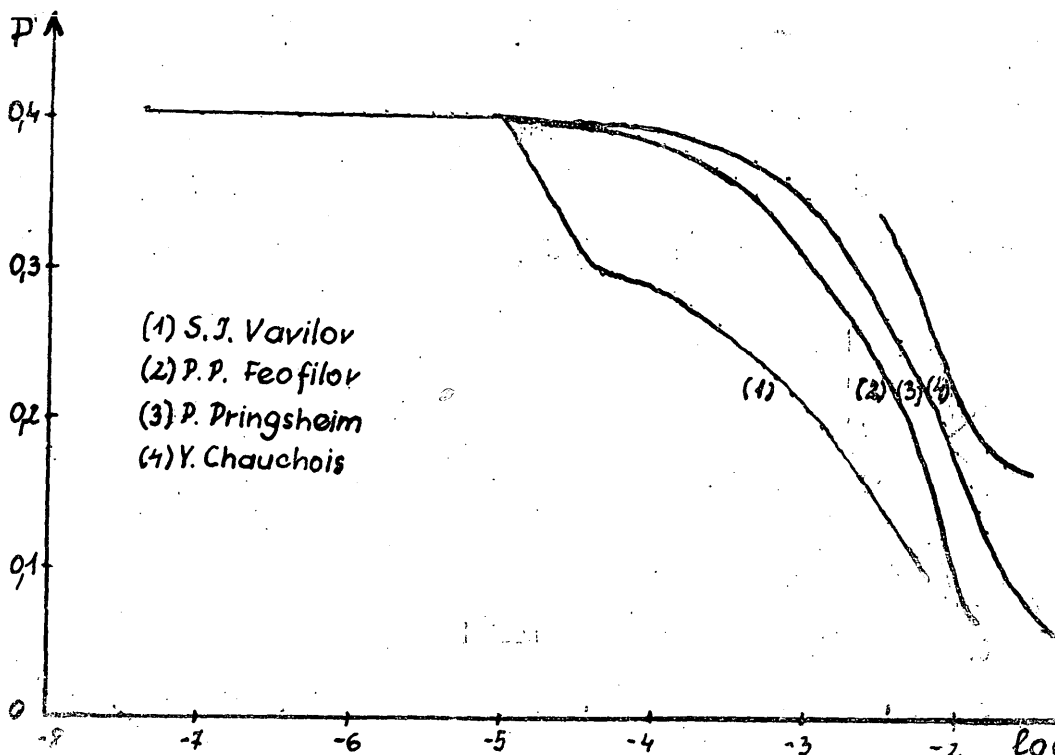
Minthogy az R_0 ilyen módon való meghatározásához a koncentrációs

depolarizáció: kísérletileg felvett görbéje szükséges és az irodalmi adatok szerint az eddig felvett ilyen görbék jelentősen eltérnek, szükségesnek látszott a koncentrációs depolarizáció görbéjének újbóli felvétele.

Kísérleti vizsgálatok.

Az 1. ábrán bemutatjuk a fluoreszcein esetében eddig végzett vizsgálatok eredményét. Ha összehasonlítjuk Vavilov⁶ Chauchois⁷ Gaviola és Pringsheim⁸, továbbá Feofilov és Szvesnyikov⁹ mérései alapján felrajzolt koncentrációs depolarizációs görbéket, akkor azonnal szembetűnik, hogy a görbék igen jelentősen eltérnek. Ennek legfőbb oka abban keresendő, hogy a régebbi méréseknél a szekunder lumineszcenciát általában nem vették figyelembe, a polarizációs méréseket kevésbé pontos vizuális módszerrel végezték és azt sem vették figyelembe, hogy a gerjesztő fény hullámhosszától is függ.

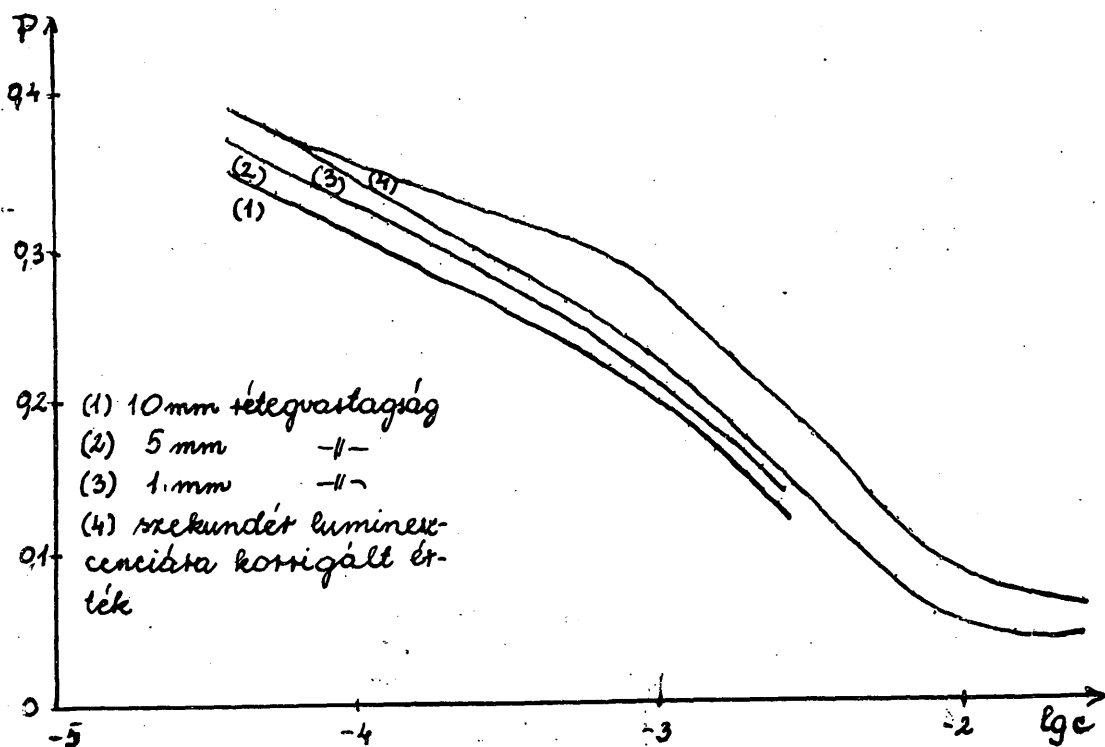
Saját méréseink eredményét mutatjuk be a 2. ábrán. A polarizációs fokot a fluoreszcein 93 %-os glicerines oldatában 436 m μ -os gerjesztőssel vettük fel, az oldatban levő 3 % NaOH-dal biztosítottunk olyan közegot, hogy észlelésre a fluoreszcein kétszeres negatív töltésű anionjának világitása kerüljön.



A polarizációs fokot fotoelektromos berendezéssel mértük meg¹⁰, a preparátum hőmérsékletét ultratermosztát segítségével 0.1 fok pontossággal 30.0°C hőmérsékleten mértük meg. Az ábrán látható alsó három görbe három különböző rétegvastagság esetén mért értékek alapján készült, a legmagasabban futó görbe a rétegvastagságtól független, a szekunder lumineszcencia szempontjából elvégzett korrekció után nyert koncentrációs depolarizációs görbe. A szekunder lumineszcenciára való korrekciót a 3-ban leírt módon végeztük.

Következtetések.

Az általunk nyert R_0 14 % kal nagyobb, mint a Förster által megadott. Az eltérés nem tulajdonítható mérési hibának, mert a formulaiban szereplő mennyiségek általában 2 % nál kisebb hibával határozhatók meg.



2 ábra

Arra a következtetésre kell tehát jutnunk, hogy glicerin oldatokban a rezonanciás energiaátadás valós zsinüskéje jelentősen kisebb (figyelembe 30.

kell ugyanis vennünk, hogy a rezonanciás energiaátadás valószínűsége az elmélet szerint az R_0 6. hatványával fordítva arányos.).

Az az érdekes probléma, hogy az energiaátadás valószínűsége az oldószer milyen fizikai sajátságaitól függ, további vizsgálatok tárgyát képezhetné és ezekből a vizsgálatokból felvilágosításokat lehetne remélni, az oldószer és az oldott molekulák közötti kölcsönhatásra vonatkozóan is.

Barta-Farkas. Investigations of the energy migration based on the concentration depolarization at fluorescein solutions.

The true concentrational depolarization of fluorescein solutions measured by means of a photoelectric method was compared with the critically evaluated earlier experimental results and was applied for the calculation of the critical distance, R_0 , characteristic for the energy migration. R_0 was found to be 57 Å.

I r o d a l o m

1. F. Weigert, Verh. dtsh. Physikal. Ges. 23, 100, 1920.
2. Th. Förster, Fluoreszenz organischer Verbindungen, Vandenhoeck Ruprecht, Göttingen, 1951, 163. old.
3. Budó A., Magyar Fizikai Folyóirat, 9, 269, 1961.
4. S. I. Vavilov, A fény mikrostrukturája, Akadémiai Kiadó, 1955, 117. o.
M. D. Tancsics; M. szer. u. meop. fiz., 21, 126, 1951.
5. C. Bojarski, A. Kawski, Ann. Phys., 5, 31, 1959
6. S. I. Vavilov : Zs. E. T. F., 13, 13, 1943.
7. Y. Chancois, I. chim. physique 27, 339, 1930
8. E. Gaviola, P. Pringsheim : Z. Phys., 24, 24, 1924
9. P. P. Feofilov, B. J. Szvesnyikov : *M. szer. u. meop. fiz., 10, 1372, 1940.*
10. Ketskemély I., Szalay L., Magyar Fizikai Folyóirat, 4, 115, 1956.



A SZEKUNDÉRLUMINESZCENCIA AGRANOVICS-FÉLE ELMÉLETÉVEL KAPCSOLATOS SZÁMITÁSAINKRÓL

Arlett L., Bálint E., Borbély M., Leopold J., Mayer I.

IV. évf. mat-fiz. szak

KISÉRLETI FIZIKAI INTÉZET

A molekuláris lumineszcencia tanulmányozásánál - mint az utóbbi években végzett vizsgálatok mutatják - nem elég a gerjesztő fény által közvetlenül létrehozott ún. primér fluoreszcenciát figyelembe vennünk, hanem a számításoknál figyelemmel kell lennünk a primér fluoreszcencia által gerjesztett szekundér fluoreszcenciára, sőt a terciér, quaternér fluoreszcenciára is. Míg azonban a primér fluoreszcenciát általában irányított, sőt közel párhuzamos fénynyalábbal gerjesztjük, a szekundér és a «magasabbrendű» fluoreszcenciákat a divergens fluoreszcencia-nyalábok elnyelődése váltja ki, és ezért a kérdés matematikai szempontból igen bonyolult. A szekundérlumineszcencia elméleti tanulmányozása ez utóbbi okból kifolyólag csak 1950-ben, Galanin kutatásaival vette kezdetét. Galanin erősen egyszerűsítő feltételek bevezetésével egy formulát vezetett le a szekundér és a primér fluoreszcencia κ intenzitás-viszonyára vonatkozólag. Ennek a Galanin-féle formulának alkalmazhatósági területe meglehetősen korlátozott, de az elméletet lényegesen továbbfejlesztették és kísérletileg ellenőrizték Budó és munkatársai¹ úgy, hogy ha a primér, szekundér terciér stb. lumineszcenciák intenzitásait egy geometriai haladvány tagjainak tekintjük, akkor az általuk megadott összefüggések alapján kiszámított κ birtokában a lumineszcencia teljes intenzitását a molekuláris lumineszcencia-jellemzők alapján ki lehet számítani.

Abban az esetben mármint, ha a vizsgált lumineszcens oldat vagy vagy molekuláris kristály rétegvastagsága, vagy az oldat koncentrációja

nagy, kérdésessé válhat, hogy az előbb említett geometriai haladvánnyal való közelítés pontossága megfelelő-e. Különösen a molekuláris kristályok esetében merülhet fel ez a kérdés, mert ezeknél a luminoforoknál az abszorpciós koefficiens és ezzel együtt κ is igen nagy értékű, még viszonylag kis rétegvastagságok esetén is. A molekulakristályokra vonatkozólag 1959-ben Agranovics és munkatársai² dolgozott ki egy elméletet. Ez az elmélet, amint ezt be lehet látnunk, inkább a nagykoncentrációjú oldatokra alkalmazható. Az Agranovics-féle elmélet leglényegesebb eredménye a következőben foglalható össze.

Tegyük fel, hogy a $k(\lambda)$ abszorpciós koefficienssel, $f(\lambda)$ fluoreszcenciaspektrummal, valamint $\eta(\lambda)$ kvantumhatásfokkal jellemzett fluoreszkáló közeg (oldat, ill. molekulakristály) a gerjesztő fénysugarak irányára merőleges síkokkal határolt félteret teljesen kitölti, továbbá, hogy a monokromatikus gerjesztő fény intenzitása egységnyi, azaz 1 sec alatt a felületegységen 1 gerjesztő foton halad át. Az Agranovics-féle elmélet szerint a besugárzott felületre merőleges irányban való megfigyelés esetén a fluoreszcencia spektrális felületi fényessége - kvantumáramban kifejezve -

$$B(\lambda) = \frac{f(\lambda)}{4\pi} \eta \alpha R(\alpha, \beta), \quad (1)$$

ahol $\alpha = \frac{\bar{k}}{k_{max}}$, \bar{k} jelenti a gerjesztő fény hullámhosszára vonatkoztatott abszorpciós koefficiens; $\beta = \frac{k(\lambda)}{k_{max}}$ az η hatásfokot pedig itt szintén a gerjesztő fény hullámhosszára vonatkoztatjuk. Az (1) egyenletben szereplő $R(\alpha, \beta)$ függvényi az Agranovics-féle elmélet szerint:

$$R(\alpha, \beta) = \frac{\varphi(\frac{1}{\alpha})\varphi(\frac{1}{\beta})}{\alpha + \beta} \quad (2)$$

az itteni φ függvény pedig a

$$\varphi(x) = 1 + \frac{x}{2k_{max}} \int_0^{\infty} f(\lambda)\eta(\lambda)k(\lambda) \left[\int_0^{\frac{1}{x+y}} \frac{\varphi(y)\varphi(y)}{x+y} dy \right] d\lambda \quad (3)$$

integrálegyenletnek tesz eleget. A $B(\lambda)$ spektrális fluoreszcencia-intenzitás kiszámításához tehát a φ függvény iterációs uton való meghatározására van szükség. Numerikus számításaink célja az volt, hogy e számítási módszer célszerű voltáról meggyőződjünk, mégpedig úgy, hogy az ezen « φ »-elmélet» és a korábban említett « κ »-elmélet» eredményeit

összehasonlitsuk. Munkánkat megkönnyítette az a körülmény, hogy a vizes fluoreszcein oldatra vonatkozó fluoreszcencia-jellemzőket és egy eléggé nagy rétegvastagságra vonatkozólag, ugyancsak a fluoreszceinre kiszámított κ függvény értékeit Kísérleti Fizikai Intézetünkben rendelkezésünkre bocsátották. Így alkalom nyílt a (2) egyenletben szereplő, általunk kiszámított $\varphi\left(\frac{1}{\alpha}\right) \varphi\left(\frac{1}{\beta}\right)$ szorzatnak az $\frac{1}{1-\kappa(\alpha, \beta)}$ függvénnyel való összehasonlítására. Számításainknál a (3) egyenletben szereplő integrációkat grafikusán, polárplaniméterrel hajtottuk végre, és hogy az iterációk eredményeként adódó $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ függvények konvergenciájának gyorsaságáról meggyőződünk. 0-adik közelítésben $\varphi_0(x) \equiv 1$ -et helyettesítettünk.

1. ábránk mutatja a $\varphi(x)$ függvény menetét különböző közelítésekben. Látható, hogy x kisebb értékeire, ami fizikailag a nagyobb abszorpciós koefficienseknek felel meg φ_4 igen közel fut φ_5 -hoz. Az igen kicsiny abszorpciós koefficiensek esetén azonban φ_4 és φ_5 között még észrevehető - habár nem jelentős - különbség áll fenn. Az $x \approx 100$ tartományban tehát az eléggé hosszadalmas számítást még tovább kellene folytatnunk ahhoz, hogy φ -t 1%-nál nagyobb pontossággal megkaphassuk.

A 2. ábra a $\beta = \frac{k(\lambda)}{k_{\max}}$ abszorpciós spektrumot és a $\Phi_1 = \frac{1}{1-\kappa}$ valamint a $\varphi\left(\frac{k_{\max}}{k(\lambda)}\right)$ és $\Phi_2 = \varphi_2\left(\frac{1}{\alpha}\right) \varphi_5\left(\frac{1}{\beta}\right)$ függvényeket mutatja a λ hullámhossz függvényében. Ámint látható, Φ_1 és Φ_2 eltérése nem haladja meg az 1%-ot, az Agranovics-féle számítási eljárás tehát, legalábbis az ötödik közelítésben, igen jó eredményt szolgáltat.

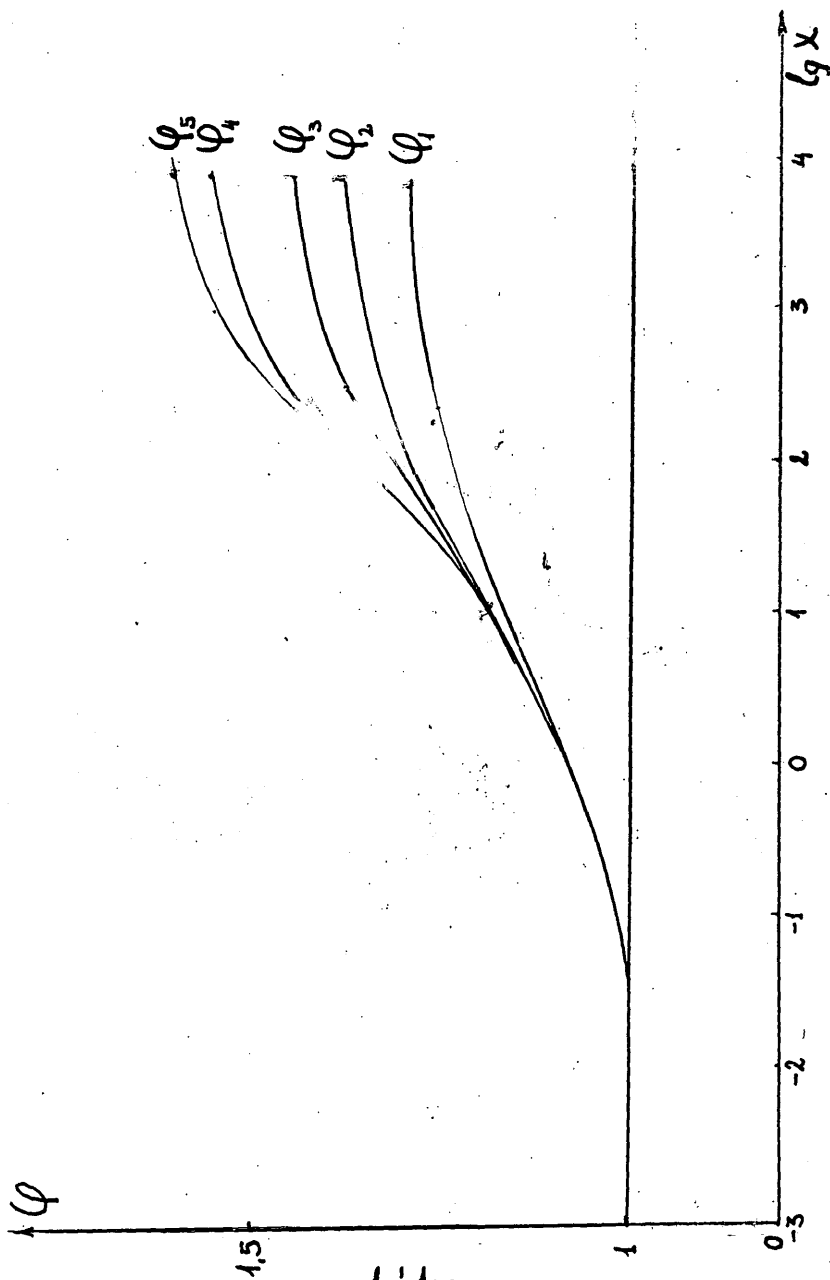
Zusammenfassung

Es wurden numerische Berechnungen zwecks Prüfung der Agranowitschen Theorie der Sekundärfluoreszenz durchgeführt. Die für die Intensität der Sekundärfluoreszenz charakteristische Funktion wurde in der fünften Näherung berechnet und die Ergebnisse unserer Berechnungen wurden mit den früher, auf andere Weise gewonnenen Resultaten von Budó und Ketskeméty verglichen. Es ergab sich dabei, dass die Agranowitsch'sche Methode zwar kompliziert, doch wenigstens für den Fall der Lösungen gut anwendbar ist.

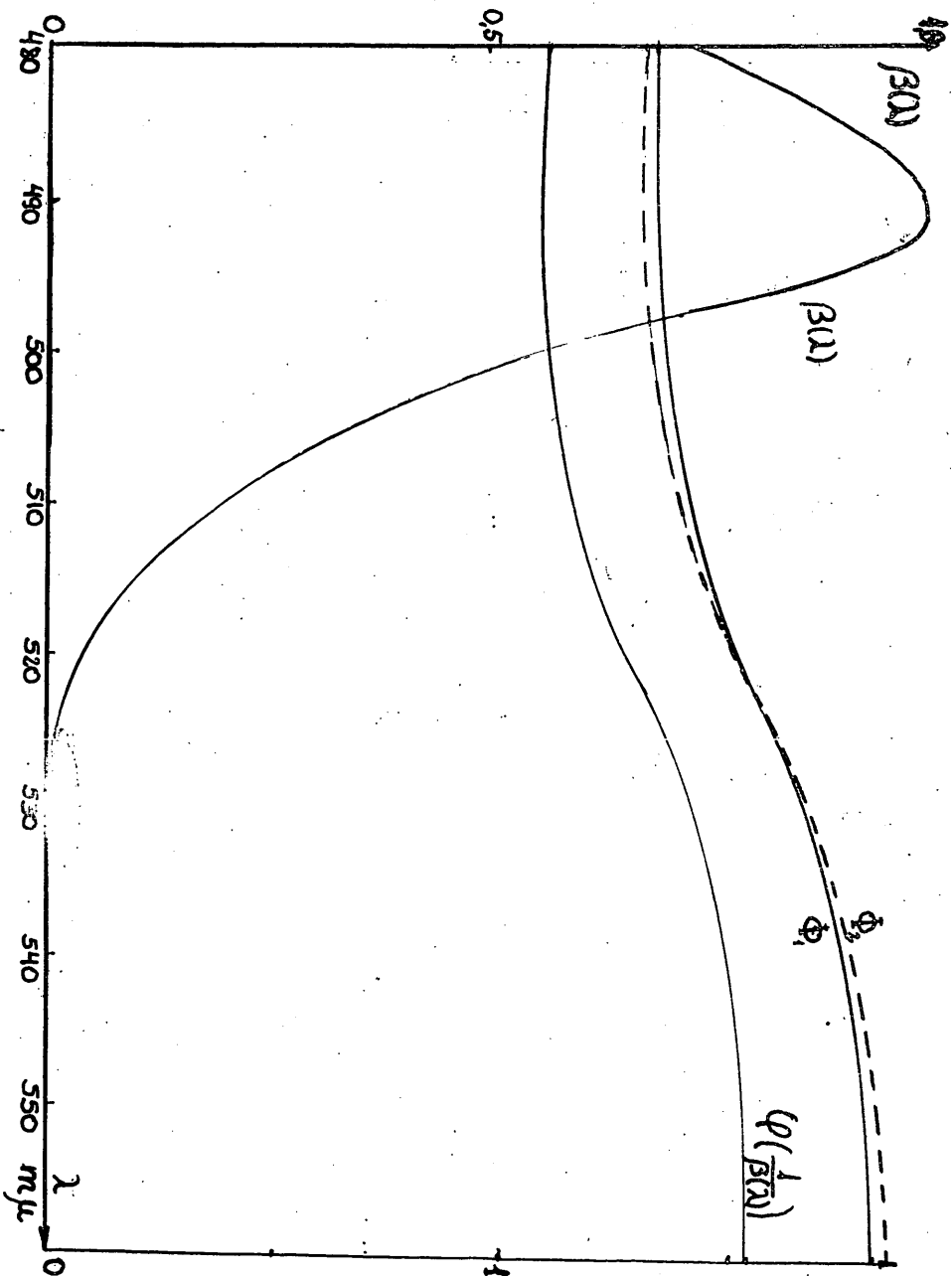
I r o d a l o m

1. A. Budó und I. Ketskeméty : Acta Phys. Hung. 7 , 207 (1957).

2. B. M. **Вирахович** : Изв. АН СССР, серия физ., 23, 40 (1959).



1. ábra



2. ábra

ASSZOCIÁCIÓ VIZSGÁLATA AROMÁS AZOMETINEKNÉL
ELEKTRONGERJESZTÉSI ELNYELÉSI SZINKÉP ALAPJÁN

Szirovicza Lajos

V. évf. vegyész

ÁLTALÁNOS ÉS FIZIKAI KÉMIAI INTÉZET

Bizonyos vegyületeknél a kémiai sajátságokat csak úgy lehet értelmezni, ha feltételezzük, hogy ezek molekulái között, vagy a molekulán belül olyan kötések vannak, amelyek kialakításában a H - atom vesz részt. Ezen vegyületek gőznyomása, oldhatósága, megfelelő oldószerekben az asszociációképzési hajlam, ultraibolya, és különösen infravörös spektruma jellemző.

Már a múlt század végén megállapították, hogy a hidroxil-csoportot tartalmazó vegyületek gőz állapotban, valamint apoláros oldószerekben asszociálva vannak, míg a hidroxilmentes származékaik nem mutatnak ilyen jelenségeket. Azt is észrevették, hogy OH-csoportot tartalmazó anyagok egyes oldószerekben erősen, másokban nem, vagy csak kis mértékben asszociálódnak. Pl. NERNST¹ 1891-ben azt találta, hogy a benzoélsav a poláros vízben nem asszociál, az apoláros benzolban viszont kettős molekulákká asszociál.

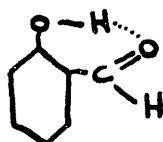
AUWERS² azt tapasztalta, hogy az NH-kötések az asszociációt szintén elősegítik.

Ekkor még az asszociációt a régi kötéselmélettel nem tudták értelmezni.

Később a WERNER³ féle koordinációs elmélettel magyarázták a hidrogénnek, mint kötést létrehozó atomnak a szerepét. A hidrogént mint koordinatív kötésben résztvevő atomot képzeltek el. PFEIFFER, MOORE, WINMILL és HANTZSCH⁴⁻⁶ a hidrogénnek mellékvegyértéket tulajdoni-

tottak és feltételezték, hogy a hidrogénatom megfelelő feltételek mellett belső komplexeket is képezhet.

PFEIFER^{7,8} feltételezte, hogy a szalicilaldehid molekulában az orto helyzetű OH gyök hidrogénje és az aldehid csoport oxigénje között koordinatív kötés jön létre :



1915-ben SIDGWICK⁹, 1919-ben HUGGINS¹⁰ a kötést elektronszerkezeti alapon magyarázta. Ennek az elméletnek az alapjai ma is helytállóak.

A hidrogénatom által létrehozott kötés megjelölésére sokféle elnevezés található az irodalomban.

A legfontosabbak : «hidrogénhid», «koordinatív kötés», hidrogénkötés», «hidroxilkötés».

A hidrogénhid kifejezés különösen találó, mert a kötés tulajdonképpen nem valódi kémiai kötés.

Jelölésmódja nem egységes. Pontokkal és nyilakkal jelölik, ahol a nyíl az elektrópárt adó atomból indul ki.

A kimutatás módszerei : fizikai tulajdonságok mérése /gőznyomás, gőzpontcsökkenés, stb./elektronelhajlások / PAULING, BROCKWAY/ mérése¹¹. Ma leginkább HILBERT¹² mérései alapján az OH vegyértékrezgések vizsgálatánál a hidrogénhidnak megfelelő felhangot veszik megfigyelés alá és ebből következtetnek a hidrogénhid természetére.

I. A klasszikus vizsgálatok eredményei.

A. Intramolekuláris hidrogén - hid kötés.

Az OH és NH gyököt tartalmazó molekulák asszociációs jelenségei fel foghatók a hidrogén-hid képződés megnyilvánulásaként.

Ennek bizonyítékai :

1. Az asszociáció függ az oldott anyag koncentrációjától.
2. Az asszociáció erőssége az OH és NH kötések erősségétől is függ.

mert ha az OH illetve NH csoport egy molekulában hiányzik az asszociáció benzolban és más apoláros oldószerben nagymértékben lecsökken.

Ha tehát az OH vagy NH gyök hidrogénjét más csoporttal /pl. metil/ kicseréljük, az asszociáció lecsökken. Ez bizonyítja, hogy a H atomnak a két molekula összekapcsolásában fontos szerepe van.

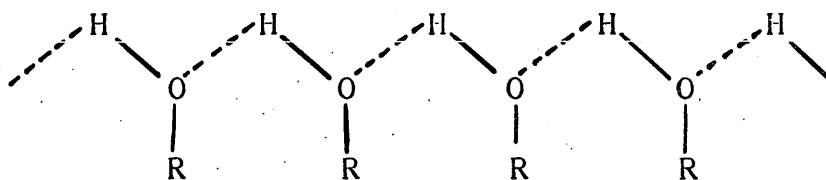
A létrejött kötés tulajdonságait a hidrogén-hid kötés kialakulásához szükséges feltételek vizsgálatával tanulmányozhatjuk. Ezen kívül nézhetjük azt, hogy milyen hatással vannak a hidkötések a vegyületek sajátságaira.

Régebben főleg kriozkópos módszert alkalmaztak az asszociáció ki- mutatására. Ennek alapját a RAULT törvénytől való eltérés képezte. A fo- lyadékok asszociációjának vizsgálatát az EÖTVÖS törvény alapján végez- ték.

AUWERS¹³ szerint a H-atom a következő hidkötéseket hozhatja lét- re :



A molekulák közötti hidrogénhid egész láncmolekula asszociátumot is létrehozhat :



a./ Oldószer hatása az asszociációra.

Szolvatáció.

Az indifferent oldószereknél az asszociáció mértéke más, mint polár oldószerekben, ez azt mutatja, hogy a szolvatációs energia a két típusu o- dószer-nél különböző.

A szolvatációs energia akkor szabadul fel, amikor az oldószer mole- kulái az oldott anyag OH csoportjával szolvatációs kölcsönhatásba lépnek.

Ez az energia az alkohol benzolos oldatánál 4,4Kcal/mol szolvatált OH csoportonként. Ebből látható, hogy a szolvatációs energia nagyobb lehet az asszociációs energiánál és így nem alakulnak ki a H-hid kötések

kapcsolt asszociátumok.

A szolvatáció az asszociáció jellegét és fokát is befolyásolja.

b./ Asszociáció tiszta folyadékokban.

A H-hidat képező vegyületeknél a H-hid nemcsak oldatban és gáz-állapotban mutatható ki, hanem a vegyületek homogén folyadékállapotában is.

A folyékony alkohol, oxim, karbonsav stb. hidrogénhidak által összekapcsolt asszociációs komplexek alakjában léteznek. Ezt bizonyítja az, hogy ezeknek a folyadékoknak, azon származékaihoz képest, ahol az oxigén kénnel illetve klorral van kicserélve, anomálishan magas az olvadás és forráspontjuk.

B. Intramolekuláris hidrogénhid kötés.

a./ Az asszociációs és az intramolekuláris H-hid kötés.

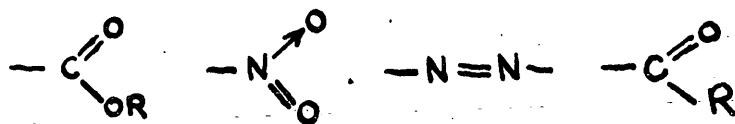
Az eddigiekben olyan vegyületek tulajdonságairól volt szó, amelyek apoláros oldószerekben, mint pl. benzol, ciklohexán, széndiszulfid, széntetraklorid stb. asszociációt mutatnak. Vannak azonban olyan OH tartalmú vegyületek amelyek apoláros oldószerekben nem mutatnak asszociációt. Ilyen pl. a szalicilaldehid.

A szalicilaldehid meta és para származéka erősen asszociál, míg az orto vegyület az asszociáció szempontjából OH mentes anyagként viselkedik.

Ez csak úgy magyarázható, ha feltételezzük, hogy az orto vegyület intramolekuláris H-hidat képez, és ezért nem képeződik intermolekuláris asszociátum.

Ebből levonható az a következtetés, hogy a H atom egyszerre nem képezhet inter és intramolekuláris H-hidat.

Ha az aldehid csoport helyére a következő gyököket szubsztituáljuk



gyakorlatilag ugyanilyen jelenséget tapasztalunk.

A $C=N$ - kötésekhez o-helyzetű OH-t tartalmazó vegyületeknél szintén várható az intramolekuláris H-hid kialakulása. Ez a speciális eset vizsgálata volt a feladatomban, s a későbbiekben vizsgálataim eredményéről részletesen beszámolok.

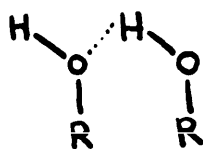
Az NH- gyök hidrogénje o-helyzetű csoportokkal /pl. nitró, aldehid, metoxi stb/ H-hidat alkothat.

Az NH...N típusú H-hidak általában a molekulán belül nem fordulnak elő.

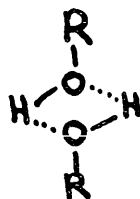
Az OH és NH csoport legerősebb hidat akkor alkothat, ha az így keletkező gyűrű hatos tagszámu.

C. Sztérikus faktorok hatása az asszociációra.

Az alkoholoknál a szénlánc növelésével csökken az asszociáció. Legnagyobb a csökkenési tendencia az izo-alkoholoknál. A sztérikus hatásoktól függ az is, hogy a következő két H-hid típus közül melyik fog kialakulni.



vagy



II. Újabb vizsgálati módszerek.

Az újabb vizsgálati módszerek HILBERT, WULF, HENDRICKS és LIJDEL¹⁴ valamint ERRERA és MOLLET¹⁵ tapasztalatai alapján UV és IR spektrumok vizsgálatán alapulnak.

Az OH csoportnak, amely a klasszikus vizsgálatok alapján H-hidat alkot jellemző sávja van.

A CCl₄-ben oldott hig alkohol 2.75- 2.77 μ tartományban abszorpciós sávot ad. Ha növeljük az alkohol koncentrációját akkor új jellemző intenzív sáv jelenik meg és az OH sáv maximuma eltolódik hosszabb hullámhossz felé.

A. Intermolekuláris hidrogén-hid kötés vizsgálata, oldatokban.

A zavartalan OH vegyértékrezgés sávja 3640 cm^{-1} -nél van. Növeked-

vő alkoholkoncentrációnál a sáv intenzitása csökken. Ez az asszociátum kialakulására utal. Ha a hőmérsékletet emeljük a sáv intenzitása ismét nő, mivel csökkent az asszociáció. Az asszociáció mértéke a hőmérséklettől függ.

HOYER¹⁶ összegezve az IR vizsgálatok eredményeit a következőket állapította meg.

Molekulák közötti H-hidak akkor keletkeznek, ha egy olyan vegyületet, amely meglehetősen poláros XH-kötést tartalmaz /OH, CH, SH, HCl stb./ olyan oldószerekben oldunk, amelyben O vagy N van. Ezek nemcsak H-hidat, hanem majdnem sóhoz hasonló komplex kötést alkotnak. A laza komplexképződés folytán az XH csoportok vegyértékrezgései csökkennek, mivel a zavart XH csoportok erősebben abszorbeálnak, mint a zavartalanok.

VENKATESWARAN¹⁷ azt találta, hogy egy H-hid kialakulásakor az XH csoport vegyértékrezgésének eltolódása annál nagyobb minél polárosabb a H-hid kötésben résztvevő XH.

B. Intramolekuláris H-hid kötések vizsgálata infravörös szinkép alapján.

Az OH csoportot tartalmazó molekuláknál az intramolekuláris H-hid jelenlétének kritériuma az, hogy az OH rezgés alaprezgése 2,72-2,75 μ -ig /3680-3640 cm^{-1} / valamint az asszociációs kötés első felharmónikusa hiányozzon.

C. A H-hid kötés szilárdsága.

A H-hid kötés szilárdságának jellemzésére a vegyületek szublimációs, párolgás és elegyítési hőit adják meg, valamint az oldatban kialakult egyensúly hőmérsékleti koefficienséből számított ΔH és ΔU értékeit adják meg.

