

## Török Ferenc (1929-1981)

FOGARASI Géza\*

ELTE TTK Kémiai Intézet, Pázmány sétány 1, 1117 Budapest, Hungary



Török Ferenc (1929-1981)

Hírnév és teljesítmény nem mindig jár együtt: a korán elhunyt Török Ferenc viszonylag kevéssé ismert a kémikus társadalomban, pedig úttörő szerepe volt a magyar elméleti kémia megteremtésében.

Pécsett született 1929. május 30-án. Középiskolai tanulmányait a *Jézustársasági Pécsi Pius-Gimnáziumban* végezte. A kémia „kitüntetett szerepe” már itt megmutatkozott: érettségi bizonyítványa 11 tantárgyat tüntet fel, melyek eredménye mind jeles, egyetlen kivétellel: a „vegytan” csak jó. Elszántságát ez láthatólag nem törte meg, s 1947-ben megkezdte egyetemi tanulmányait az Eötvös Loránd Tudományegyetem (ELTE) vegyész szakán, ahol 1952-ben diplomázott. Szakmai pályafutása a Lengyel Béla professzor vezette Általános és Szeretlen Kémiai Tanszéken indult, s tulajdonképp végig ehhez a helyhez kötődött. 1962-től mintegy tíz évig akadémiai státuszban volt, majd 1971 után újból a Tanszéken oktató-kutató, egyetemi tanári beosztásban. 1960-ban *A metilszilikonok egyensúlyi átrendeződéséről* c. értekezése alapján szerezte meg a *kémiai tudományok kandidátusa* fokozatot, majd 1970-ben lett - már elméleti kémiai témában (rezgési erőállandók) - a *kémiai tudományok doktora*. Időközben, még 1967-ben alkalmazott matematikusi diplomát is szerzett. A hetvenes években mi, a környezetében úgy gondoltuk, lassan megérdemelt lenne az akadémiai tagság is, de - az akkori szokásoknak megfelelően - jelezték neki, hogy ehhez illene belépnie a Pártba ...

Kandidátusi értekezése még – az MTA-kutatócsoport profiljának megfelelően – a szilikonkutatásokhoz

kapcsolódott, de már itt is megmutatkozott matematikai-elméleti érdeklődése: polisziloxánok egyensúlyozódásának időfüggését, mint matematikai problémát vizsgálta. (Eltökélttségére jellemző, hogy amikor először matematikusokhoz fordult, ők azt mondták, ezt nem lehet megoldani; ő azonban makacsul, „mint egy cipzárt, legombolyította” a feladatot, s megoldotta problémát.) Ezután még határozottabban fordult az elméleti kémia felé. Ez akkor, a hatvanas évek elején nem létezett önálló tudományterületként, s Török Ferenc rengeteg önképzéssel jutott el oda, hogy körülötte lassan kialakult egy elméleti csoport (Pulay Péter, Fogarasi Géza, Császár Pál, később Pongor Gábor.) A hatvanas-hetvenes évek fordulóján a Török-csoport már nemzetközileg kiemelkedő - itthon még kevésbé elismert - eredményeket mutatott fel. E kutatásoknak különlegességet adott egy akkoriban teljesen új szemlélet, a spektroszkópia és a kvantumkémia sajátos ötvözése.

Az első elméleti (kifejezetten matematikai jellegű) kutatások az infravörös (IR) spektroszkópia *inverz rezgési problémájával* foglalkoztak. Ekkoriban számos kutatócsoportot foglalkoztatott a világban az a kérdés, hogy hogyan lehetne egy molekula rezgési frekvenciáit számításokkal meghatározni. Tisztán elméleti (elektronszerkezeti) módszer még nem jöhetett szóba, viszont egyre több kis molekula *erőterét* (rezgési *erőállandóit*) sikerült meghatározni a kísérleti frekvenciákból.; az erőállandókat aztán nagyobb molekulákra átvive lehetett utóbbiak rezgési frekvenciáit és így spektrumukat közelítőleg számítani, s ezáltal részletesen értelmezni. Probléma volt azonban, hogy a kísérleti *normálrezgenciák* száma általánosságban kisebb, mint a meghatározandó erőállandók száma. Sőt, az adatok számát izotópfrekvenciákkal, vagy akár finomszerkezeti állandókkal is kiegészítve, az inverz probléma még mindig határozatlan maradhat. Török Ferenc ezért egy érdekes kérdést vetett fel: rögzített számú kísérleti adat mellett, ha az erőállandók nem is meghatározottak, milyen *tartományon* belüli értékeik vannak összhangban az adatokkal. Részben Pulayval együtt, ezt a kérdést a hatvanas évek második felében egy hosszú cikksorozatban tárgyalták az *Acta Chimica Hungarica*-ban. Az „*F mátrix paraméteres formája*” módszer rövid életű volt, de rendkívüli mértékben járult hozzá az erőállandó-probléma mély megértéséhez.

