



Ronald Gillespie (1924–2021)

Nemrég kaptuk a szomorú hírt, hogy életének 97. évében (2021. február 26-án) elhunyt Ronald J. Gillespie angol születésű kanadai kémikus (névének kiejtése *gilleszpi*, a hangsúly a középső szótagon van). A *Magyar Kémikusok Lapja* 2014. évi 11. számában (334–338.) a Hargittai István műegyetemi előadásán készített jegyzetek alapján cikk jelent meg Gillespie VSEPR-modelljéről és a hozzá kapcsolódó történetekről. Az alábbiakban a szokásos nekrológ helyett személyes hangú „mozaikkal” emlékezünk a nagy tudósra (Hargittai István, *Mozaikokból egy élet*, Akadémiai Kiadó, 2019, 71–75.). Az eredeti írásban mindent változtatás nélkül hagyunk.



Hargittai István és Ronald Gillespie egy texasi nemzetközi konferencián, 1994 (Ismeretlen szerző felvétele)

Első amerikai utam 1969 januárjában Texasba vezetett, de útközben megálltam Indiana állam Bloomington városában, mert az Indianai Egyetem kémiai tanszékétől meghívást kaptam előadásra. A bloomingtoni volt az első amerikai előadásom és az egyik első tudományos előadásom. Ma már tudom, hogy a meghívásom nem elsősorban eredményeimnek szólt, sokkal inkább annak, hogy ritka volt a „keletről” jövő tudományos kutató. Főleg kísérleti eredményeket mutattam be; elég eredeti kísérleteket építettünk, és keveset foglalkoztam az eredmények értelmezésével. Az előadást követő kérdés-felelet részben valaki megkérdezte, hogy nem próbáltam-e alkalmazni Ronald J. Gillespie (1924–) elméletét az eredményeim értelmezésére. Nem, nem próbáltam, de az előadást követő éjszakát a könyvtárban töltöttem – nem volt nehéz fennmaradnom az időkülönbség miatt. Mindent elolvastam, amit csak találtam Gillespie elméletéről, amelynek külön neve is volt, VSEPR, „vegyértékhéj-elektronpár taszítás”. Azonnal láttam, hogy valóban nagyon hasznos az eredményeink értelmezéséhez. Még azon az éjszakán hosszú, színes rajzokkal illusztrált levelet írtam Magdinak, aki akkor már a feleségem volt, de egyúttal a diákom is.

Gillespie elmélete, melyet helyesebb modellnek, mint elméletnek nevezni (erről majd kicsit később) azt állapítja meg, hogy az egyszerű molekulákban hogyan helyezkednek el az atomok egymáshoz képest. A molekulák térbeli szerkezetének ismerete nélkül nem érthetjük meg a molekulák kémiai viselkedését. Az én diákkoromban ezeket a térbeli szerkezeteket még mind egyenként meg kellett je-

gyeznünk, míg Gillespie modelljével sok vegyület molekulaszervezetét ki lehet találni. Az egyszerűbb molekulákban van egy központi atom, és ehhez kapcsolódik a többi atom. Gillespie modellje azt mondja meg, hogyan helyezkednek el egymáshoz képest az atomok közötti kötések, és ezzel megadja az atomok térbeli elhelyezkedését, a térbeli szerkezetet. A kötések elektronpárok alkotják, ezekhez a kötésben részt vevő két atom egy-egy elektronnal járul hozzá. A közös elektronpárok az atomok külső héjában helyezkednek el, ezt a héjat vegyértékhéjnak nevezzük. A vegyértékhéj elektronjainak száma utal az adott atom vegyértékére, ami azt fejezi ki, hogy az atom hány másik atommal tud kapcsolatba lépni. Maradhatnak olyan elektronok a vegyértékhéjban, amelyek nem fordulnak elő más atommal közös elektronpárban. Ha ezekből alakul elektronpár, azt magános elektronpárnak nevezzük. Egy-egy elektronpárt úgy kell elképzelni, hogy elfoglalja a tér bizonyos hányadát, mintha dió vagy felfújt léggömb lenne, és a „könyöklésükön” múlik, hogyan helyezkednek el a vegyértékhéjban. Mindegyiknek térre van szüksége, és a könyöklés eredménye, hogy az elektronpárok, vagyis az atomok közötti kötések milyen térbeli alakzatot hoznak létre. Ez lesz a molekula alakja, vagyis szerkezete. Az elektronpárok, akárhány van is belőlük a központi atom vegyértékhéjában, mindig kitöltik a teljes rendelkezésre álló teret. Minél több elektronpár van a vegyértékhéjban, annál jobban kell az elektronpároknak könyökölniük a közös térben való kényelmes elhelyezkedésért.

