

dc_806_13

**Kísérleti és elméleti
molekulaspektroszkópiai vizsgálatok III.**

MTA DOKTORI ÉRTEKEZÉS TÉZISEI

Tarczay György

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Kémiai Intézet



Budapest, 2013. november 15.

Tézisek

0. Felépítettünk egy modern mátrixizolációs és egy lézerspektroszkópai laboratóriumot. Ezzel megteremtettük a feltételeket ahhoz, hogy nemzetközi színvonalú alapkutatásokat végezhessünk a reaktív molekulák előállítása és spektroszkópai azonosítása, a biomolekulák szerkezetvizsgálata és fotokémiája, valamint az alagúthatással történő szerkezetváltozások megfigyelése területén.

1. A mátrixizolációs vizsgálatokhoz (kísérleti és elméleti) módszereket fejlesztettünk és teszteltünk. Ezek között több olyan is van, amelyeket világviszonylatban az elsők között alkalmaztunk.

1.a Megmutattuk, hogy konformációanalízisekhez a mátrixizolációs spektroszkópiát hatékonyan lehet kombinálni a szuperszonikus fúvókás mintabeeresztéssel. A módszer segítségével olyan *n*-propil-nitrit konformereket is megbízhatóan tudtunk azonosítani, amelyek csak az alkilánc térszerkezetében térnek el.

1.b Megmutattuk, hogy a MI-VCD spektroszkópia hatékonyan használható a konformációanalízisben. A módszernek szintén fontos szerepe lehet a hidrogénkötés kialakítására képes flexibilis molekulák abszolút konfigurációjának meghatározásában, hiszen a MI-VCD spektrumok értelmezéséhez a számításokban el lehet hanyagolni az egyébként nehezen figyelembe vehető intermolekuláris kölcsönhatásokat. Megmutattuk azt, hogy a módszer királis-királis és királis-akirális molekulakomplexek szerkezetvizsgálatára is alkalmazható.

1.c Megmutattuk azt, hogy a NIR-lézer-besugárzással kombinált MI-IR spektroszkópia, a korábban vizsgált rendszereknél nagyobb, bonyolultabb sokkonformeres molekuláris rendszerekre is sikeresen alkalmazható. A módszer „konformációs felbontása” a mikrohullámú (MW) spektroszkópiához hasonlítható. A MW spektroszkópiával szemben az általunk alkalmazott technika alkalmas kis dipólusmomentumú konformerek azonosítására is. A módszer lehetőséget ad nagyenergiájú, rövid élettartamú (1 s-tól néhány órás felezési idejű) konformerek előállítására és megfigyelésére is.

1.d Gázfázisú és Ar-mátrixban történő IR spektroszkópiai vizsgálatokhoz SQM skálafaktorokat optimáltunk négyféle funkcionálhoz és kétféle bázishoz. Egyszerű szerves molekulák esetében az ezekkel a skálafaktorokkal kapott rezgési spektrumok jobb egyezést mutatnak a mátrixizolációs mérésekkel, mint a nagyobb számítási igényű, de a mátrixhatást figyelembe nem vevő anharmonikus rezgési számítások.

2. 12 korábban ismeretlen és 7 korábban bizonytalanul azonosított vagy kevésbé karakterizált, reaktív kovalens pszeudohalogén-vegyületet, valamint alkoxi- és aromás peroxigyököket állítottunk elő alacsony hőmérsékletű inert mátrixokban. Míg a pszeudohalogének szerkezeti változatosságukon túl asztrokémiai szempontból érdekesek, addig az alkoxi- és peroxigyökök a légkörkémiában töltenek be fontos szerepet. Ezeket a reaktív molekulákat és gyököket a mért és a kvantumkémiai módszerekkel, magas elméleti szinten számított IR és UV, továbbá egy esetben Raman spektrumaik összehasonlítása alapján azonosítottuk.