Részben az előbb említett kérdéskör vezetett tovább a molekuláris erőállandók tisztán elméleti, az elektronszerkezet számításán alapuló meghatározásához, ami az utóbbi évtizedek egyik legnagyobb magyar sikere a szerkezetkutatás területén. Az *elektronok* Schrödinger-egyenletét a magok helykoordinátáinak függvényében (vagyis elvben nagyon sok maghelyzetre) megoldva, az  $E(\mathbf{R})$  függvény jelenti azt a potenciálfelületet, amely a molekularezgéseket meghatározza. Török Ferenc biztatására és támogatásával, Pulay teljes lendülettel fordult a kvantumkémia felé, amihez a technikai lehetőségeket (computer) is megteremtette

\* Fogarasi Géza professor emeritus, ELTE TTK Kémiai Intézet, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A. fg@chem.elte.hu

egy 1967/68-as DAAD-ösztöndíj az NSZK-ban. Pulay nevéhez fűződik az *analitikus deriváltak* („erő-módszer”) kidolgozása, mely ma minden kereskedelmi program nélkülözhetetlen része.

Török Ferencnek abszolút meghatározó szerepe volt a kvantumkémia az *oktatásba* való bevezetésében. Két-három évig speciálkollégiumot tartott, majd az „Elméleti Kémia” kötelező, kétféléves kollégiumként bekerült az ELTE vegyészképzésébe. Ezt a világviszonylatban is élenjáró kezdeményezést sokan és sokáig fenntartással nézték. Nagy elégtétel lenne „Feri” számára, ha láthatná, hogy ma már a preparatív szerveskémikusok is szinte mindennapi eszközként „futtatják” a kvantumkémiai programokat.

Az oktatáshoz rögtön egyetemi jegyzet is készült. A 70-es évek legelején megjelent Török-Pulay-féle *Elméleti Kémiát* legalább 25 évig nyomtatták újra. Hasonlóan, részben még ma is használt jegyzet a Török Ferenc szerkesztésében 1974-ben megjelent, maga és munkatársai által írott *A kémiai szerkezetvizsgáló módszerek elmélete* c. jegyzet. Nagyobb igényű, alapvető szakkönyv a Kapuy-Török szerzőpáros *Az atomok és molekulák elektronszerkezete* c. műve, mely máig is meghatározó a téma magyar nyelvű irodalmában.

Török Ferenc jó megjelenésű, magas, erős testalkatú ember volt, azzal a békés, csöndes természettel, mely sokszor épp’ az ilyen embereket jellemzi. Alig tíz-egynéhány évvel volt idősebb nálunk, mégis szinte apának kijáró tisztelettel néztünk fel rá. Az ebéd utáni rendszeres teázásainknak is az ő megnyugtató, fanyar humorral fűszerezett életszemlélete adta meg alaphangulatát. Az már a mélylélektan kérdései közé tartozik, hogy ez a nyugodt, magabiztosnak tűnő férfi élete utolsó éveiben súlyos depresszió áldozata lett, ami hozzájárulhatott sajnálatosan korai halálához. Látva azonban a magyar elméleti kémikusok mai nemzetközi sikereit, meggyőződéssel mondhatjuk, hogy az épület, melynek alapkövét lerakta, erősebben áll, mint valaha.