Ha a vegyértékhéjban csak egyetlen elektronpár található, akkor annak nincs kitüntetett iránya. Ha két elektronpár van, akkor azok egymástól a lehető legtávolabb helyezkednek el, és ha ez a két elektronpár két kémiai kötést jelent, akkor a legegyszerűbb esetben olyan háromatomos molekulához tartoznak, amelyben a két kötés egy egyenes mentén található. Ha a vegyértékhéjban három elektronpár van, és mind a három egy-egy atomot kapcsol a központi atomhoz, akkor a molekula háromszög alakú. Az előbbi két eset különösen egyszerű volt, mert intuíciónk alapján ugyanezt várnánk. Amikor viszont a vegyértékhéjban négy elektronpár van, akkor négyzetes szerkezetet várhatnánk, amelyben a négy kötés a középen levő központi atomtól egy olyan négyzet sarkai felé irányul, amelynek a négy sarkában egy-egy atom van. Ebben az esetben azonban a kötések tartalmazó sík nagyon zsúfolt lenne, míg a sík alatt és fölött a tér kihasználatlan maradna. A négy elektronpár tetraédesen is elhelyezkedhet, és ez mind a négyük számára kényelmesebb. A sort lehetne folytatni, de már ennyi példa is érzékelteti a modell egyszerűségét.

Gillespie modelljét olyan példákkal is illusztrálhatjuk, amelyek a szó szoros értelmében kézzel foghatók. Ha léggömböket fújunk fel, és nyílásuknál összekötjük őket, akkor a léggömbcsoportok ugyanolyan alakzatokat hoznak létre, mint az elektronpárok. Ha négy felfújt léggömböt kötünk össze a nyílásuknál, és magára hagyjuk az így összekötött csoportot, a négy léggömb tetraédesen helyezkedik el. A négy léggömböt kényszeríthetjük arra, hogy mind egy síkban helyezkedjenek el, de amikor elengedjük őket, akkor visszaáll a tetraédes elrendezés. Ha ilyen modellt készítünk, ne hurkaszerű, hanem minél kövérebb léggömböket válasszunk, hogy valóban zsúfolódjanak a rendelkezésre álló térben. A természetben megfigyelhetjük, hogy az együtt növekedő diók is követik a fenti alakzatokat. Az ok egyszerű, az elektronpárok, léggömbök, diók mind a lehető legkényelmesebb elrendeződésre törekednek, ami a legjobb térkihasználás. Ahogy itt bemutattam Gillespie modelljét, csak a legalapvetőbb elvét említettem meg. Sok más szempontot figyelmen kívül hagytam. Amikor a számba vehető sok szempont közül csak a legalap-



vetőbbet vesszük figyelembe, és a többit elhanyagoljuk, modellt alakítunk ki. Ez még nem elmélet, csak modell. A modell nagyon hasznos az egyszerűsége miatt. A modellt aztán lehet finomítani – ezzel kiterjeszthetjük az alkalmazását és az érvényességét. Egyre több szempont figyelembevételével a modell egyre inkább elméletté válik, és alkalmazása is egyre bonyolultabb lesz.

Gillespie egy Ronald Nyholm nevű társszerzővel már 1957-ben leírta a modelljét egy hosszú cikkben. Kezdetben nem sokan alkalmazták – ez késztette arra, hogy 1972-ben könyvet jelentessen meg róla. A könyvtől azt remélte, hogy a modellt többen megismerik és alkalmazzák. Ma a modell, Gillespie nevével vagy anélkül, minden egyetemi általános kémiai és szervetlen kémiai tankönyvben szerepel, sőt középiskolai kémiai tankönyvekben is, de ötven-hatvan évvel ezelőtt alig ismerték. Úgy éreztem, hogy itthon népszerűsíteni kell, és hazatérésem után írtam róla a *Természet Világa* című folyóiratban.

A tudomány-népszerűsítésnek és az ismeretterjesztésnek van egy fontos mellékterméke. Ha az ismeretterjesztéssel komolyan foglalkozunk, akkor értenünk kell azt, amiről frünk, mert csak úgy tudjuk mások számára is elmagyarázni. Én is arra törekedtem, hogy a lehető legegyszerűbb példákkal illusztráljam a *Természet Világa* olvasói számára Gillespie modelljét. Meglepetésemre, éppen ezekre a legegyszerűbb esetekre valami nem működött a modellben. Írtam erről Gillespie-nek – ekkor kerültem először kapcsolatba vele, és örültem, hogy válaszolt. Gillespie akkor már híres tudós volt, én még kezdő kutatónak számítottam. Gillespie komolyan vette a problémámat, és megkért, hogy egyelőre ne hozzam nyilvánosságra megfigyelésemet, mert éppen akkor várta, hogy megjelenjen a modellről szóló könyve, és nem szeretne volna, ha kétélyek gyengítenék a sikerét. A *Természet Világában* hamarosan megjelenttem a cikkemet, de angolul csak évekkel később írtam róla, akkor, amikor már volt magyarázatom is a problémára. A megoldást olyan kiegészítés jelentette, amely megbízhatóbbá tette a modell alkalmazását. Gillespie-vel időről időre folytattuk a levelezést, és 1991-ben közös tankönyvet jelentettünk meg a modell korszerű változatáról, sok alkalmazási példával. A könyv hamarosan eltűnt a piacról, sokat idézték, de kapni már nem lehetett, mert az eredeti kiadót elnyelte a sok egyesülés és felvásárlás, ami a könyvkiadást az elmúlt években jellemezte. A könyv orosz és olasz fordításban is megjelent. 2012-ben egy neves kiadó utánnyomással újra kiadta.¹