Az intermolekuláris H-hidak energiája 4,5-6,7 Kcal/mól között változik. A belső H-hidak energiái még kevésbé ismertek.

A kötésenergiák hőmérsékleti függésének vizsgálatából kitűnik, hogy magasabb hőmérséklet inkább a molekulák közötti H-hidak kialakulásának kedvez.

E. A H-hidban lévő kötésállapot.

A H-hid képződésének okairól és létrehozó erőiről három féle elképzelés van.

Az első elképzelés szerint a hidban résztvevő H elektronpárokat gyűjt maga köré arról az atomról amely a H-hid kötésben résztvesz. Ez a felfogás a PAULI elv alapján nem lehetséges, mert a K héj fel van töltődve és alapállapotban kettőnél több elektront nem tartalmazhat.

A másik elképzelés szerint a H-kötés energiája a kvantummechanikai rezonanciának, molekulától molekuláig terjedő különböző határállapotaiából tevődik össze. Ez a módszer nehézkes és sok dolgot nem tud magyarázni.

A harmadik felfogás szerint a H-hid kötés elektrosztatikus alapon magyarázható.

Összefoglalva megállapítható, hogy az utóbbi két magyarázat létjogosult, de az utóbbi vizsgálatok alapján úgy látszik, hogy a legjobb közelítést az elektrosztatikus elmélet ad.

Az elektrosztatikus elmélet szerint a kialakult kötés ionos jellegű.

F. Elektrolitos disszociáció és a H-hid kötés.

A H-hid által asszociátumot képző molekulák nempoláros oldószerben oldva mindig vezetőképességet mutattak. Az áramszállítást itt is ionok végzik. A vezetőképesség az ROH oldószer rendszerénél a hígítással exponenciálisan csökken, ami ellentétben áll a vizes oldatoknál tapasztaltakkal. Ez a vezetőképesség végtelen hígítás esetén se mutat határértéket.

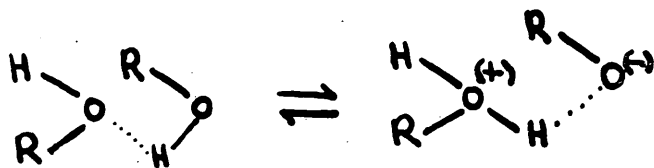
Az anomális viselkedés okai :

1./ Az elektrolitos disszociáció monomolekulás míg itt bimekulás disszociáció van. Egy ROH molekula tehát csak egy aniont vagy egy kationt szolgáltat.

2. / Az oldószerben ionok és a legkülönbözőbb nagyságu asszociációs komplexek vannak jelen, amelyek IR szinkép alapján kimutathatók.

3./ A disszociáció a tömeghatás törvényének engedelmessé oxán.

oxónium forma egyensúlyára vezethető vissza.



KISÉRLETI RÉSZ

Az ultraibolya elnyelési szinkép meghatározását Beckman DU spektrofotométeren végeztük.

A jelenleg folyamatban lévő infravörös vizsgálatokat IKSZ-12 -es készülékkel folytatjuk.

Az ultraibolya vizsgálatoknál 1 és 5 cm- es kvarc-küvetákat használtunk. Az extinció értékeit az ismert Lambert-Beer féle összefüggés segítségével számoltuk ki.

$$E = \frac{1}{cd} \log \frac{J_0}{J}$$

- ahol
- c koncentráció/mól/liter/
 - d a küvetta rétegvastagsága /cm/
 - I_0 a belépő fény intenzitása.
 - I a kilépő fény intenzitása

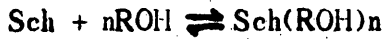
Az oldatok elkészítéséhez használt etanol és hexán az irodalomban leírt ismert módszerek segítségével lett tisztítva.

A vizsgált azometineket kondenzációs reakciók segítségével kaptuk megfelelő aldehidből és primér aminből. Ezek tisztítása sokszori átkristályosítással történt.

A kísérleti eredmények tárgyalása.

Feltételezték /13.19/ a Schiff-bázisok oldószersorozatban felvett spektrumának értelmezése alapján, hogy adott koncentrációjú oldószerlegyenben a hidroxil-gyököt tartalmazó oldószermolekula és a Schiff-bázis között adott hőmérsékleten egy H-lid kötésű asszociátum keletkezik. Az asszoci-

átumra a következő egyensúlyi alkalmazták :



A tömeghatás törvénye alapján az egyensúlyi állandó :

$$K = \frac{[\text{Sch}(\text{ROH})_n]}{[\text{Sch}]/[\text{ROH}]^n}$$

ha $a = a$ a bemért Schiff-bázis koncentrációja

$b = a$ a bemért alkohol koncentrációja

c_{12} a z asszociátum koncentrációja

akkor az egyensúlyi koncentrációk :

$$[\text{Sch}] = a - c_{12}$$

$$[\text{ROH}] = b - c_{12}$$

$$[\text{Sch}(\text{ROH})_n] = c_{12}$$

így az egyensúlyi állandó :

$$K = \frac{c_{12}}{(a - c_{12}) (b - c_{12})^n}$$

ha $b \gg c_{12}$ akkor $(b - c_{12})^n \cong b^n$ és így

$$K = \frac{c_{12}}{(a - c_{12}) (b)^n}$$

ebből $Kab^n - Kc_{12}b^n = c_{12}$

$$Kab^n = c_{12} + Kc_{12}b^n$$

$$Kab^n = c_{12}(1 + Kb^n)$$

$$c_{12} = \frac{K a b^n}{1 + K b^n} \dots \dots \dots (1)$$

Az oldat extinciója összetevődik :

$$aE = c_{12}E_{12} + (a - c_{12})E_1$$

A c_{12} -t ebből is kifejezzük :

$$aE = c_{12}E_{12} + aE_1 - c_{12}E_1$$

$$aE - aE_1 = c_{12}E_{12} - c_{12}E_1$$

$$a(E - E_1) = c_{12}(E_{12} - E_1)$$

$$c_{12} = \frac{E - E_1}{E_{12} - E_1} \cdot a \dots \dots (2)$$

Az (1) és (2) egyenletekből :

$$a \frac{E - E_1}{E_{12} - E_1} = \frac{K a b^n}{1 + K b^n}$$

Ebből a K -t kifejezve :

$$K b^n E_{12} - K b^n E_1 = E - E_1 + K b^n E - K b^n E_1$$

$$K (E_{12} b^n - E_1 b^n + E_1 b^n - b^n E) = E - E_1$$

$$K = \frac{E - E_1}{(E_{12} - E) b^n}$$

Logaritmizálva az egyenletet :

$$\log k = \log (E - E_1) - \log (E_{12} - E) - n \log b$$

$$\log K = \log \frac{E - E_1}{E_{12} - E} - n \log b$$

$$\log \frac{E - E_1}{E_{12} - E} = \log K + n \log b$$

Ha a $\log \frac{E - E_1}{E_{12} - E}$ - t mint $\log b$ függvényét ábrázoljuk, egyenest ka-

punk ahol az egyenes iránytangense az n értékét adja meg.

A vizsgálatokat a következő vegyületsorozatra végeztem el :

N, N' bis (szalicilidén) etiléndiamin

N, N' bis (szalicilidén) propiléndiamin

N, N' bis (szalicilidén) butiléndiamin

Az N, N' bis (szalicilidén) etiléndiamin és az etanol között kialakult asszociátum disszociációs egyensúlyának termodinamikai adatait, vagyis a H-hid kötés szilárdságát, az egyensúlyi állandó hőmérséklet függéséből számítottam ki.

Az egyensúlyi állandó logaritmus $1/T$ függvényében egy egyenest ad.

A kapott egyenes iránytangense ismeretében a termodinamikai adatokat az alábbi összefüggések ismeretében kiszámíthatjuk

$$\Delta H = 2,303 \cdot 1,987 \cdot \lg \alpha$$

$$\Delta H = 4,576 \cdot \lg \alpha$$

A termodinamikai potenciál változását, és az entalpia változását a következő összefüggések segítségével lehet számolni,

$$\Delta G = -R T \ln K = -1,987 \cdot T \cdot 2,303 \cdot \log K$$

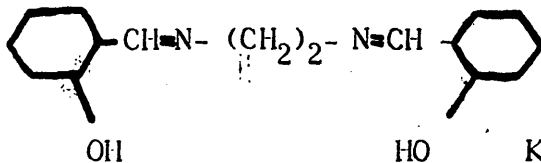
$$\Delta G = -4,576 \cdot T \log K$$

$$\Delta G = \Delta H - T \Delta S$$

$$T \Delta S = \Delta H - \Delta G$$

$$\Delta S = \frac{\Delta H - \Delta G}{T}$$

A következőkben a mérések eredményei láthatók.



Etanol sűrűsége : 0.7854 g/cm^3

Konc. etanolban : 0.02 g/100 ml

$$c = 0.7468 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$$

Konc. hexánban : 0.02 g/100 ml

$$c = 0.7468 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$$

Mólsúly : 268.32

$$\lambda = 403 \text{ m}\mu$$

$$T = 288.16 \text{ K}^\circ$$

Etanol hexán, elegyben

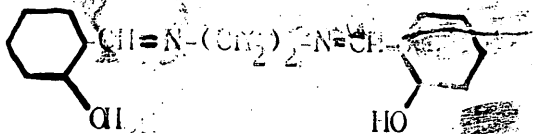
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ mol/lit	$\log I_0/I$	$\log b$	E_0	$\log \frac{E-E_1}{E_{12}-E}$	$K = \frac{E-E_1}{(E_{12}-E) b^n}$
0.08542	0.045	-1.06844	12.05	-1.9152	0.1423
0.17084	0.073	-0.76741	19.54	-1.6404	0.13394
0.34168	0.123	-0.46639	34.27	-1.3558	0.12898
0.68336	0.238	-0.16536	63.73	-1.0476	0.13114

$$E_1 = 3.213$$

$$E_{12} = 739.08$$

$$n = 1.00$$

$$K = 1.3409 \cdot 10^{-1}$$



Etanol sűrűsége : 0,7854g

Konc. etanolban : 0,02g/100

$c = 0,7463 \cdot 10^{-3}$ mol/l

Konc. hexánban : 0,02g/100

$c = 0,7463 \cdot 10^{-3}$ mol/l

Mólsúly : 263, 32

$\lambda = 408 \text{ m}\mu$

$T = 298,16 \text{ K}^\circ$

Etanol hexán elegyben :

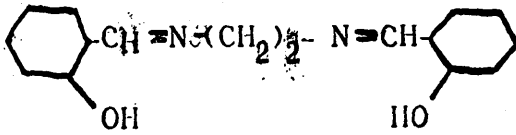
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ mol/lit	$\log I_o/I$	$\log b.$	E	$\log \frac{E-E_1}{E_{12}-E}$	$K = \frac{E-E_1}{(E_{12}-E)b^n}$
0,08542	0,036	-1,06844	8,64	-2,03585	0,10559
0,17084	0,068	-0,76741	18,46	-1,67533	0,12585
0,34168	0,125	-0,46639	33,47	-1,27627	0,12162
0,68336	0,236	-0,16536	63,13	-1,06537	0,12358

$$E_1 = 2,677$$

$$E_{12} = 765,84$$

$$n = 1,0096$$

$$K = 1,1916 \cdot 10^{-1}$$



Etanol sűrűsége : 0.7854 g/cm^3

Konc. etanolban : 0.02 g/100 ml

$c = 0.7468 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$

Konc. hexánban : 0.02 g/100 ml

$c = 0.7468 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$

Molsúly : 268.32

$\lambda = 408 \text{ nm}$

$T = 308.16 \text{ K}^\circ$

Etanol hexan elegyben :

$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ mol/lit	$\log I_0/I$	$\log b.$	E	$\log \frac{E-E_1}{E_{12}-E}$	$K = \frac{E-E_1}{(E_{12}-E)b^n}$
0.08542	0.032	-1.06844	8.57	-2.04336	0.09104
0.17084	0.060	-0.76741	16.06	-1.72172	0.10452
0.34168	0.117	-0.46639	31.33	-1.39997	0.10932
0.68336	0.217	-0.16536	58.11	-1.10515	0.10030

$$E_1 = 1.6066$$

$$E_{12} = 777.91$$

$$n = 1.0707$$

$$K = 1.0129 \cdot 10^{-1}$$

A H-hid kötésre jellemző termodinamikai adatok az N, N'-bis (szalicilidin) propiléndiamin esetében.

T K°	L/T	K	log K
288.16	0.003470	0.13409	-0.87260
298.16	0.003354	0.11916	-0.92387
308.16	0.003245	0.10129	-0.99444

$$\lg \alpha = 545.45$$

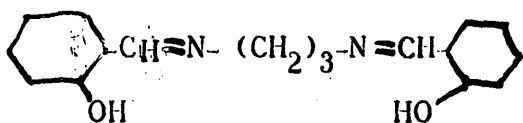
$$\Delta H = -0.303 \cdot 1.987 \cdot 545.45$$

$$\Delta H = -2.495 \text{ Kcal / mol}$$

$$\Delta G = -4.576 \cdot T \log K$$

$$\Delta S = \frac{\Delta H - \Delta G}{T}$$

T K°	G Kcal/mol	S cal/fok
288.16	1.1506	-12.65
298.16	1.2605	-12.59
308.16	1.4022	-12.64



Etanol sűrűsége : 0.7857 g/cm^3
 Konc. etanolban : $0.70985 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$

$c = 0.02 \text{ g/100 ml}$

Konc. hexánban : 0.02 g/100 ml

$c = 0.70985 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$

Molsúly : 282.34

$\lambda = 406 \text{ nm}$
 $T = 298.16 \text{ K}^{\circ}$

Etanol hexán elegyben

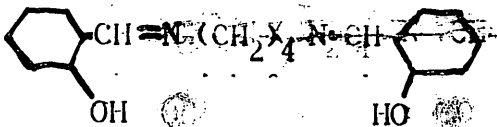
$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ mol/lit	$\log I_0/I$	$\log b$	E	$\log \frac{E-E_1}{E_{12}-E}$	$K = \frac{E-E_1}{(E_{12}-E) b^n}$
0.08534	0.058	-1.06885	16.34	-2.15739	0.0594
0.17068	0.088	-0.76777	24.79	-1.81248	0.0843
0.34136	0.143	-0.46674	40.29	-1.50362	0.0776
0.68272	0.270	-0.16577	76.07	-1.15428	0.0789

$E_1 = 9.298$

$E_{12} = 1028.4$

$n = 1.137$

$K = 7.505 \cdot 10^{-2}$



Molsuly : 296,374

Etanol sűrűsége : 0.7857 g/cm^3

Konc. etanolban : 0.02 g/100 ml

$c = 0.67625 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$

Konc. hexánban : 0.02 g/100 ml

$c = 0.67625 \cdot 10^{-3} \text{ mol/l}$

$$\lambda = 406 \text{ m}\mu$$

$$T = 298,16 \text{ K}^{\circ}$$

Etanol hexán elegyben :

$\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ mol/lit	$\log I_0/I$	$\log b$	E	$\log \frac{E-E_1}{E_{12}-E}$	$K = \frac{E-E_1}{(E_{12}-E)b^n}$
0.08543	0.055	-1.06835	16.26	-2.2451	0.0558
0.17068	0.092	-0.76777	27.21	-1.3850	0.0730
0.34136	0.153	-0.46674	46.43	-1.5812	0.0694
0.68272	0.310	-0.16577	91.68	-1.2563	0.0692

$$E_1 = 7.689$$

$$E_{12} = 1523.1$$

$$n = 1.083$$

$$K = 6.685 \cdot 10^{-2}$$

Die Untersuchung der Association bei den aromatischen Azomethinen durch ihre UV Absorption Spektren.

Zusammenfassung.

Wir haben die Lösungsmittelabhängigkeit bei den aromatischen o-oxy-Azomethinen in den hexan-ethanol Lösungsgemischen untersucht.

Institut für Allgemeine und Physikalische Chemie Universität. Szeged.

I r o d a l o m

1. Nernst. Z. Phys. Chem. 8,110 (1801)
2. Auwers, Z. Phys. Chem. 42. 512. 629 (1903)
3. Werner. Neuere Anschauungen auf dem Gebiet der Anorganischen Chemie. Chemie. 2. Auf., 2900. 1909
4. Pfeiffer, Liebigs Ann. Chem. 376, 285 (1910)
5. Moore és Winmill, J.chem. Soc. London 101. 1635 (1912)
6. Hantzsch és Scharf, Ber. Dtsch. chem. Ges. 46. 3570 (1913)
7. Pfeiffer, Liebigs Ann. Chem. 398, 137 (1913)
8. Pfeiffer, Ber Dtsch. chem. Ges. 47,1530 (1914)
9. Sidgwick, Spurrell és Davies, J. chem. Soc. London 107, 1202 (1915)
10. Huggins. Undergraduate Thesis, University of California (1919)
11. Pauling és Brockway, Proceed. nat Acad. Sci. 20. 336 (1934)
12. Hilbert, Wulv, Hendricks és Liddel, J. Amer.Chem. Soc. 58. 548 (1936)
13. Auwers, Z. Phisyk. Chem. 42. 512(1903)
14. Hilbert, Hendricks, Wulf és Liddel, J. Amer. Chem. Soc. 58,548 (1936)
15. Errera és Mdet, J. Physique Radium // 6, 281 (1935)
16. Hoyer, Z. Elektrochem. 49. 115 (1943)
17. Venkateswaran, Proceedd Indian Acad. Sci. 7. 13 (1938)
18. J. Hires and L. Hack Acta Phys. et Chem. 19 (1959)
19. J. Hires. Acta Phys. et Chem. 120(1958)

SZERVES MOLEKULÁK VIZSGÁLATA AZ LCAO-MO

MÓDSZERREL

Szabó József - Török Miklós

IV. évf. vegyész

ÁLTALÁNOS ÉS FIZIKAI KÉMIAI INTÉZET

I. §. Molekuláris problémák sajátértékegyenletei.

A kvantummechanika szerint egy atomi rendszer megengedett energiaállapotait a Schrödinger egyenlet megoldásával nyerjük, amely az atomi rendszer energiaoperátorának sajátérték-egyenlete:

$$H\psi = E\psi \quad /1/$$

Az energiaoperátor -másképpen Hamilton operátor- molekulák esetében a következő alakban írható fel:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_k \frac{1}{\mu_k} \Delta_k - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{1}{\mu_i} \Delta_i + V \quad /2/$$

A képletben k indexszel jelöltük a magokat, i -vel az elektronokat, μ_k -vel az illető részecske tömegét, Δ_k -vel ill. Δ_i -vel a megfelelő részecske koordinátáira vonatkozó Laplace operátorokat, és V -vel a potenciálfüggvényt. Ha a részecskék között csak elektrostatikus kölcsönhatást tételezünk fel, a potenciálfüggvény a következő alakú lesz:

$$V = \sum_{k>k'} \frac{z_k z_{k'} e^2}{r_{kk'}} + \sum_{i>i'} \frac{e^2}{r_{ii'}} - \sum_k \sum_i \frac{z_k e^2}{r_{ki}} \quad /3/$$

A kifejezésben z_k jelenti a k -adik mag töltését, $r_{kk'}$ a k -adik és k' -edik magok távolságát, $r_{ii'}$ az i -vel és i' -vel jelölt elektronok távolságát, r_{ki} pedig a k -adik mag és az i -edik elektron távolságát.

Tekintve, hogy az így megalkotott Schrödinger-egyenlet egzakt megoldása csak a hidrogén atom esetén lehetséges, éppen ezért a bonyolultabb esetekben, így pl. a molekuláris problémák esetében különösen,

közeliítő megoldásokra vagyunk utalva. Ilyen esetekben egyszerűsítő feltevéseket teszünk, pl. eltekintünk a magok mozgásából eredő potenciális energia változásoktól stb.

2. §. Az LCAO-MO módszer.

Azon feltevés, miszerint a többielektronos atomok esetében a sajátfüggvények egyelektron-függvények/u.n. atomi pályák AO/ szorzatával közelíthetők meg /Pl. Hartree-Fock módszer/ némi változtatásokkal molekuláris problémákra is átvihető. HUND és MULLIKAN¹, ill. ² feltételezték, hogy az u. n. valencia elektronok által létrehozott molekulapályák sajátfüggvényei, az egyelektron-függvények szorzatával megközelíthető. Tehát a molekula energiáját a valencia-elektronok energiáinak összege adja. Azonban a valenciaelektronok problémája nem tekinthető egyelektron problémának. Ha a molekulapálya energiáját E_0 -nak vesszük, sajátfüggvényét pedig Φ_k -nek, akkor lehetséges-e olyan ψ_i függvényt találni, melyre a rendszer H operátora alkalmazható, s segítségével egy olyan E energiaérték nyerhető, mely E_0 -t jól közelíti? Ha sorbafejtjük a többcentrumu Φ_k -t az egycentrumu ψ_i sajátfüggvények szerint,

$$\Phi_k = \sum_i a_{ik} \psi_i \quad /4/$$

és helyettesítünk az energia kifejezésébe,

$$E_k = \frac{(\sum_i a_{ik} \psi_i, H \sum_i a_{ik} \psi_i)}{(\sum_i a_{ik} \psi_i, \sum_i a_{ik} \psi_i)} \quad /5/$$

akkor az az energiaérték lesz a felvett ψ_i függvények esetében a legkisebb, s ezáltal az E_0 -hoz legközelebb eső, amelyre a

$$\frac{\partial E_k}{\partial a_{ik}} = 0 \quad /6/$$

feltétel teljesül.

Az LCAO-MO módszer a közeliítő függvényt lineárisan független atomi pályák lineáris kombinációjával állítja elő:

$$\Phi_k = \sum_i c_{ik} \psi_i \quad /7/$$

Az így kapott kifejezést az energia egyenletbe helyettesítve,

$$E_k = \frac{(\sum_i c_{ik} \psi_i, H \sum_i c_{ik} \psi_i)}{(\sum_i c_{ik} \psi_i, \sum_i c_{ik} \psi_i)} \quad /8/$$

és megkövetelve a /6./ feltétel teljesülését, a C_{ik} lineáris kombinációs konstansokra a szekuláris egyenletrendszeret nyerjük, mely a

$$(\varphi_i, H \varphi_j) = H_{ij} \quad /9/$$

$$(\varphi_i, \varphi_j) = S_{ij} \quad /10/$$

jelölések bevezetésével a

$$\sum_i c_{ik} (H_{ij} - E_k S_{ij}) = 0 \quad /11/$$

alakba írható.

Az ezen úton nyert szekuláris egyenlet rendszer egy homogén, lineáris egyenletrendszer, melynek nemtriviális megoldását úgy nyerhetjük, ha a

$$\det | H_{ij} - E_k S_{ij} | = 0 \quad /12/$$

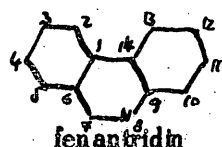
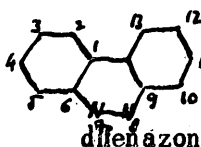
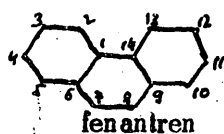
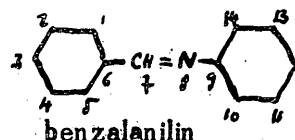
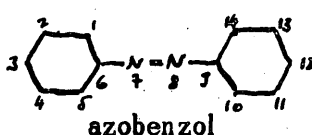
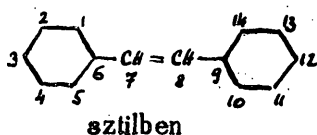
feltétel teljesülését megköveteljük.

π -kötéseket konjugációban tartalmazó molekulák esetében a π elektronok egységes rendszert alkotnak a molekulában. HÜCKEL³ vetette fel azt a gondolatot, hogy a fenti eljárást alkalmazni lehetne kizárólag π elektronokra is. Így nagymértékben egyszerűsödik a számítás és a bonyolult szerkezetű szerves molekulákra is viszonylag egyszerűen vitelezhető ki. Ekkor a potenciál teret úgy állítjuk elő, hogy minden atomról csak egy elektront veszünk le, s ezek lehetséges állapotait vizsgáljuk az előbb említett potenciáltérben.

3. §. A számítások kivitelezése.

Az LCAO-MO módszert az alábbi hat szerves molekulára alkalmaztuk: sztilben, benzalanilin, azobenzol, difenazon, fenantrén.

A molekulák atomjait a következőképpen számoztuk:



A számítások egyszerűsítése érdekében a következő feltevéseket alkalmaztuk :

1./ Minden kölcsönhatás nem -szomszédos atomok esetén elhanyagolható : $(\varphi_i, H \varphi_j) = H_{ij} = 0$ $(\varphi_i, \varphi_j) = S_{ij} = 0$

ahol φ_i és φ_j nem -szomszédos atomipálya-függvények

2./ Az u. n. átfedési integrálok elhagyolhatóak és az atomi pályák normáltak :

$$(\varphi_i, \varphi_j) = S_{ij} = \delta_{ij} = \begin{cases} = 1 & \text{ha } i = j \\ = 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases}$$

3./ Szomszédos atomok kölcsönhatásai egyenlők :

$$H_{ij} = (\varphi_i, H \varphi_j) = \alpha$$

ha φ_i és φ_j szomszédos atomok

hullámfüggvényei.

4./ Szénatomok H_{ii} típusu integráljai egyenlők :

$$H_{ii} = (\varphi_i, H \varphi_i) = \alpha$$

5./ A nitrogénatomok H_{ii} típusu integráljaira a Dewar által megadott

$$(\varphi_i', H \varphi_i') = \alpha_N = \alpha + 0.5\beta$$

közelítést vettük fel.

Ahol φ_i' a nitrogén atomhoz rendelt atomi függvény.

Ezen jelölések és egyszerűsítő feltételek felhasználásával felírhatók a szekuláris egyenletrendszerek. β -val való osztás után az egyenletrendszerek determinánsai a következő alakúak :

Sztilben típus :

Fenantren típus :

60.

$$\text{Ahol } K_k = \frac{\alpha - \bar{E}_k}{\beta} \quad \text{és}$$

- q_1 a sztilbennél, a benzalanilinnél,
a fenantrennél és a fenantridinnél egyenlő x_k -val
az azobenzolnál és a difenazonnál pedig $x_k + 0.5$,
 q_2 a sztilbennél és a fenantrennél x_k -val egyenlő,
a másik négy molekula esetében $x_k + 0.5$.

Az ilyen nagy determinánsok kifejtése a közönséges sor és oszlop törlésén alapuló, módszerrel nehézkes és sok hibalehetőséget rejt magában. Számításainkban sikerrel alkalmaztuk az u. n. Laplace kifejtést /lásd függelék/. Ennek előnye gyorsaságán és megbízhatóságán kívül az is volt, hogy a determinánsok értékét szorzatok alakjában adta meg, hasonlóan a csoportelméleti úton nyerhető eredményekhez.

A determinánsok kifejtése a következő polinomokat ill. polinomszorzatokat szolgáltatja :

Sztilben :

$$(x^2-1)^2(x^5+x^4-6x^3-5x^2+7x+4)(x^5-x^4-6x^3+5x^2+7x-4) = 0$$

Benzalanilin :

$$(x^2-1)^2(x^{10}+0.5x^9-13x^8-5.5x^7+60x^6+20.5x^5-117x^4-29.5x^3+89x^2+14x-16) = 0$$

Azobenzol :

$$(x^2-1)^2(x^5-0.5x^4-6x^3+2.5x^2+7x-2)(x^5+1.5x^4-6x^3-7.5x^2+7x+6) = 0$$

Fenantren :

$$(x^7+2x^6-6x^5-11x^4+9x^3+15x^2-4x-5)(x^7-2x^6-6x^5+11x^4+9x^3-15x^2-4x+5) = 0$$

Fenantridin :

$$(x^{14}+0.5x^{13}-16x^{12}-7x^{11}+98x^{10}+36.5x^9-297x^8-90.5x^7+479x^6+13.5x^5-407x^4-63.5x^3+166x^2+15.5x-25) = 0$$

Difenazon :

$$(x^7+2.5x^6-5.5x^5-14x^4+7x^3+19.5x^2-2.5x-7)(x^7-1.5x^6-6.5x^5+8x^4+11x^3-10.5x^2-5.5x+3) = 0$$

Az így nyert polinomok zérushelyeit numerikus közelítéssel határoztuk meg. Számításaink végén felhasználtuk a polinom gyökeinek és együtthatóinak összefüggéseit a két utolsó gyök meghatározására. Felhasz-

náltuk továbbá azt, hogy egy vagy két nitrogénatom beépülése a molekulába az energia értékeket csak bizonyos határon belül módosítja, s így x_k megfelelő értékei is egy adott határon belül esnek egymáshoz viszonyítva. A megfelelő x_k értékek különbségeit az atomok sorszámai szerint felüntetve igen érdekes görbét kapunk.

A x_k -k ismeretében az energiákat β -egységekben megadhatjuk. Számíthatók továbbá a lineárkombinációs konstansok is, melyek segítségével a molekulák jellemző adatai – töltéseloszlás, kötésrend, kötéstávolság, szabad-vegyérték index, dipolmomentum, spektrum – megadhatók elméleti ill. félempirikus uton. Felhasználhatók továbbá az eredmények további finomabb és pontosabb közelítések alapjául, pl. az elektron-elektron kölcsönhatások figyelembevételéhez vagy az így kapott molekulapályák antiszimmetrizálására /ASMO módszer/, amely távolabbi terveink közé tartozik.

A polinomok zérushelyeinek értékeit az alábbiakban adjuk meg :

Sztilben típus :

k	sztilben	azobenzol	benzalanilin
1.	+ 2.2105	+ 2.1389	+2.17305
2.	+ 2.0641	+2.0540	+2.05800
3.	+ 1.5046	+ 1.3590	+1.43574
4.	+1.1555	+ 1.1278	+1.13830
5.	+ 1.0000	+ 1.0000	+ 1.00000
6.	+ 1.0000	+ 1.0000	+ 1.00000
7.	+ 0.5043	+ 0.2767	+ 0.41294
8.	- 0.5043	-0.6597	- 0.60025
9.	- 1.0000	- 1.0000	- 1.00000
10.	- 1.0000	- 1.0000	- 1.00000
11.	- 1.1555	- 1.1962	- 1.17120
12.	- 1.5046	- 1.6678	- 1.59805
13	- 2.0641	-2.0786	- 2.06975
14	- 2.2105	-2.3543	- 2.27911

Fenantren típus :

k.	fenantren	difenazon	fenantridin
1.	2.43477	+ 2.38938	+ 2.41050
2.	+ 1.95063	+ 1.94069	+ 1.94623
3.	+ 1.51628	+ 1.36080	+ 1.43655
4.	+ 1.30580	+ 1.28078	+ 1.30028
5.	+ 1.14238	+ 1.11414	+ 1.12486
6.	+ 0.76905	+ 0.76010	+ 0.76556
7.	+ 0.60523	+ 0.39437	+ 0.51748
8.	- 0.60523	- 0.73961	- 0.77779
9.	- 0.76905	- 0.78078	- 0.68303
10.	- 1.14238	- 1.18524	- 1.15845
11.	- 1.30580	- 1.31107	- 1.30872
12.	- 1.95063	- 1.96531	- 1.95959
13.	- 1.51628	- 1.74039	- 1.63723
14.	- 2.43477	- 2.52386	- 2.47564

Függelék.

Determinánsok kifejtése a Laplace módszer szerint.

A determinánsok Laplace módszerrel való kifejtése a következőképpen történik :

Egy n -ed rendű determináns első k sorából minden lehetséges módon kiválasztunk k -ad rendű determinánsokat, mindegyiket megszorozzuk $n-k$ -ad rendű al-determinánsával és összegezzük, a determinánszorzatokat amelyek előjelét $a/(-1)^{r+s}$ adja meg ahol r a sor-, s pedig az oszlopmutatók összege.

Summary

The investigation of organic molecules by the LCAO-MO method

J. Szabó and M. Török

The one electron energies of stilbene, benzalaniline, azobenzene phenantren phenantridine and diphenazone were calculated by the LCAO-MO approxima

in the form used by Hückel. To expand the determinants the Laplace method have been applied.

Zusammenfassung.

Untersuchung über organischen Molekülen mit der LCAO-MO Method

J. Szabó und M. török

Die Eine Elektron-Energien des Stilbens, Benzalanilins, Azobenzols, Phenanthrens und Diphenazons wurden mit der LCAO-MO Methode in Hückelscher Form berechnet. Die Seculare-Determinanten die in der Rechnung vorkommen, wurden auf Grund des Laplace-schen Entwicklungssatzes entwickelt.

I r o d a l o m.

1. HUND : Zs. f. Phys. 51. 759/1928/
2. MULLIKEN : Phys. Rev. 32. 186/1928/
3. HÜCKEL : Zs. f. Phys. 60. 423. /1930/
4. EYRING H : L. J. WALTER and G. E. KIMBALL :
Quantum Chemistry , New York, 1949.
5. HARTMANN, H : Theorie der Chemischen Bindung. Berlin. 1954.

ÁTMENETI FÉM KOMPLEXEK BEN ELŐFORDULÓ ÁTFEDÉSI INTEGRÁLOK VIZSGÁLATA

Fényi Szaniszló

V. évf. kém-fiz

Feladatul tűztük ki, hogy megvizsgáljuk az MO módszerben szereplő átfedési integrálokat, közelítő és exakt értékének a molekula e módszerrel nyert termendszerére kifejtett hatását.

Gilde F.¹ javasolt egy közelítő módszert mely segítségével az átfedési integrálok egyszerű geometriai értelmezést nyertek, s így könnyen ki-számíthatók voltak. Ezzel a közelítő-eljárással nyert értékek több molekula-nál felhasználásra kerültek.^{2,3} Érdekesnek ígérkezik az a vizsgálat, mely-ben összehasonlítjuk a közelítő módszerrel nyert integrálértékeket a mate-matikailag exakt értékekkel. Az általunk használt lineáarkombinációs függvé-nyeket Slater adta meg⁴. Ezen függvényekben bevezetésre került az effek-tív főkvantumszám, mely már nem mindig egész szám. Az exakt számolás-nál célszerű az egész illetve nem egész effektív főkvantumszámú eseteket külön tárgyalni.

Egész effektív főkvantumszámú függvények átfedései:

$$\begin{aligned}
 (3d_{xy}, 2p\pi) & \quad \text{ahol:} \\
 (3d_{yz}, 2p\pi) & \quad \psi(3d) = N r^2 e^{-\alpha r} \cos \vartheta \sin \vartheta \sin \varphi \\
 (3d_{z^2-y^2}, 2p\sigma) & \quad \psi(3d_{yz}) = N r^2 e^{-\alpha r} (\sin^2 \vartheta \cos \varphi - \sin^2 \vartheta \sin \varphi) \\
 (3d_{x^2}, 2p\sigma) & \quad \psi(3d_{z^2}) = N r^2 e^{-\alpha r} (3 \cos^2 \vartheta - 1) \\
 (3d_{x^2}, 2p\sigma) & \quad \psi(2p\pi) = N r e^{-\alpha r} \sin \vartheta \cos \varphi \\
 & \quad \psi(2p\sigma) = N r e^{-\alpha r} \cos \vartheta
 \end{aligned}
 \tag{1}$$

Transzformációs tulajdonságok alapján kimutatható, hogy a $(3d_{xy}, 2$

és a $(3d_{yz}, 2p\pi)$ átfedések egyenlőek. Az integrálok számítását a Mülliken⁵ által megadott eljárással végeztük el. A módszer röviden a következő: a kétcentrumu integrálót célszerűen elliptikus koordinátarendszerre transzformáljuk, majd az egész térre integráljuk.

Például az $(3d_{xy}, 2p\pi)$ átfedés:

Ha a $\Psi(3d_{xy})$ függvényt elliptikus koordinátákra transzformáljuk, a tengelyek következő módon transzformálódnak:

$$x \rightarrow y$$

$$\text{tehát } 3d_{xy} = 3d_{yz}$$

$$y \rightarrow z$$

$$z \rightarrow x$$

$$\text{azaz } \Psi(3d_{yz}) = N' r_b e^{-kr} \cos \vartheta_b \sin \vartheta_b \sin \varphi$$

A $2p\pi$ függvény hasonlóan transzformálható:

$$\Psi(r, \vartheta, \varphi) = N r_a e^{-kr} \sin \vartheta_a \sin \varphi$$

Ahol a két centrumra való tekintettel megfelelően indexeltünk. Kimutatható,

hogy

$$r_a = \frac{R}{2} (\mu + \nu)$$

$$r_b = \frac{R}{2} (\mu - \nu)$$

$$\cos \vartheta_a = \frac{\mu\nu + 1}{\mu + \nu}$$

$$\cos \vartheta_b = \frac{1 - \mu\nu}{\mu - \nu} = \frac{2}{2} \frac{1 - \mu\nu}{r_b}$$

$$\sin \vartheta_a = \frac{R}{2} \frac{1}{r_a} \sqrt{(\mu^2 - 1)(1 - \nu^2)} \quad \sin \vartheta_b = \frac{R}{2} \frac{1}{r_b} \sqrt{(\mu^2 - 1)(1 - \nu^2)}$$

ahol μ, ν az elliptikus koordináták.