### Török Ferenc publikációi

- Lengyel, B.; Prekopa, A.; Torok, F. “Kinetics and equilibrium of the equilibration reaction of linear methyl polysiloxanes. I”, *Zeitschrift fuer Physikalische Chemie (Leipzig)* **1956**, *206*, 161-8.
- Lengyel, B.; Prekopa, A.; Revesz, P.; Torok, F. “Kinetics and equilibrium of the equilibration reaction of linear methyl polysiloxanes. II”, *Zeitschrift fuer Physikalische Chemie (Leipzig)* **1958**, *208*, 33-41.
- Lengyel, B.; Torok, F. Kinetics and equilibrium in the equilibration reaction of linear methyl polysiloxanes *Zeitschrift fuer Physikalische Chemie (Leipzig)* **1960**, *213*, 289-97.
- Gomory, P.; Torok, F. “The factors which determine the properties of silicone rubber vulcanized at room temperature”, *Ann. Univ. Sci. Budapest. Rolando Eotvos Nominatae, Sect. Chim.* **1961**, *3*, 15-21.
- Pulay, P.; Torok, F. “Application of the method of one-centered molecular orbitals to the investigation of the structure of monosilane”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1964**, *41*, 257-64.
- Csakvari, B.; Szekely, T.; Torok, F. “SiMe<sub>4</sub>-BCl<sub>3</sub> and Me<sub>3</sub>SiCl-BCl<sub>3</sub> systems”, *Intern. Symp. Organosilicon Chem., Sci. Commun., Prague* **1965**, 104-8.
- Pulay, P.; Torok, F. “Vibration spectra of boron compounds containing the trimethylsilyl radical”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1965**, *45*, 123-9.
- Foldesi, I.; Torok, F. “The infrared spectra of phenoxysilanes and cresoxysilanes”, *Int. Symp. Organosilicon Chem., Sci. Commun.* **1965**, 216-19.
- Pulay, P.; Torok, F. “Parameter representation of the force constant matrix”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1965**, *44*, 287-92.
- Pulay, P.; Torok, F. “Parameter form of matrix F. II. Assignment with the aid of the parameter form”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1966**, *47*, 273-9.
- Torok, F.; Hun, Gy. B. “Vibrational spectrum of the trimethylsilyl group”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1966**, *47*, 329-42.
- Csakvari, B.; Szekely, T.; Torok, F. “The Si(CH<sub>3</sub>)<sub>4</sub>-BCl<sub>3</sub> and (CH<sub>3</sub>)<sub>3</sub>SiCl-BCl<sub>3</sub> systems”, *Annales Universitatis Scientiarum Budapestinensis de Rolando Eotvos Nominatae, Sectio Chimica* **1967**, *9*, 111-14.
- Torok, F. “Parameter form of force constants matrix. IV. The forming by parameters of matrices F belonging to a given assignment”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1967**, *52*, 205-13.
- Fogarasi, G.; Torok, F.; Vdovin, V. M. “Vibrational spectra of silacyclohexane derivatives and the siliconcarbon stretching frequencies of various-membered silacycloalkanes”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1967**, *54*, 277-85.
- Pulay, P.; Borossay, Gy.; Torok, F. “General method for calculation of matrices depending on the equilibrium configuration of the molecule by computers”, *J. Mol. Struct.* **1968**, *2*(4), 336-40.
- Torok, F.; Pulay, P. “Parameter form of force-constant matrix V. Maximum and minimum values of force constants”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1968**, *56*, 285-96.
- Torok, F. “Parameter form of force constant matrix. VI. Common force constant matrices of isotopic molecules”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1968**, *57*, 141-5.
- Torok, F.; Hun, B. Gy. “Parameter form of force constant matrix. VIII. Calculation of all mean amplitudes of vibration compatible with normal frequencies”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1969**, *59*, 303-8.
- Torok, F. “Parameter form of the force-constant matrix. IX. Connection between normal and symmetry coordinates”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1969**, *60*, 97-102.
- Torok, F.; Pulay, P.; Hun-Borossay, Gy. “Parameter form of force constant matrix. X. Coriolis coupling constants compatible with the normal frequencies”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1969**, *61*, 39-43.
- Torok, F.; Pulay, P. “Molecular force field investigation with the help of parameter representation of force constants. II. Nitrosyl fluoride”, *J. Mol. Struct.* **1969**, *3*, 283-92.
- Torok, F. “Interaction of the [PtCl<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> and K<sup>+</sup> ions in the K<sub>2</sub>PtCl<sub>4</sub> crystal on the basis of its infrared spectrum”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1970**, *63*, 237-41.
- Torok, F.; Paldi, Emil; Dobos, Sandor; Fogarasi, G. “The infrared and NMR spectra of the (Me<sub>2</sub>N)<sub>2</sub>S, (Me<sub>2</sub>N)<sub>2</sub>SO, (Me<sub>2</sub>N)<sub>2</sub>SO<sub>2</sub> and Me<sub>2</sub>NSO<sub>2</sub>Cl molecules”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1970**, *63*, 417-23.
- Torok, F. “Common force constants of isotopic molecules”, *Izvestiya na Fizicheskiya Institut s ANEB, Bulgarska Akademiya na Naukite* **1971**, *21*, 233-6.
- Torok, F.; Kovacs, G., Edited By: Cyvin, S. J. “Mean amplitudes of vibration compatible with measured normal frequencies”, *Mol. Struct. Vib.* **1972**, *69*-84.
- Pulay, P.; Torok, F. “Calculation of molecular geometries and force constants from CNDO [complete neglect of differential overlap] wavefunctions by the force method”, *Mol. Phys.* **1973**, *25*, 1153-61.
- Torok, F.; Hegedus, Agnes; Pulay, P. “Calculation of fully optimized geometries of five- and six-membered differential overlap force method”, *Theor. Chim. Acta* **1973**, *32*, 145-50.
- Torok, F.; Pulay, P.; Szondy, Tamas; Nagy, P. “Ab initio calculations on the sulfur nitride radicals and sulfur nitride(+) ion”, *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1974**, *80*, 139-45.