2.a MI-IR spektruma alapján elsőként azonosítottuk a tiofulminsavat (HCNS), amelyet 1,2,5-tiadiazol fotolízisével Ar- és Kr-mátrixokban állítottunk elő. Felvettük a HCNS MI-UV spektrumát is. A mátrix fotolízisét követő hőkezeléssel előállítottuk és azonosítottuk a HCNS...HCN komplexet.

2.b Szubsztituált 1,2,5-tiadiazolok fotolízisével nitril-szulfidokat állítottunk elő, és felvettük ezek MI-IR és MI-UV spektrumát. Ezek közül az FCNS, a ClCNS és az NCCNS új, korábban ismeretlen molekula, míg a CH₃CNS esetében az irodalmi spektroszkópiai információkat sikerült jelentősen kiegészíteni.

2.c Az FCNS esetében megfigyeltük, hogy a nyíltláncú molekula 365 nm-es fotolízis hatására gyűrűt zár, szubsztituált tiazirin, FC(NS) keletkezik. Az FC(NS) pedig 254 nm-es fénnel – FCN + S disszociáció mellett – FCNS-é alakítható vissza. Kvantumkémiai számításokkal rámutattunk, hogy ez a fotoizomerizáció az FCNS és az FC(NS) alap- és első két gerjesztett állapotai által alkotott három kónikus metszáson keresztül játszódik le.

2.d A 3,5-dikloro-1,2,4-tiadiazol fotolízisét a többi szubsztituált 1,2,4-tiadiazoléhoz képest bonyolultabbnak találtuk. A fotolízis elején, több reakciótermék mellett, ClCNS is keletkezik, de ez a fotolízis során gyorsan tovább bomlik ClCN-re és kénatomra. A termékek között azonosítottuk a ClNCS-t, amely szintén új, irodalomból nem ismert molekula, továbbá az NCCNS-t is. Ugyanezeket a termékeket a 3-kloro-1,2,5-tiadiazol fotolízistermékei között is

azonosítottuk. Ebben az esetben HCl képződése is megfigyelhető volt, amely azt mutatja, hogy az NCCNS HCl-eliminációval keletkezik.

2.e A HCNS előállításának analógiájára előállítottuk, és MI-IR, valamint MI-UV spektrumuk alapján azonosítottuk a szelenafulminsavat (HCNSe). Korábban erről a vegyületről nem sikerült MI-IR spektrumot felvenni, az UV spektrum alapján történt azonosítása pedig nem volt meggyőző erejű.

2.f Szubsztituált 1,2,4-szelanadiazolok fotolízisével előállítottuk, és MI-IR, valamint MI-UV spektrumuk alapján azonosítottuk a CH₃CNSe-t és az NCCNSe-t. Míg az előbbi molekula esetében megerősítettük a korábbi, nem meggyőző erejű, UV spektrum alapján történt azonosítást, addig az NCCNSe egy olyan molekula, amelyet korábban nem ismeretek.

2.g AgNCSe és HBr reakciójával reprodukáltuk a reaktív HNCSe előállítását. A korábbinál lényegesen jobb minőségű MI-IR spektrumunk lehetővé tette az asszignáció kiegészítését, megbízhatóan azonosítottunk több kombinációs sávot. Elsőként felvettük a vegyület MI-UV spektrumát, illetve elsőként azonosítottuk a DNCSe két rezgési átmenetét. A HNCSe fotolízisével a prekursor egy korábban nem ismert izomerét, a HSeNC-t állítottuk elő. Számításokkal megmutattuk, hogy a negyedik, még nem azonosított kis energiájú nyíltláncú izomert Raman spektroszkópiával lehetne kimutatni.

2.h I₂ és AgNCS, illetve I₂ és AgNCSe reakciójával NCSSCN-t és NCSeSeCN-t állítottunk elő. Az előbbi molekula esetében a korábbiaktól jobb minőségű MI-IR és MI-Raman spektrumokat vettünk fel, valamint közöltük a molekula MI-UV spektrumát. Az utóbbi molekula esetében elsőként közöltünk MI-IR és MI-UV spektrumokat. A vegyületek fotolízisével előállítottuk, és spektrumaik elemzésével azonosítottuk a korábban ismeretlen SCNNCS, SCNSCN, valamint SeCNSeCN izomereket.