Gillespie nem volt teljesen megelégedve a modelljével, amihez az is hozzájárult, hogy a saját egyetemén volt egy kollégája, aki folyton azzal piszkálta, hogy a modell primitív. Ha Gillespie-nek nagyobb önbizalma lett volna, kevésbé törődött volna ezzel. Gillespie modelljét remekül lehetett becslésekre és változási irányok előrejelzésére alkalmazni. A részletes információk az elméletekből és az egyre pontosabb számításokból jöhetnek.

Egyszerű modelljével Gillespie két alkalommal is óriási sikert aratott már a kezdet kezdetén, amikor kísérleti adatok alapján következtetett szerkezeteket cáfolt meg és ajánlott helyettük más szerkezeteket, amelyekre a modelljéből következtetett, és amelyeket azután további kísérletek alátámasztottak. Az eredeti kísérleti adatok nem voltak hibásak, csak a következtetésekben tévedtek a kutatók. Gillespie modellje sikertörténet, de neki nem hozta meg az igazi elégedettség érzését. Erről egy alkalommal nyers őszinteséggel beszélt nekem, mégpedig Oláh György Nobel-díja kapcsán. Gillespie szerint Oláh tökéletesen megérdemelte a Nobel-díjat. Egyik érdemének a legjobb értelemben vett nagyvonalúságot látta, amivel Gillespie-nél bátrabban el tudott jutni az eredményeihez. Gillespie és Oláh kuta-

tásai sok ponton találkoztak egy nagyon fontos területen, a szupersavak kémiájában. A szupersavak kutatásában Gillespie valamikor előbbre járt, mint Oláh, segítette is a kutatásait. Oláh remekül alkalmazta ezeket a szupersavakat – és újakat is felfedezett –, amikor szerves kémiai reakciók átmeneti köztitermékeinek hosszabbította meg az élettartamát. Maga Oláh György mondta nekem, hogy ha a Nobel-díjat a szupersavak kémiájáért adták volna, akkor az lett volna igazságos, ha a díjat megosztják kettejük közt – de a díjat nem a szupersavakért adták.

HI

HUNGAROCOAT DiGiT 2021, avagy Nemzetközi Festékipari Kiállítás és Konferencia a virtuális térben

28 éve rendeztük meg a Budapesti Műszaki Egyetem aulájában az EMP 93' (East-European Meeting Point) néven bemutatkozó nemzetközi részvételi festékipari konferenciát. Az akkori programban, a szakmai előadások mellett, először vettek részt kiállítóként a hazai festékipar magyar és külföldi beszállítói.

A pozitív visszajelzések arra biztattak minket, hogy hosszabb távra tervezzük meg rendezvényünk jövőjét, hogy itthon is folyamatos megjelenési lehetőséget kapjanak a festékszakma fontos szereplői. Új elnevezéssel, immár HUNGAROCOAT néven folytatódott a kétéves ciklusú rendezvénysorozat, melynek X. kongresszusára 2018-ban került sor. Két alkalommal a budapesti Múcsarnok, 2003-ban a Budapesti Kongresszusi Központ, 2006 óta az ELTE ad otthont a találkónak.



Amikor a 2020 novemberében tartandó XI. rendezvényünk előkészületeibe kezdtünk, valami mást, újat, különlegesen szerettünk volna hozzáadni az eddigi megszokott tematikához. Sok mindenre gondoltunk, de arra nem, hogy „kihúzzák a talajt a lábunk alól”.

Kimentek a körlevelek, lefoglaltuk a helyszínt, jöttek az első bejelentkezések a kiállításra és a konferencia-előadásra. Október közepéig döntenünk kellett, megtartjuk vagy elhalasztjuk a rendezvényt.

Gyors körkérdést küldtünk a hagyományos résztvevőknek: legyen-e online rendezvény? Mit szólnának ehhez az új formához? A szokásos kérdés: hogyan lehet megszervezni egy kiállítást megfogható tárgyak, személyes találkozók nélkül? Hogyan? Hát úgy, hogy megpróbáljuk kivetíteni a virtuális térbe képzeletbeli standjainkat, előadásainkat, ismereteinket. Képekkel, feltöltött broszúrákkal, filmekkel, személyes részvételünk írott vagy videoközzétetésével. Ez komoly kihívás kiállítóknak, konferenciaelőadónak és a látogató résztvevőnek egyaránt. A piaci szereplők „ki vannak éhezve” arra, hogy végre, legalább online kapcsolatba kerüljenek vevőikkel, partnereikkel.

¹ R. J. Gillespie and I. Hargittai, *The VSEPR Model of Molecular Geometry* (Allyn and Bacon, 1991; Dover, 2012).