A formulákba ezeket helyettesítve a függvények szorzatát véve /hullámfüggvényünk valós, tehát $\Psi^* = \Psi$ /és teljes térre integrálva, az integráljuk teljesen egyváltozós függvények szorzatára bomlik, melyek az irodalomban⁶ tabellázva vannak, de rekurziós formulákkal is kiszámíthatók.

$$A_n(\alpha) = \int_0^\infty \mu^n e^{-\alpha\mu} d\mu = \frac{n! e^{-\alpha}}{\alpha^{n+1}} \sum_{\nu=0}^n \frac{\alpha^\nu}{\nu!}$$

$$B_n(\beta) = \int_{-1}^{+1} \nu^n e^{-\beta\nu} d\nu = (-1)^{n+1} A_n(-\beta) - A_n(\beta)$$

Érdemes megjegyezni, hogy az integranduszban lévő exponensben β előjelétől az integrál abszolút értéke nem függ, ez a tulajdonság azért hasznos, mert ennek ismeretében a centrumcsere elengedhetővé válik.

Ezen módszerrel kiszámoltuk az 1. átfedéseket a $(3d_{xy}, 2p\bar{y}), (3d_{xy}, 2p\bar{y})$ átfedések általunk kapott értékeit így ellenőrizhettük Mulliken által már táblázott értékekkel. /Igy beigazolódott, hogy a táblázatban másodfoku Newton interpoláció már teljesen kielégítő eredményt ad./

A $(3d_{x^2}, 2p\sigma)$ átfedés vizsgálatánál kitűnt, hogy az exakt érték és a közelítő módszerrel nyert érték közötti eltérés kb. 6 %.

Nem egész effektív főkvantumszámú függvények átfedései :

Ezek exakt számítására Gilde⁷ adott meg egy eljárást.

Nem célunk ennek részletes kifejtése, mivel az említett dolgozatban ez ismertetve van. Konkrét esetünkben azonban ez az eljárás nem volt minden további nélkül alkalmazható, mert oly integrálok is felléptek, melyek megoldását csak sorfejtéssel sikerült megoldani.

Nevezetesen

$$\textcircled{4} = \int_0^{\infty} n^m e^{-n} dn \quad \text{ahol } 0 < m < 1$$

Érdemes megjegyezni, hogy az inkomplett gammafüggvényekre Pearson⁸ táblázatát használtuk, a táblázatot kombináltuk parciális integrálásból adódó rekurzív formulával, interpolációs nehézségek miatt.

Ezzel az eljárással az alábbi átfedéseket számoltuk az

$(4s, 2p\sigma), (4p\sigma, 2p\sigma), (4p\bar{y}, 2p\bar{y})$ integrálokat.

Azt tapasztaltuk, hogy a közelítő módszer $(4s, 2p\sigma)$ esetében az exakt érték 50 %-t adta, a többi esetekben ez az eltérés még nagyobb volt /100-200 %/

Jellegzetes, hogy a közelítő eljárás alulról közelít minden eddigi esetben. Még megjegyeznünk annyit, hogy az effektív főkvantumszám nem egész esetben a numerikus munka jóval nagyobb, ezért nem érdektelen egy oly jobb közelítés kidolgozása, mely nagyobb munkával jár ugyan mint az /1/ közelítése de még mindig jobban kezelhető mint az exakt eljárás.

Befejezésül választ adunk a dolgozat elején kitűzött kérdésre :

mivel a közelítő eljárás alulról közelít, az exakt értékek nyilván nagyobb kölcsönhatást jelentenek, tehát a termrendszer jobban szétválík.

Végül ezen a helyen mondok köszönetet Dr. Gilde Ferenc docensnek és Dr. Bán Miklós tudományos munkatársnak a közvetlen irányításért és tanácsokért.

Summary :

Study on some overlap integrals occurring in transition metal complexes.

Sz. Fényi

The overlap integrals calculated by the approximation method of Gilde and those calculated exactly were compared. The deviation between the values of the two methods for the integral values of principal quantum number was not greater than 6 %, but for the overlaps ($4s, 2p\sigma$), ($4p\sigma, 2p\sigma$) and ($4p\pi, 2p\pi$) came to 50-200 %. As the exact values in each case were greater than the approximation ones so the separation among the energy values increased

I r o d a l o m

1. Gilde F. : Disszertáció 1958
- 2-3. Bán M. : Disszertáció
4. H. Hellmann : Einführung in die Quantenchemie.
1937 Franz Deuticke, Leipzig.
5. Mulliken R. S. C. A. Riecke, D. Orloff ;
J. Chem. Phys. 17 II. 243. /1944/
6. Preuss H. : Integraltafeln zur Quantenchemie.
/Springer, Berlin. I. Bd. 1956. II. Bd. 1957./
- 7./ Gilde : Überlappungsintegrale.
/Acta phys. et chem. Szeged. VII. 3-4/
- 8./ Pearson : Incomplete gamma - functions.

INDOLVÁZAS VEGYÜLETEK BIOSZINTÉZISÉNEK VIZSGÁLATA ÉLESZTÖKÖN

Porcs Tibor

V. évi, kémia-növényélettan sz. h.

NÖVÉNYÉLETTANI INTÉZET

Közismert dolog az indolvázias vegyületek előfordulása a magasabb szervezetségű növényekben (triptofán, indolauxinok stb.) Az irodalomban számos közlemény jelent meg, amelyek az indolvázias vegyületek mikroorganizmusokban való előfordulásáról számolnak be. Az indolváz és származékainak bioszintézisét magasabb szervezetségű növényeken és mikroorganizmusokon igazolták.

a/ Több összefoglaló ábrát ismerünk, melyekben képet kaphatunk az indolváz bioszintézisének utjáról, sőt az indol származékok szintézisééről is.

DAVIS (1955), ZOBERST (1958), POLJANOWSKI (1959) közölnek egy-egy ábrát melyekben az aromás aminosavak bioszintézisének egyes lépései vannak feltüntetve. A pentozefoszfát ciklusból indulnak ki, majd több köztes vegyületen át a sikiminsavig jutnak el, majd egy "z₁" intermedieren keresztül az antranilsav, ebből az indol majd a triptofán keletkezik. SCHRÖTER (1953) ábrájában hiányzik a "z₁" köztes vegyület, szerinte az antranilsavból közvetlenül keletkezhet indol, tyrozin, fenilalanin. SCHRÖTER triptofánból kiindulva kinureninen át vezeti le a nikotinsav keletkezését. Ezen reakciósor egyes intermedierjeiből származtatja a kynurensavat és a xanthurensavat.

MEHLER (1955) a 3OH-antranilsavból kiindulva az antranilsav 3,4-dikinonon át vezeti le az a-pikolinsav, nikotinsav és a kinolinsav keletkezését.

HEIDELBERGER ÁBRAHÁM, LEPKOVSKY (1949) tisztázták a triptofánból a nikotinsav keletkezésének reakciómechanizmusát.

Ezen rövid összefoglaló adatokból láthatjuk, hogy az indolvázias ve-

gyületekből kiindulva milyen nagyszámu élettanilag fontos vegyület keletkezik.

b/ Az antranilsav egy fontos központi vegyület az indolváz bioszintézise szempontjából, hiszen a fent közölt ábrákon az indolváz közvetlen előanyaga. DAVIS (1955) és POLJANOWSKI (1959) az ismeretlen "z₁" intermediérből származtatja az antranilsavat. Az antranilsavból és ecetsavból keletkezik az N-acetilantranilsav, majd több lépésen át az indol.

NYC, MITCHELL, LEIFER és LANGHAM (1949) izotóptechnikával a Neurospora néhány mutánsában bizonyították az antranilsav indol reakciót.

YANOFSKY (1956) PARKS és DOUGLAS (1957) szintén kimutattak indolt az E. coli antranilsavas táptalajából.

KREBS, HAFEZ, EGGLESTON (1942) kimutatták, hogy a Bacterium coli a 2/2 aminofenil etanolt képes átalakítani indollá.

MANN és SMITHIES (1955) szerint indol keletkezik a 2/2 aminofenil etilaminból.

TEAS és ANDERSON (1951) antranilsav keletkezését mutatták ki triptofánból, a kukorica porzóiban, csiranövényekben és levelekben. Az antranilsav keletkezése triptofánból kinureninen keresztül történik.

Látható a felsorolt irodalmi adatokból, hogy az indol szintézise több féle előanyagból és különböző élő szervezetben játszódhat le.

d./ Irodalmi adatok utalnak arra, hogy több élő szervezet képes indolból és szerinből triptofánt szintetizálni. Néha nem szükséges szerint sem adagolni a tápoldathoz, ilyen esetekben amikor az élő szervezet elegendő szerint tartalmaz.

GUFFENHEIM (1944) a Neurospórában tudta megvalósítani az indol és szerin kondenzációját.

WILDMANN, FERRI, BONNER (1947) a triptofán szintézist indollal és szerinnel infiltrált parajlevelekben sikerült észlelniök.

MADIHUSUDANAN, NAIR, VAIDYANATHAN (1961) kísérleti növényként a csicseri borsót használták. Infiltrációs kísérletek azt mutatták, hogy a triptofán közvetlen előanyaga az indol és a szerin. A szintézisben közre-

működő enzimet (szintetáz) a mag sejtmentes kivonatában kimutatták. A szintézis optimális pH-ja 5.5 és piridoxálfoszfát jelenléte is szükséges a reakcióhoz. A triptofán-szintetáz működését a nehéz fémionok gátolják.

YANOFSKY (1957) Neurospóra mutánst vizsgálva mutatta ki az indol és szerin kondenzációját triptofáná.

UMBREIT, WOOD, GUNDALUS (1946), YANOFSKY (1952) mutatták rá arra, hogy az indol és a szerin kondenzációs reakciójához elengedhetetlen a pyridoxálfoszfát jelenléte.

POLJANOWSKI (1959), BRAUNSTEIN és SCHEMIKIN (1953) tisztázták a fosztopiridoxál-proteid biokatalitikus szerepét az indol és szerin kondenzációjában. Az indol reakcióban lép a szerin-fosztopiridoxál proteid komplex-szel, a szerin és a fosztopiridoxál egy azometin kötéssel létesít vegyületet és a fosztopiridoxál-proteid kilépésével keletkezik a triptofán.

TATUM és SHEMIN (1954) tanulmányozták a reakció mechanizmusát. A szerint jelölték C¹⁴-gyel és N¹⁵-tel és deutériummal, A reakció lejátszódása után egy molekula triptofánra számolva, egy atom deutérium hiányzik. Ebből azt következtetik, hogy a reakció intermolekuláris dehidratáció.

RAFELSON (1955) az *A. aerogenes*-ből izolálta a jelzett szerin segítségével szintetizált triptofánt, ennek oldallánca hasonló mintájú mint a jelölt szerin.

Az indol és szerin kondenzációs reakcióját még a következő mikroorganizmusok segítségével hajtották végre: *Lactobacillus ssp.* (SNELL 1943, SCHWEIGERT 1947) *Lentinus amphotodes* (FRIES 1950) *Salmonella typhosus*, *B. coli*, és *Claviceps purpurea* (HARLEY, MASON 1954).

d./ Közismert dolog az IES előfordulása a magasabb szervezetségű növényekben. Az irodalomban azonban számos közlemény jelent meg, amelyek az IES-nek a mikroorganizmusokban való előfordulásáról számolnak be.

GRUEN (1959) nagy összefoglaló dolgozatában, melyben az auxinok gombákban való előfordulásáról számol be, közli hogy 30 gomba genus és 75 gombafaj auxin produkcióját irták le. Az előfordulási adatokat megnézve

megállapíthatjuk, hogy többségében az IES jelenlétét biológiai teszt módszerekkel mutatták ki. A mikroorganizmusokból csupán három esetben állítottak elő IES-t. KÖGL és KOSTERMANS (1934) 50 kg élesztőből éteres extrahálással 1,2 mg IES-t kaptak. THIMANN (1935) a *Rhizopus sinusból*, CRAM és TISCHLER (1943) *Penicilliumból* állított elő IES-t.

A gombák auxinprodukciónak főleg *Avena kolooptil* tszttel mutatták ki. A *Saccaromyces* genuson belül a *S. cerevisiae* auxinprodukciónak mutatták ki *Avena* teszt segítségével és izolálással. Néhány adat ismeretes, ahol az IES jelenlétét papirkromatográfiával bizonyították.

WOLF (1952) az *Ustilago zaeae*-ből és a *Gymnosporangium juniperi virginiae*-ből (1956). Megemlíti, hogy az utóbbi gomba csak akkor képes IES-t szintetizálni, ha a tápoldatban 0,1 % triptofán volt. Foglalkozott ezenkívül még a fent nevezett gomba IES bioszintézisével is. Megállapította, hogy a *Gymnosporangium juniperi virginiae*-ban az IES bioszintézise a triptaminon keresztül történik.

WATANABE (1957) EHRLICH reagenssel mutatta ki az IES-t *Piricularia oryzae* éteres savanyú extraktumának papirkromatogramján.

GRUEN (1956) *Phycomyces blakesleanus*-ből papirkromatográfiával és SALKOWSKI reagenssel mutatta ki az IES-t.

URLICH (1960) közölte IES előfordulást mikrorhiza gombákban. Említést tesz az IES-oxidázról is, amely a gomba kimutatható IES tartalmát 24 óra alatt II más vegyületté alakítja át.

Ha az irodalmi adatokat megnézzük, megállapíthatjuk, hogy az IES jelenlétét legtöbbször biológiai teszt módszerekkel mutatták ki. Vizsgálataim célja az volt, hogy antranilsavból kiindulva tanulmányozzam az indolváz, majd a triptofánon keresztül az IES bioszintézisét élesztőkön. Az antranilsavból kiindulva az IES-ig a köztes lépéseket idáig más és más élő szervezeteken igazolták. Ismert dolog volt az indolváz és származékainak jelenléte az élesztőkben, tehát ezek bioszintézisének minden lépését lehetségesnek látszik vizsgálni kizárólag az élesztők egy faján is.

Anyagok és módszerek

a./ Indolváz bioszintézise : 100 ml csapvíz + 1 g glükózban szuszpendáltam

4 g péklesztőt, 2 ml alkoholos oldatot készítettem 50 mg antranilsavból és 10 mg szerinből és ezt az élesztő szuszpenzióhoz öntöttem. 48 órán keresztül rázattam 25 C^o-on. Ezután az élesztősejteket kicentrifugáltam a tápoldatból, a tápoldatot vízfürdön vácuumban szárazra bepároltam. A maradékot 10 ml peroxidmentes éterrel feloldottam és ebből 0,1 ml-t felvittem kromatogram papírra. Izopropanol : NH₃ : víz 10 : 1 : 1 arányu keveréket használtam szolvensnek. A kromatogramot GORDON WEBER reagenssel hívtam elő.

b/ Triptofán bioszintézise : az a/ pontban leirt élesztő szuszpenzióhoz 2 ml alkoholban oldott 30 mg indol és 10 mg szerint adtam. 48 óra rázatás után (25 C^o-on) az élesztősejteket kicentrifugáltam. A tápoldatot vízfürdön vácuumban szárazra bepároltam. A maradékot 10 ml alkoholban enyhe melegítés közben feloldottam, majd kromatografáltam. Szolvens : butanol-ecetsavviz 2 : 1 : 1 arányu keveréke. A kromatogramm kvantitatív értékelése : a HAIS és FRANC által közölt (csökkenő standard mennyiség) módszere az analizált oldat növekvő mennyiségével szembeállítva) módszer segítségével történt. A futtatott kromatogramot acetonos ninhidrin reagenssel hívtam elő.

c./ Az IES bioszintézise : az a/ pontban leirt tápoldatba 1 mg alkoholban oldott 20 mg triptofánt adtam 48 órán keresztül rázattam (25 C^o-on). Az élesztősejtek kicentrifugálása után a tápoldatokból az indolauxinokat éterrel extraháltam LARSEN (1939) és BONDE (1953) módszere szerint. Az éter peroxidmentesítése a HEYN (1936) által leirt módszer szerint történt. A savas frakció 1 ml-ét kromatografáltam. A kromatogram előhívása GORDON WEBER reagenssel történt. A kicentrifugált élesztősejteket (NH)₂ SO₄ al autolizáltam, és ezek IES tartalmát is megvizsgáltam.

WARBURG metódussal mértem a dekarboxilációt : 50 g péklesztőt szitán átréseltem 50 ml 0 C^o-os acetonba, üvegbottal kevergettem, majd ülepedni hagytam. Az acetont leöntöttem, majd ismét 50 ml acetonnal kevergettem. Az utóbbi műveletet még kétszer megismételtem. Vacuum szűrés után az élesztőt 50 ml éterrel mostam. Száritás után 6 g acetonport kaptam ezt 50 ml 10⁻³ M os káliumdihidrofoszfát oldatban szuszpendáltam. A WAR

edényke főterébe 2 ml szuszpenziót vittem, az oldaledénykébe 1/2 ml metanolt, amely 1 mg triptofánt tartalmazott. A megfelelő kontroll oldal edénykéjében 1/2 ml metanol volt.

Megemlítem, hogy szilárd ill. folyékony táptalajon nevelt élesztőkön is vizsgáltam az IES jelenlétét. A folyékony táptalaj összetételét pepton és e nélkül variáltam.

Eredmények.

Az antranilsavat tartalmazó tápoldat kromatogramján 0.95 Rf érték-nél egy határozott narancsvörös foltot kaptam, mely előhívás előtt UV fényben halványzöld színben fluoreszkált (indol). 0.40 Rf értéknél UV fényben hamuszínűen fluoreszkáló folt volt észlelhető, amely GORDON-WEBER reagens hatására rózsaszínű lett (IES). Más foltok is keletkeztek a reagens hatására, de ezeket nem azonosítottam (0.85, 0.80 Rf-nél).

Az indolt és szerint tartalmazó tápoldat kromatogramján, miután acetonos ninhidrin reagenssel előhívtam, 0.38, 0.50, 0.60 Rf értéknél lila foltot kaptam. Nem vettem figyelembe a szerin foltját, mivel ezt eleve tartalmazta a tápoldat. Minden esetben szintetikus anyaggal párhuzamos csíkot futtattam. A triptofán foltját azonosítottam 0.50 Rf értéknél. Kvantitatív vizsgálatok alapján megállapítottam, hogy a *S. cerevisiae* 30 mg indilból és 10 mg szerinből 6 mg triptofánt tud szintetizálni 72 órás rázatás után.

A triptofánt tartalmazó tápoldat kromatogramján 0.4 Rf értéknél egy határozott foltot kaptam, és 0.75 Rf-nél egy barna színű foltot GORDON-WEBER reagens hatására. Áttanulmányozva azokat az adatokat amelyeket SEN és LEOPOLD közölt az indolvázis vegyületek színreakcióiról, Rf értékeiről különféle szolvensekben, igen nagy valószínűséggel megállapíthatjuk, hogy a 0.75-nél lévő folt a triptamin. A 0.40 ill. 0.95-nél lévő vegyületek amelyeket szintetikus vegyületek futtatásával is azonosítani tudtam, az IES és az indol. Az aminosavakra előhívott kromatogramon a 0.60 Rf értéknél a valint, 0.38 Rf-nél az alanint és 0.50 Rf értéknél a triptofánt tudtam azonosítani irodalmi Rf értékek és szintetikus vegyületek futtatás segítségével. Megjegyzem, hogy az IES-t, triptofánt, indolt papirelektroforézissel is sikerült szétválasztani és azonosítani.

Peptonos tápoldatban nevelt élesztőtörzsek tápoldatában a következő fajknál találtam IES-at. *Saccaromyces cerevisiae*, *Schizosaccharomyces pombe*, *Geotrichum candidum*, *Cryptococcus diffluens*, *Paratorulopsis pseudaria*, *Procandida tropicalis*. A sejtek autolizátumának extraktumában csak a *Schizosaccharomyces pombe*-nél sikerült IES-at kimutatni.

A triptofánnal nevelt *S. cerevisiae* tápoldatában már három órai rázás után kimutatható mennyiségű IES keletkezett. A kontroll edényekben rázatott szuszpenzió éteres extraktuma kromatografálva nem mutatott IES reakciót. Az inkubációs idővel emelkedett az IES produkció, amelyet a folt színének intenzitása jelzett.

WARBURG metódussal mértem az élesztőből készült acetonpor szuszpenzió széndioxid produkcióját. A metanolban oldott triptofán hozzáadása után emelkedett a széndioxid mennyisége a kontrollhoz viszonyítva.

		h ₁ óra	h ₂ óra
		közép	közép
triptofán nélkül	1.	+ 36.6	+ 17.2
	2.	+ 29.7	+ 12.7
+ triptofán	3.	+ 42.1	+ 20.5
	4.	+ 58.0	+ 34.0
		+ 33.1	+ 14.8
		+ 50.0	+ 27.2

Az első órás mérések alapján

levegő

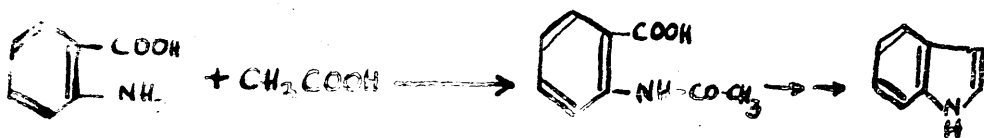
0 CO₂ 0.2 (25 C^o-on)

A reakció lassu volta a triptofán rossz oldódásának tulajdonítható.

Eredmények értékelése

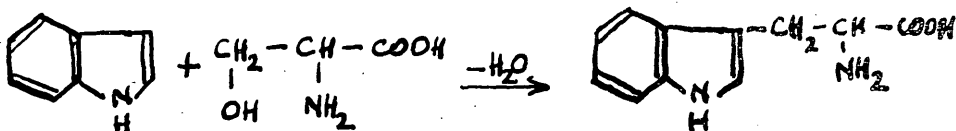
Az antranilsavas tápoldatban sikerült az indolt kimutatni, míg a kontroll szuszpenzióban nem találtam meg. Valószínű tehát, hogy a *S. cerevisiae* képes az antranilsavból indolt szintetizálni. NYC. MITCHELL, LEIFER és LANGHAM (1949) a *Neurospora*-ban, majd YANOFSKY (1955) az *E. coli* segítségével tudta ezt a reakciót megvalósítani.

POLJANOWSKI (1959) szerint a reakció a következőképpen játszódik le



N-acetyltranilsav

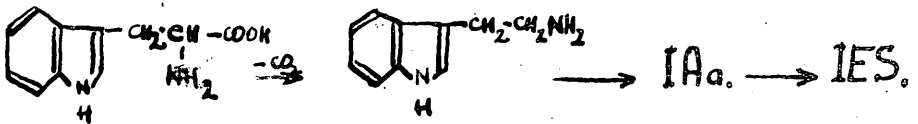
Az élesztő szuszpenziójához alkoholban oldott indol és szerint adva létrejött a két vegyület dehidrációs kondenzációja és triptofán keletkezik. A triptofán bioszintézisének ezt a formáját GUGGENHEIM (1944) a Neurospora-ban, WILDMANN, FERRI, BONNER (1947) Neurospora mutánsokban igazolta. Ezt a szintézist magasabb szervezetségű növényekben is igazolták infiltrációs kísérletekkel.



Ezen szintézis mechanizmusát izotoptechnikával TATUM és SHEMIN (1954) igazolták.

Az indol és szerint kondenzációs reakcióját a triptofánszintetáz enzim végzi, melynek prosztetikus csoportja a piridoxál foszfát. A szintetizált 6 mg triptofán a tápoldatban található meg, valószínűleg az élesztősejt is jelentős mennyiségű triptofánt beépít. Élesztő segítségével tehát nagyobb mennyiségű triptofán nyerhető indolból és szerintből. A kromatogramon lévő 0,38 Rf érték-nél az alanin valószínűleg a triptofán lebontási terméke a triptofánpyroláz enzim segítségével. A O. GOREF-nél lévő valin eredete kétséges. A triptofánt tartalmazó tápoldatból IES-t sikerült kimutatnom nagyobb mennyiségben.

Az IES mellett a triptamin feltja is határozottan megjelent. Ebből következik, hogy az élesztőkben esetlegesen található IES a triptofánból keletkezik triptaminon keresztül :

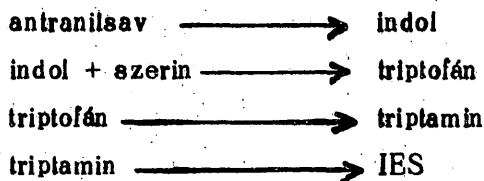


Ezt az IES szintézist SKOOG (1937) a zab szövetében, PILET és ATHANASIADIS (1959) a lencsében; DANNENBURG és LIVERMANN (1957) a görögdinnyében, CAROY és WOLF (1957) a gombákban észlelte. A *S. cerevisiae* ben is triptaminon keresztül megy az IES bioszintézise. Ezt a feltevésemet még WARBURG módszerrel is igazolni tudtam, mivel a triptofánból a triptamin keletkezése decarboxilációval történik, a közben felszabaduló széndioxid által okozott nyomásemelkedés mérhető. A WARBURG-ozási táblázatból világosan látható a decarboxiláció. Ezen vizsgálat alapján méginkább igazolva látszik az a feltevés, hogy a *S. cerevisiae* IES bioszintézise a triptaminon keresztül történik.

Összefoglalás

Az IES bioszintézisének tanulmányozására rázatott élesztőszuszpenziókat, analizálására papirkromatográfiát használtam. Megállapítottam, hogy a triptofán adagolásával emelkedett az IES feltjának intenzitása. Kimutattam a triptofán szintézist indolból és szerinből (30 mg indolból és 10 mg szerinből 6 mg triptofán keletkezett). Antranilsav hozzáadása a szuszpenzióhoz a tápoldatban indolt sikerült kimutatni, WARBURG módszerrel kimutattam a triptofán decarboxilációját, papirkromatográfiikusan a triptamint.

Ezen eredmények a következő szintetikus reakciókat mutatják :



Investigations on the synthesis of indole derivatives in yeasts

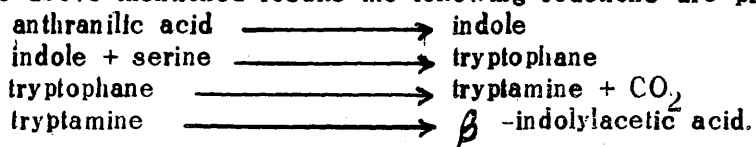
T. Procs

Various precursors were added to shaken suspensions of yeasts and the liquids were analysed with the aid of paper chromatography. Addition of

tryptophane increased the quantity of 3-indolylacetic acid in the liquid. Syntheses of tryptophane from indole and serine was also demonstrated. Following addition of anthranilic acid indole was found in the suspension.

Decarboxylation of tryptophane was observed in a suspension of an acetone-preparate of baker's yeast with Warburg-method. Tryptamine originating through the decarboxylation was paperchromatographically demonstrated.

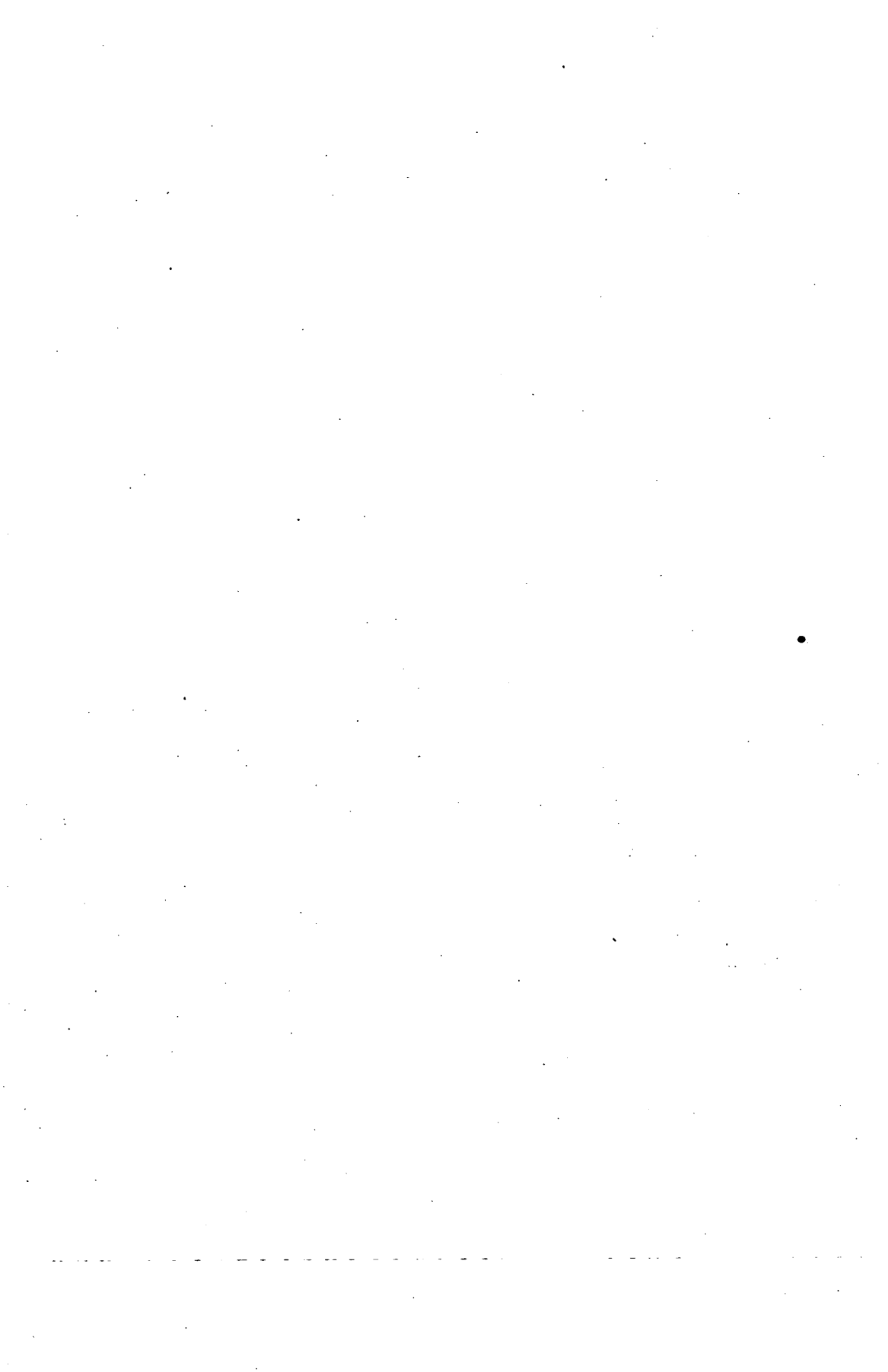
According to the above-mentioned results the following reactions are probably



I r o d a l o m

1. Bonde, E. K. : Bot. Gaz., 115- 1-15 (1953)
2. Crady, E. E., and Wolf, F. T. : Physiol. Plantarum, 12, 525 (1959)
3. Cram, D. J., and Tischler, M. J. : Am. chem. Soc. 70, 4238-39 (1948)
4. Dannenburg, W. N., and Liverman, J. L. : Plant Physiol., 32, 263 (1957)
5. Galston : A. W. and Purves, W. K. : Ann. Rec. Plant Physiol., 11, 239 (1960)
6. Gruen, H. E. : Ann. Rev. Plant Physiol. 10, 405-440 (1959)
7. Fries, N. : Sr. bot. Tidskr. 44, 380-386 (1950)
8. Harley-Mason, I. : Experientia (Basel) 10, 134. (1954)
9. Kögl, F., und Kostermans D. G. R. : Z. physiol. Chem. Hoppe-Seylers, 228, 113-121 (1934)
10. Krebs, H. A., Hafez, M. M., und Eggleston K. : Biochemic. J. 36, 306-309 (1942).
11. Larsen, P. : Moderne Methoden der pflanzenanalyse III. Band 565-625.
12. Madhusudanan Nair, P. - Vaidyanathan, C. S. : Arch. Biochem. Biophys., New York., 93, 262-266 (1961)
13. Mann, P. J. G. and Smithies, W. R. : Biochemic. J. 61, 101-105 (1955)
14. Manning, D. T., und Galston, A. W. : Plant. Physiol., 30 225 (1955)
15. Nyc, J. F., Michell, H. K., Leifer, E., and Langham, W. F. :
16. Pilet, P. E., and Athanasiades, J. : Br. schweiz. botan. Ges., 69, 16 (1959)
17. Schröter, H. B. : Handbuch der Pflanzephysiologie, III. Band 844-888 (1958)
18. Schweigert, B. S. : J. of Biol. Chem. 168, 283 (1947)
19. Sen, S. P. , Leopold, A. C. : Physiol. Plant, 7, 98-108. (1954)
20. Skoog, F. : Gen. Physiol. , 20, 311 (1937)
21. Snell, E. E. : Arch. of Biochem. 2, 389-394 (1943)

22. Tatum, E. L., and Shemin, D. : J. of Biol. Chem. 209, 671-675 (1954)
23. Teas, H. J., and Anderson, E. G. : Proc. Natl. Sci U. S. 37, 645 (1951)
24. Thimann, K. V. : J. Biol. Chem. 109, 279-291 (1935)
25. Ulrich, J. M. : Physiol. Plant. 13, 429-443 (1960)
26. Umbreit, W. W., Wood, W. A., and Gunsalus, I. C. : J. of Biol. Chem. 165, 731-732 (1942)
27. Watanabe, T. : Ann. Phytopathol. Soc. Japan, 22, 123-147. (1957)
28. Wildmann, S. G., M. G. Ferri and J. Bonner : Arch. of Biochem. 13, 131-144 (1947).
29. Wolf, F. T. : Phytopat. Z. 26, 219-223 (1956)
30. Wolf, F. T. : Proc. Natl. Acad. Sci U. S. 38, 106 III (1952)
31. Yanofsky, C. : J. of Biol. Chem. 194, 279 (1952).
32. Yanofsky, C. : Science (Lancaster, Pa.) 121, 138-139 (1955)



ANTIMIKROBIÁLIS VEGYÜLETEK ELŐFORDULÁSA

HAZAI DISZNÖVÉNYEKBEN

Göndös György

IV. évf. kémia-növényélettani sz. h.

NÖVÉNYÉLETTANI INTÉZET

Ha a legutóbbi évtized növényélettani, microbiológiai vagy gyógyszer-tani kutatási irányát figyelemmel kísérjük, szembeötlő, hogy a kutatók egyre nagyobb érdeklődéssel ismét a természetes hatóanyagok vizsgálata felé fordulnak. Intenzíven kutatják előfordulási körüket, izolálják ezeket a vegyületeket és nagy figyelmet fordítanak kémiai és biokémiai sajátásaik megállapítására, valamint alkalmazási lehetőségeikre.

Ezek felhasználásánál nem egy esetben olyan kiváló eredményeket értek el, amelyet szintetikus termékekkel mindezideig meg sem közelítettek.

A legújabb növényélettani, microbiológiai és gyógyszer-tani vizsgálatok, melyeket világszerte végeznek, arra a megállapításra jutatták a kutatókat, hogy a magasabb szervezetségű növényfajok hatóanyagait viszonylag csak igen kis mértékben ismerjük még annak ellenére, hogy mind elméleti, mind pedig gyakorlati szempontból igen lényegesek.

Az egyik ilyen terület, ahol ma még kevés ismerettel rendelkezünk a magasabb szervezetségű növényekben előforduló, a microorganizmusok élettevékenységét és szaporodását gátló, vagy azt teljesen megszüntető vegyületek vizsgálata.

Ilyen vegyületek meglétét feltételeztük hazai disznóvénnyekben is. Ez adott indítást e terület felkutatására.

E vegyületek, melyek jelenlétét feltételeztük egyéb szempontból sem lehetnek közömbösek.

Lényeges lesz tisztázni növényélettani szerepüket, kémiai természetüket és microbiológiai hatásmechanizmusukat.

Az ilyen természetű vegyületek kimutatása továbbá azért is lényeges, mert esetleg lesznek közöttük olyanok, melyek azok ellen a kórokozók és betegségek ellen is használhatók lehetnek, melyekkel szemben ma még nem rendelkezünk megfelelő gyógyszerrel. Elsősorban vírusokra és carcinomára gondolok itt. Ugy látszik ugyanis, hogy a vírus és rákellenes vegyületek felfedezése felé a baktérium és gomba ellenes anyagok vizsgálatán keresztül is vezet út.