2.i Vizsgáltuk az *n*-propil-nitrit és az *i*-propil-nitrit fotolízisét Ar-mátrixban. Az *i*-propil-nitrit esetében azonosítottuk a reakció-köztitermék *i*-propoxigyök legintenzívebb sávjait.

2.j Vizsgáltuk a benzol, a toluol, az *o*-, a *m*- és a *p*-xilol UV-lézerfotolízisét Ar-mátrixban. Megmutattuk, hogy a fotolízis során arilgyökök is képződnek. O₂-t is tartalmazó mátrixok hőkezelésével ezek tovább alakíthatók peroxigyökökké. Megfigyeltük azt is, hogy az O₂-tartalmú mátrixok esetében az O₂-koncentráció növelésével egyre kisebb az aromásvegyületek fotolízisének hatása. Ezért a peroxigyökök előállításához célszerűbb nem az Ar-mátrixba keverni az O₂-t, hanem az aromásvegyület-tartalmú Ar- és tiszta O₂-rétegeket egymásra leválasztani.

3. Vizsgáltuk biomolekulák konformer- és tautomereloszlását, elektrongerjesztéseit, fotolízisét és a biomolekulák komplexálódását. Ezen a területen elért legfontosabb eredményeink a következők:

3.a Megerősítettük, hogy alacsony hőmérsékletű inert mátrixban a glicinnek három konformere, a ***ttt/Ip***, a ***ccc/IIn*** és a ***tct/IIIp*** van jelen. Megmutattuk, hogy az O–H nyújtási rezgés első felharmonikusának konformerszelektív NIR-lézer-besugárzásával nagyon hatékonyan ki lehet váltani a ***ttt/Ip*** → ***tct/IIIp*** és a ***tct/IIIp*** → ***ccc/IIn***, valamint kevésbé, de viszonylag hatékonyan a ***ccc/IIn*** → ***tct/IIIp*** (és a ***ccc/IIn*** → ***ttt/Ip***) átalakulást. A ***ttt/Ip*** konformer besugárzásával egy – még 10 K-en is – rövid élettartamú konformert (***ttc/VIp***) állítottunk elő. A glicin és a glicin-*d*₃ molekula fenti négy konformerének átmeneteit asszignáltuk Ar-, Kr-, Xe- és N₂-mátrixokban is.

3.b Szelektív NIR-lézer-besugárzással megerősítettük az alanin **I** és a **IIa** konformereinek asszignációját Ar-mátrixban, valamint asszignáltuk e két konformer átmeneteit Kr- és N₂-mátrixokban is. Egy korábbi munkát cáfolva megmutattuk, hogy a **IIIa** és a **IIIb** nincs jelen a 8 K-en, vagy magasabb hőmérsékletben kifagyasztott mátrixban. NIR-lézer-besugárzással előállítottuk a rövid élettartamú **VI**-os konformert, és asszignáltuk az IR spektrumát Ar-, Kr- és N₂-mátrixokban.

3.c Szelektív NIR-lézer-besugárzásos módszerrel a cisztein öt stabil (**I**-es, **II**-es, és **III**-as gerinckonformációjú), és egy (**VI**-os gerinckonformációjú) rövid élettartamú konformerét azonosítottuk Ar-, Kr- és N₂-mátrixokban, és asszignáltuk ezek rezgési átmeneteit. (Korábbi mátrixizolációs IR méréssel csak az **I**-es és a **II**-es konformerek csoportjait tudták elkülöníteni, egyedi konformereket nem tudtak asszignálni. A MW spektroszkópiával azonosított hat konformerből öt megegyezik az általunk azonosított konformerrel, a rövid élettartamú konformert azonban nem tudták megfigyelni MW spektroszkópiával.)