29. Lukovits, I.; Torok, F. "Extreme values of Coriolis coupling constants compatible with the measured normal frequencies", *Acta Chim. Acad. Sci. Hung.* **1974**, *83*, 309-13.
30. Cyvin, S. J.; Borossay, Gy. H.; Kovacs, G.; Torok, F. "Iterative procedures applied to refined calculations of mean amplitudes of formic acid monomer", *J. Mol. Struct.* **1974**, *21*, 37-40.
31. Pulay, P.; Torok, F. "Calculation of the electronic structure of atoms and molecules by ab initio quantum chemical methods", *Annales Universitatis Scientiarum Budapestinensis de Rolando Eotvos Nominatae, Sectio Chimica* **1975**, *14*, 11-46.
32. Pulay, P.; Torok, F. "Force constants, vibrational assignment, and geometry of methyl amine from Hartree-Fock calculations", *J. Mol. Struct.* **1975**, *29*, 239-46.
33. Panchenko, Yu. N.; Pulay, P.; Torok, F. "Prediction of vibrational spectra by the CNDO/2 force method. II. The calculation of vibrational frequencies of cis and trans forms of glyoxal, acrolein and 1,3-butadiene", *J. Mol. Struct.* **1976**, *34*, 283-9.
34. Torok, F.; Hegedus, A.; Kosa, K.; Pulay, P. "Prediction of vibrational spectra by the CNDO/2 force method. I. Out-of-plane vibrations of benzene and fluorobenzenes", *J. Mol. Struct.* **1976**, *32*, 93-9.
35. Torok, F.; Pulay, P. "Calculation of force constants by semiempirical quantum chemical method", *J. Mol. Struct.* **1978**, *46*, 43-7.
36. Fogarasi, G.; Pulay, P.; Torok, F.; Boggs, J. E. "The geometry of some amides obtained from ab initio calculations", *J. Mol. Struct.* **1979**, *57*, 259-70.
37. Panchenko, Yu. N.; Mochalov, V. I.; Pupyshv, V. I.; Stepanov, N. F.; Torok, F.; Pulay, P.; Fogarasi, G.; Pongor, G. "Prediction of vibrational spectra of propylene and its deuterated analogs by the CNDO/2 force method", *Vestnik Moskovskogo Universiteta, Seriya 2: Khimiya* **1980**, *21(5)*, 453-7.
38. Panchenko, Yu. N.; Csaszar, P.; Torok, F. "Vibrational spectra of trans- and cis-1,3,5-hexatrienes and their 2,3,4,5-tetradeutero analogs", *Acta Chim. Hung.* **1983**, *113*, 149-58.
39. Panchenko, Yu. N.; Mochalov, V. I.; Csaszar, P.; Torok, F.; Benedetti, E.; Aglietto, M. "Theoretical interpretation of the vibrational spectra of trans- and cis-penta-1,3-dienes and 2,3-dimethylbutadiene", *Acta Chim. Hung.* **1983**, *114*, 149-57.

### Magyarul

40. Torok, F.; Gomory, P. "Preparation of macromolecular dimethyl polysiloxanes suitable for production of silicone gum, in the presence of alkaline catalysts", *Magyar Kémiai Folyóirat* **1960**, *66*, 70-3.
41. Gomory, Pal; Torok, F. "Factors determining the properties of cold-vulcanizing silicone rubber", *Magyar Kémiai Folyóirat* **1961**, *67*, 346-9.
42. Gebhardt, I.; Lengyel, B.; Torok, F. "Preparation of poly(dimethylsiloxanediol)", *Magyar Kémiai Folyóirat* **1962**, *68*, 159-61.
43. Torok, F.; Pulay, P. "Calculation of the electronic structure of atoms and molecules", *Kémiai Közlemények* **1970**, *34*, 303-25.
44. Torok, F. "Gillespie method and molecular shape", *Fizikai Szemle* **1975**, *25*, 77-9.
45. Hegedus, A.; Kosa, K.; Pulay, P.; Torok, F. "Quantum chemical calculation of the spectra of aromatic compounds originating from vibrations perpendicular to their planes", *Kémiai Közlemények* **1976**, *46*, 428-30.
46. Torok, F. "Fifty years of quantum chemistry", *Fizikai Szemle* **1977**, *27*, 401-2.
47. Torok, F. "Evolution of the concept of chemical valence", *Fizikai Szemle* **1977**, *27*, 417-18.
48. Torok, F. "Molecular orbital theory of the electronic structure of inorganic molecules and ions", *Magyar Kemikusok Lapja* **1977**, *32*, 44-51.

### Könyv

49. Kapuy, E.; Török, F. *Az atomok és molekulák kvantumelmélete*, Akadémiai Kiadó: Budapest, **1975**.