Kérdés most már számomra az volt, hogy a vizsgált disznóvénnyek valóban tartalmazznak-e olyan vegyületeket, amelyek hatásosak a mikroorganizmusokra, amelyek károsítják anyagcseréjüket, gátolják szaporodásukat, így közvetlenül résztvehetnek a fertőzés megállításában, illetve a gyógyításban.

A kutatási terület megválasztásánál a következő szempontok vezettek:

1/ A disznóvénnyeket eddig még hatóanyagra nézve rendszeresen nem dolgozták fel.

2. Ha vizsgáltak is egyeseket, ezek a vizsgálatok legfeljebb 1 pfl értékre terjedtek ki.

3. A vizsgálatokat csak baktériumok ellen végezték el egyik másik disznóvénnyél és gombákra nem, holott ezek sokszor nagyobb veszélyt jelentenek számunkra, mint a baktériumok.

4/ Ezek a növények nagy mennyiségben állanak rendelkezésünkre. Ha ugyanis ilyen növényekben találtunk hatóanyagokat, az a jövőbeli izolálás néhez munkáját, mely nagy anyagmennyiséget igényel - jelentősen megkönnyíti.

Anyagok és módszerek.

A disznóvénnyek hatását a következő két baktérium, illetve két gombafaj ellen próbáltam ki. A Gram pozitív *Bacillus cereus* /var. *mycoides*/ a Gram negatív *Serratia marcescens*, valamint a gombák közül *Syncephalastrum racemosum* és *Hansenula anomala*. Ezek a mikroorganizmusok, gyorsan egy 24 óra alatt elszaporodnak és az eredmények leolvashatók 24 órás inkubálás után.

A használt mikroorganizmusok általános jellemzése.

Bacillus cereus /var. *mycoides*/

Sporák: elipsozidálisak, átlag nagyságuk 1-1,5 μ /jelentős variációval/.

24 óra alatt megjelennek, spóra-hajtás /csírázás/ polaris.

Sejtek : 1-5 μ közöttiek, hosszú láncokban fordulnak elő, végük élesen levágott, a sejtekben granulumok láthatók, különösen ha a táptalajban glucos vagy glicerin van. Rendszerint zsirt raktároznak. A sima felülettel bíró törzsekben a sejtek mozgók, flagellumokkal. A rücskös felületű törzsek nem mozgékonyak. Gram pozitívak.

A zselatint folyósítják. Az agarkolloniák szürkéses, vékonyak gyorsan növekszenek a sejtlanok révén. Ferde agaron szürkés, gyorsan növekvő rhisoidos telepet képeznek, melyek hozzátapadnak az agarhoz, vagy beleisszikkadnak.

A tejet gyorsan peptizálják, gyenge koagulációval vagy anélkül. Véres agaron haemolízist hoznak létre. A nitrátból nitritet képeznek, a keményítőt hidrolizálják. A glycosból, fruktózból, maltózból, dextrinből, glicerinből savakat képeznek, de a saccharozból és szalicinből is. A mannózból és laktózból rendszerint nem. Az arabinózból, ramnózból xylozból raffinózból, inulinből és mannitból savképzés nincs.

A citrátokat, mint egyedüli szénforrást hasznosítják. Optimális hőmérséklet a növekedésükhöz 30 C° körül, a maximális 43 C° körül van. Aerob talajban fordul elő.

Serratia marcescens :

Sejtek : 0,5 - 1 μ hosszúságú pálcikák. Egyenként vagy alkalmadtán 5-6 sejtű láncokban előfordulva. Mozdó sejtek 4 peritrich flagellummal rendelkeznek. Gram negatívak. Zselatinon vékony enyhén szemcsézett, körkörös /cirkuláris/ enyhén hullámos szélű telepek képződnek.

Eleinte szürkéses, majd vöröses lesznek. A mediumot /zselatint/ meg lehetőséggel gyorsan folyósítják.

Agaron körkörös vékony szemcsézett telepek képződnek, melyek kezdetben fehérek, majd vörössé válnak. A husleveset zavarosítják, a felületen vörösgyűrűt vagy hártyát képeznek, valamint szürke üledéket.

Az ecetsavat, hangyasavat, borostyánkősavat, balra forgató tejsavat, etilalkoholt, acetil-metil carbinolt a 2, 3 butilenglikolt, széndioxidot és nyomokban hidrogént képeznek glycosból.

Desztilált vízben, amely carbamidot, kaliumclridot és glycózt tartalmaz, gyengén vagy egyáltalán nem nőnek.

Indolt nem képeznek. Nitrátból nitritet képeznek. Kénhidrogént képeznek cisteinből, cistinből és más organikus kénvegyületekből. Sulfatokból, thiosulfatokból kenet hoznak létre, de sulfidból nem. A pigment oldódik alkoholban, éterben, cloroformban, benzolban és széndisulfidban.

A pigment bediffundálhat az agarba is, az anyag enyhe víz oldékony-ságát igazolva akkor, ha a törzsek erősen pigmentáltak. 35 C^o-on nincs pigmentképzés. Trimetilamint képeznek. Fakultativ aerobok. Optimális növekedés 25-30 C^o között. Előfordul vízben, talajban, tejben, élelmiszerekben és Insektakban.

Syncephalastrum racemosum.

A Zygomycetales ordóban tartozik. Macroszópos növekedése a *Rhysopusra* emlékeztet kisebb nagyítással. Sporangium tartója az *Aspergillusra* emlékeztet. Nagyobb nagyítással látható, hogy a spóraláncok többé-kevésbé hosszú cső-alaku sporangiumba sorakozó endospórák. Trópusi eredetű. Trópusból importált termékekkel került hazánkba.

Hansenula anomala :

Sarjadzó sejtjeik vannak. Arthrospóráik nincsenek. Askusaik, melyek közvetlenül a Zygota átalakulásából keletkeznek sisak, kalap alakúak. Nitrátot asszimilálnak. Erjeszt glykózt, galaktózt, saccharózt, maltózt és 1/3 részben raffinózt. Nem erjeszti a laktózt.

Asszimilálni képes a glykózt, galaktózt, saccharózt, maltózt és raffinózt. Nem képes asszimilálni a laktózt. Asszimilál még ethanol-t, az arbutint hasítja és pseudomycelliummal rendelkezik.

A baktériumokat 2 % agart tartalmazó Bouillon táptalajon a gombákat maláta agaron neveltem. Az egész vizsgálati idő alatt friss 24 óra tenyészeteket használtam.

A vizsgált növények 1960. őszén az egyetemi fűvészkertből származtak.

A felhasznált eljárásnál a növénynek csak a levelét használtam fel, a vizsgálat tájékoztató jellege miatt. Mivel a növény egyik fontos szintetizáló szerve a levél, ezért ha a növény hatóanyagot tartalmaz, az legnagyobb

valószínűséggel megjelenik a levélben. Ezt egyébként gyakorlati tapasztalataink is alátámasztják.

A levelet vegytiszta kvarchomokkal homogenizáltam egészen pépes állapotig. Ezzel a sejteket elroncsoltam, s a hatóanyag sejtéből való kiszabadulását lehetővé tettem.

A homogenizálás után a növényi rész súlyára számított 2.5 x-es mennyiségű acetont tettem. Az acetonos kezelés kettős célt szolgált. Először a hatóanyag extrakciójának intenzitását növelte, másodszer a növényi részre tapadt microorganizmusokat elpusztította, amelyek a későbbi vizsgálatot zavarták volna.

Ezután az acetont a növényi részről elpárologtattam. Az aceton elpárologtatása után a száraz homogenizátumhoz annyi desztillált vizet adtam, hogy az ismét pépes állapotba kerüljön és testelésre alkalmas legyen. A növényi homogenizátum pH-ját közelítőleg 7-re állítottam be, nehogy az esetleges savasság hozza létre a microszervezetek szaporodásának gátlását. Előzetes vizsgálatok során meggyőződtem arról, hogy erre az eljárásra szükség van.

A hatóanyag vizsgálatát 2 pH értéken végeztem el, egy enyhén savas 6.5 és enyhén lúgos 7.5 pH-ju táptalajon. A két pH értéken azért dolgoztam, mert ha a testnövény savas karakterű hatóanyagot tartalmaz az savas környezetben aktívabb, ha pedig lúgos karakterű, akkor lúgos környezetben aktívabb.

Egyik igen jó példa erre a steránvázás glycoalkaloidok esete, amelyek maguk lúgos karakterűek és lúgos környezetben nagyobb gátló zónát hoznak létre, mint savas környezetben.

Az előzőeknek megfelelő 6.5 és 7.5 pH-ju táptalajokat Petri csészékbe öntöttem, s hagytam megszilárdulni. A szilárd agar lemez vastagsága 5 mm volt. Ezen a szilárd táptalaj felületén a megfelelő microorganizmust szélesztettem. A beoltott táptalajra ezután a homogenizátum kis kb. 0.1 g-nyi mennyiséget rávittem, úgy hogy az kis kup formájában megtapadt a szilárd táptalaj felületén. A tenyészeteket 25 C^o-os termosztátban 24 óráig át indukáltam. Ha ezen idő alatt antimicrobiális

hatóanyag diffundál ki a disznővény tesztelt részéből, úgy a testnövény körül megjelenik a jellegzetes microorganizmus mentes zóna, szemben a táptalaj egyéb felületeivel, ahol akadálytalanul szaporodik a kérdéses microorganizmus. A zónák nagysága a hatóanyag mennyiségével és minőségével, valamint aktivitásával és diffúzió sebességével arányos.

E r e d m é n y e k

A megvizsgált disznővények hatóanyagai szelektívnek bizonyultak. Előszörban a *Bacillus cereus* var. *mycoides* szaporodását gátolták. Másrészt viszont kizárólag csak gombákra, a *Hansenula anomalara* és a *Syncephalastrum racemosum*ra hatottak. Továbbá vannak olyan disznővények, melyek levelei mind a baktériumok, mind a gombák szaporodását gátolták. Ez utóbbi esetben széles hatóspektrumu antimicrobiális vegyületek jelenlétét kell feltételezni.

Csak egészen kevés esetben tapasztaltam a Gram negatív *Serratia marcescens* szaporodásának gátlását. Egyedül az *Iberis amara*, *hyacintiflora* esetében mutatkozott határozott gátló zóna, és az *Anemone rivularis*nál tapasztaltam jelentős 8 mm-es pigment gátlást. A vizsgálat eredményeit illetően egészen külön helyet foglalnak el azok a növények, amelyek kizárólag csak egyik gomba szaporodását gátolták, míg a másik vizsgált gombára hatástalannak bizonyultak. Ilyenek :

Tradescantia brevicaulis csak a *Syncephalastrum racemosum*ra

Lopesia coronata - » -

Aster purdonii csak a *Hansenula anomalara*, a

Doronicum pardalienenches - » -

Iberis amara hyacintiflora - » -

hatottak.

A vizsgálat eredményeit a következő táblázat tartalmazza :

Táblázat . A disznővények szaporodásgátló aktivitásának vizsgálata az alábbi microorganizmusokra.

Jelmagyarázat : I. *Bacillus cereus* /var. *mycoides*/-re

II. *Serratia marcescens*re

III. *Sycephalastrum racemosum*ra

IV. *Hansenula anomalara*

+ : Részleges gátlás.

x : Pigmentképzés gátlása.

A növény neve	Az inhibíciós zóna sugara mm-ben							
	I.		II.		III.		IV.	
	ph6	ph7	ph6	ph7	ph6	ph7	ph6	ph7
<i>Achyranthes aureireticulata</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Aconitum orientale</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Ageratum mexicanum</i> «Blue Ball»	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Alonsoa caulialata</i>	+	2	-	-	-	-	-	-
<i>Alternanthera amoena</i> var. <i>Jewel</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Alternanthera aurea</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Althea rosea</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Alyssum maritimum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Alyssum ovirense</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Amaranthus caudatus</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Ammobium alatum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Anemone rivularis</i>	-	-	x	x	7	5	+	+
<i>Anthemis tinctoria</i>	-	3	-	-	-	-	-	-
<i>Antirrhinum dielsianum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Arabis coerulea</i>	8	6	-	-	7	8	6	6
<i>Arabis ferdinánd coeburgi</i>	-	-	-	-	3	-	2	2
<i>Arabis precurrens</i>	4	2	-	-	5	-	3	3
<i>Arabis tzechinensis</i>	2	2	-	-	-	-	-	-
<i>Arctotis grandis</i>	7	6	-	-	-	-	-	-
<i>Armeria vulgaris</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Arrhenantherum bulbosum</i>	-	-	-	-	+	+	+	+
<i>Artemisia vulgaris</i>	3	1	-	-	-	-	-	-
<i>Asperula hexophylla</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Aster alpinus</i>	3	-	-	-	-	-	-	-
<i>Aster dumosus</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Aster purdonii</i>	-	-	-	-	-	-	1	1
<i>Aquilegia chrysantha</i>	-	-	-	-	-	-	-	-

A növény neve	Az inhibíciós zóna sugara mm-ben							
	I		II		III		IV.	
	pH6	pH7	pH6	pH7	pH6	pH7	pH6	pH7
<i>Aquilegia japonica</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Baptisia tinctoria</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Baeria coronaria</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Begonia semperflorens</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Bergenia bifolia</i>	4	5	-	-	-	-	-	-
<i>Blumerbachia hyeronimi</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Browallia grandiflora</i>	+	+	-	-	+	+	4	5
<i>Calceolaria gracilis</i>	2	3	-	-	-	-	-	-
<i>Calendula officinalis</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Campanula persicifolia</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Canna indica</i> «Fürst Bismarki»	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Catanche coerulea</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Celosia cristata nana</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Cerastium bibersteinii</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Cerastium lanatum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Chrysanthemum carinatum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Chrysanthemum clusii</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Chrysanthemum coronarium</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Chrysanthemum indicum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Chrysanthemum irkutianum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Chrysanthemum maximum</i>	+	+	x	-	-	-	-	-
<i>Chrysanthemum ochroleucum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Chrysanthemum parthenium</i> «Flore pleno»	6	6	-	-	+	+	-	-
<i>Chrysanthemum segetum</i> «Helios»	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Cineraria maritima</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Cleome gigantea</i>	2	1	-	-	-	-	-	-
<i>Coleus reclinellianus</i>	2	+	-	-	-	-	-	-
<i>Collomia coccinea</i>	1	+	-	-	-	-	-	-

A növény neve	Az inhibíciós zóna sugara mm-ben							
	I		II		III		IV	
	pl16	pl17	pl16	pl17	pl16	pl17	pl16	pl17
<i>Commelina coelestris</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Convolvulus tricolor</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Coreopsis grandiflora</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Coreopsis tinctoria</i> « <i>radiata minima</i> »	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Cosmos bipinnatus alba</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Crucianella stilosa</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Dahlia pinnata semiplena</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Delphinium staphysagria</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Dianthus caryophyllus</i> « <i>Chabaud</i> »	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Dianthus chinensis</i> « <i>Flore pleno</i> »	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Digitalis amandina</i>	-	-	-	-	5	4	6	6
<i>Digitalis glutinosa</i>	-	-	-	-	3	2	2	4
<i>Digitalis orientalis</i>	-	-	-	-	3	5	5	6
<i>Digitalis purpurea</i>	-	-	-	-	5	6	5	5
<i>Dimorphoteca sinuata</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Doronicum orphanides</i>	3	3	-	-	-	-	-	-
<i>Doronicum pardaliendres</i>	5	5	-	-	-	-	3	3
<i>Escoltzia californica</i>	5	-	-	-	-	-	-	-
<i>Euphorbia variegata</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Erygeron alpinus</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Eryophyllus caespitosus</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Filipendula vulgaris</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Gaillardia grandiflora burgunder</i>	5	5	-	-	-	-	-	-
<i>Gaillardia lorentziana</i>	2	3	-	-	-	-	-	-
<i>Glaucium flavum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Gnaphalium lanatum</i>	+	+	-	-	-	-	-	-
<i>Godetia rubicunda</i>	4	2	-	-	-	-	-	-
<i>Gomphrena globoza rosea</i>	-	-	-	-	-	-	-	-

A növény neve	Az inhibíciós zóna sugara mm-ben							
	I.		II.		III.		IV.	
	pl16	pl17	pl16	pl17	pl16	pl17	pl16	pl17
<i>Gynerium argenteum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Helianthemum Pers.</i>	2	2	-	-	-	-	-	-
<i>Helichrysum bracteatum</i> var <i>monstruca</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Heliotropium peruvianum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Herbenstreitia dentata</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Heuchera villosa</i>	7	4	-	-	5	3	-	-
<i>Hormium pyrena</i>	3	2	-	-	-	-	-	-
<i>Hosta coerulea</i>	-	-	-	-	6	6	6	6
<i>Hypericum mosereanum</i>	5	5	-	-	+	-	-	-
<i>Iberis amara hyacinthiflora</i>	6	6	3	3	-	-	2	3
<i>Iberis sempervirens</i>	4	+	+	+	5	6	+	+
<i>Impatiens balsamina camelia</i>	5	+	-	-	-	-	-	-
<i>Iresine vallisii</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Iris vesicolor</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Kniphofia pumila</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Kochia trychophylla</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Lantana hybrida</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Leonotis leonorus</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Linaria amethystina</i>	1	+	-	-	-	-	-	-
<i>Linaria purpurea</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Lindelophia longifolia</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Lindheimera texana</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Lobelia dresdensis</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Lobelia Erinus</i> "Kaiser Wilhelm"	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Lobelia hybrida</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Lobelia syphyletica</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Lopesia coronata</i>	3	1	-	-	+	2	-	-
<i>Lupinus polyphyllus</i>	-	-	-	-	-	-	-	-

A növény neve	Az inhibíciós zóna sugara mm-ben							
	I.		II.		III.		IV.	
	pl6	pl7	pl6	pl7	pl6	pl7	pl6	pl7
<i>Macleya cordata</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Malope trifida</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Meuchera calicosa</i>	5	3	-	-	-	-	-	-
<i>Mimulus cardinalis</i>	2	3	-	-	-	-	-	-
<i>Mimulus luteus</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Mirrabilis jalappa</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Nemesia melissifolia</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Nemesia strumosa flribunda</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Nepata pannonica</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Nicotiana affinis</i>	-	-	-	-	4	5	3	5
<i>Nierembergia hypomanica</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Ocimum carnosum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Oenothera acaulis</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Origanum vulgare</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Palfoxia texana</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Papaver atlanticum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Pennisetum americanum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Penstemon diffuz.</i>	3	3	-	-	-	-	-	-
<i>Penstemon barettae</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Perowskia abrotanoides</i>	4	2	-	-	-	-	-	-
<i>Petunia atkinsiana</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Petunia fimbriata</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Phlox compacta</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Pilea muscosa</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Polemonium coeruleum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Potentilla nepalensis</i>	-	4	-	-	-	-	-	-
<i>Primula acaulis</i>	-	-	-	-	5	5	4	4
<i>Primula officinalis</i>	-	-	-	-	5	4	4	4
<i>Primula veris</i>	-	-	-	-	5	5	4	4

A növény neve	Az inhibíciós zóna sugara mm-ben							
	I		II		III		IV	
	pH6	pH7	pH6	pH7	pH6	pH7	pH6	pH7
<i>Prunella grandiflora</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Pulsatilla rubra</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Pyretrum carneum</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Rudbeckia bicolor</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Rudbeckia maxima</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Salpiglossis sinuata</i>	2	2	-	-	+	+	7	7
<i>Salvia splendens</i> «Raketa»	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Silene rubella</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Schkhuria abrotanioides</i>	6	6	-	-	-	-	-	-
<i>Statice sinuata</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Statice tatarica</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Tagetes erectus</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Thymus chamaedrys</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Rigrida paronia</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Tithonia speciosa</i>	2	+	-	-	-	-	-	-
<i>Tradescantia brevicaulis</i>	3	2	-	-	+	3	-	-
<i>Verbena deffiance</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Verbena officinalis</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Viola odorata</i>	6	6	-	-	-	-	-	-
<i>Viola sagittata</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Viscaria vulgaris</i>	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>Zinnia elegans aureo</i>	-	-	-	-	-	-	-	-

Az eredmények megbeszélése.

A táblázatból látható, hogy a megvizsgált disznövények nagy százalékban tartalmaznak olyan vegyületeket, melyek a fenti microorganizmusok valamelyikének, vagy azokból többnek a szaporodását gátolni képesek. A 165 vizsgált disznövény közül 59 hozott létre gátló zónát. Százalékosan kifejezve a disznövények 35.5 %-ban voltak aktívak. Ezen értéket irodalmi adatokkal összevetettem. Ezek az irodalmi adatok 5.9 %, 10 %, és 15 %-os

eredményeikről számolnak be. Ebből következik, hogy a választás valóban helyesen esett a disznővényekre.

Különösen érdekesek és meglepőek voltak a Digitalis fajok vizsgálatánál nyert eredmények. Amint azt a fenti táblázat mutatja a négy Digitalis faj

Digitalis amandina

Digitalis glutinosa

Digitalis orientalis

Digitalis purpurea

kizárólag a gombák szaporodását gátolták és ez a gátlás mind a négy Digitalis fajnál egyértelmű volt.

Ennek jelentősége azért különleges, mivel itt a gátló hatást valószínű a Digitalisokban előforduló szteránvázas glycosidok idézik elő. Ha ez így van, akkor ez azt jelenti, hogy egy egészen új sajátosságát ismertük meg a szteránvázas glycosidoknak microbiológiai szempontból.

Természetes ahhoz, hogy mindezek bebizonyítottak legyenek, ahhoz ezeket a szterolokat izolálni kell, ami munkám következő lépése lesz. Megállapíthatjuk tehát, hogy a vizsgált disznővény fajok valóban tartalmaznak olyan hatóanyagokat is, melyek a mikroorganizmusok szaporodását gátolják, tehát alkalmasak lehetnek fertőző betegségek gyógyítására. Vizsgálataim következő célja ezen vegyületek izolálása lesz és a kapott anyagok jellegének megállapítása.

Ö s s z e f o g l a l á s

Megvizsgáltam 165 db. közönséges és nagy mennyiségben rendelkezésre álló disznővényt, hogy eldöntsem vajon tartalmaznak-e mikroorganizmus ellenes hatóanyagokat. Vizsgálataim sok pozitív eredményre vezettek.

A vizsgálatok alapján tájékoztam arról, hogy a disznővények körében mely növényekkel érdemes foglalkozni hatóanyag izolálása szempontjából.

Ugy látszik, hogy elsősorban a Digitalisok hatóanyagának vizsgálatával lesz érdemes foglalkozni. Ezenkívül fontos további feladatunk lesz a széles hatóanyagú vegyületet tartalmazó *Arabis*, és *Iberis* fajokkal, valamint a szintén jelentős *Nicotiana affinis*, *Heuchera villosa*, *Hosta coerulea*, *Hypericum moserianum* és a különböző *Primula* fajok hatóanyagainak előállításával fog-

lalkozni.

A talált hatóanyagok elsősorban a Gram pozitív *Bacillus cereus* var. *mycoides* szaporodását gátolták, kisebb vagy nagyobb mértékben.

Emellett jelentős számban voltak olyanok, amelyek hatásukat gombákra fejtették ki.

A vizsgált növények 35,5 %-ban voltak aktívak, 26,6 %-ban baktériumokra 15,7 %-ban pedig gombákra hatottak.

Érdeemes tehát a még nem vizsgált disznövényeket további vizsgálatnak alávetni és nemcsak a disznövényeket, de a többi még eddig ilyen szempontból nem kutatott hatóanyagok feltárását is elvégezni.

165 ornamental plant species /growing in great quantity under our climatical zone /were examined for ascertaining their antimicrobial effectiveness against different bacteria and fungi.

Of the examined plant species 35.5 per cent was shown to be active, 26.6 per cent against bacteria and 15.7 per cent against fungi.

I r o d a l o m.

1. Adam, W. Desinfektion und Gesundheitswesen, 6 : 324. 1957.
2. Atkinson, N., and K. M. Rainsforó. Antibacterial substances produced by flowering plants. L. Preliminary survey. Aust. Jour. Exp. Biol. and Med. Sci. 24 : 49-51. 1946.
3. Bihop, C. J., and R. E. MacDonald. A survey of higher plants for antibacterial substances. Can. Jour. Bot. 29 : 260-269. 1951.
4. Clarenburg, A., Kampelmacher, E. H. Voeding, 18 : 384. 1957.
5. Ferenczy L., Gracza, L. Naturwiss., 44 : 590. 1957.
6. Freerksen, E., and R. Böniczke. Über antibacterielle Prinzipien in höheren Pflanzen. I. Zeitschr. f. Hygiene 132 : 417-449. 1951.
7. Fulton, M., Forney, C. E., Leifson, E. : Canad. J. Microbiol., 5 : 261. 1959.
8. Gottshall, R. Y., E. H. Lucas, A. Lickfeldt and J. M. Roberts. The occurrence of antibacterial substances active against *Mycobacterium tuberculosis* in seed plants. Jour. Chin. Invest 28 : 920-923. 1949.
9. Hughes, J., E. Survey of antibiotics in the wild green plants of Southern California. Antibiotics and Chemotherapy 2 : 487-491. 1952.
10. A. Lickfeldt, R. Y. Gottshall, and J. C. Jennings. The occurrence of antibacterial substances in seed plants wight special reference *Mycobacterium tuberculosis*. Bull. Torrey Bot. Club 78 : 310-321. 1951.

11. Osborn E. M. On the occurrence of antibacterial substances in green plants. Brit. Jour. Exp. Path. 24 : 227-231, 1943.
12. Pates, A. L., and G. C. Madsen, Occurance of antimicrobial substances in chlorophyllose plants growing in Florida. II, Bot. Gaz. 116 : 250-261, 1955.
13. T. J. Sproston, and M. W. Fonte, Isolation and antifungal action of naturally occurring 2-methoxy-1,4-naphthoquinone. Jour.
14. Winter, A. G. and Willeke, Untersuchungen über Antibiotica aus höheren Pflanzen and ihre Bedeutung für die Bodenmicrobiologie und Pflanzensoologie. Naturwiss 38 : 262-264.

A SZEGEDI PARKOK FÁI ÉS CSERJÉI.

Bitó Mária

III. évf. biológia-kémia sz. II.

NÖVÉNYTANI INTÉZET

Egy várost nemcsak műemlékei, értékes szobrai, épületei teszik szépé, hanem izlésesen elrendezett parkjai, üde virágokkal és fákkal díszített utcái is nagyban hozzájárulnak a város képének a kialakításához. Szeged az ország nagy kulturcentrumai közé tartozik. A Szabadtéri Játékok idején sok külföldi és vidéki vendég keresi fel. Jó lenne megismertetni a város lakóival és vendégeivel a parkokban és az utcákon előforduló ritka fa és cserjefajokat. Ezt elősegítenék a fákra helyezett táblák, amelyeken a fák magyar és a latin neve valamint a származása szerepelne. Szegeden sok a középiskolás, az egyetemen és a főiskolán több száz biológus és gyógyszerész hallgató van, akiknek szintén nagy segítséget jelentene a nevek felírása. Nem is beszélve azokról a középiskolásokról akik Szegedre jönnek kirándulni.

A szegedi parkok történetéről :

Széchenyi-tér.

Magyarország vidéki városainak terei közül a szegedi Széchenyi-tér a legnagyobb. Területe 50.087 m^2 . Bármely világvárosnak a becsületére válna. A Széchenyi-tér rendezése a Bach korszakban történt meg. A kocsimentén kétoldalt a gyalog sétautak készítését 1856-ban Gamperl a társadalom önkéntes adakozása alapján valósította meg. A Széchenyi tér a XVIII. század folyamán a régi vár melletti "Nagy piacból" alakult ki. Amíg a vár állott a katonai parancsnokság betiltotta a tér befásítását, nehogy a fák akadályozzák a szabad kilátást. A Széchenyi tér szép vadgesztenye fákat Gamperl polgármester ültette 1858-ban. A Széchenyi tér a mai alakját a XIX. század végén az árvíz után kapta. Szép platán fái, tiszafái, fenyői és Magnoliái

jó összhangban vannak a környező házakkal és a téren lévő szobrokkal.

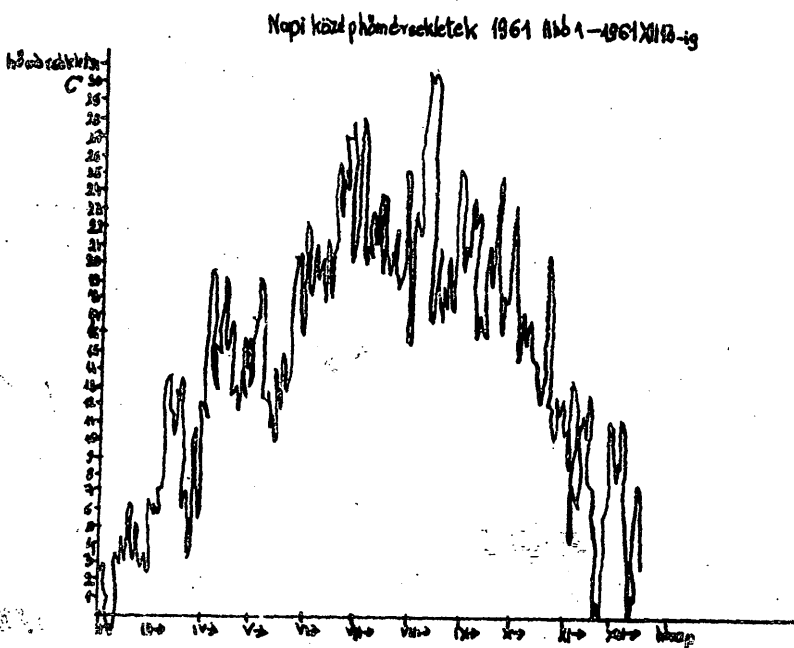
Dugonics-tér.

A Dugonics-téri fasorokat 1859-ben létesítették. A Dugonics-tér kifejező harmoniába olvadt az ősi fenyők koszorúzza Központi Egyetem épületével. A mai képét inkább a hársfái adják. Szép látványt nyújt a Központi Egyetem előtt lévő nagy simafenyő és az épület előtt lévő rózsák.

Ujszegedi Liget.

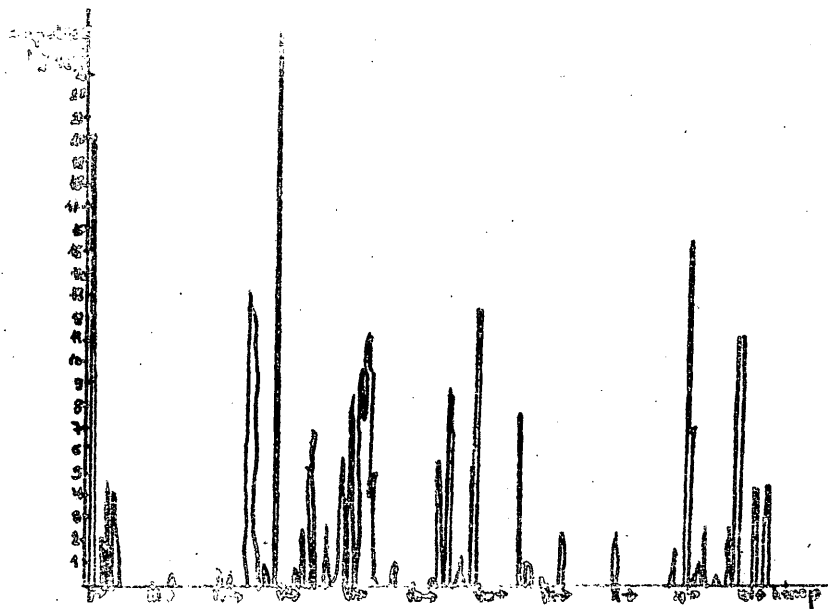
Szeged legnagyobb kiterjedésű parkjának az ujszegedi Ligetnek, vagy ahogyan régebben nevezték a Népker-t-nek az alapját 1853-ban vetették meg. Ott azelőtt óriási kubikgyödrök és mocsarak voltak. A parkosítást jó részt a katonaság segítségével végezték el. A Liget hosszú ideig az uralkodó osztály pihenését és a szórakozását szolgálta. Ma már a szocializmust építő ember jogos birtokába kerültek az árnyas padok, a virágos parkok.

Szegeden a Nagy körút és a Tiszapart által határolt területen lévő parkokon és utcákon előforduló fa- és cserjefajokat vizsgáltam. 1960 tele rövid volt és ez a fák korai virágzásában is megmutatkozott. A Széchenyi-téren a Magnoliák júliusban másodszor is hoztak virágot. Az 1961-es napi középhőmérsékletet az 1. ábra grafikonján tüntettem fel.



A csapadék eloszlását a 2. ábra grafikonja szemlélteti.

A csapadékeloszlás 1961 II hó - 1961 XII hó Big



2. ábra

Szeged fűmák és cserjéinek virágzási ideje 1961. ben.

Faj	virágzási idő :
<i>Taxus baccata</i> L. Tiszafa	III. 15
<i>Pinus strobus</i> L. Simafenyő	V. 2.
<i>Pinus nigra</i> Arn. fekete-fenyő	IV. 30
<i>Pinus silvestris</i> L. Erdei-fenyő	V. 8
<i>Picea pungens</i> Engelm. Ezüsfenyő	V. 22
<i>Picea excelsa</i> /Lam./ Lk. Lucfenyő	V. 1
<i>Juniperus sabina</i> L. Nehézszagú boróka	IV. 25.
<i>Juniperus virginiana</i> L. Virginiai boróka	IV. 23
<i>Carpinus betulus</i> L. Gyertyán	IV. 15.

Faj	virágzási idő
<i>Corylus avellana</i> L. Közönséges mogyoró	II. 9 II. 5
<i>Corylus colurna</i> L. Török mogyoró	II. 23 II. 2
<i>Betula pendula</i> Roth. Közönséges nyír	IV. 6
<i>Fagus silvatica</i> L. Bükk	IV. 10
<i>Quercus petraea</i> /Mattuschka/ Lieblein. Kocsántalan tölgy	IV. 16
<i>Quercus robur</i> L. Kocsános tölgy	IV. 30
<i>Juglans regia</i> L. Dió	IV. 3
<i>Populus tremula</i> L. Rezgő nyár	III. 21
<i>Populus italica</i> /Duroi/ Mönch. Jegenye nyár	III. 25
<i>Populus nigra</i> L. Fekete nyár	IV. 25
<i>Salix babylonica</i> L. Szomorú fűz	IV. 4.
<i>Morus alba</i> L. Selyem eperfa	IV. 13
<i>Morus nigra</i> L. Fekete eperfa	IV. 22
<i>Ulmus campestris</i> L. Mezei szil	III. 19
<i>Ulmus laevis</i> Pall. Vénic szil	III. 23
<i>Celtis occidentalis</i> L. Nyugati ostorfa	IV. 18
<i>Buxus arborescens</i> L. Télizöld puszpáng	III. 19
<i>Platanus acerifolia</i> /Ait./ Wild. Juharlevelű platán	IV. 5.
<i>Magnolia acuminata</i> L. Hegyeslevelű liliomfa	III. 25
<i>Liriodendron tulipifera</i> L. Tulipánfa	VI. 17
<i>Berberis vulgaris</i> L. Sóska	IV. 21
<i>Mahonia aquifolium</i> Nutt. Mahonia	IV. 9
<i>Philadelphus coronarius</i> L. Jezsámen /Jázmin/	V. 8
<i>Ribes aureum</i> Pursh. Arany ribiszke	IV. 20
<i>Spiraea van Houttei</i> Zabel. Közönséges gyöngyvessző	V. 10
<i>Cydonia oblonga</i> Mill. Birsk	V. 19
<i>Crataegus monogyna</i> Jacq. Egybibés galagonya	IV. 26
<i>Prunus cerasifera</i> Ehrh. var. <i>pissardi</i> /Carr./ Balley. Vérszilva	IV. 8

Faj :	virágzási idő
<i>Prunus persica</i> /L./ Batsch. Őszibarack	IV. 5
<i>Chaenomeles japonica</i> Lindl. Japánbirs	III. 23
<i>Caragana arborescens</i> Lam. Sárgaakác	V. 4
<i>Colutea arborescens</i> L. Pukkantó dudafürt	IV. 26
<i>Robinia pseudo-acacia</i> L. Fehérakác	V. 7
<i>Cercis siliquastrum</i> L. Judásfa	III. 24
<i>Gleditsia triacanthos</i> L. Lepényfa	V. 16
<i>Eleagnus angustifolia</i> L. Keskenylevelű ezüstfa	V. 21
<i>Hibiscus syriacus</i> L. Török rózsza	VI. 3
<i>Tilia cordata</i> Mill. Kislevelű hárs	V. 30
<i>Tilia patyphyllos</i> Scop. Nagylevelű hárs	VI. 14
<i>Tilia argentea</i> Desf. Ezüst hárs	VI. 17
<i>Ptelea trifoliata</i> L. Alásfa	VI. 2
<i>Koelreuteria paniculata</i> Laxm. Csörgőfa	V. 27
<i>Acer campestre</i> L. Mezei juhar	IV. 4
<i>Acer ginnala</i> Maxim	IV. 1
<i>Acer negundo</i> L. Kőrislelevelű juhar	III. 27
<i>Acer pseudoplatanus</i> L. Hegyi juhar	IV. 14
<i>Euonimus europaeus</i> L. Csikos kecskerágó	IV. 30
<i>Aesculus hippocastanum</i> L. Fehérvirágú vadgesztenye	IV. 12
<i>Aesculus pavia</i> L. Pirosvirágú vadgesztenye	IV. 14
<i>Parthenocissus tricuspidata</i> L. Japánborostyánszőlő	VI. 7
<i>Cornus alba</i> L. Fehér som	V. 7
<i>Catalpa bignonioides</i> L. Közönséges szivarfa	V. 22
<i>Fraxinus ornus</i> L. Virágos kőris	IV. 3
<i>Syringa vulgaris</i> L. Közönséges orgona	IV. 20
<i>Forsythia suspensa</i> Vahl. Bokoló aranyfa	III. 27
<i>Ligustrum vulgare</i> L. Közönséges fagyal	V. 8
<i>Sambucus nigra</i> L. Fekete bodza	V. 7
<i>Viburnum lantana</i> L. Ostormenta	III. 21

Faj :	virágzási idő :
<i>Lonicera tatarica</i> L. Tatár lonc	IV. 19
<i>Symphoricarpus rivularis</i> Suksdorf. Hóbogyó	VII.22
<i>Tamarix tetanara</i> Pall. Kerti tamariska	IV. 29
<i>Frangula alnus</i> Mill. Kutyabenge	V. 22.