3.d A 213,5–240 nm-es UV tartományban vizsgáltuk a glicin fotolízisét Ar-mátrixban. Megállapítottuk, hogy a CO₂-kilépés a fő csatorna. Egyértelműen kimutattuk a reakció másik termékét, a metil-amint, amely az általunk vizsgált hullámhosszakon nem bomlik tovább. Azonosítottunk egy másik bomlási csatornát is, amelyben vízkilépés mellett amino-ketén keletkezik.

3.e A korábbinál jobb minőségű MI-IR spektrumokat vettünk fel az Ac-Gly-NHMe és az Ac-L-Ala-NHMe modellpeptidekről. A spektrumok újraasszignálásával az Ac-Gly-NHMe három

(β_{DL} , γ_L és δ_L), valamint az Ac-L-Ala-NHMe két konformerét ($\beta_{L(D)}$ és γ_L) azonosítottuk. Felvettük Ac-L-Ala-NHMe MI-VCD spektrumát is. Megmutattuk, hogy a $\beta_{L(D)}$ konformer amid I sávjai nem robosztusak. Ezt leszámítva az amid I tartományban mért MI-VCD és a számított VCD spektrumok jó egyezést mutatnak, megerősítik a MI-IR spektrumok asszignációját.

3.f Felvettük az Ac-L-Pro-NH₂ MI-IR és MI-VCD spektrumát. A spektrumok analízisével megmutattuk, hogy a mátrixban (és így gázfázisban is) egy domináns *transz*-konformer van, a $\tau_{\gamma L}^+$. A *cisz*-konformerek közül a $\alpha_{\gamma L}^+$ nyomnyi mennyiségben fordul elő, míg a $\tau_{\gamma L}^-$ konformer, amelyik csak a gyűrű vetődésében különbözik a $\tau_{\gamma L}^+$ -tól, annak ellenére nincs jelen a mátrixban, hogy a számítások ~14% populációt becsülnek erre a konformerre. Ezt az ellentmondást azzal lehet feloldani, hogy kifagyasztás közben a $\tau_{\gamma L}^-$ konformer – az alacsony konformációs gáton keresztül – a $\tau_{\gamma L}^+$ konformerbe alakul.

3.g Felvettük és elemeztük az Ac- β -HGly-NHMe és az Ac- β -HAla-NHMe MI-IR spektrumait. Az előbbi esetében kettő, az utóbbinál három konformert azonosítottunk Ar- és Kr-mátrixokban.

3.h Felvettük és elemeztük az Ac- β^3 -HPro-NHMe IR és VCD spektrumait Ar- és Kr-mátrixokban, valamint diklórmétán, deuterált acetonitril és deuterált dimetil-szulfoxid oldószerekben. Az inert mátrixokban négy konformert azonosítottunk. Ezek közül az egyik, hozzávetőleg 10%-ban jelenlevő konformerben az amidcsoportnak *cisz*-szerkezete van. Megmutattuk, hogy még kis dipólusmomentumú oldószerben is a *cisz*-konformer a domináns, és ennek aránya még nagyobb az oldószer polaritásának növekedésével. Azaz – a várakozásokkal ellentétben – a β^3 -HPro nagy dipólusmomentumú oldószerekben, így biológiai mátrixokban nem alakít ki pszeudo- β -, illetve pszeudo- γ -kanyarokat, ugyanakkor kiváló *cisz*-peptid építőelem.

3.i Kétféle Ac-ACBA-NHMe és kétféle Ac-(ACBA)₂-NHMe β -modellpeptid szerkezetét vizsgáltuk (ACBA: aminociklobután-1-karbonsav). A *cisz*-(*R,S*)-Ac-ACBA-NHMe és a *transz*-(*S,S*)-Ac-ACBA-NHMe esetében megbízhatóan azonosítottunk két-két konformert Ar- és Kr-mátrixokban. Az Ac-(ACBA)₂-NHMe modellvegyületek vizsgálata során leszűrt legfontosabb módszertani konklúzió az volt, hogy ekkora méretű és ilyen komplexitású molekulák esetében már elérjük a MI-IR spektroszkópia „konformációs felbontásának” határát. Ugyan mindkét modellvegyület esetében 2–2 konformert biztosan azonosítottunk, de a további konformerek ((*S,R,S,S*)- Ac-(ACBA)₂-NHMe esetében további két, az (*S,S,S,R*)-Ac-

(ACBA)₂-NHMe esetében pedig egy konformer) jelenlétét csak a számítások alapján valószínűsítettük. Várakozásaink szerint a NIR-lézer-besugárzással kombinált MI-IR spektroszkópia ebben, és az ehhez hasonló esetekben is növelheti a „konformációs felbontást”.