I r o d a l o m.

- Kiss, F.- Tonelli, S.- Szigethy, V. 1927, Szeged
 Budapest: Magyar Városok Monográfiája Kiadóhivatala.
- Reizner, J. 1896-1899, Szeged története I-IV. Szeged. Engel-nyomda
- Varga, F. 1887. Szeged város története. Szeged
- Györffy, I. : 1928. Phytogéographia Szegediensis anni 1928. Szeged
 Szeged Városi Nyomda és Könyvkiadó.

NÉHÁNY CSONTOS HALUNK GÁZHÓLYAGJÁNAK ÖSSZEHASONLÍTÓ BONCTANA ÉS SZÖVETTANA

P. Kovács István

IV. évf. biol. földrajz sz. II.

ÁLTALÁNOS ÁLLATTANI ÉS BIOLÓGIAI INTÉZET

A gázhólyagot szokták uszó, illetve levegőhólyagnak is nevezni. Helyesebb azonban, ha egyszerűen gázhólyagnak nevezzük, tekintettel arra, hogy a benne lévő gáz összetétele különbözik a légköri levegő összetételétől, és az uszásban csak mint passzív szerv vesz részt.

Feltétlenül löbb funkciója van, elsősorban hidrosztatikai szerv, amely az uszást megkönnyíti. Szerepet játszik továbbá a gázcserében is, és feltételezik, hogy bizonyos esetekben hallószervként is működik.

Vizsgálati anyag és módszer.

Vizsgálataimat nyolc fajon végeztem. Valamennyi hal a nyílthólyaguak /Physostomi/ csoportjába tartozik. Ezek közül öt a Cyprinidae család tagja, nevezetesen a ponty /Cyprinus carpio/, a dévér keszeg /Abramis brama/, a széles kárász /Carassius carassius/, a nyálkás compó /Tinca tinca/, és a ragadozó /Aspius aspius/. Két faj a leső harcsa /Silurus glanis/ és a törpe harcsa /Amiurus nebulosus/ a Siluridae családba, és egy faj pedig, nevezetesen a réti csik /Misgurnus fossilis/, a Cobitidae családba tartozik.

Az anyagot a Fehér-tó őszi lehalászása alkalmával gyűjtöttem, amelyet részben 10 % os formalinban, részben Bouillé féle folyadékban rögzítettem, a metszeteket haemateinnel és eosinnal festettem.

A gázhólyag anatómiája.

A gázhólyag bonctani vizsgálatát az alábbi szempontok szerint végeztem: 1. elhelyezkedése, 2. alakja és nagysága, 3. szerkezete, 4. összeköttetés a bélcsatornával.

1. E l h e l y e z k e d é s : A gázhólyag az emésztőcsatorna hasi

része, a gerincoszlop és az aorta háti része között helyezkedik el. A test súlypontjához viszonyított helyzete befolyásolja a test egyensúlyozását.

L. Bertin vizsgálatai szerint azok a halak, amelyeknek súlypontja a gázhólyag alatt van /Tinca/, erőfeszítés nélkül lebegni tudnak, azok ellenben, amelyeknél a gázhólyag felett van a súlypont, csak akkor képesek lebegni, ha uszóikkal állandóan erőt fejtenek ki.

A gázhólyag cranio-caudalis irányba húzódik. Málamennyi pontyféléknél a hólyag a hasüreg $2/3$ -át tölti ki. A pontynál és a dévér keszégénél a hólyag hátulsó kamrája ivalakban görbült és egészen az anusig folytatódik. A másik három fajnál a görbület iver sokkal enyhébb, és a hólyag nem nyulik le az anusig.

A lesó, és a törpe harcsánál a gázhólyag másképpen helyezkedik el. Itt a hólyag a testüreg elülső $1/3$ -ában található, s a pontyfélékkel ellentétben annak aránylag csak kis részét – mindössze $1/5$ -ét – tölti ki. Erős kötőszövet szorosán a gerincoszlophoz rögzíti úgy, hogy arról igen nehéz lefejtetni.

A réti csik gázhólyagja három kamrából áll, és szokatlan elhelyezkedésű. A súlyzó alaku két kamra a testüreg elülső részében, közvetlenül a fej mögött és a gerincoszlop alatt egy csontos tokba zárva található. Ezek a testüreg $1/5$ -ét töltik ki. Az előbbi két kamrával összefüggő harmadik szabad kamraszakasz hátrafelé húzódik.

2. Alak és nagyság. A gázhólyag alakja fajonként nagy változosságot mutat.

A pontyféléknél az alapforma nagyjából megegyezik, a gázhólyag általában egy elülső kisebb és egy hátulsó nagyobb kamrából áll. A hátulsó kamra minden esetben kihegyesedik, és ventrális irányba az anus felé kissé meghajlik. A vizsgált fajok közül négyenél ezt az alapformát találtam. Kivétel csak a ponty képezte. Itt az elülső kamra mindig nagyobb, mint a hátulsó. A két kamra között egy csatormán keresztül összeköttetés van, így a bennük levő gáz összetétele azonos.

A két harcsafaj gázhólyagjának egészen más alakja van, mint az e

lőbb tárgyalt család tagjainak. Itt csak egy kamra van és az szivalaku. A leső harcsánál kétszer nagyobb a hólyág hosszúsága, mint a szélessége, a törpe harcsánál viszont csak alig hosszabb, mint amilyen széles. Maga a hólyág – ellentétben a pontyfélék nagyjából hengeres formájú gázhólyágjával – lapított.

Egészen érdekes és szokatlan formát mutat a réti csik gázhólyága. A három kamrából álló gázhólyág két kisebb elülső, és egy nagyobb hátsó részből áll, amely utóbbi szorosan ráfekszik a testfalra, és így a légnomásváltozásokat, ezáltal az időváltozásokat is könnyen megérzi. Ezért ezt a halat «időjós hal»-nak is szokták nevezni. /A. Brehm, 4./

3. Szerkezet. Egyedül a Siluridae családnál találunk belső falakkal határolt cellákat. Mindkét fajnál van egy hosszanti és egy keresztfal. A falak elhelyezkedése egészen szabályos, egy faj minden egyednél körülbelül azonos. A hosszanti fal pontosan középen, a keresztfal pedig az előbbire merőlegesen, a hólyág elülső 1/3-ában található. A keresztfalhoz mindkét oldalt egy igen vékony hártyaszerű képződmény, úgynevezett másodlagos fal tapad.

4. Összeköttetés a bélcsatornával. A gázhólyág a nyelőcső kiöblösödéséből alakult, és eredetileg egy vezetéken keresztül összeköttetésben áll a bélcsatornával. Ez a vezeték a ductus pneumaticus. Az olyan halakat, amelyeknél ez az összeköttetés megmarad, nyílthólyaguaknak /Physostomi/ szoktuk nevezni, ellentétben a zárthólyaguakkal /Physoclisti/ ahol nincs meg a ductus pneumaticus. Valamennyi hal, amelyeken a megfigyeléseimet végeztem, a Physostomi-ak csoportjához tartozik.

A pontyféléknél, ahol két kamrájú gázhólyágot találunk, a hátsó kamra elülső felébe torkollik a ductus pneumaticus. A törpe harcsa és a leső harcsa fajoknál, ahol nincs külön két kamra, hanem a hólyág csak falakkal van cellákra osztva, a vezeték közvetlen a harántfal előtt, a gázhólyág elülső 1/3-ába torkollik. A réti csiknál a két elülső gömbalaku kamrát összekötő vezetéken van egy nyílás, és itt szájadzik a ductus pneumaticus.

A gázhólyag szövettana.

A gázhólyag szövettanának vizsgálatát a Cyprinidae családnál végeztem. A többi család gázhólyagjának szövettani feldolgozását a későbbiek során fogom elvégezni.

A Cyprinidae családnál mindkét fajrészből keresztmetszeteket készítettem. A gázhólyag hátulsó kamrájából készített szövettani preparátumok keresztmetszeti képén az alábbi rétegek különíthetők el: 1. tunica mucosa, 2. tunica muscularis, 3. tunica serosa.

1. Tunica mucosa. A t. mucosa hámrétegből és lamina propria-ból áll. A hámot általában lapos, illetve néhol kisebb köbös hámsejtek alkotják. A l. propria-t vékony és laza szerkezetű kötőszöveti elemek építik fel. A kötőszövetben a kollagén rostok mellett rugalmas rostok is vannak.

2. Tunica muscularis. A t. muscularis aránylag vékony belső hosszanti és vastagabb külső körkörös sima izomrétegből áll. A két izomréteg között kötőszöveti elemeket csak nagyon ritkán találni. Szinte úgy látszik, mintha a két réteg egymással szorosan összefüggene. Az izomsejtek nagyon kicsik, és mind a két rétegben szorosan egymás mellé simulnak olyanjira, hogy a köztük levő kötőszöveti rostok egyáltalán nem festődnek.

3. Tunica serosa. A t. serosa a gázhólyag különböző szakaszainak megfelelően, a keresztmetszeti képen egyes helyeken vastagabb, más helyeken vékony. A t. serosa a t. muscularis külső, körkörös rétegéhez mint laza strukturájú kötőszövet kapcsolódik. Ahol a serosa kötőszöveti rétege vastagabb, kisebb szigeteket alkotó, tömörebb szerkezetű kötőszöveti elemeket találunk.

Véredényeket főleg a fentebb említett lazább szerkezetű kötőszöveti rostok között, ezenkívül nagyon ritkán a körkörös izomréteg külső részében találunk. Egyébként általánosságban elmondható, hogy ebben a rétegben - a tömörebb szerkezetű kötőszöveti nyaláboktól eltekintve - vannak véredények.

A gázhólyag külső kötőszöveti rétege több helyen átmegy a gázhólyagot a testüreg falához rögzítő kötőszöveti rétegbe. Ezen a kötőszöveti ny-

106.

lábok és a gázhólyag t. serosa kötőszövege felett mindenütt lapos, egy rétegű hámot találunk.

A gázhólyag belső kamrájának szövettani strukturája annyiban tér el a fentiekben ismertetett hátulsó kamra szövettani rétegeitől, hogy itt még ki egészítőleg megtaláljuk a tunica muscularis mucosae t és a tunica submuc. Ez utóbbi réteg idegekben igen gazdag és idegsejteket is tartalmaz. /Ábrahám-Stammer, 2./

A ductus pneumaticus szövettani képe megegyezik a hólyag hátulsó kamrájának szövettani rétegeivel. Eltérést csupán a t. mucosa hámja és a t. serosa kötőszöveti felépítése mutat. A ductus pneumaticus ugyanis a gázhólyag t. mucosa-jának egyrétegű laphámjával szemben, egyrétegű hengerhámot találunk. A t. serosa pedig abban tér el, hogy itt vastag rétegben zsírszövetet is lehet látni.

Összefoglalás.

Nyolc hazai csontos hal gázhólyagján végzett anatómiai és szövettani vizsgálataim eredményeit az alábbiakban foglalhatom össze :

1. A Cyprinidae, a Siluridae és Cobitidae családokba tartozó halak gázhólyagjának elhelyezkedése és szerkezete eltérést mutat.

2. Szövettanilag a ductus pneumaticus és a gázhólyag hátulsó kamrája szövettani felépítésében mutatkozik nagyobb fokú hasonlóság.

Zusammenfassung.

Der Verfasser hat die Schwimmblase acht einheimischer Teleostei-Arten anatomisch und histologisch untersucht. Die Beobachtungen können in Folgenden zusammengefasst werden :

1. Die Lage und der Struktur der Schwimmblase sind bei den untersuchten Familien /Cyprinidae, Siluridae und Cobitidae/ verschieden.

2. Im histologischen Aufbau zeigt sich eine bedeutende Ähnlichkeit zwischen dem ductus pneumaticus und dem hinteren Kamm der Schwimmblase.

I r o d a l o m

1. Ábrahám, A. : Összehasonlító állatszervezetten. /Felsőoktatási Jegyzet-ellátó Vállalat /, Budapest, 1959.
2. Ábrahám, A.- Stammer, A. : Pressurezeptoren in der Wand der Schwimmblase. Anales Biol. Univ. Hung. Tomus II, /1952./, p. 345-360. Budapest, 1954.
3. Bauch, G. : Die einheimischen Süßwasserfische. /2. Aufl./, Radebeul und Berlin, 1954.

4. Brehm, A. E. : Az állatok világa. /II. kiad./, II. köt. /Halak. kételtűek. hüllők/, Budapest, 1960.
5. Grassé, P. P. : Traité de Zoologie. Tome XIII.. Fascicule II.. p. 1342-1359.. Paris. 1959.

A SZERENCSI ÖBÖL ÉS KÖRNYÉKÉNEK TERMÉSZETFÖLDRAJZI VÁZLATA

Asztalos Ágnes
IV. biol.-földrajz sz. h.

FÖLDRAJZI INTÉZET

A terület a Tokaj-Hegyaljai hegységtől DNY-ra Sajó, Takta, Hernád, Tisza folyók között terül el. A Szerencs patak mintegy kettészeli É-D-i irányban. Ezzel a területtel először Hoffer A foglalkozott "Szerencsi sziget geomorfológiája" című munkájában. - tőle ered az elnevezés is - majd 1944-ben Láng Sándor.

Közigazgatásilag a terület az alábbi településeket foglalja magában : Szerencs, Legyesbénye, Bekecs, Monok, Tállya, Rátka, Ond.

Az 1959-60-61-es évben a Szerencsi sziget D-i középső, É-i részén Aranka tető, Hidegvölcs, Kassahegy, Topolyka, Somos, valamint a Tokaj-Abaujszántói DNY-i Szerencsi sziget felé eső részén Alsónyomás, Istenhegy, Holtvölgy, Szenttamás történtek perspektivikus kutató furások. A feltárt furási adatok képezik munkám alapját.

A térszín és környezetének morfológiai vázlata.

A Szerencs, Golop, Monok községek közé eső terület alacsony hegyvidék. A Szerencs patak baloldali része K felé egy jellegzetes penepénszerű hegyvidéki formát mutat, mely DNY-on fokozatosan simul bele az Alföld síkjába.

Az alacsony hegyvidéki rész Hoffer szerint öt vonulatra tagozódik.

A legkeletibb vonulat tagjai : Somos /284/, Kővágó /233/, Céklás /255/, Kassahegy, Feketehegy /265/ ennek D-i lejtője Berkectető /266/, Szerencsi hegy /207/.

A második vonulat részei : Szentes /322/ Kővágótető /312/, Nyirjes /337/, Középhegy /173/, Bekecsihegy /212/.

A harmadik vonulat tagjai : a teljesen különálló Öreghegy /273/. Szőlős-hegy /217/, délebbre a Falugaza /292/ Csörgő. Fulóhegy /255/.

A negyedik vonulat ettől nyugatabbra Zsebrik. Megyes

Mig az ötödik két sort alkot /Kaptár. Pipiske. Nagy-Répás. Kis-Répás/ majd /Hosszúhegy és Majoshegy/ Az utóbbi két vonulat már nem tartozik a szorosán vett terület közé, de összefügg vele.

A terület vonulataiban tektonikailag különálló egységeket is találhatunk mint pl. Öreghegy. Szőlős és Somoshegy. Ezek kb. 250 m átlagmagasságú riolit és riolittufából felépült tömegek. A tektonikailag nem összefüggő tagok különállóságának oka abban keresendő, hogy a területen történő vulkáni működések során centrolabialis jellegű vulkáni tevékenység történt. A törésvonalak területei összefüggő vonulatot alkotnak, míg a nevezett különálló tömegek a centrális jellegnek az eredményei. Alaktanilag azonban a nagymérvű lepusztulás következtében morfológiailag egy vonulatnak vehetjük.

A Szerencsi öböl felszínét morfológiailag értékelve azt tapasztaljuk, hogy a terület É-i része Abaujszántóval egy vonalban jól megőrizte alacsony felszíni jellegét, s a területen kevésbé érvényesült a tektonikai mozgás. A térszínen a völgyhálózat csak kezdetleges formát mutat. Ettől D-re és DNY-ra a térszín kezd kiemelkedni. A kiemelkedés során pl. az ujpleisztocén mozgások ÉNY-DK tengelyű antiklinálisokat hoztak létre /Somostól É-ra. Berkecstető/, valamint törések keletkeztek, melyek egyenlőtlenül megemelték a területet. A térszínen a töréses szerkezet következtében jól fejlett völgyhálózat alakulhatott ki, s e völgyképzésben a nagymértékű erózió is szerepet kapott. Ennek következtében a terület változatos és szétdarabolódott képet mutat. Az egyenlőtlen megemelkedéssel magyarázható az is, hogy a Szerencs és Hernád patak vízválasztója nem a hegységi részben, hanem a Hernádpárt közelében van.

A terület legáltalánosabb képét a felsoroltak mellett a különböző irányú törésvonalak alakították ki. Ezek a törésvonalak azok, melyek pl. megszabták a Gilip és Harangod patak völgyeit.

A törésvonalak irányukat négyve háromfélék :

I/ÉNY-DK. 2/É-D. 3/ K-NY. 1/Az ÉNY-DK irányu törésvonalaknál mindenütt nyílt kovásodás figyelhető meg. A területen három ilyen irányu törésvonalat találunk. Az egyik a Somoshegy ÉK-i oldalán húzódik, kettészeli a Szerencs patak tektonikus árkat. E törések mentén Tállya községtől K-re a Koldu bánya NY-i oldalán levő termális források is igazolják a töréses szerkezetet. A másik két törésvonal egymással prázuzamosan halad. Az egyik a Somos DNY-i oldalán, mely az előbbivel együtt mintegy körülveszi a Somos kitörési centrumát. A harmadik a Kővágó DNY-i oldalán, amely törés mentén a keleti szárny rétegei megsüllyedtek s a Kővágón még a felszínhez közel a horzsaköves lapillis riolittufa 100 m mélyre kerül, s rá réteges riolittufa rakodott le.

2./ A sziget-hegység területén több É-D-i irányu törésvonal van. A törésvonalak közrefogják az említett első hegyvonulat /Kassahegy, Feketehegy, Céklás, Berkeztető, Szerencsihegy/ területét. Ugyancsak törésvonal húzódik végig /Ond községen/, valamint a Szerencspatak K-i és az Istenhegy NY-i oldalán /Barátságógnél/ is. Az utóbb említett törésvonalak között az öböl egy É-D-i irányu teknője helyezkedik el, amelyben jelenleg is igen erős üledék felhalmozódás történik. A süllyedék széle felé, azonban a rétegek erősen lepusztultak. Elég legyen utalni a negyedkori rétegek igen csekély vastagságára, valamint a süllyedés nagyságát igazolja a mészhomokkő mintegy 200 m-es lesüllyedése is.

3./ A harmadik csoportba tartozó törésvonalak K-NY-irányuak. Ilyeneket találunk a Berkeztető és a Feketehegy között, valamint az Arankatető D-i oldalán.

A sziget-hegységtől K-re lévő terület a Szerencspatak baloldali terrasza. A terület erősen peneplán szerű. A térszín jellegét az epiro és orogénetikus mozgások adták meg. Ez Hoffer szerint egy új ciklus kezdete. Törések nem darabolják fel a területet egészen az Istenhegy és Danckatetői törésig.

Maga a sziget belseje vízben nagyon szegény. A Hernádnak és a Szerencspataknak a szigetben csak egy-egy aszója van /pl. a Szerencs pataké a Golo patak/.

Hoffer mintegy öt terraszs szintet ismertet a vidék folyóinál. Az első a

fellegrvári ujpleisztocéni /Hernád. Szerencs Golop patak völgyében csak foszlányokban/ található meg. A negyedik szint a folyóvizek ujholocén terrasza - az ötödik a folyók mai mederszintje.

A mai eredmények ezzel szemben nem mindég egyetértők. Láng S. szerint a Szerencsi szigethegységénél a pleisztocén folyóteraszok keletkezésé nem lehet az egyenletes kiemelkedéssel és az esetleges nyugalmi állapotokkal magyarázni. Ha ezzel lenne összefüggésben a terraszképződés, úgy a környék minden völgyében kellene terraszoknak lenni. Azonban a Hernád pataknak nincs, de a Gilip pataknak megvannak a pleisztocén terraszai.

Mind a Szerencs, mind a Golop patak tektonikus eredetű konzekvens völgyek. A folyóvölgyekben állandóan van víz. A folyók és aszóvölgyeik középszakasz jellegűek, s árkaik normális lejtőjűek. Maga a Szerencs patak Hoffer szerint a levanteiben tört be. Tektonikus volta mellett tanuskodik a korlátai, boldogkővárjai, rátkai, mádi stb. hidrokvarcit telepek, s a korlátai, abaujszántói langyos források is. A patak mai medre 2-3 m mélyen benn van az Óholocén terraszban, s ez igazolja az új terraszképződést. Óholocén terrasza pedig csaknem minden helyen van. Ezzel a terület hidrográfiai viszonyát röviden jellemeztem, mint olyan tényezőt, amely a térszín morfológiája tekintetében a tektonika mellett jelentős.

Visszatérve a szigethegység területére - itt az ópleisztocéni kőzetek jelentik a felszínt. /200-300/ A felszín formái legömölyödöttek, lekoptak a lejtők lankásak, rajtuk alig van törmelék, eredeti formájukat alig őrizték meg. A lepusztulás normális volt. Legnagyobb mértékét a pleisztocénben érte el, amikor az erózió kívül a kéregszerkezeti mozgások és a kőzetminőség is szerepet játszott a lepusztulásban. Az így kialakított formákat módosította a löszrakerakódás, amely a terület jelentős részében felhalmozódott, de különösen a szigethegység D-i előterében, ahol É-fele lankásan a Tisza és a Sajó völgyére 4-6 m-es peremmel végződik.

A terület vulkánossága és anyagai.

A Szerencsi öböl rétegsorát ma már a kutatások alapján egész jól ismerjük. A rétegsor alapja agyagmárga és finomszemű homokkő - minden

valószínűség szerint tortonai kora /öslénytani leletek alapján/. Azt a hegység É-i részén kimutatták, hogy a meszesagyagmárga, vulkáni homokkő, tufit felső része szarmata kora. Az agyagmárga a torton és a szarmata határán végbement transzgresszió eredménye. Egyes hazai és újabban szlovák geológusok azt állítják, hogy az Eperjes-Tokaji hegy vulkáni működése a pannonba is átnyult. Pl. az Sz2-es furásnál a pannon agyag és homokkő diszkordanciával települt a vulkáni kőzetekre.

Ennek alapján a vulkáni működést három szakaszra lehet osztani :

1. szakasz : tortonai vulkanizmus, mely az agyagmárga alatti összletet produkálta.

2. szakasz : Szarmata eleji vulkanizmus a nagy denudációig.

3. szakasz : szarmata végi /esetleg pannon kori/ vulkanizmus a nagy denudációtól.

E hármass tagozódás nem jelenti azt, hogy az egész területen a vulkáni működés három ilyen jól elkülöníthető szakaszban játszódott le. Az agyagmárgában vulkáni törmelék végig megtalálható s a fiatalabb un. idősebb andezit kitörés között sem fontos, hogy nyugalmi időszak lett volna, sok helyütt még diszkordáns réteg sincs köztük.

Érdekes tény az is, hogy a szarmata rétegbe a vízbe hullott szárazföldi összetételek váltakoznak. A vízbe hullott vulkáni törmelék diagenetikusán elváltozott, összecementálódott -míg a szárazföldi törmelék laza és sokszor gyermekfej nagyságu horzsaköveket is tartalmaz / Fe tufák a tenger feltöltődése következtében jöttek létre./

A Tokaji hegy egész területére jellemző, hogy a szarmata alatti összlet alsó részén kizárólag tufát, majd lávát /andezitot, tiolitot/ találunk.

A Szerencsi öböl területén riolitot főleg Öreghegy, Szőlös, Kőzuzó Somos és Tállyától D-re lévő területen, találunk. Somos hegynél a riolitot körülvevő réteges tiolittufa 200-120 m-ig, s alatta 120-0 /tsz-ig/ horzsakölapillis riolittufa található. Somos hegytől K-re egészen a Szerencs patak, Szántó dülő, Koldu patak-nál csak negyedkori képződményeket ismerünk. Ami Rátka községnél folytatódik, de alatta már zeolitosodott földpántos trachituffa van. Rátkánál /R3/ furásnál már limnokvarcit. Tállyától D-re lévő területen /T6/ csak mintegy 20-30 m vastagságu

riolittufa van, alatta réteges riolittufa, majd horzsaköves riolittufa, ami Kővágó hegy felé folytatódik, de itt már a felszínen. Somos oldal és Kővágó között csak negyedkori képződmények ismertek. Topolykánál /T 5, G 3/ réteges riolittufa, G3-nál kálitufa. Ugyanigy horzsaköves lapillis riolittufa ki sebb nagyobb mennyiségben Hidegvölgynél /SZ12, Sz4/ Arankatetőnél a limnopolit alatt mintegy 130-0m-ig, ami azután kihúzódva a Szerencs patak ezen részéig réteges riolittufa, mely fölött illit, pannon agyag, homok van a negyedkori képződmények alatt.

Istenhegynél a limnokvarcit /R37/ majd /R3/ horzsaköves lapillis réteges riolittufa váltakoznak, majd tőle DNY-ra zeolitosodott földpétos tufa, ismét limnokvarcit, végül 02-nél teljes riolittufa sorozatot találunk. Kassahegynél teljes egészében horzsaköves lapillis riolittufa, a felszínen egy negyedkori képződménnyel folytatódva a Kőporosnál alatta biotitos riolittufa zeolitosodott földpántos trasszal. Ond 7-es furásnál a Dancka tetőnél perlit, horzsakő, törmelékes riolittufa alatta horzsakőtufával s a tsz alatt horzsaköves lapillis riolittufával.

A Szerencsi patak földtani szelvényét ma meglehetősen ismerjük /07/ -negyedkori képe, zeolitosodott földpántos trasztufa, bentonitos agyagmárgás tuffit homokkő padokkal, utána ismét agyagmárgás tuffit.

A szarmatá denudációs térszint igen sokféle anyag borítja. Ezek zömme tavi üledékek - betonit, kaolin, porcellánit, szenes anyag, szén stb. Bentonit nagy mennyiségben pl. Istenhegynél /R37/ Középhegy, Danckatetőnél Kaolin. Arankatetőnél kis mennyiségben /Sz2/, Kassahegynél -a környéken nyomokban kvarcit, limnokvarcit, Istenhegy /R37, R3/ Rátta, Danckatetőnél porcellánit, Alsónyomásnál /09/ a tsz. alatt 100-170 m-re.

A furások arról tanuskodnak, hogy nem nagy kiterjedésű tó vagy tavak, hanem igen változatos, sekélyvizű, állandóan mozgó tórendszerek voltak, aminek következtében az üledék is igen változatos.

A Szerencsi ööl most bemutatott földtani eredményei először tárják fel a hegység DNY-i részének tufaszintjeit. A furási adatok szerint a tufaszintek mindenek előtt a vízbe hullott és szárazföldi jellegzetes és könnyen felismerhető fajtái horizontálisan jól láthatók.

1. Angaben zur Geomorphologie der Bucht von Gerencs

Diese Arbeit beschäftigt sich mit den geomorphologischen Erscheinungen der Bucht zu Gerencs, mit besonderer Berücksichtigung der tektonischen und hydrographischen Verhältnisse, mit der vulkanischen Tätigkeit der teutonisch - sarmatischen Zeit und derer Produkten sowie der territorialen Lage dieser Produkten.

I r o d a l o m

Hoffer A. A Szerencsi sziget geomorfológiája

M. Maier István - A Tokaj Hegyalja Tállya Mád közé eső területének földtani leírása /Bp 1928/

Láng Sándor - Geomorfológiai vizsgálatok a Miskolci kapuban /Földrajzi Közlemények 1944- Bp./

Rozlozsnik Pál - A Tokaj Hegyalja DNY-részének földtani viszonyai /Földt. Int. Évi jelentés. 1937/

Vadász Elemér - Magyarország földtana.
-Geológiai jegyzetek a Borsodi Bükk hegységről

É. Magyarországi Kutató Furó Váll. évi jelentése. Az egyes furási pontok adatai 1959-60-61.

ADATOK SZEGED VÁROS TELEPÜLÉSI VISZONYAIHOZ

Galántai Márta

IV. évf. biol.-földrajz sz. h.

FÖLDRAJZI INTÉZET

A 20 éves távlati, népgazdasági tervek során Szeged a között az 5 nagyobb vidéki város között szerepel, amelyet a kormány a nagyobbarányú fejlesztés útján, ipari és kulturális központu, egész Délkelet Magyarország gazdasági irányítására alkalmas centrummá fejleszt. Szeged település-földrajzi arculatában ez a tervezés, jelentős változásokat eredményez. Ezeket a nagy változásokat természetesen komoly és alapos tudományos vizsgálatok előzik meg, és így a távlati 15 éves városépítési, fejlesztési terv sok tudományos feladat elvégzését igényli.

Először a problémához kapcsolódok, amikor a diákkori munkám során, Szeged település-földrajzi helyzetének természetföldrajzi vonatkozásaiban vizsgálatokat végzek. Értekezésemben a városföld /urbanit/ településlehetőségei vonatkozásában a hidrogeográfiai viszonyok, és a várostérszín közetanyagának egymás közötti kapcsolata kerül elemzésre.

Szeged településének jelentős tényezőjét kell látnunk az említett természetföldrajzi viszonyokban. Maga a települési szint mint azt a szegedi településtörténeti munkákban láthatjuk, jelentős változásokon ment át napjainkig. E folyamatokat leginkább az antropogén hatások eredményezik. Azonban e szintnek jelentkeznek olyan természetföldrajzi tényezői is, amelyek a város-tervezés szempontjából nem lehetnek közömbösek. Munkámban elsősorban Szeged település-földrajzi problémáit a hidrogeológiai viszonyokkal hozom összefüggésbe. Az elemzésben először a környező kistáj területének vizsgálatát tartom fontosnak megemlíteni.

Kistáji keretet jelent Szeged árvízi érdekessége szempontjából az a

Tiszta jobbparti területsáv, amely Csongrád és Martonos között 7,5 km, szélességben húzódó árteret alkot. Ennek alsó harmadába, a legmélyebb szakaszába esik városunk legnagyobb része. Ennek az ártéri kistájnak gyenge, fővédvonalai töltése szakadt át 1879-ben. Ezért keresztgátak, védőtöltések és egyéb berendezések megerősítésével lehetett megvalósítani az ártéri város árvízvédelmi biztonságát. Ez az árvédelmi objektum az elteltek fél-évszázada alatt azt igazolta, hogy Szeged árvízvédelmi biztonsága ez esetben jól megvalósított műszaki munka volt.

A város településbiztonságát azonban az előbbi esettől függetlenül a jobbparton 1550 km², a balparton pedig 60 km² terjedelmű belvizi kistáj befolyásolja jelenleg is, amely a jobbparton "Algyő-Tápé-Vesszősi és Gyálai vízrendszer", a balparton pedig "Újszegedi vízrendszer" néven szerepel a Szeged Vízügyigazgatósági nyilvántartásában.

Mint ismeretes Szeged települését a történelem folyamán időnként visszatérő belvizkatasztrófa is veszélyeztette; a nagy tiszai árvizek mellett. A belviz káros hatásai még jelenleg is kihatnak a város térszínére. Száraz évjáratokat követő nedves periódusban, a talajviztárolás felszinközeli talajvizállást eredményez, és ez néhol forrásszerűleg előtörhet. Erre utal pl. Forráskút községnév is. Később megtelnek a völgyek füzérszerűen elhelyezkedő medencéi /semlyék vagy semlyékek/, amelyek legalacsonyabb peremén a víz átsap az alsóbb semlyékbe. Így vízfolyás indul meg a völgyekben, amelyek vize a Szeged környéki ártérbe gyűlik össze. Súlyosabb a helyzet akkor, ha a talajfelszín kemény telek hatására nagyobb mélységben átfagy. Ezen vastag hótakaró képződik, és tavasszal megolvadt állapotban kerül lefolyásra. Katasztrófa-helyzet alakulhat akkor is, ha az olvadás gyors felmelegedéssel jár, és ez rendkívüli záporokkal párosul. Mindezek a körülmények feltétlenül igénylik Szeged és környékének alapos morfológiai és földtani vizsgálatát.

Elmondható, hogy a kistáj jobbparti részének domborzata igen változatos. A makrorelief általában Kelet irányu lejtést mutat. A táj legmagasabb pontja Észak-Nyugaton 130 m., Dél-Nyugaton 140 m., a legmélyebb pont pedig 78 m. tszf. magasságban van. A mikrorelief ÉNY-DK irányu párhuzamos.

lapos völgyeket mutat. Fenékvonulataik és vízválasztóik közt 2-4, 10-15 m-es szintkülönbségek vannak. Ez a völgyek esetében átlagosan 1 % körüli esést jelent, ami nem egyenletes lejtésű, mivel azokat az oldalirányú homokbefúvások helyenként letorlaszolták. Ez utóbbiak tovább tagolják a völgyeket, és azokat medencékre bontják. Ezek a nép nyelvén semlyék, laposok füzérszerűen helyezkednek el egymás mellett. Ilyen környezeti viszonyok középpontjában terül el Szeged.

A város 84-78, Tápé 81, Algyó 83 m magasságu területével együtt egy mélyenfekvő teknőt képez, amelyet D-ről is a magasan, 87 m-re fekvő Horgos egészen bezár. Nem csoda tehát, hogy nemcsak a Tisza és a Maros, hanem még a Duna-Tisza közti vadvizek, a jó lejtési viszonyoknak megfelelően, a várost nagyobb esőzések alkalmával É-ről és Ny-ről körülzáró vízgyűjtő medencében gyűlnek össze. Ezek régebben Szeged belterületén áthaladó számos ér által összeköttetésben voltak a Tiszával, és azokon át folytak le a még mélyebben fekvő folyó medrébe. A feltöltő munkák során ezek az erek a felszín morfológiai arculatából teljesen eltűntek. Feltételezhető azonban, hogy a talajközetek belsejében történő talajvíz mozgások, továbbra is a volt erek területén mutatnak intenzívebb áramlást, a folyóvölgy tengelye irányában. Ez esetleg együtt járhat az altalaj szerkezetének feltazulásával, ami jelentős problémája lehet a város fejlesztésének. Gondolhatunk itt a szegedi belterület egyes térszín elvizenyősödéseire, egyes utszakaszok, területek vagy tiszavölgyi rakpartok lesüllyedéseire stb. Dolgozatomnak éppen ez a további feladata, hogy a város településföldrajzában ezeket a problémákat vizsgáljam. Ehhez azonban fontos röviden ismertetni Szeged településtörténeti kialakulását.