3.j Az Ac-Gly-NHMe komplexeit MI-IR spektroszkópiával, míg az Ac-L-Ala-NHMe és az Ac-L-Pro-NH₂ vízzel alkotott komplexeit MI-IR és MI-VCD spektroszkópiával vizsgáltuk. Megmutattuk, hogy elsősorban a β_L konformer komplexálódik, a komplexálódás során pedig jelentős térszerkezeti változás megy végbe. A komplexben a modellpeptid $\gamma_{L=D}$ (illetve γ_L) konformerhez hasonló szerkezetet vesz fel. Megfigyeltük az ún. kiralitástranszfer (vagy indukált kiralitás) jelenségét, azaz azt, hogy a komplexálódott akirális víz hajlítási rezgései is megjelennek a MI-VCD spektrumban.

3.k Felvettük a citozin MI-IR és MI-UV spektrumát. Az IR spektrumok és számítások segítségével a korábbiaknál precízebb izomerarányokat határoztunk meg. Megmutattuk, hogy – a korábbi gyakorlattal ellentétben – a gázfázisú vagy az inert közegben izolált citozin UV spektrumának megértéséhez és szimulációjához mindhárom tautomert figyelembe kell venni.

4. A NIR-lézer-besugárzással előállított nagyenergiájú konformerek alagúthatással történő átalakulást vizsgáltuk alacsonyhőmérsékletű mátrixokban. Ezek közül a legfontosabb eredmények:

4.a A 2-klór-propionsav példáján megmutattuk, hogy a NIR-lézer-besugárzás hatására olyan szerkezetű *cisz*-konformerek is képződhetnek, amelyek a merev mátrixüreg miatt nem relaxálódnak a szabad molekula potenciális felületéhez tartozó minimumba. Megmutattuk azt is, hogy – a korábbi példákhoz hasonlóan ebben az esetben is – az alagúthatással történő visszaalakulás sebessége nagymértékben függ a mátrixüregtől. Portugál kollégákkal egy időben, de egymástól függetlenül kísérletileg kimutattuk, hogy egyes esetekben – így a *cisz*-2-klór-propionsav esetében is – az alagúthatással történő visszaalakulás sebessége egyszerű egyexponenciális lecsengéstől lényegesen eltérő, diszperiós kinetikát mutat.

4.b Megmutattuk, hogy a glicin **VI**-os gerinckonformációjú aminosavak alagúthatással alacsonyabb energiájú konformerekbe alakulnak át. Megmértük a glicin, alanin és fenilalanin megfelelő konformereinek felezési idejét Ar-, Kr-, (Xe-) és N₂-mátrixokban, valamint a cisztein és szerin megfelelő konformereinek felezési idejét N₂-mátrixokban. A rövid felezési idő választ ad arra, hogy eddig ezeket a konformereket miért nem észlelték. A

dc_806_13

gátmagasságokra történt számításaink alapján elmondható az is, hogy azok a konformerek, amelyek csak a C–C–N–H vagy a C–C–S–H torziós koordinátában különböznek egy kisebb energiájú konformertől, alagúthatással még gyorsabban átalakulnak az alacsonyabb energiájú konformerbe. Ez a konklúzió összhangot teremt a korábbi, egymásnak ellentmondani látszó kísérleti és elméleti eredmények között, megmagyarázza, hogy egyes konformereket miért nem lehet azonosítani mátrixizolációs spektroszkópiával.

Publikációk és publikációs statisztika

Impakt faktorok összege:	176,1
Hivatkozások száma:	1111
Független hivatkozások száma:	626
Hirsch-index:	20
(2013. november 15.)	