Az első település nyomait a Duna-Tisza közén a vízből kiemelkedő halmokon és dombokon találjuk. Egy 1713-ból fennmaradt térkép is azt bizonyítja, hogy a város is ezen víz nem járta területnek három szigetszerű kiemelkedésén épült fel. Ez időből származó adataink szerint a nevezett kiemelkedéseken: Alsóvárosban 575, a Felsővárosban 340, és a Várban számos kisebb-nagyobb lakóház állott. Szeged eredeti domborzata

tehát hármass tagozódású. Legmagasabb szint az értérből kiemelkedő hátság, a későbbi Vár, és az ahhoz D-ről csatlakozó Palánk. Ettől a DNY-ra terül el a mai Alsóváros hátsága. A harmadik rész pedig a Felsőváros 6-7 különböző nagyságú szigete. Ezek magassági viszonyait pontosan nem ismerjük, mert az évszázadok feltöltése során az eredeti szint lényegesen módosult. Annyi biztos, hogy valamennyi sziget 80 m. tszf.nél magasabb lehetett, mert különben az árviz elöntötte volna, és így településre nem lett volna alkalmas. Bár a furások alapján rekonstruálható az is, hogy az őstérszín és az ősarvízszint feltételezett magassága arra enged következtetni, hogy a város szárazulati részei is /79.5 m./ leggyakrabban áradások alkalmával víz alá kerültek, amely már az ősi településben is árvízvédelmet igényelt. Az őstérszín azonban egyre gyarapodott, és ez a természetes és mesterséges urbanit magassági növekedésében /tszf/ jelentkezett. Vagyis a terület összefüggő betelepülése együttjárt a mesterséges feltöltéssel. A terület terjeszkedésével a szigetek közti mélyedéseket feltöltötték. Ma már csak talajfurásokból következtethetünk az egykori mélyebb részekre. A hátságok és mélyedések között több méteres szintkülönbségek is voltak. E régi morfológiát ma már csak a korábbi térképek őrzik, de ez a várostelepülés és a jelenlegi városrendezés során eléggé fontos tényező.

A továbbiakban vegyük vizsgálat alá a mesterségesen feltöltött városföld sorsát. Az 1879-es árviz után a feltöltés gyors ütemű volt, de ma is folyamatban van a belterület mélyfekvésű, rombolt felszínű részein.

A mai belterület körtöltésen belüli szintje a régi Várpalánk parti szakaszán 83.5, a Kisköruton 82.5, a Nagyköruton 81.3, a külvárosokban 80.3, illetve 78.8, a betelepületlen részeken pedig 79-81.5 m. között változik. A számok azonban még nem fejezik ki a belterület legjellemzőbb talajdomborzatának bordázott voltát. Ezt főleg az 1879-es árviz utáni városfeltöltés eredményezte. Az u.n. "eszményi szintre" való feltöltés elhibázott elv volt. Ki akarta emelni a várost mély fekvéséből, és árvízbiztos települési szintet kívánt teremteni. Célját nem érte el, sőt egyenesen káros volt, mert nem a települési terület pangóvizű részei kerültek feltöltésre, hanem az utak és

122.

az utcák, így ugrásszerűen megemelkedett a lefolyástalan területek, a lecsapolatlan foltok száma. A Tisza vizállása pedig 1880-84 között meghaladta az eszményi szintet. A feltöltés egyaránt megdrágította a lakásépítést és a lakbéreket, másrészt a nedves, egészségtelen, alagsori és pincelakások százait eredményezte. Ezenkívül emelte a talajvizet, ez pedig felfagyás révén rongálja az utburkolatokat. Ez a városfeltöltés még sokáig éreztetni fogja súlyos egészségügyi, gazdasági és városképi hátrányait.

Település és építkezés szempontjából a talajnak felső rétegeit az ún. urbanitot fontos elsősorban számításba vennünk. Ez a mesterséges városföld Szeged talajának ősi felszínét 2-6 m. vastagságban is borítja. Pálmai Mátyás „Szeged városföld” c. értekezése táblázatba foglalta a feltöltés vastagságát, területi kiterjedését. Ez Szeged város belterületén a következő képet nyújtja.

0-1 m es feltöltés területe	2 480 625 m ²	1 240 112 m ²
1-2 „ „ „	2 133 687 „	3 202 030 „
2-3 „ „ „	881 718 „	2 204 235 „
3-4 „ „ „	1 036 350 „	3 592 225 „
4-5 „ „ „	505 400 „	2 262 300 „
5-6 „ „ „	641 025 „	3 525 637 „
6 nál magasabb	<u>13 262 „</u>	<u>78 972 „</u>
Osszesen :	7 692 067 m ²	16 105 781 m ²

A táblázatban szereplő értékek csak tájékoztató jellegűek tekintettel arra, hogy az eredeti térszín reliefenergiája erősen befolyásolja a feltöltés vastagságát. Az urbanit alatt egy kb 8 m. vastag sárga agyag víztartó réteg következik, amely a város széle felé növekszik, helyenként a 10 m. vastagságot is meghaladja, és ezáltal a legfelső rétegek alatt egy természetes lejtőt alkot, amely a talajviznek a Tisza felé áramlását segíti elő. Mivel a víztartó réteg közel fekszik a felszínhez, ezért a talajvíz árszintje változóan alakul. Ezt a változást előidézheti a területen végbemenő éghajlati hatás is /párolgás, csapadékmennyiség/, úgy, hogy a talajviznek 1 m es ingadozásait is ki lehet mutatni.

Az említett sárga agyag alatt 2-3 m. vastag lencsésen betelepült vörös agyag következik, majd egy 4-5 m es kék agyagszint, amely köz-

kb. 5 m vastag homokos iszap rétegeződik. Ez utóbbi a Tisza balpartján 18 métert ér el, és közvetlenül a feltöltés alatt jelentkeznek. Ezek az általaj viszonyok viszont azt igazolják, hogy a város térszine alatt elég vastag agyagrétegek fekszenek, melynek lejtési viszonyai a Tisza irányába fejlődtek ki. Az agyagrétegek a várostelepítés szempontjából pozitív hatások. Azonban nem közömbös ezeknek felszíni, morfológiai jellege, valamint a mesterséges feltöltés, amiről már volt szó.

A Nagykörut és ennek tágabb körzetében végzett 167 mélyfurás -10 méter - azt mutatja, hogy a városföld vízáteresztő képesség szempontjából, valamint a közvetlen várostelepülési szint legfelsőbb rétegei igen változatos képet nyújtanak. Az említett területsávban a térszín általaj viszonyában a vízáteresztő képesség mind a mélységgel, mind pedig a területtel aránylag jelentősen változik. Ezzel is igazoltnak látszik, hogy a szege-di városföld /mesterséges feltöltés/ anyaga eléggé inhomogén.

A 167 furás alapján a közetösszetétel figyelembe vételével megállapítást nyert e közet vízáteresztő képessége. Ezt kívánom a továbbiakban területileg értékelni. Az értékelés során az egyes furáspontokban előforduló kőzetanyagok vízáteresztő képességének százalékos kimutatásával határoztam meg az egyes területek viszonyait.

A Felsővárosban többnyire a víz át nem eresztő kőzet uralkodik az urbanitban. Az egyes furáspontok rétegvastagságában, ez mintegy 60 %-ot is elér. /Pl. A József Attila sug-on a temető mellett, a Kemes utca és a Csillag tér között, valamint ettől ÉNy-ra lévő gyümölcsösben./ Ugyanakkor e városrész D-i felében már a kőzetanyag vízáteresztő képessége erősen megváltozik, és az u.n. félig vízáteresztő kőzet csoportjába sorolható üledékanyagok jelentkeznek. Ezek összefüggő területet is alkotnak. Így a József Attila sug-tól kezdődően a Retek utcával párhuzamosan Halad, majd ettől kezdve ÉK-DNy -irányban kiszélesedve a Csillag téren keresztül a Szilléri sug-al párhuzamosan fut, benyulik a Nagykörut területére, majd a Liszt utca, Tabán utca, Tápéi utca, Pille utca, Etelka-sor, Molnár utca, Halász utca közti területét foglalja magába.

Rókus területén többnyire általánosan a víz át nem eresztő és félig

vizáteresztő kőzetek uralkodnak. A viz át nem eresztő jellegű rétegek eléggé összefüggő területet képeznek: nevezetesen a Puskás utca, Körtöltéssor és Óthalom utca között, valamint a Boross József utca, Bakay Nándor utca és Fűrész utca közötti rész, majd a Londoni krt., Mérey utca, Kossuth Lajos sug közötti terület jelölhető ki.

A félig áteresztő kőzet területi kiterjedése is hasonló az előbbihez, elég nagy kiterjedésű. Ez az üledéktípus a Párisi krt. és Árvíz utca körüli területen található. Az értékelés kapcsán elmondható, hogy Rókus területén vizáteresztő részek is előfordulnak a feltöltésben, azonban csak kis területre korlátozódnak. Így a Makos erdősor, Jakab Lajos utca és a Körtöltéssor közötti rész jelölhető ki.

Móráváros térszínén a városföld anyagában az át nem eresztő képesség nem domináns elem. Egyes területeken ugyan megtalálható kisebb foltokban, mint a Kolozsvári téren, valamint a Felhő utca, Kormányos utca és Nemestakács utca környékén. E városrészben a legnagyobb kiterjedésű területet a félig áteresztő és az áteresztő üledékek képviselik. Így a nevezett jellegek a Kálvária tér és a Vértanúk tere között, Csendes utca és Rákóczi utca környékén találhatók.

Alsóvárosban legáltalánosabb a vizáteresztő üledékek települése. Móra városból folytatódóan ezek áthúzódnak a Pásztor utca, Tarló utca, Temető és Horgosi utca által közbezárt részen, és itt teljes területi összefüggést mutatnak. Továbbá a Hámán Kató utca Április 4 utja kereszteződésénél, valamint a Paprika utca és a Hattyas sor találkozási környékén fordulnak elő.

Különösen figyelemre méltó az üledék vizáteresztő képessége az alábbi területeken, amely ugyancsak kisebb foltokban jelentkezik. Így a Petőfi Sándor sug. és a Horgosi utca találkozási környéki területen, valamint a Szabadság tér, Daru utca, Pálffy utca, Ballagító sor, Világos utca és Tompa Mihály utca közötti területen.

Dolgozatom célja az volt, hogy a várostérszín területén elemezzem a települési szint hidrogéográfiai jellegét. Ez a rövid kis tanulmányozás is azt bizonyítja, hogy a városföld /urbanit/ analitikus elemzése hasznos tapasztalatokkal segítheti elő a városrendezési és fejlesztési terv megvalósítását.

Angaben zur Siedlungsgeographie der Stadt Szeged.

In Zusammenhang mit dem 15-jährigen Stadtentwicklungsplan wurde es nötig mit dem Problem der Siedlung von Szeged eindringlicher beschäftigt.

In dieser Arbeit habe ich besonders die hydrographische und hydrogeologische Verhältnisse hervorgehoben. Ich habe die am Großen Boulevard vollgezogene Bohrungen analysiert und die prozentuale Wasserdurchlässigkeit der verschiedenen Gesteintypen dargestellt.

A DÉLKELET ALFÖLD TERMÁLVIZGAZDÁLKODÁSA

Rátkai Árpád

V. évf. biol.-földrajz sz. h.

FÖLDRAJZI INTÉZET

1./ A hidrogeológiai adottságok.

Csongrád és Békés megye területének mélyszerkezetére vonatkozó ismereteink még nagyon hiányosak. Bár vizsgálatok itt is történtek, összefoglaló szintézist még nem állítottak össze, mert a legutóbbi időkig hiányoztak a földtani megismeréshez szükséges mélyebb, a rétegsort a mezozoikus alapig feltáró kutatás adatok. A folyamatban lévő szénhidrogén kutató mélyfurások azonban egyre több adatot nyújtanak a vizsgálatokhoz.

Az alföldi ópaleozoos kristályos vonulatot a Tiszántul közepén, az Erdélyi-rézhegység folytatásaként nagyjából ÉK-DNy csapásirányban a keleti országhatártól Tisza felé húzódik. Ez a rögökre darabolt kristályos vonulat környezetéből 1000-2000 méteres szintkülönbséggel emelkedik ki és a Tiszántult északi és déli mezozoos aljazatu medence részre osztja. A paleozoos vonulat legmagasabb pontja Kismarjánál /Hajdu-Bihar megye/ mindössze 1051 méter mélyen van. /13/

A délalföldi mezozoos aljazatu neogén medence keleti pereme felől nyugatra haladva a paleozoos mezozoos alaphegység lépcsős vetődésekkel a medence belseje felé a mélybe süllyed. A romániai Zádorlakon furással feltárt paleozoikum a határon innen Battyányánál /mágneses mérésekkel valószínűsítve/ süllyed a mélybe Tótkomlós felé. Tovább kelet felé haladva valószínűleg a Tisza völgy alatt éri el a legnagyobb mélységet.

A lesüllyedt medencébe a pliocén és pleisztocén folyamán hatalmas, néhol 3500 métert is meghaladó vastagságú üledéksorozat halmozódott fel. /13/ A pliocén üledékek az országban ebben a Berettyó-Körös vonaltól délre

elterülő medencerészben helyezkednek el a legmélyebben. E hatalmas rétegsorozat bővelkedik több méter vastag és nagykiterjedésű homokos, viztartó rétegekben. A legjobb ilyen homokrétegek ill. lencsék Csongrád és Békés m. területén vannak, ahol a pliocén üledékek a legnagyobb vastagságot érik el. A felszinközeli kutakhoz hasonlóan a leggazdagabb vízhozamu mélyfurású kutak is az országnak ezen a részén vannak.

Az itt található hatalmas vízkészlet mennyiségét ma még egyáltalán nem ismerjük, a már feltárt termálkutak bő és meglehetősen egyenletes vízhozama azonban arra utal, hogy a kutak számát megfelelő telepítéssel megsokszorozhatjuk anélkül, hogy vízhozamuk lényeges csökkenése következne be.

A víztartó rétegekben a geológiai idők folyamán felhalmozott hatalmas vízkészlet mellett egyes kutatók a mélybeszivárgás útján történetű utánpótlást is lehetségesnek tartják. Ez az utánpótlódás a Kárpát-medence sajátos orográfiai, szerkezeti és hidrogeológiai viszonyaiból kifolyólag elsősorban vízszintes irányból, a környező hegységkeret felől képzelhető el. /8/

A szerkezeti és hidrogeológiai tényezőkön kívül nagy szerepe van a termálfeltárási lehetőségek szempontjából a geotermikus gradiens nagyságának. A felszínre érkező víz természetesen már néhány fokkal alacsonyabb hőmérsékletű lesz, hiszen a csövet körülvevő kőzetek hűtőhatása és a térfogatnagyság növekedés következtében kissé lehűl. Ez a hűtőhatás anélkül kevésbé érvényesül, minél nagyobb a vízhozam. A béléscsövet körülvevő kőzetek jelentékeny hűtőhatását igazolja az a tapasztalat is, hogy amikor kis vízhozam esetén kissé magasabban fekvő rétegek bekapcsolásával növelték a vízhozamot, legtöbbször a víz hőmérséklete is emelkedett.

A közölt táblázat Az Országos Balneológiai Kutató Intézet Hidrogeológiai Osztályának mérési adatai /4,5,6,7./ az Országos Vízügyi Főigazgatóság adatai /1./, valamint az irodalomban közölt más adatok /2.,3.,9.,10.,11./ alapján a Csongrád és Békés megye területén található /35 C⁰-on felüli hőmérsékletű/ termálkutak eddig észlelt minimális vízhozam - /Q/ és minimális vízhőmérséklet- /T/ adatait tünteti fel /L p ill. C⁰/. Azért a minimális, mert ez az a vízhozam és vízhőmérséklet, melyre a felhasználás

során biztosan lehet számítani. Az értékeket összevetve ugyancsak az I. táblázatban található geotermikus-gradiens értékekkel megállapíthatjuk, hogy a geotermikus-gradiens viszonyok értékelése - éppen a területileg rendkívül nagy különbségeket mutató Q-érték, és annak T-re gyakorolt hatása következtében - nem alkalmas az optimális termálfeltárási lehetőségek egyik igen fontos tényezőjének megállapítására, arra, hogy egy furandó termálkútnál előre meghatározzuk azt a mélységet, amely adott hőmérsékletű termálfeltáráshoz szükséges. Helyette a hidrogeotermikus gradiens fogalmának bevezetését javasoljuk, amelyből egyrészt következtethetünk egy megadott területen a várható vízhőmérsékletre, másrészt a kutak talppontjában mért hőmérséklet ismerete nélkül is kiszámítható:

$$\text{hidrogeotermikus gradiens} = \frac{\text{kut mélysége /m/}}{T}$$

A hidrogeotermikus -gradiens viszonyokat a közölt táblázat tünteti fel.

A fenti adatokból levonhatjuk azt a következtetést, hogy a geotermikus gradiens Békésben valamivel kedvezőbbnek mondható, a hidrogeotermikus-gradiens értékei azonban Csongrád és Békés területén - megközelítően azonos mélységben - nagyjából megegyeznek: tekintve azonban, hogy Csongrádban a termálkútak vízhozama sokszorososa a Békésinek, továbbá a kutak létesítése elsősorban Csongrád megyében kívánatos.

Termálfeltárási szempontból a minőség kérdése rendkívül fontos tényező. A termálfeltáráshoz, mint energiahordozónak felhasználása szempontjából az oldott anyag-tartalom lényegesen befolyásolja a felhasználás módját, gazdaságosságát.

A vizsgált területen Csongrád megye termálfeltárási szempontjából -mint arra legutóbb rámutattam -igen kedvezően alakult. /Rátkai: Adatok Csongrád és Békés megye termálfeltárási szempontjából. Hidrol. Tájé. 1961. aug./ Csongrád megye termálfeltárási szempontjából alapvetően különbözik más alacsony geotermikus gradiensű területek készletétől. Nincs ugyan kimagasló gyógyhatása, ásványi anyagok kivonása szempontjából sem jöhet számításba

A Délkelet-Alföld 35-100 C^o-os termálkútjainak fontosabb adatai.

Sor sz.	Település	mély- ség m	létesí- tés é- ve	0 vizho- zam min. l/p	T. vizhő mjn. C ^o	Geoterm gradiens	hidrgeo. gradiens
1.	Békés	789	1957	130	37	17,9	21,0
2.	"	733	1928	95	40	22,8	19,3
3.	Békéscsaba	2001	1959	340	76	20,0	26,3
4.	Endrőd	2941	.	800	81	.	35,9
5.	Eperjes	650	1958	600	43	.	15,1
6.	"	631,5	1952	630	38	.	16,6
7.	"	625	1952	400	42	.	14,9
8.	Füzesgyarmat	552	.	55	36	.	15,3
9.	Gyoma	1137	1958	450	62	.	18,3
10.	Gyula	2334	1953	500	71	19,6	28,2
11.	Hódmezővhely	1096,90	1954	1330	42	24,7	26,1
12.	"	606	.	1370	42	.	14,4
13.	Makó	993,0	1956	1100	42	21,3	23,1
14.	Mezőberény	710	.	100	40	.	17,7
15.	Mezőhegyes	.	.	100	36	.	.
16.	Mezőkovácsháza	1602	.	168	82	.	19,5
17.	"	.	.	45	38	.	.
18.	Nagyszénás	1695	.	83	72	.	13,8
19.	Ref.kovácsháza	365	1940	22	36	.	.
20.	Szarvas	800	1957	1000	43	18,5	18,6
21.	"	697,0	1959	820	42	18,8	16,5
22.	Szeged	1014	1958	1330	52	.	19,5
23.	"	1013	1957	2000	53	17,5	19,3
24.	"	943	1927	380	48	.	19,7
25.	Szentes	1736,1	1958	1600	76	22,4	22,9
26.	Tótkomlós	.	1928	17	40	.	.
27.	"	2116	.	1200	83	.	25,4
28.	"	545	1942	348	41	.	13,9

. adat nem ismeretes

óriási előnye azonban, hogy minimális oldott anyagtartalma következtében lerakódásra nem hajlamos és így a kút és a hasznosító berendezések sokkal könnyebben üzemeltethetők.

Az oldott anyag-tartalom kelet felé haladva, Békés megye területén ug-rásszerűen megnő, a vízhozam ugyan akkor lényegesen csökken, Békésben tehát sokkal kedvezőlenebbek a termálvíz feltárási lehetőségek.

2./ A kitermelés módja.

Az ásványi anyagok vízből történő kivonása a vizsgált területen az alacsony oldott anyag-tartalom miatt nem gazdaságos. Annál gazdaságosabb azonban a 100 C^o-nál magasabb hőmérsékletű ún. földgőz felhasználása elektromos energia termelésére.

A vizsgált területen Szeged-Szentes környékén már 2000 méteres mélységben elérhető a 100 C^o-os termálviz, tehát a földgőz elérhető mélységből, gazdaságosan kitermelhető. Ezért érdemesnek látszik egy 2000-2500 méteres kutató furás és egy kísérleti áramfejlesztő telep létesítése.

Különösen nagy lehetőségek kínálkoznak a növényházak és a megye területén épülő új lakóöbölök termál-vízzel való fűtésében. Ez csökkentené a települések levegőszennyeződését, a por és szemképződést. A szénfogyasztás csökkenése a közlekedést is tehermentesítené. A levegőszennyezettség csökkentésének kérdése, különösen Szeged esetében fontos, hiszen az iparosítással járó füst- és koromképződés növekedése Szegedet sokkal súlyosabban érinti, mint bármely más iparvárosunkat, mert a város környékén számottevő erdőterület nincs és így ez nem jöhet számításba a levegő javítása szempontjából. Súlyosbíja a helyzetet az a körülmény is, hogy Szeged ipari övezete a város nyugati részén, uralkodó szélirányba helyezkedik el. Ezért helyes volna a már meglévő ipari üzemeket is megvizsgálni olyan szempontból, hogy a jelenleg szén- és olajtüzelésű kazánok milyen mértékben lennének helyettesíthetők termál viz-üzemű fűtéssel és melegvíz-szolgáltatással.

A kifejezetten termálviz termelésére létesített kutak kivitelezésének gazdaságosságát a Békéscsaba 2001 /1959/ és a Gyula 2004 /1958/ termálkutak helyzete jól jellemzi. Mindkét mélyfuráshoz igen nagy reményeket fűztek, felbuzdulva a minden várakozást felülmúló szentesi furás eredményein.

A Szentes 1736 /1953/ vízhozama 1600 l/p, vízhőmérséklete 76 C^o. A víz oldott anyag-tartalma mindössze 1348,92 mg/l, tehát a hasznosítást nem akadályozza. Ezzel szemben mi a Békés megyei furások eredménye? Békéscsabán a vízhőmérséklet 76 C^o, tehát közel 300 méterrel

mélyebbre kellett fúrni, hogy a Szentesihez hasonló hőmérsékletű vízhez jussanak. Gyulán még rosszabb az eredmény : a víz hőmérséklet csak 71°C . Békéscsabán a vízhozam 340 l/p . Gyulán 500 l/p , tehát a két darab 2000 méteres furás vízhozama együttesen is csak fele a Szentesi 1736 méteres kút vízhozamának.

A termálvíz oldott anyag tartalma még az utóbbi két furásnál is kedvezőnek mondható $/2500 \text{ mg/l körül/}$, a fenti tényezők azonban elegendők ahhoz, hogy levonjuk a következtetést : Békésben újabb termálkutak létesítése a kedvezőtlen hidrogeológiai adottságok miatt egyelőre nem kívánatos. Helyes lenne az ilyen célokra rendelkezésre álló anyagi eszközöket Csongrád megyében felhasználni, hiszen a beruházások hatékonysága többszöröse a békésieknek.

Összefoglalás.

A hidrogeotermikus gradiens viszonyok Csongrád és Békés megye területén azonos mélységben nagyjából megegyeznek. Csongrádban azonban a termálkutak vízhozama sokszorossa a békésieknek, és a termálvíz minimális oldott anyag tartalma következtében lerakódásra nem hajlamos.

Szeged-Szentes környékén $2000-2500 \text{ m}$ mélységből 100°C -nál magasabb hőmérsékletű, v.n. "földgőz" termelhető ki.

Termálkutak létesítésekor Csongrádban a beruházások hatékonysága többszöröse mint Békésben.

I r o d a l o m.

- 1/ Adatok a 26°C -nál magasabb hőmérsékletű vizeinkről, /Termálvizek/.
Összeállította : Kocsis Árpád és Koltay József, Országos Vízügyi Főigazgatóság II. n. , 1959.
- 2/ Békéty Lajos : A hazai termális vizek feltáró kúrfurás fejlődése és legújabb eredményei, Hidrol. Közl. 1960. 276. old.
- 3/ Cziráky József : A hazai termális vizek, Hidrol. Közl. 1960. 507. old.
- 4/ Jelentés az Országos Balneológiai Kutató Intézet Hidrogeológiai Osztályának 1951. évi vidéki ásvány és gyógyvíz vizsgálatairól, Összeállította : Cziráky József, Hidrol. Közl. 1953. 370. o.
- 5/ Jelentés az Országos Balneológiai Kutató Intézet Hidrogeológiai Osztályának 1952. és 1953. években végzett vidéki gyógyforrásokkal és kutakkal kapcsolatos vízhozam- és hőmérséklet méréseiről, Összeállította :

Cziráký József. Hidrol. Közl. 1955. 44. o.

- 6./ Jelentés az Országos Balneológiai Kutató Intézet Hidrogeológiai Osztályának 1954. és 1955. években végzett vidéki gyógyforrásokkal és kúttakkal kapcsolatos vízhozam - és hőmérséklet méréséről. Összeállította : Cziráký József. Hidrol. Közl. 1958. 145. o.
- 7./ Jelentés az Országos Balneológiai Kutató Intézet Hidrogeológiai Osztályának 1956. és 1957. években végzett vidéki gyógyforrásokkal és kúttakkal kapcsolatos vízhozam és hőmérséklet méréséről. Összeállította : Cziráký József. Hidrol. Közl. 1959. 31b. o.
- 8./ Junász József : Felszínalatti vízkészletünk. Hidrol. Közl. 1955. 25. o.
- 9./ Kocsis Endre és Herke Ilona : A szegedi Tisza Lajos krt. és Kossuth Lajos sugárut kereszteződésénél lévő mélyfurási melegvízű kút vegyi vizsgálata. Hidrol. Közl. 1937. 34 o.
- 10./ Magyarország ásvány - és gyógyvizei. Szerk. Schulhof Ödön. Bp. 1957.
- 11./ Rátkai Árpád : A szegedi termálvizek és hasznosításuk. Acta Iuvenum. /Acta Universitatis Szegediensis./ 1961. 202. old.
- 12./ Rátkai Árpád : Adatok Csongárd és Békés megye termálvízkészletének felméréséhez. Hidrol. Tájé. 1961. 36. o.
- 13./ Völgyi László : A nagyalföldi kőolajkutatás újabb földtani eredményei. Földtani Közlöny. 1959. 37. o.

A DUNA-TISZA-KÖZI KARBONÁTÜLEDÉKEK PUHATESTŰ

FAUNÁJA

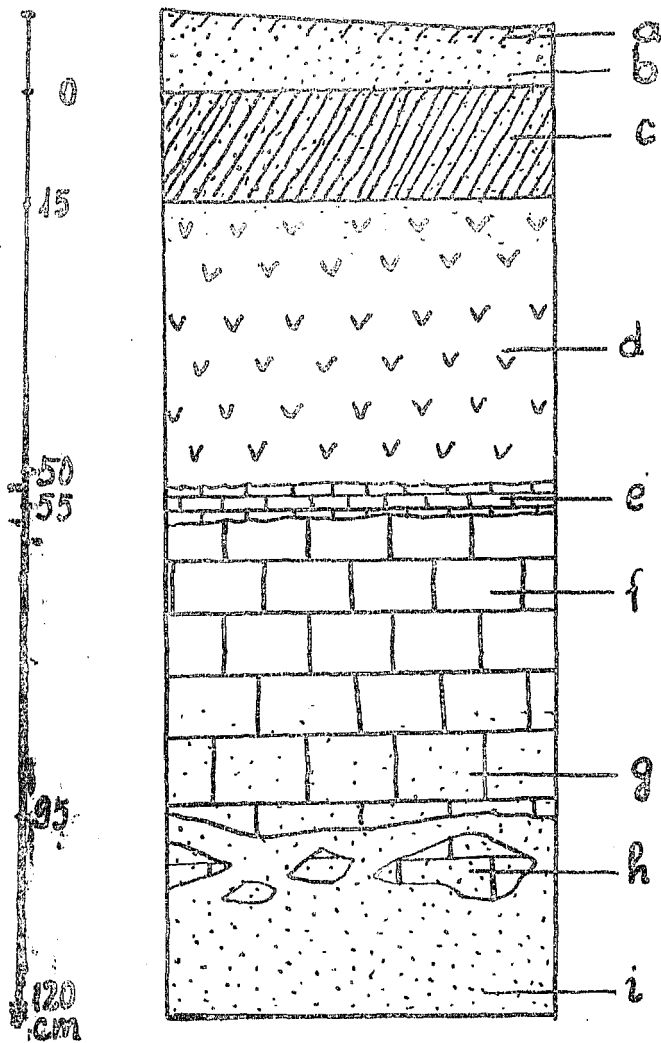
Mucsi Mihály

III. évf. földrajz-földtan sz. h.

A Duna-Tisza - köz mélyedéseiben, a szemlélykaljakon, kisebb nagyobb foltokban csaknem mindenütt találhatók karbonátrétegek. Vizsgálataim céljára a Csólyospálos környéki előfordulást használtam fel.

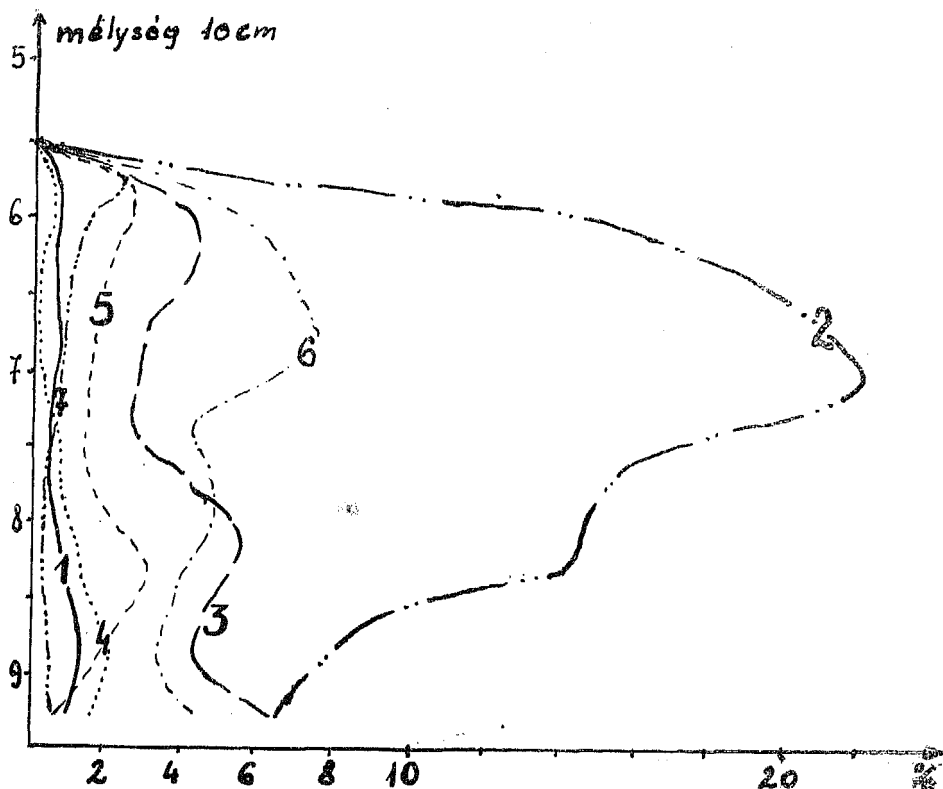
Rétegsor. Lelőhelyemen 10-15 cm vastag erősen humuszos réti talaj fedi a karbonátos összletet, Irodalmi adatok más helyekről 20-50 cm t jeleznek. A humuszos szintet gyors változással követi a mészsíszap. Ez 15 cm-től 50 cm mélységig tart. Az eddigi adatokkal ellentétben az egyik feltárásban puhatestű maradványokat tartalmaz. Éles határral elkülönítve találjuk a réti mészkő felső részét, 50 és 55 cm közötti mélységben. Vékony réteges kifejlődésű. Faunanyomokat eddig nem találtam benne. A gazdaságilag hasznosítható rész a felső szint után szintén éles határral következik, vastagsága a vizsgált területen általában 40 cm. Már szemmel is két részre különíthető. Multévi vizsgálataim alapján a felső rész karbonáttartalma 80 % fölött, az alsó részé fokozatos átmenettel 65 % körül alakul. Az alján és szélein konkréciószerű csomókból áll. A köveikben és környék kutaitban feltárt legidősebb képződmény óholocén futóhomok, ennek egykori mélyedéseiben települnek a karbonát üledékek. Ezt a részt alul meszes homoknak, felül homokos mészkőnek nevezhetjük.

Fauna tartalom. A hasznosítható részből 5 cm-enként 5 kg. anyagot gyűjtöttem be. Ebben nagy mennyiségben találhatók vázmaradványok. Az előkerült puhatestű fajok ma is élnek, így a rendszerezés a belső szervezetségükre és élettérigényükre nézve ismert rokonok házának alapulvételé indult ki. A csigák és kagylók a holocénben nem kimondott szintjelzők, de segítségükkel lehetséges az éghajlatot és a vegetációt rekonstruálni.



A rétegsor anyagi összetétele

- a - jelenkori futóhomok kissé humuszosodott felszine.
- b - ujholocén futóhomok
- c - erősen humuszos, homokos iszap
- d - mésziszap
- e - réteges, likacsos, mésziszapos mészkő
- f - tömör, tiszta réti mészkő
- g - homokos réti mészkő
- h - meszes homok
- i - óholocén futóhomok



1. ábra : 1- *Valvata cristata* O. F. Müll.
 2- *Valvata pulchella* Stud.
 3- *Valvata piscinalis* O. F. Müll.
 4- *Bithynia tentaculata* L.
 5- *Bithynia leachi* Shepp.
 6- *Carychium minimum* O. F. Müll.
 7- *Stagnicola palustris* O. F. Müll.

A *Valvata cristata* növényekkel gazdagon benőtt állóvizekben és lassan folyó árkokban él, rendszeren növényekhez tapadva. A palaearktikus régió nagyobb részében elterjedt. %-os aránya az alsó részben magasabb, ez azzal magyarázható, hogy az állat érzékenyebb a víz sótartalmára iránt.

A *Valvata pulchella* mocsarakban és réteken lévő mélyedések, árkok vizeiben él. Nálunk ma már inkább csak fosszilis északi faj, recensén Czögler említi Királyhalmáról, ahol előfordulása a homoki vadvizek alacsony hőmérsékletével magyarázható. Közép- és észak európai faj.

Az alsó részben alacsony és csak lassan emelkedő %-os arány a jelenleginél jóval hűvösebbé váló éghajlatra enged következtetni. A legfelső részben határozott csökkenés észlelhető, különösen ha a darabszámot is figyelembe vesszük, következmény, hogy a klíma melegebb lett.

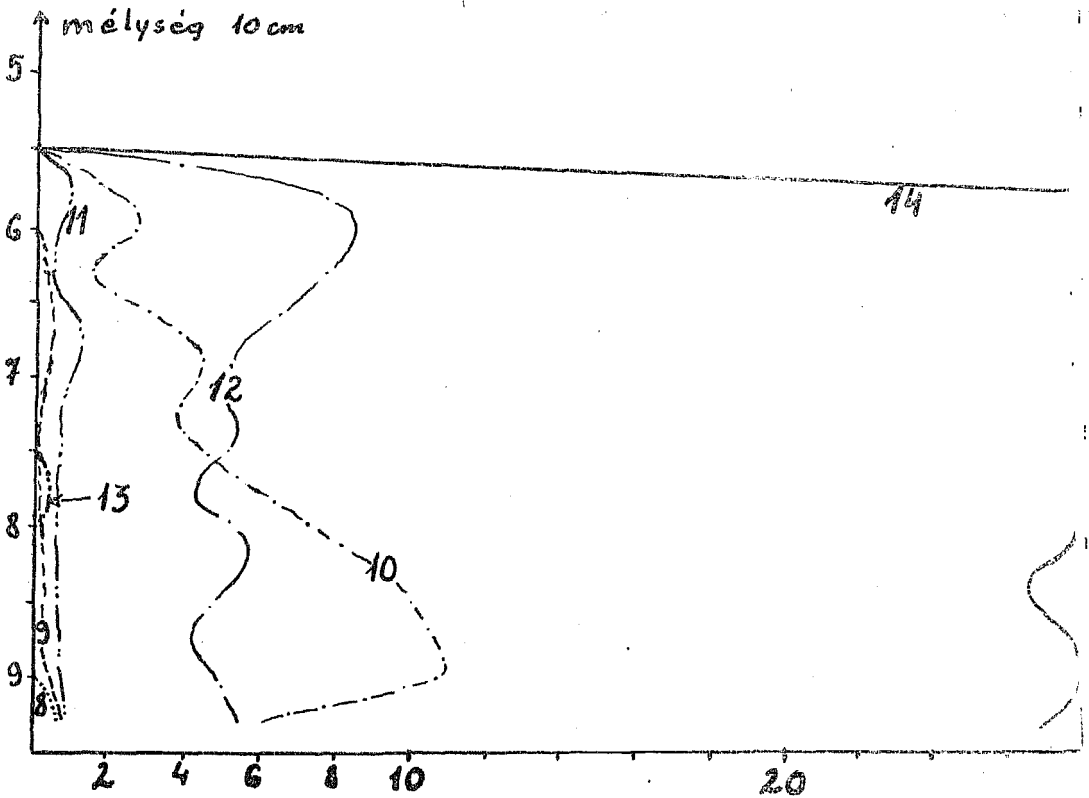
A *Valvata piscinalis* álló és lassan folyó vizek iszapos-homokos felekén él, kedvező helyeken eléggé tömegesen. Meglehetősen igényes, a tiszta vizeket kedveli. Európában eléggé általános. Változó mennyiségben való jelentkezése igényességével okolható. Ebből pedig az következik, hogy a lerakódás tartalma alatt a víz szennyezettsége periódusosan változó volt.

A *Bithynia tentaculata* csendes állóvizek állata, tavakban, tócsákban, mocsarakban, növényekkel benőtt árkokban él, sík területeken ma nagyon közönséges, szinte mindenütt megtalálható. Egész Európában elterjedt. A aó-tartalommal szemben igényes. A felső részben egészen minimális %-kal szerepel, gyakoribb a feltárás egyik szintjében sem mondható. Optimális biotópja eltér az itt uralkodott viszonyoktól.

A *Bithynia leachi* biotópja hasonló az előzőhöz. Fosszilis előfordulási adatai arra engednek következtetni, hogy a pleisztocénben gyakoribb volt, mint ma és a két faj gyakorisága is fordított volt. Az élettérváltozással egyértelműen kettős maximumot mutat a %-os gyakoriság görbéje.

A *Carychium minimum* szárazföldi, de vizes, nedves helyeken él, életmódja tekintetében kétéltűnek nevezhető. Európa északibb részében messze elterjedt és gyakori faj. A %-os görbe lefutása hasonló a *Valvata pulchellá*-éhoz. A felsőbb részben jóval gyakoribb, de legvégül hirtelen lecsökken az egyedszám. A maximum az éghajlat hidegebbre válását jelenti, a végső lecsökkenés pedig szódataralom emelkedést.

A *Stagnicola palustris* álló és lassan folyó vizekben él. Gazdag növényzetű árkokban és mocsarakban tömegesen gyűjthető. Holoarktikus elterjedésű faj. Az időszakos kiszáradás nem illik bele optimális biotópjába. A felső rész felé enyhén emelkedik mennyisége, ennek ellenére mindenütt kevésnek mondható. A vegetáció nem volt kimondottan dus és az üledékképződés alatt ez lényegesen nem is változott meg. A felső szint maximum inkább a többi faj elmaradásának tudható be.



2. ábra : 8- *Radix ovata* Drap.
 9- *Radix peregra* O.F. Müll.
 10- *Galba truncatula* O. F. Müll.
 11- *Planorbis cornea* L.
 12- *Anisus planorbis* L.
 13- *Anisus septemgyratus* Bielz
 14- *Anisus spirorbis* L.

A *Radix ovata* lassan folyó és álló vizekben közönséges, a növényzettel dusan benőtt árkokban és pocsolyákban él nagyobb tömegben. Palaearktikus faj, Európában általánosan elterjedt. Jellegzetes európai faj, Izlandban 40 fokos vízben is megtalálták, ugyanakkor az Alpokban felhatol 2500 m magasságig. Az alsó 5 cm-ben jelentkező, 0,44 % a fentiek alapján nem sokat mond.

A *Radix peregra* kisebb álló és lassan folyó vizekben található. Vízitől távolabbi, de nedves környezet is jó biotóp számára. Elterjedése nagyon széleskörű, mert hőmérséklet és táplálék tekintetében nagyon igénytelen. Héja mészből dus vizekben erős, gyakran feltűnően

vastag, humuszsavas vizekben ellenben vékony, sokszor összemart. A %-os arány alacsony, változást alig mutat a lerakódás tartalma alatt. A felső szintből hiányzik, valószínűleg nem bírta a tulsós vizet. Az előkerült héjak határozottan vastagnak mondhatók, ez a víz mésztartalmát igazolja, bár ennek a ténynek bizonyító voltára nincs szükség, hiszen ebből a vízből kellett kicsapódni a kb 80 cm vastag karbonátösszletnek.

A *Galba truncatula* kicsiny, sőt apró vizek lakója, tócsákban, rétek árkaiban, nem ritkán a vizen kívül található. Nagyobb vizeknek csak a parti részeiben lelhető meg. Holoarktikus elterjedésű faj. A mainál hidegebb éghajlat tartozik optimális biotópjához. A legalsó részben még alacsony egyedszám hirtelen emelkedik maximumra, de fokozatosan lecsökken. A magas mésztartalom és a viszonylag növényzetmentes nyíltvíz nem biztosította számára a legmegfelelőbb élettért. A legfelső részben mutatkozó kisebb maximum oka valószínűleg a többi faj egyedszámának lecsökkenésében keresendő.

A *Planorbis cornea* gazdag növényzetű álló és lassan folyó vizekben él. Jelenleg a 64. fok szélességet is eléri, nálunk azonban elsősorban alföldi, s Horváth Andor tapasztalatai szerint inkább melegigényes faj. Minden szintben szerepel, de csak a felső részben éri el mennyisége a faunaegyüttes 1 %-t. Ritkaságát melegigényesebb voltával magyarázhatjuk.

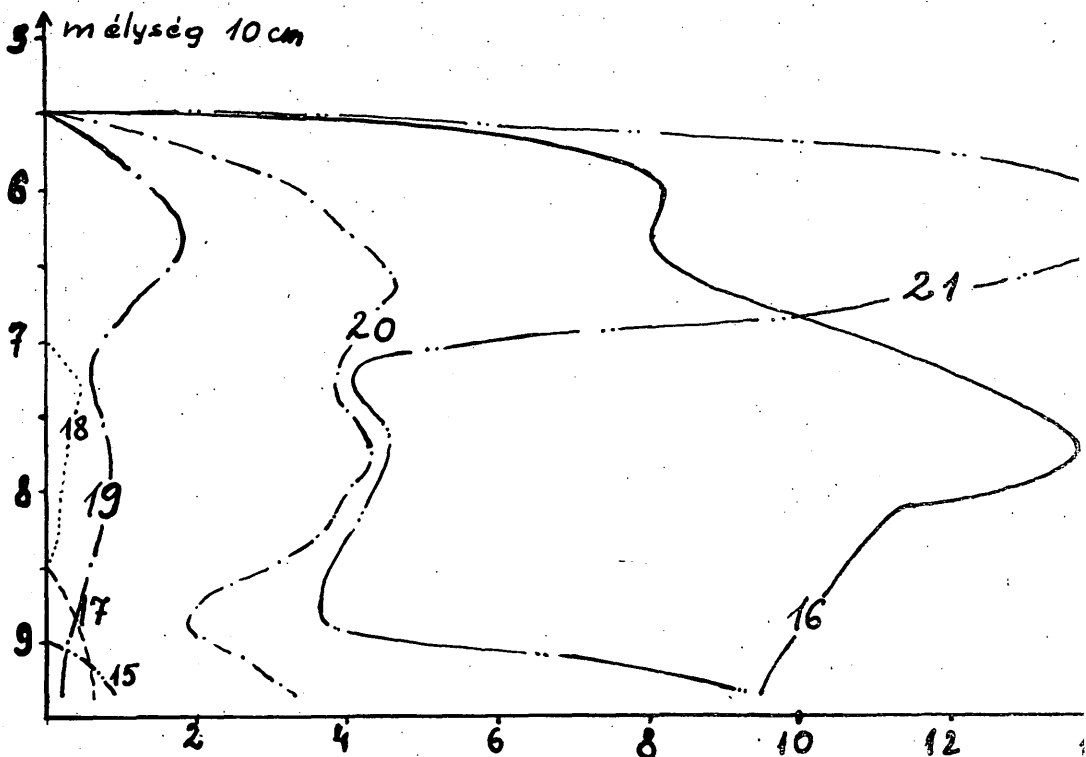
Az *Anisus planorbis* iszapos fenekű állóvizekben, lápokban, tavakban, holtágakban él, a félsós vizeket könnyen elviseli. A hideget eltűrő, de a mérsékelt meleget kedvelő fajok közé tartozik. %-os aránya kis hullámmal állandóan emelkedik és a legfelső részben éri el a maximumot, ahol sótűrését figyelembevéve klimamelegedést mutat. Az alsó részben alacsonyabb arányát a vegetáció szegényebb volta okolja.

Az *Anisus septemgyratus* tavak és mocsarak állata. Egyetlen példányt találtam. Ritkaságának oka, hogy az adott élettér számára nem volt megfelelő.

Az *Anisus spirorbis* minden szintben uralkodik. Kisebb állóvizekben él. Egyike a legszivósabb fajoknak, könnyen eltűri a szennyezett és szikes vizeket is. Optimális éghajlati igénye mérsékelt meleg. A %-os arány hol emelkedik, hol pedig süllyed. Az átlagosnál nagyobb mennyiség a rétimészke képződési idejének kezdetén és végén élt. Sótűrő faj lévén a víz sótartalomválto-

140.

zása csak másodlagosan befolyásolhatja az arányt, így a két maximum idején valamivel enyhébb klíma kellett, hogy legyen a területen.



3. ábra : 15- *Succinea putris* L.
 16- *Succinea oblonga* Drap.
 17- *Succinea pfeifferi* Rossm.
 18- *Cochlicopa lubricia* O. F. Müll.
 19- *Vertigo pygmaea* Drap.
 20- *Pupilla muscorum* L.
 21- *Vallonia enniensis* Gred.

A *Succinea putris* leggyakrabban nádon és más vízi növényeken található. Összesen 3 példány került elő a legalsó szintből. Nálunk az Alföldön és az alacsonyabb dombvidéken általánosan elterjedt, de csak kis egyedszámmal található. Itt sem lehetett gyakori, az adott feltételek biotópjának szélső határára esnek.

A *Succinea oblonga* nedves és száraz területeken, vizek mentén, nedves réteken, szikesedett semlyéken egyaránt megtalálható. A nagy hideget és a nagy meleget nem kedveli. A vizigénységet tekintve am-

fibikusnak vehetjük. %-os aránya elég magas, a középső részig egyenletesen emelkedik maximumra. A maximum azt mutatja, hogy az éghajlat a középső rész lerakódása alatt sem lehetett kimondottan hideg. A felső szinti felé való csökkenés vagy a vizállás állandósulását, vagy a szódataralom erőteljes emelkedését mutatja, természetesen lehet, hogy mindkettőt.

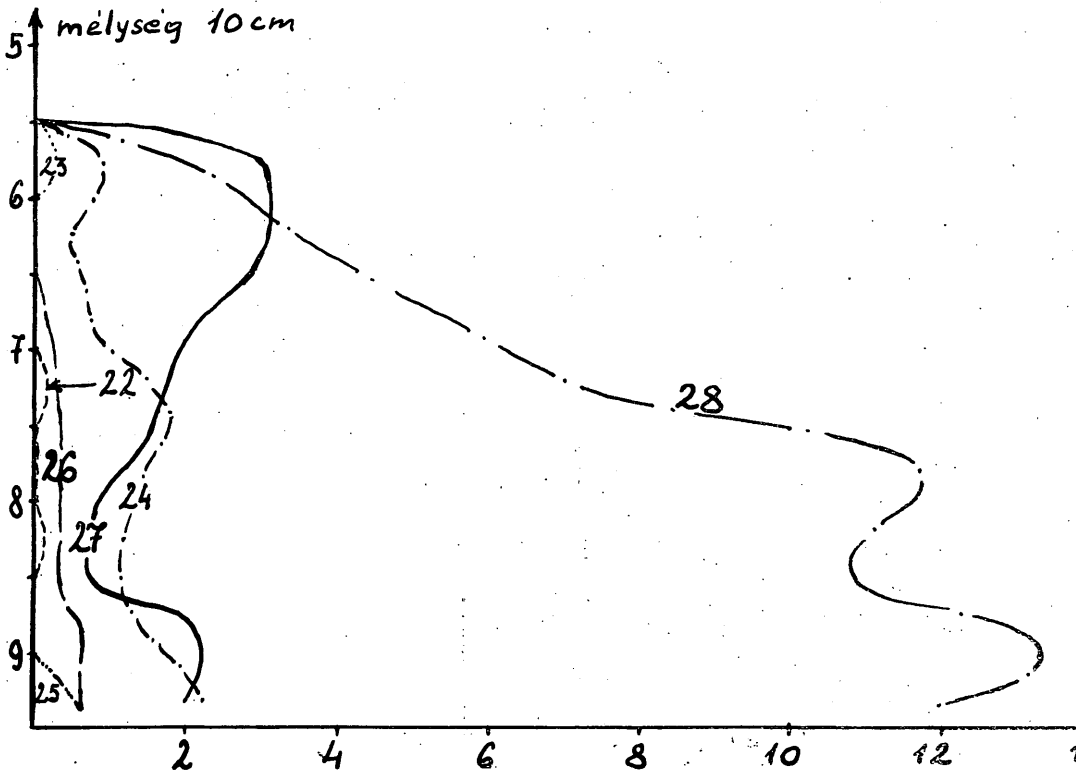
A *Succinea pfeifferi* valamennyi *Succinea* fajunk közül leginkább vízhez kötött. Nálunk az alacsonyabb fekvésű pontokon országszerte elterjedt. Csak az alsó részből került elő, további kimaradását az életkörülmények megváltoztatása indokolja.

A *Copillicopa lubrica* többnyire nedves környezetben, réteken fű és moha közt él. Holoarktikus faj. Hazai viszonylatban inkább hegyvidéki. %-os aránya egyértelmű a többi fajéval, a hűvösebb éghajlatot mutató középső szint képződési idejére korlátozódik.

A *Vertigo pygmaea* nedves réteken fű és moha közt él, de megtalálható szárazabb helyeken is. %-os aránya a felső szinti maximumig egyenletesen emelkedik. Optimális viszonyai elég széleskörűek. Németország területén messze elterjedt faj, de nálunk is országszerte előfordul. Enyhe felső szinti maximumát a tág határok között változó biotóp okozza.

A *Pupilla muscorum* legelőkön fű és annak gyökerei között él, de rendszeren a szárazabb helyeken gyakori. Holoarktikus elterjedésű, szívós, messze északra felhatoló faj. Az alsó szint után hirtelen lecsökken a %-os arány, minden valószínűség szerint a nyíltvíz kiterjedésével magyarázható meg ez a változás. A következő mintától kezdve az egyedszám stagnál, az arány változását az összegyedszám-változás okozza.

A *Vallonia enniensis* melegigényes déleuropai eredetű faj. Északra ma Dél-Németország és Lengyelországig hatol fel. Fosszilisán Horváth A. a paksi löszfal Riss₁-ből említi, előtte csak a holocénból volt ismeretes. %-os görbéje az alsó szint után hirtelen lecsökken és csak a felső részben emelkedik meg újból. A változás kb. négyszeres. A csökkenés határozott hűvösödést, az emelkedés határozott enyhülést jelent.



4. ábra : 22- *Caecilioides acicula* O. F. Müll.
 23- *Zonitoides radiatulus* Als.
 24- *Euconulus trochiformis* Mont
 25- *Helicella obvia* Hartm.
 26- *Sphaerium corneum* L.
 27- *Pisidium casertanum* Poli.
 28- *Pisidium obstrale* C. Pfr.

A *Caecilioides acicula* földben él, az állat vak. Középeurópai és mediterrán faj, de északra Anglia és Skandinávia déli részéig telmaiol. Kéi példányban való megjelenése csupán érekesesség.

A *Zonitoides radiatulus* nedves réteken, földön, erdőkben korhadó növényrészek alatt él. Holoarktikus elterjedésű. Az adott populáció egyetlen ligetlakó faja. A felső szintből került elő egy példány, majdnem teljesen lekopott bordázattal. Valószínű, hogy szállítás révén került az adott területre.

Az *Euconulus trochiformis* nedves réteken, vizek partján és erdőkben él. Holoarktikus faj. Mennyisége enyhe ingadozással csökken a felső

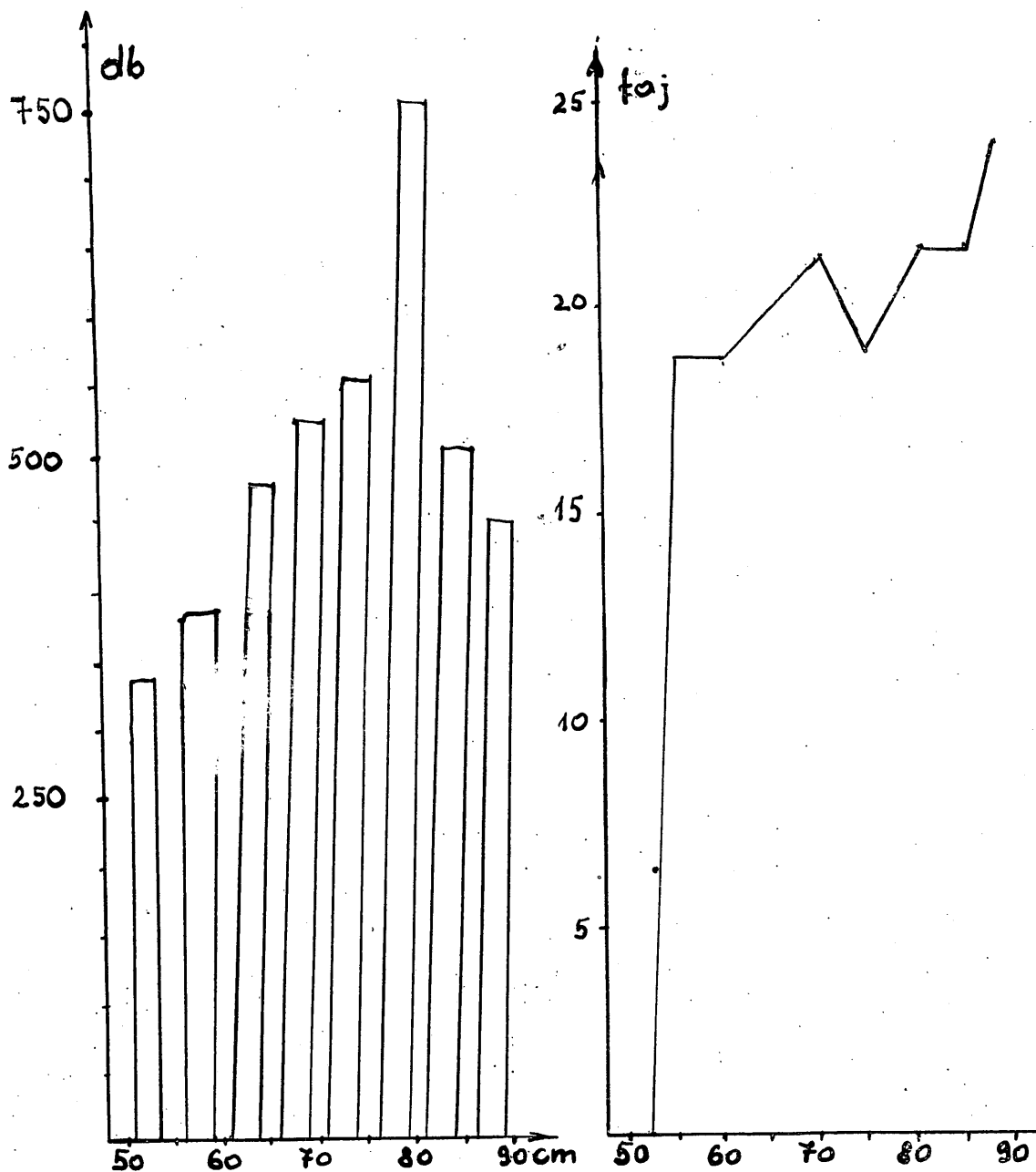
szint felé. A nyílt víz és az emelkedő szódatartalom érthetően akadályozta nagyobb mérvű elszaporodását.

A *Helicella obvia* száraz, füves helyeken a földön, vagy csapatosan fűszálakra és kórókra tapadva él, helyenként tömegesen. Melegkedvelő, délkelet-európai eredetű faj. Északra Lengyelország déli részéig hatol fel. Csak a legalsó szintben találtam. Jelenléte az üledékképződés kezdetekor feltételezett melegebb klímát igazolja.

A *Sphaerium corneum* a legkülönbözőbb álló és folyó vizekben megtalálható, árkokban és mocsarakban az iszap lakóhelye. Mennyisége az alsó rész után tizedszázalékra csökken és eltűnik. A karbonátképződéshez szükséges környezet számára nem volt megfelelő.

A *Pisidium casertanum* hasonlóan az előzőhöz a legkülönbözőbb vizekben megtalálható. Palaearktikus faj. Maximuma a felső részre esik, amit igénytelensége indokol.

A *Pisidium obstuale* leginkább kisebb árkokban és pocsolyákban, gödörökben, ritkán tavakban él. Európa középső és északi részein gyakori, nálunk a Duna-Tisza köz vízenyős rétjein és szikeseiben közönséges. Az öszlet alsó harmadában lényeges alkotója a populációnak, innentől a %-os arány egyenletesen lecsökken. A megcsappanás oka szerintem az, hogy a nyílt vízzel borított, viszonylag gyér vegetációju karbonátképződési területről az amfibikus partszegélyi területre húzódott ki.

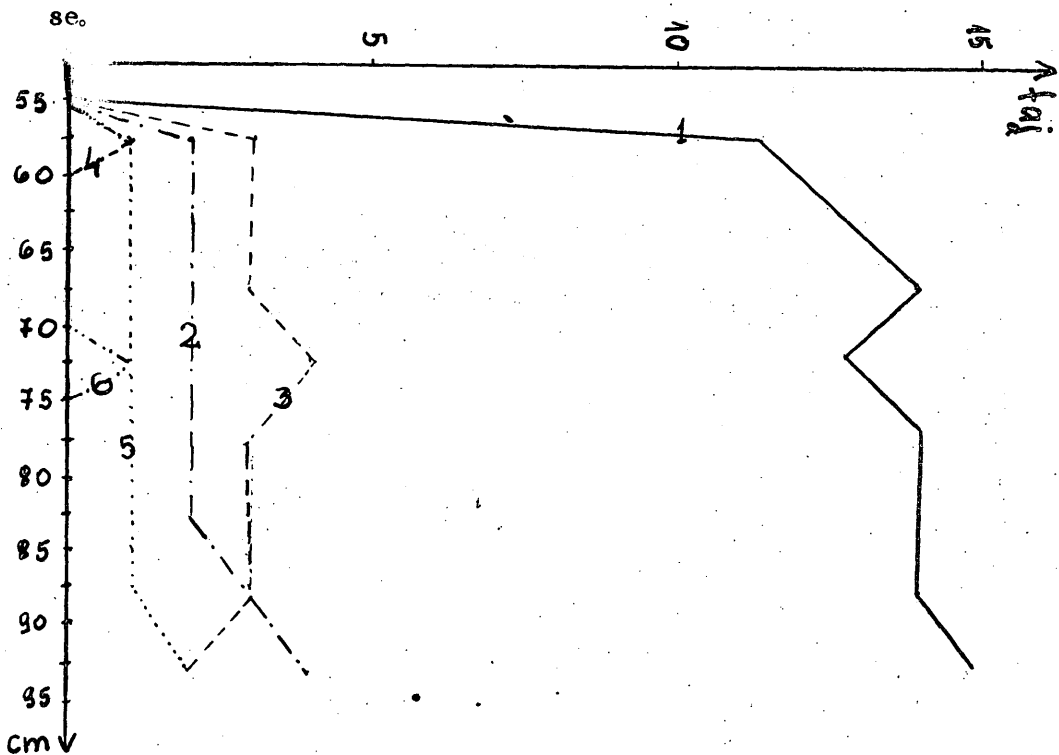


5. ábra : A szintenkénti mennyiség változás.

6. ábra : A szintenkénti fajszám változás.

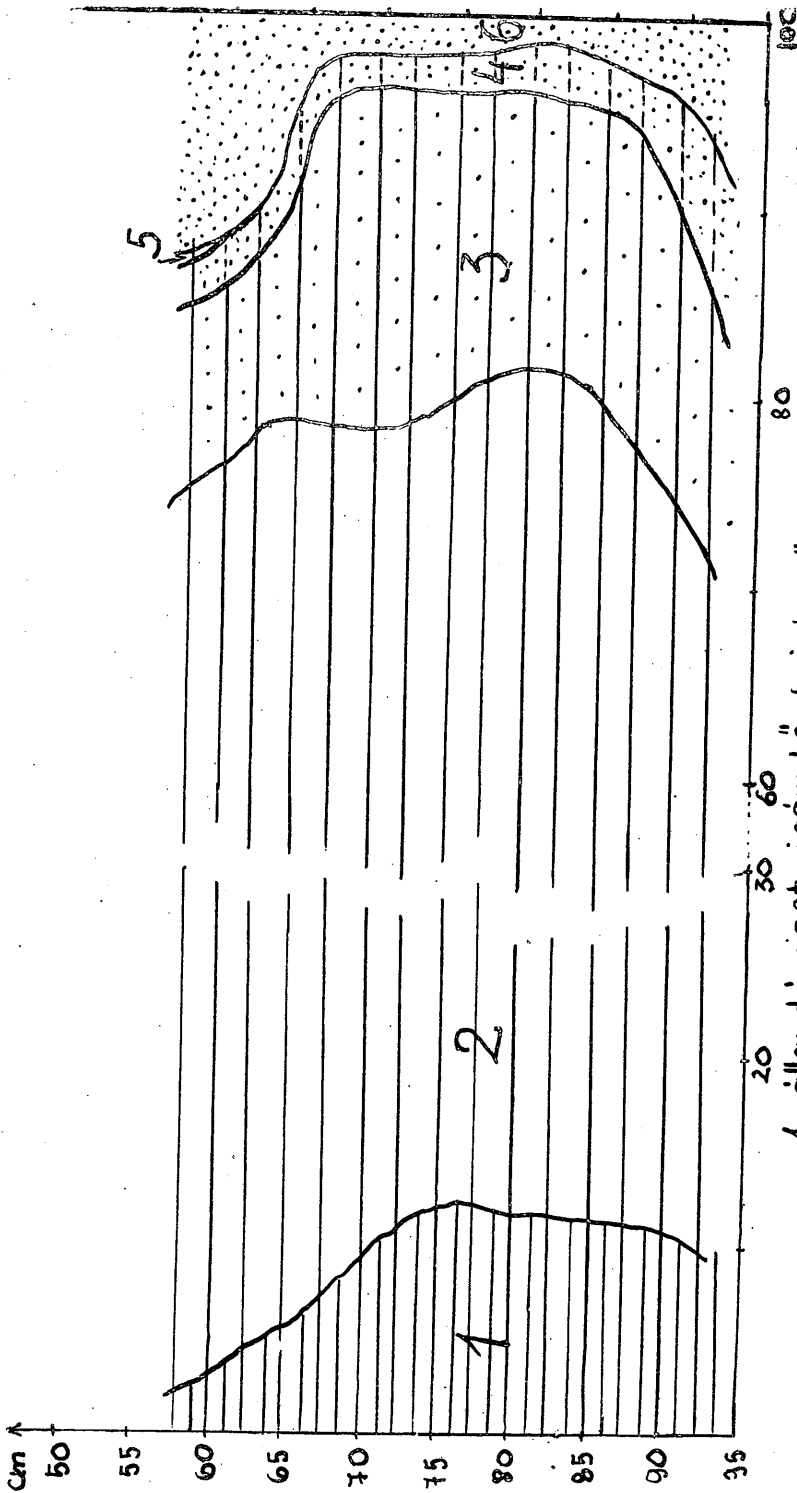
Alulról felfelé haladva a fajszám lépcsőzetesen csökken, az egyedszámmal fordított arányban. Az igényes és a melegkedvelő fajok kiesnek a populációból, ugyanakkor a kozmopolita hűvös éghajlatot igénylők száma

emelkedik. Az egyedszám mintánkénti eltérése igen nagy, a maximum az őszlet alsó felére esik. A csökkenés okát a következőkkel magyarázhatjuk. Az uralkodó fajok partközeli és amfibikusak, a víznívó megemelkedésével az üledékképződés főterületéről, ahonnan a minták is valók, a szélék felé húzódtak. A másik ok a víz szóda tartalmának fokozatos emelkedése.



7. ábra : Az életmód alapján csoportosított fajok megjelenése az egyes szintekben.

- 1- Vizi életmód
- 2- Amfibikus életmód
- 3- Ubiquista életmód
- 4- Ligetlakó életmód
- 5- Melegkedvelő szárazföldi életmód.
- 6- Felszín alatti életmód



1-állandó vizet igénylő fajok
 2-időszakos " "
 3-amfi bikus fajok
 4-ubiquista " "
 5-ligettlakó " "
 6-mélegkedvelő, száraztöldi fajok

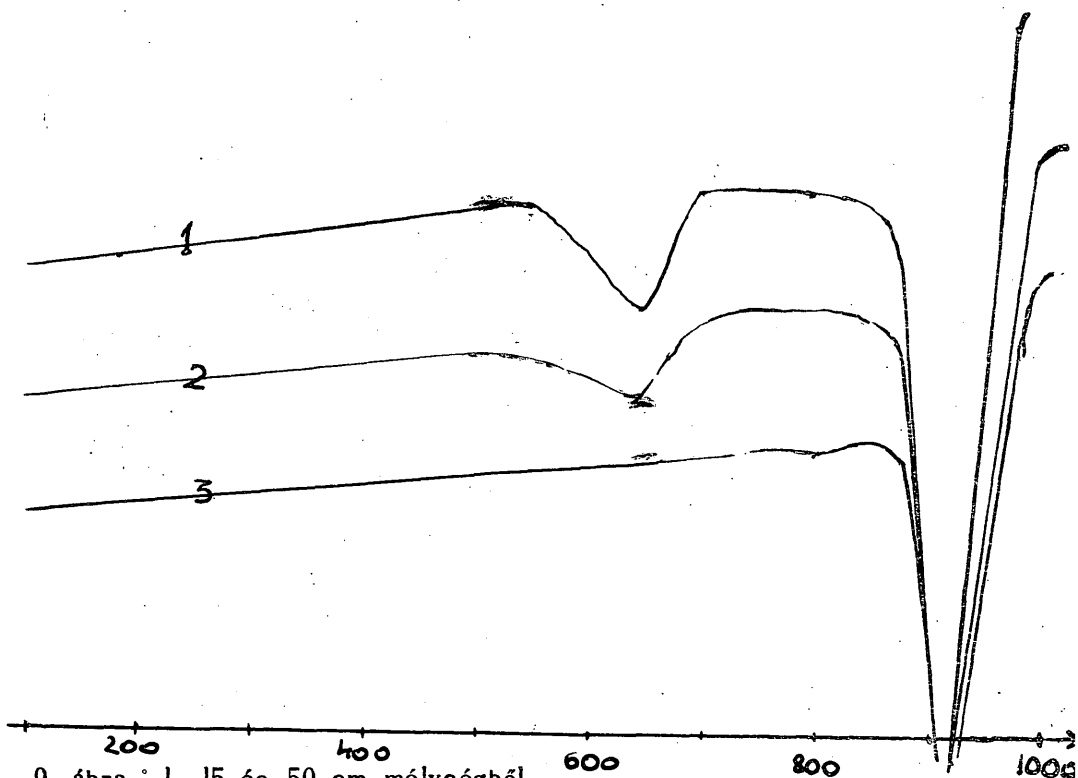
össz %-os mennyisége
 " "
 " "
 " "
 " "
 " "

8. ábra

A 7. ábra alapján a vízi, amfibikus és a melegkedvelő fajok száma az első mintában a legmagasabb. Az ubiquisták szerepe a lerakódás tartalma alatt fokozatosan növekszik, ez a vízzel borított terület növekedésére utal. A 8. ábra adja az eredmények összefoglalását. Látszólagos csupán az ellentmondás, amelyet a vizigényesebb /erősebb kék/ fajok változása mutat. A szódátartalom iránt érzékenyebbek, a szódátartalom emelkedés csökkenésüket eredményezte. Az amfibikus és partközeli fajok kozmopolitábbak. A Valvaták és az Anisusok szerepét mutatja a vízi fajok határa, százalékos arányuk a mélyebb részből való mintákban a legkisebb. Ekkor kellett a legkisebb vízborításnak lenni a területen. Az amfibikus fajok élettere jelentősen meg kellett, hogy növekedjen, ezt a százalékos arányuk növekedése mutatja. Az ubiquisták szereplése teljesen azonos értelmű az előbbivel. Az egyetlen ligetlakó jelenléte, mint azt már a leíró részben megjegyeztem, véletlennek vehető. Döntő fontosságu a melegkedvelő Vallonia enniensis és Helicella obvia mennyisége. Az előbbekkel egyértelműen azt mutatják, hogy a lerakódás kezdetén és végén az éghajlat, helyesebben az adott biotóp, melegebb volt. Az öszi és nagyobbik, középső részében alig szerepelnek, ez vízborítást és hűvösebb körülményeket jelez.

DTA vizsgálat. Három mintából DTA-t készítettem. A 3-as görbe alapján a réti mészkő alsó szintje $MgCO_3$ -ot egyáltalán nem tartalmaz. Kötőanyaga $CaCO_3$. Bizonyítja, hogy a DTA görve 850 C° -ig egyenes lefutású, innen alakul ki a $CaCO_3$ -ra jellemző asszimmetrikus, nagy endoterm csúcs. Maximuma 920 C° körül van. A kötőanyagban az agyagásványok egyike sem mutatkozott még nyomokban sem.

A 2-es és a 3-as görbe kettős csúcsot mutatott, mindkettő CO_3 -ra utal. Az első endoterm csúcs asszimmetrikus, 500 C° -on kezdődik gyenge lehajlással és 730 C° -on a reakció teljesen befejeződik. Viszonylag gyenge maximuma 670 C° -on van. A második endoterm csúcs hasonló a mélyebb szintűhöz, maximuma ugyanugy 920 C° -nál jelentkezett.



9. ábra : 1- 15 és 50 cm mélységből.
 2- 50 és 55 " " "
 3- 85 és 90 " "

Nyilvánvaló, hogy az első a $MgCO_3$, a második a $CaCO_3$ átalakulását jelzi. Kérdés, hogy kalcit és magnezit van-e jelen keverék formájában, vagy dolomit? Az utóbbi ellen szól az, hogy a dolomitnál az első endoterm csucs $800\text{ }^\circ\text{C}$ körül szokott jelentkezni, ha viszont $CaCO_3$ és $MgCO_3$ keverékről van szó, akkor az első csucs lényegesen alacsonyabb hőmérsékleten jelentkezik a $MgCO_3$ disszociációs hőmérsékletének megfelelően. Hogy a felső szintekben a magnezit és kalcit keverékről van szó, ezt valószínűvé teszi, hogy a mélységgel az $MgCO_3$ kimarad, ha dolomit lenne a mélyebb szintekből sem hiányozhatna az $MgCO_3$ -ra jellemző endoterm csucs.

A DTA alapján a mésziszap és a réti mészkő felső része $MgCO_3$ -al szennyezett $CaCO_3$. Végeredményben a kérdést egyértelműen eldönteni csak röntgen analitikával lehetne.

Összefoglalva az eredményeket megállapítható, hogy az ismer-
tetett bánya területén a réli mészkő képződése mérsékelten száraz, me-
leg éghajlat alatt kezdődött. A hidegebb klímát kívánó fajok megszaporo-
dása fokozatos hűvösebbé válást mutat. A vegetáció a fajok igénye alap-
ján közepesnek tételezhető fel, semmi esetre sem mocsárinak. Ez az
éghajlat a mogyoró és tölgy-kor átmeneti idejére mutat. A tölgy-kort to-
vábbi szakaszokra még nem bontották, így a felső részben a melegked-
velők százalékos arányában tapasztalt emelkedést kellőképpen nem tu-
dom értékelni. A homoki szikes vadvizek hőmérséklete alacsony, elkép-
zelhető, hogy az üledékképződés miatt a víz mélysége csökkent, így a
biotóp relativ melegedése csupán a feltöltődést mutatja. Az üledékképző-
dés fő tartama alatt időszakos kiszáradások alig képzelhetők el a viz-
igényes fajok állandó jelenléte alapján. A legfelső minta nem tartalma-
zott még faunanyomokat sem, az ok kiderítéséhez további vizsgálatokra
van szükség. Ugyanez áll egy másik kőfejtő területére, ahol a karbonát-
üledékek uralkodó részét mészszipap alkotja, mészkő csak legalul talál-
ható vékony kifejlődésben. Itt a mészszipapban meglehetősen gazdag
fauna van. A teljes feldolgozás folyamatban van. Lehetséges, hogy az
itteni mészszipap a szomszédos mészkő heteropikus fáciesét jelzi.

DIE MOLLUSKENFAUNA DER KARBONATSEDIMENTE DES GEBIETES ZWISCHEN DONAU UND THEISS

von Mihály Mucsi

In den sanften Vertiefungen des altholozänen Flusses dieses
Gebietes kommen Mg-reiche lockere Karbonatschlämme /Sseekreiden/
und hauptsächlich aus CaCO_3 bestehende Süßwasserkalke vor. Wo beide
Sedimentarten ausgebildet sind, liegen die Kalksteinschichten immer unten,
in den meisten Stellen kommt aber nur Karbonatschlamm vor. In dessen
oberen Teile fehlen Molluskenreste gänzlich, im unteren sind wenige, gegen
Soda unempfindlichere, in periodischen stehenden Gewässern lebende und oft
Arten. Das zeigt auf eine, nach oben zunehmende Aridität des Klimas, mit
stärkerem Salzgehalt des Wassers. Das Lebensoptimum der Mollusken war
im Ablagerungszeit des Kalksteins, in dessen Mitte ist der Zahl der Exemplare

der grösste, bis 316 Stück pro dm³. Die Bewohner der ständigen Gewässer sind vorwiegend, aber auch der Artenzahl ist gross. Wärmeliebende Arten treten zurück zugut der kälteliebenden. Das Klima der Ausbildungszeit dieses Horizontes sollte am meisten niederschlagreich und gleich verhältnä kühl zu sein. Nach unten vermehren sich die trockenländische und wärmeliebende Arten, und vermindert sich der Arten- und Exemplarenzahl, ~~gan~~ bis zum Übergang in Flugsand. Auf Grund der Sedimentenausbildung und Molluskenverteilung lassen sich die Karbonatsedimente in die klimatische Abschnitte des Holozäns einreihen. Flugsand : Haselnusszeit, Süswwasserke Eichen- und ältere Buchenzeit, Ausbildung der Karbonatschlämme : Jüngere Buchenzeit.

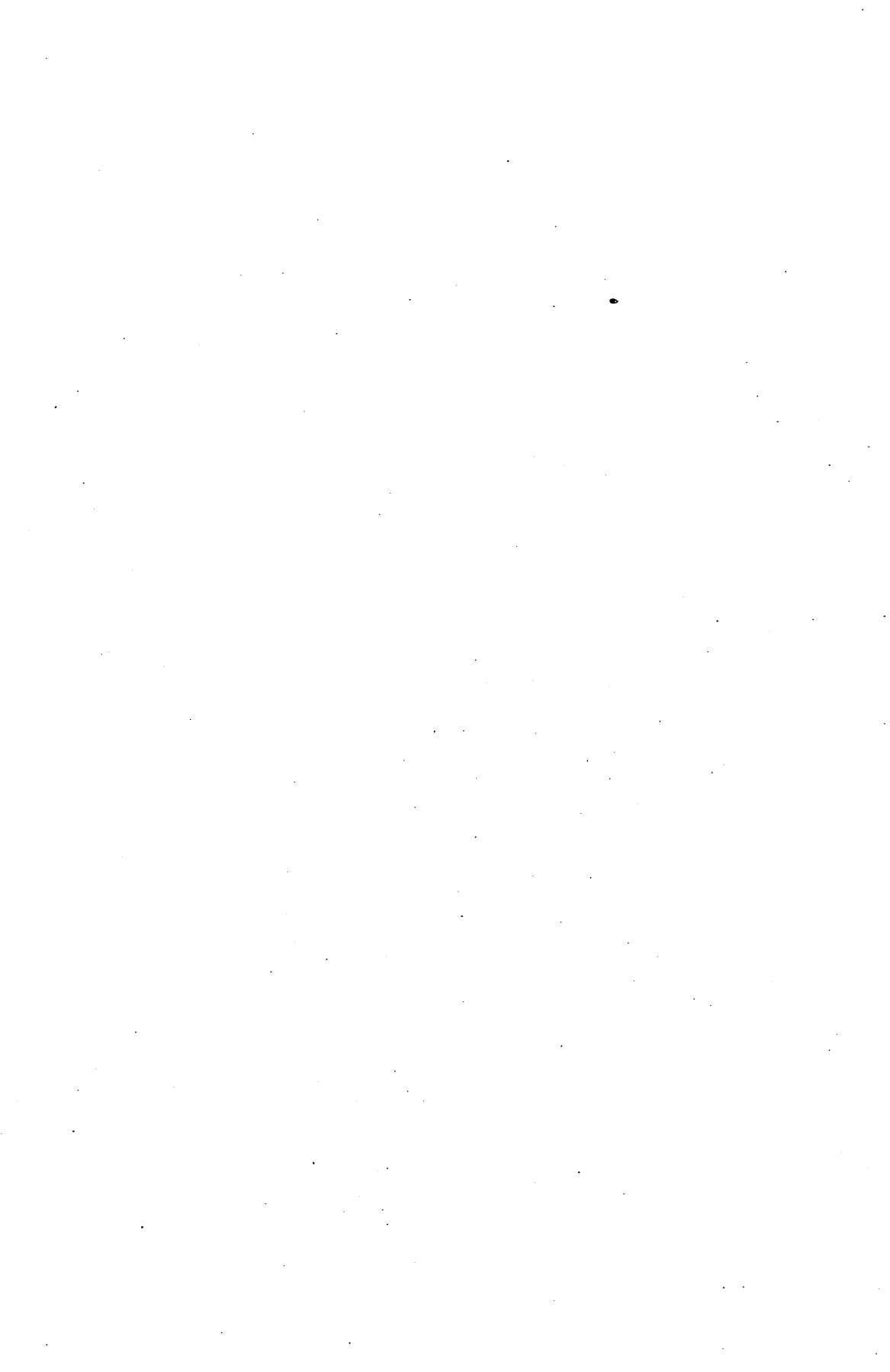
I r o d a l o m

1. Horváth Andor : A paksi pleisztocén üledékek csigái és értékelésük. /Álltani Közlemények XLIV. k. 3-4 f./ 1954.-
2. Horváth A. és Antalfi S. : Malakológiai tanulmány a Duna-Tisza köz déli részének pleisztocén rétegeiről. /Separatum ex : Annales Biologicae Universitatum Hungariae/. 1954. Budapest.
3. Kriván Pál : Die Bildung der Karbonatsedimente im Zwischengebiet von Duna und Theiss. / Separatum Acta Geologica Tom. II./ 1953, Budapest.
4. Miháلتz István és M. Faragó Mária : A Duna-Tisza-közi édesvízi mészkő képződmények. / Különlenyomat az Alföldi Tudományos Intézet 1944-45. Évkönyvéből. /
5. Rotarides Mihály : A lösz csigafaunája. Összevetve a mai faunával, külön tekintettel a szegedvidéki löszökre. 1931. Szeged.
6. Soós Lajos : A Kárpát-medence mollusca faunája. 1943. Bp.-
7. Zólyomi Bálint : Magyarország növénytakarójának fejlődéstörténete az utolsó jégkorszaktól. /Különlenyomat a M. Tud. Akad. Biol. Oszt. Közleményei I. köt. 4. sz./ 1952. Budapest.

M é l y s é g c m- b e n

	Életmód	50-55	55-60	60-65	65-70
1. <i>Valvata cristata</i>	vizi	-	2	2	3
2. <i>Valvata pulchella</i>	»	-	48	74	101
3. <i>Valvata piscinalis</i>	»	-	9	19	16
4. <i>Bithynia tentaculata</i>	»	-	2	2	1
5. <i>Bithynia leachi</i>	»	-	7	8	7
6. <i>Carychium minimum</i>	amf.	-	11	24	33
7. <i>Stagnicola palustris</i>	vizi	-	7	5	4
8. <i>Radix ovata</i>	»	-	-	-	-
9. <i>Radix peregra</i>	»	-	-	1	2
10. <i>Galba truncatula</i>	»	-	10	7	26
11. <i>Planorbis cornea</i>	»	-	4	3	6
12. <i>Anisus planorbis</i>	»	-	29	25	27
13. <i>Anisus septemgyratus</i>	»	-	-	-	-
14. <i>Anisus spirorbis</i>	»	-	97	100	133
15. <i>Succinea putris</i>	amf.	-	-	-	-
16. <i>Succinea oblonga</i>	»	-	26	27	55
17. <i>Succinea pfeifferi</i>	»	-	-	-	-
18. <i>Cochlicopa lubrica</i>	ubiq.	-	-	-	-
19. <i>Vertigo pygmaea</i>	»	-	5	4	3
20. <i>Pupilla moscorum</i>	»	-	7	14	14
21. <i>Vallonia enniensis</i>	melegk. sz.f.	-	46	44	19
22. <i>Caecilioides acicula</i>	felsz. a.	-	-	-	-
23. <i>Zonitoides radiatulus</i>	ligetl.	-	1	-	-
24. <i>Euconulus trochiformis</i>	ubiq.	-	3	2	4
25. <i>Helicella obvia</i>	melegk. sz. f.	-	-	-	-
26. <i>Sphaerium corneum</i>	vizi	-	-	-	1
27. <i>Pisidium casertanum</i>	»	-	9	11	6
28. <i>Pisidium obtusale</i>	»	-	7	14	25
Összesen :		-	330	385	436

70-75	75-80	80-85	85-90	90-95	Össz.
2	2	8	6	5	30
115	79	105	41	32	595
14	34	35	22	32	181
3	3	11	9	6	36
6	6	20	7	3	64
20	24	24	17	20	173
5	4	7	5	4	41
-	-	-	-	2	2
1	-	1	1	2	8
26	37	75	54	28	263
4	5	5	4	3	34
34	27	44	22	22	230
-	1	-	-	-	1
135	143	189	138	122	1057
-	-	-	-	3	3
73	63	83	62	44	433
-	-	-	1	2	3
2	-	1	-	-	3
3	4	-	1	-	20
13	15	21	8	12	104
15	17	21	13	36	211
1	-	1	-	-	2
-	-	-	-	-	1
9	6	8	8	10	50
-	-	-	-	2	2
-	1	2	3	2	9
8	3	6	10	9	62
36	66	87	68	55	358
525	540	754	500	456	3976



ADATOK A PÓTHARASZTI ERDŐ MIKROKLIMATOLÓGIAI VIZSGÁLATÁHOZ

Boros József

IV. évf. biol.-földrajz sz. II.

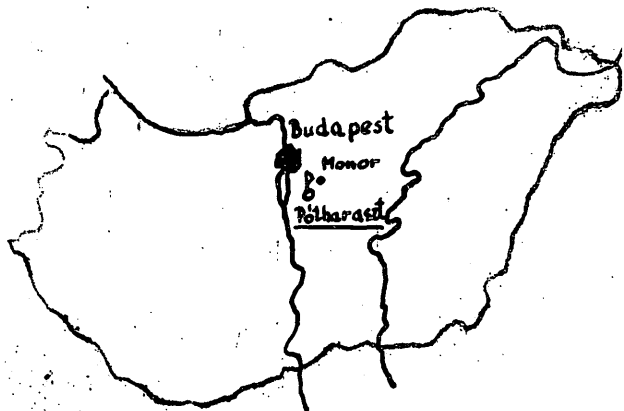
ÉGHAJLATTANI INTÉZET

A Szegedi Tudományegyetem Éghajlattani Intézetének mikroklimatológiai vizsgálatai a pótharaszti erdőben 1960 július hónapban tartottak. Az erdő természetvédelmi területe Monortól NY-ra fekszik 8 km-re. /1. ábra/. Jellegzetes növényvilága tette szükségessé, hogy botanikai viszonyai mellett klímáját is megvizsgáljuk.

A terület általános jellem-

zése

A Pestlőrinc - Vecsés - Monor - Cegléd - Alpár vonal felől NY-ra a Duna felső - pliocén-pleisztocén medre, ártere van. A területet felszabdalják hajdani fattyuágai, holt medrei. A területre folyami hordalék és lösz telepedett. De amilyen változa-



1. ábra

tos egy ártér, úgy itt is a hordalék és lösz nem adnak egységes takarót, horizontálisan és vertikálisan egyaránt változnak. A vizsgálati területünkön található futóhomokformák keletkezésére PÉCSI ad magyarázatot /2/. Szerinte Ócsa, Soroksár környékén a pleisztocén végén meszes iszap borította el az addigi üledékeket. Ahová ez a folyó szeszélyessége miatt nem jutott el.

vagy az iszap lepusztult, ott felszínre került a homok, s a defláció eredményeként kialakultak a mai homokformák. Az újabb vizsgálatok alapján /8/ a Duna-Tisza közti eolikus rétegsor az egész pleisztocént magába foglalja, az ez alatti folyóvízi lerakódások már pliocén korúak. A Duna tehát utoljára a felső-pliocénben haladt DK irányban, a pleisztocénbeli szélhordta felhalmozódás K felé elgátolta és ettől kezdődőleg csak a mai meder mentén folyt. A terület változatos. A fattyúágak mellett alacsonyabb teraszszigetek, apró ármentes foltok tagolják. Jellemzőek a futóhomokformák /buckák, szélbarázdák/ és az organogén feltöltés alatt álló tőzeges, zsombékos mélyedések. A pótharaszti erdő területén uralkodó a futóhomok, melyet már mesterséges erdőtelepítéssel megkötöttek.

A vizsgálatok az erdő «Forrás»-nak nevezett részében folytak. Ez a terület az erdő NY-i részén van. Kimélyült, lapos terület, valószínűnek látszik, hogy a szél munkája révén keletkezett. Hossza 350-400 m, szélessége 80-110 m, a környezethez viszonyított szintkülönbsége sehol sem haladja meg a 2.5 m-t. Időszaki vízboritottság jellemzi. A száraz időszakban is magas a talajvíz szintje, így kialakulhatott a száraz, homokos erdő közepén egy sajátos vegetáció, természetes, jól elkülöníthető szubsztrátumokkal. A szélvájta mélyedés legmélyebb részén egy igen sűrű állományu, két méteren felüli, járhatatlan «csalános nádas», a sekélyebb partszakaszon «sásas rét» alkotják a növényzetet. /Az utóbbit kaszálóknak használják, s odaérkezésünkkor tarló állapotban volt./ A meredekebb ÉK-i lejtősődésen «gyöngyvirágos tölgyes» majd «nyárfás ligeterdő» található. A csalános nádas és a sásas rét erősen közreműködnek a mélyedés organikus feltöltésében. Dus növényzetük, az időszakos vízborítás kedvez a szerves rothadásnak, humuszképződésnek.

Több helyen végeztünk feltárást a célból, hogy a talaj szerkezetét megállapítsuk.

A sásas réten végzett feltárási eredményei :

0-20 cm tőzeg, aprószemű homokkal

20-40 cm erősen humuszos réti vályog, lényeges részét finomszemű

frakció alkotja, benne időszakos vizállásra mutató Mollusca

fajok találhatók /*Succinea oblonga*, *Anisus spirorbis*, *Galba truncatula*, *Chondrula tridens* stb./

70-100 cm. gyengén humuszos, löszből képződött vályog, mely fokozatosan homokosodik.

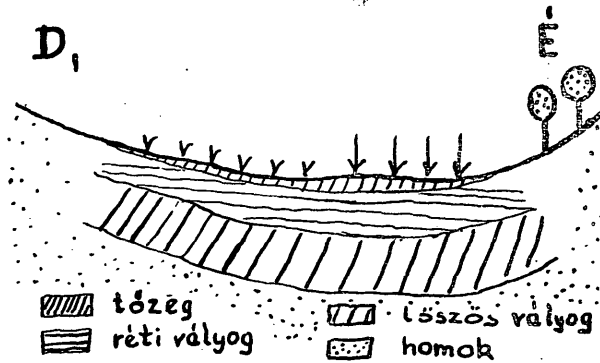
110 cm-től megjelenik a területen uralkodó aprószemű homokos finomszemű homok.

A csalános nádasban vett talajsorozat szintén ezt a képet mutatja azáltal a különbséggel, hogy a tőzeg kivételével az egyes rétegek 10-20 cm-el vastágabbak, a tőzeg sokkal dusabb és az időszakos vízállásra mutató *Mollusca* faunája sokkal gazdagabb.

A gyöngyvirágos tölgyes és nyárfás ligeterdő talajának felső rétege humuszos homok /sötétbarna színű/, majd a humusz mennyisége csökken és 80-100 cm között egész világos a homok, 170 cm-nél pedig újabb humuszszint következik.

Egészen vázlatosan, csupán a szemléletesség szempontját figyelembe véve a terület keresztmetszetét a következőképpen lehetne megrajzolni /2. ábra/

Az észlelőállomásokat É-D irányban helyeztük el, mind a négy növénytársulásban.



2. ábra.

Időjárás a vizsgálat időszakában

Julius 15-én a skóciai barometrikus minimum hidegfrontja elérte az Alpok vidékét, és 16-ra behatolt hazánkba, de kutatási területünket nem érte el. 17-én dél-alföldi központtal egy másodlagos barometrikus minimum alakult ki, melyből É felé meleg, D felé hidegfront ágazott ki. 18-ra az a ciklon feloszlott és az egész ország területét egy magas légnyomású hát foglalta el. 19-re az anticiklon megerősödött, s ez erős besugárzást és magas hőmérsékleti maximumokat eredményezett. 20-án a skandináviai minimum hidegfrontja betört a Dunántulra, és 21-én elérte területünket. Hatása erős lehülésben, zivatarokban, kiadós csapadékban nyilvánult meg.

Julius 17-én egész napon át teljesen borult volt az ég, főleg Cu, Ac, Ci és Cs felhőkkel. Este 20 óra után kezdett el oszlani a felhőzet, 23 után már teljesen kiderült. A napi menetet 12 órakor zavarta meg egy távoli zivatar hatása gyenge szemerkéléssel, hőmérsékleteséssel. Egész nap folyamán fujt a szél É, ÉNY, NY irányokból, átlagban 30-60 m/min., egy alkalommal pedig 110 m/min sebességgel. Julius 18-tól 21-ig derült éjszakák után 8-10 óra körül kezdődött meg a felhőzet felvonulása, főleg Cu, késődélután pedig Cu és Ac formájában. A felhővel való boritottság 5-ös fokozatu volt általában, de maximálisan is csak 19-én haladta meg liét alkalommal a 8-as fokot. A felhőzet 18-21 óra között oszlott fel. A zenitet a délelőttök folyamán Cu képződés jellemezte, 18-án főleg D, DNY irányu szél fujt 8-17 óráig 60-100 m/min. sebességgel, 19-én 11-14 óra között volt az előző napihoz hasonló irányu /néha K-i/, erősségü szél, 20-án a szél iránya K és D, erőssége 40-100 m/min, s 9-15 óráig fujt, 21-re virradó éjjel 0-1 óra között jelent meg a felhőzet, és a délelőtt folyamán elérte a 10-es fokot. A szél iránya NY-ra változott, s 12 órára erős zivatart hozott, 60.9 mm csapadékkal. Minden éjszaka észleltünk harmatot és 21-e kivételével talajmenti ködöt, mely napkeltekor felemelkedett, s mint pára gyorsan eloszlott. /3. 4./

Tehát az észlelés időszakában az első és utolsó nap kivételével anticiklonális helyzet, erős besugárzás, kevés, délelőtti felvonuló felhőzet, gyenge szél volt uralkodó és hőmérsékleti értéke is megfelel az átlagos júliusi értékeknek, így feldolgozásra alkalmas.

A talaj hőmérsékletének vizsgálata.

Dolgozatomban a talajhőmérsékleti észleléseket kívánom feldolgozni. Méréseket a sásas réten és a csalános nádasban végeztünk 2, 5, 10, 20 és 30 cm mélységben, higanyos hőmérőkkel, óránkénti leolvasással.

A mikroklimák alakulásában elhatároló szerepe van a szubsztrátumok minőségének, fizikai különbségének. Így tehát szükség van a szubsztrátumok megismerésére, s ennek egyik tényezője a talajhőmérséklet.

A sugárzó energia hatására a talajfelszín felmelegszik. A hőt egyrészt a vele érintkező levegőrétegnek, másrészt a talaj mélyebb rétegeinek

továbbítja. A sugárzó energia csökkenése azt eredményezi, hogy a talaj felszíne hidegebb lesz, mint az alatta levő réteg. Az alsó, melegebb talajszintből fog most hő vezetődni a talajfelszín és a még mélyebb rétegek felé, ahol a hőmérséklet alacsonyabb.

A talajnak azt a részét, mely az alatta és felette levő rétegeknél hidegebb vagy melegebb, a talaj tevékeny szintjének nevezzük. A talaj felszín lehüléskor a talaj meleg szintjéből odaáramló hő a felszín hővesztését nem pótolja, lehül maga is, megszűnik meleg szint lenni, helyét most már az alatta levő szint veszi át. Ez így halad tovább, míg a tevékeny réteg napi határához nem ér. A meleg szinthez hasonlóan keletkezik és vándorol a hideg szint is az éjjeli kihülési időszakban.

A tevékeny szintek napi járásának menete függ a talaj hővezetőképességétől, nagymértékben befolyásolja az időjárás, erősen változtatja a növényzet is, amennyiben az árnyékolással csökkenti a besugárzást, s megváltoztatja a hővezetést. /7./

A talajhőmérséklet szélső értékei

A vizsgálati területünkön felállított két állomás talajának szerkezetében nem észlelünk erősen elütő különbséget. Így a talaj hőforgalmának vizsgálatakor főleg a növényzettel való boritottságot kell figyelembe venni, mint olyan tényezőt, mely a talajhőmérséklet alakításában döntő tényezőt jelent a két állomás között.

A sásas réten a minimumok minden mélységben a három napon keresztül /július 18, 19, 20/ szabályos időben jelentkeznek :

2 cm	05 óra
5 »	06 »
10 »	09 »

A 20 és 30 cm-es rétegben nem állapítható meg pontosan, egész napi kicsiny hőingásuk miatt.

Az egyes rétegekben a hőmérsékleti minimumok közötti különbség is állandó :

	<u>július</u>	<u>18</u>	<u>19</u>	<u>20</u>
K ₂₋₅		2.5 C ^o	2.1 C ^o	2.5 C ^o
K ₅₋₁₀		1.4	1.4	1.0

A csalános nádasban hasonló a helyzet, de itt a minimum elérésének időpontjában eltolódás következik be, ami a növényzet árnyékoló hatására vezethető vissza. A korareggeli órákban a napsugarak beesési szöge még alacsony, s nem hatol közvetlenül a talajfelszínre. A minimum beállásának időpontjában kb. két órás eltolódást találtunk :

2 cm	07 óra
5 "	08 óra
10 "	09 óra

Az egyes rétegek értékei között a különbségek jóval kisebbek :

	július	18	19	20
K_{2-5}		0.5 C°	0.5 C°	0.4 C°
K_{5-10}		0.4	0.3	0.1

A nádasban a minimumok értéke magasabb, mint a sásas réten, ami azt bizonyítja, hogy a nádas szigetelőként szerepel, meggátolja az erősebb éjszakai kisugárzást. A különbség 2 cm-en mutatkozik meg : 1.7-2.0 C°-al a nádas javára.

A minimumok értékei a sásas réten és a csalános nádasban :

	július	18	19	20
<u>sásas rét</u>	2 cm	13.5	14.7	15.4 C°
	5 "	16.0	16.8	16.9
	10 "	17.4	18.2	18.9
	20 "	17.2	17.5	18.3
<u>csalános nádas</u>	2 cm	15.4	16.4	17.4
	5 "	16.9	16.9	17.8
	10 "	16.3	17.2	17.8

A maximumok esetében már megváltozik a helyzet. Mindkét állomás azonos rétegeiben a maximumok azonos időben jelentkeznek :

2 cm	14 óra
5 "	16 "
10 "	18 "

A csalános nádas növényzete a felmelegedés erősségére igen erős hatást gyakorol azzal, hogy levélzetével a napsugárzás jelentékeny részét fel fogja.

A maximumok értéke a sásas réten és a csalános nádasban :

	július	18	19	20
<u>sásas rét</u>	2 cm	33.0	32.7	33.6 C°
	5 "	24.6	25.0	25.6
	10 "	21.0	21.5	22.0
	20 "	19.0	19.5	20.0

<u>csalános nádas</u>	2 cm	22.2	22.1	22.9
	5 "	20.9	21.7	22.5
	10 "	19.3	19.9	20.9

A talajhőmérséklet napi menete

Közvetlen napkelte után - 5 órától - a "sásas réten" 2 cm mélységben elég gyorsan megindul a hőmérséklet emelkedése, így 07-08 óra között már ez lesz a legmelegebb réteg. Az egyenletes hőmérsékletemelés kb. 11-12 óráig tart, innét már a felhősödés fokához mérten lassul, majd 14 órától, a maximum elérése után megindul a hőmérséklet csökkenése. A szabad térszin miatt a kihülés elég gyors és 20-21 óra között hidegebb lesz mint az 5 cm-es réteg. Ekkor lassul le a lehülési folyamat, mivel a nálánál melegebb, mélyebb rétegekből kap utánpótlást. Ha a napi menet grafikóját megrajzoljuk, az meglehetősen hasonlít egy egyenlőszárú trapézhoz, /3. ábra/

Egy példa a felmelegedés ütemére :

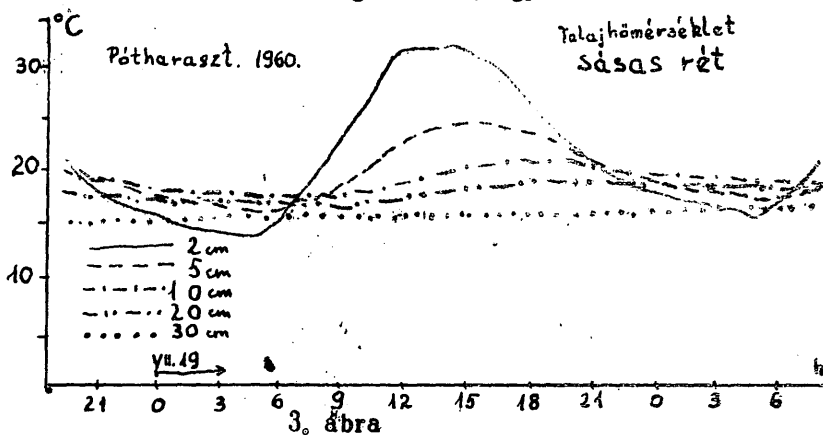
július 18-án az 05 órákor bekövetkező 13.5 C°-os minimum érték után :

06 órákor	14.0 C°
07 "	16.0
08 "	18.7
09 "	21.2

a 2 cm-es réteg hőmérséklete. A maximum értéket 14 órákor 33.0 C°-al

éri el.

Az 5 cm-es mélységben már lassabb a folyamat. A minimum értéke $1,8-2,5\text{ C}^{\circ}$ -al magasabb, mint a 2 cm-es rétegé és kb. egy órával később következik be. A felmelegedés folyamata is lelassul. 18-án a 06 órai $16,0\text{ C}^{\circ}$ -os minimum után 09 órakor még csak $17,6\text{ C}^{\circ}$ a hőmérséklete, s a maximum értékben is csak $24,6\text{ C}^{\circ}$ -ot ér el.



tehát $8,4\text{ C}^{\circ}$ -al kevesebbet, mint 2 cm-en.

A 10 cm-es mélység maximumának különbsége az előzőhöz viszonyítva $3,1-3,6\text{ C}^{\circ}$ között mozog mindhárom napon, s későn, 18 órakor éri el.

A 20 cm-es szint napi ingadozása $1,7-2,0\text{ C}^{\circ}$ közötti, pontosan meg nem állapítható időben éri el maximum és minimum értékét.

A 30 cm-es rétegnek nincs észrevehető napi menete. Az öt napos észlelés folyamán lassan emelkedő hőmérsékletet mutat: a kezdeti $15,8\text{ C}^{\circ}$ -ról $16,9\text{ C}^{\circ}$ -ra emelkedett a hőmérséklete. Állandóan ez volt a leghidegebb réteg, csupán a 2 cm-es szint hőmérséklete sülyedt ennél mélyebbre az éjjeli lehűlés folyamán.

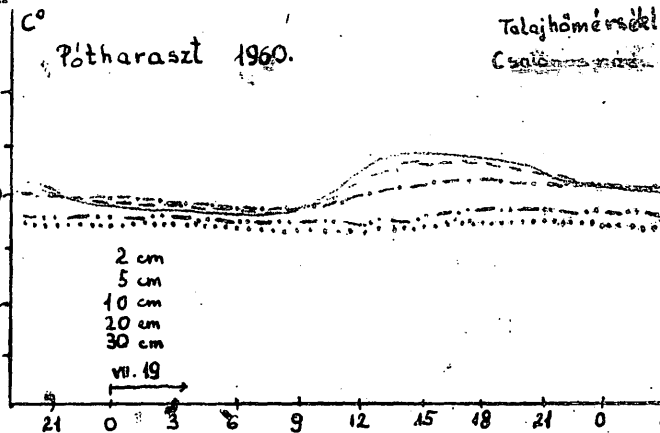
Az érdekes hőmérsékletmenet oka a talaj szerkezetében keresendő. A vastag, laza szerkezetű tőzeges réteg igen rossz hővezető. Benne megtehetősen lassan, s nagy veszteséggel terjed a hő. A talajfelszín jó hőnyelő, ez magyarázza a talajfelszínhez közeli 2 cm-es réteg erős felmelegedését. A rossz hővezetés a felső 20 cm-t jellemzi. A 30 cm-es réteg már réli vályogban van, de tőzeges réteg olyan erős szigetelő hatást gyakorol, hogy ez az aránylag nem mélyen levő szint az erős besugárzás ellenére sem vesz részt tévékenyen a napi hőforgalomban.

A "csalános nádasban" a talaj szerkezete hasonló, de elíhez egy erős növényi boritottság járul, ami jelentős mértékben megváltoztatja azt a napi

menetet, amit az előbb megismertünk.

A csalános nádasban a 2 cm-es réteg minimumát 07 órakor éri el, a telmelegedés gyorsan játszódik le, a maximumok ideje egybeesik a sásas rét maximumjainak idejével. A késői minimumot és a gyors felmelegedést az okozhatja, hogy a napsugárzás nem fokozatosan, napkeltétől kezdve melegíti a talajt, hanem akkor éri közvetlenül, amikor már elég magas szögben sugároz, s a növényzet már nem tudja elfogni a talaj elől a közvetlen sugárzást. Az árnyékolásnak így is jelentős szerepe marad, s a 2 cm-es maximum soha sem haladja meg a 23 C° -ot. A lehülési folyamat sokkal lassabb. Erős szerepet kap a növényzet szigetelő hatása. A nádas levélzónája, ha nem is akadályozza meg, de nagymértékben gyengíti az éjszakai kisugárzást. Így érthető meg, hogy a minimum-értékei a $10\text{--}12\text{ C}^\circ$ -al kisebb délelőtti felmelegedés ellenére sem haladják meg 2 cm-en a sásas rét értékeit.

Az 5 cm-es réteg 30-
hőmérsékletét közvetlenül
nem befolyásolja olyan
mértékben az árnyékolás,
így eléggé felmelegszik
a felsőbb rétegek felől
továbbított hőtől. Maximá-
lisan $1.0\text{--}2.0\text{ C}^\circ$ -al marad
le a 2 cm-es hőmérsék-
let mögött. /4. ábra/



4. ábra

A 10 cm-es réteg oly kevés hőt kap, hogy egész napi ingadozása csak $2.7\text{--}3.0\text{ C}^\circ$ között mozog.

A 20 és 30 cm-es réteg mindig a leghidegebb marad, s hasonlóan a sásas réthez, itt is emelkedő tendenciát mutat: a kezdeti 14.7 C° -ról 17.3 C° -ra melegszik fel az öt nap alatt. Általában $0.2\text{--}0.6\text{ C}^\circ$ eltolódással maradnak egymás mellett.

Ez a két állomás talajhőmérsékletének menete a vizsgálati időszakban.

Végeredményben megállapíthatjuk, hogy a két terület talajhőmérsékletének alakulásában lényeges különbségek vannak, melyet a rossz hővezetés és a növényzettel való borítottság okoz.

Angaben zur mikroklimatologischen Untersuchung des
Waldes bei Pótharaszt

J. Boros

Die Arbeit wertet aus dem Mikroklima-Untersuchungs material eines kleinen Gebietes zwischen der Donau und Theiss die Bodentemperatur-Angaben aus. Sie stellt fest diese Unterschiede welche sich im täglichen Gang der Bodentemperatur, in den Temperatur-Amplituden zwei, mit verschiedenen Pflanzung besetzter Gebiete erzeugen.

I r o d a l o m :

1. Bacsó Nándor : Magyarország éghajlata. Akadémiai Kiadó 1959.
2. Budapest természeti képe /Szerk. : Pécsi Márton/ Akadémiai Kiadó 1958.
3. Időjárási Napijelentés. Országos Meteorológiai Intézet 1960. július
4. Juhász János : Egy pótharaszti homokbucka hőmérsékleti viszonyai. Doktori értekezés 1961. /Kéziratban/
5. Pécsi Sársfalvi : Magyarország földrajza. Akadémiai Kiadó 1960.
6. Wagner Richárd : Mikroklimatárségek és térképezésük. Földrajzi Közlemények 2/1956/ 201-216.
7. Wagner Richárd : Adatok a Délkelet-Alföld mikroklimájához. Földrajzi Értesítő 2/1956/ 135-160.
8. Dr. Molnár Béla : A Duna-Tisza közti colikus rétegek felszíni és felszín alatti kiterjedése . Földtani Közöny 3/1961/ 300-315.



T a r t a l o m j e g y z é k.

Megyesi László	Néhány csoportelméleti ferdeszorzat típus vizsgálata	1.
Bánkfalvi Zsolt és Kalmár Ágota	Gráfok egy osztályának számossága	11.
Maráz Vilmos	Egy kétmagu komplex tárgyalása az MO-LCAO módszerrel	15.
Barta Judit és Farkas Éva	Energiavándorlási vizsgálatok a koncentrációs depolarizáció alapján fluoreszcen olatoknál	25.
Arlett L. Bálint E. Borbély M. Leopold J. Mayer I.	A szekundérlumineszcencia agranovics féle elméletével kapcsolatos számítása inkról.	33.
Szirovicza Lajos	Asszociáció vizsgálata aromás azometi- neknel elektrongerjesztési elnyelési szin- kép alapján	39.
Szabó József és Török Miklós	Szerves molekulák vizsgálata az LCAO- MO módszerrel	57.
Fényi Szaniszló	Átmeneti fém komplexekben előforduló átfedési integrálok vizsgálata	65.
Porcs Tibor	Indolvázias vegyületek bioszintézisének vizsgálata élesztőkön	69.
Göndös György	Antimikrobiális vegyületek előfordulása hazai disznóvényekben	81.
Bitó Mária	A szegedi parkok fái és cserjéi	97.
P. Kovács István	Néhány csontos halunk gázhólyagjának összehasonlító bonctana és szövettana	103.
Asztalos Ágnes	A szerencsi öböl és környékének ter- mészetföldrajzi vázlata	109.
Galántai Márta	Adatok Szeged város települési viszo- nyaihoz	119.
Rátkai Árpád	A Délkelet Alföld termálvizgazdálkodása	127.
Mucsi Mihály	A Duna-Tisza-közi karbonátüledékek puhatestű faunája	135.
Boros József	Adatok a pótharaszti erdő mikroklimate- lógiai vizsgálatához.	155.