Az értekezés alapjául szolgáló közlemények címét kézzel szedtem.

A. Nemzetközi referált folyóiratokban megjelent közlemények

1. [G. Tarczay](#), A. G. Császár, W. Klopper, V. Szalay, W. D. Allen, H. F. Schaefer, III
The Barrier to Linearity of Water
J. Chem. Phys. 110, 11971 (1999)
Impakt faktor: 3,289 Hivatkozások: 58 Független hivatkozások: 25
2. G. Schultz, Á. Szabados, [G. Tarczay](#), K. Zauer
Molecular Structure of 1,2,4,5-tetracyano-benzene from Gas Phase Electron Diffraction and Theoretical Calculations
Struct. Chem. 10, 149 (1999)
Impakt faktor: 0,458 Hivatkozások: 6 Független hivatkozások: 6
3. Z. Szlávik, G. Tárkányi, [G. Tarczay](#), Á. Gömöry, J. Rábai
Synthesis of 3-perfluoroalkyl-propyl Esters of L-(+)-tartaric Acid
J. Fluorine Chem. 98, 83 (1999)
Impakt faktor: 0,701 Hivatkozások: 20 Független hivatkozások: 9
4. P. Perjési, T. Nusser, [G. Tarczay](#), P. Sohár
E-2-Benzylidene Benzocycloalkanones. Synthesis, Stereostructure and NMR Spectroscopic Investigation
J. Mol. Struct. 479, 21 (1999)
Impakt faktor: 0,868 Hivatkozások: 20 Független hivatkozások: 3
5. [G. Tarczay](#), K. Vékey, K. Ludányi, P. Perjési, P. Sohár
E-2-Benzylidene benzocycloalkanones II. IR and Mass Spectrometric Investigation
J. Mol. Struct. 520, 97 (2000)
Impakt faktor: 0,849 Hivatkozások: 2 Független hivatkozások: 1
6. [G. Tarczay](#), A. G. Császár, M. L. Leininger, W. Klopper
The Barrier to Linearity of Hydrogen Sulphide
Chem. Phys. Lett. 322, 119 (2000)
Impakt faktor: 2,364 Hivatkozások: 30 Független hivatkozások: 16
7. [G. Tarczay](#), G. Vass, G. Magyarfalvi, L. Szepes
He(I) Photoelectron Spectroscopy and Electronic Structure of Alkylolithium Clusters
Organometallics 19, 3925 (2000)
Impakt faktor: 3,169 Hivatkozások: 8 Független hivatkozások: 6
8. P. Pyykkö, K. G. Dyall, A. G. Császár, [G. Tarczay](#), Oleg L. Polyansky, J. Tennyson
Estimation of Lamb Shift Effects for Molecules. Application to the Rotation-vibration Spectra of Water
Phys. Rev. A 63, 024502 (2001)
Impakt faktor: 2,810 Hivatkozások: 64 Független hivatkozások: 30

9. Z. Szlávik, G. Tárkányi, Á. Gömör, [G. Tarczay](#), J. Rábai
Convenient Syntheses and Characterization of Fluorophilic Perfluorooctyl-propyl Amines and Ab Initio Calculations of Proton Affinities of Related Model Compounds
J. Fluorine Chem. 108, 7 (2001)
Impakt faktor: 1,063 Hivatkozások: 29 Független hivatkozások: 15
10. W. Klopper, C. C. M. Samson, [G. Tarczay](#), A. G. Császár
Equilibrium Inversion Barrier of NH₃ from Extrapolated Coupled-cluster Pair Energies
J. Comput. Chem. 22, 1306 (2001)
Impakt faktor: 2,766 Hivatkozások: 41 Független hivatkozások: 32
11. [G. Tarczay](#), A. G. Császár, Oleg L. Polyansky, J. Tennyson
Ab Initio Rovibrational Spectroscopy of Hydrogen Sulphide
J. Chem. Phys. 115, 1229 (2001)
Impakt faktor: 3,147 Hivatkozások: 26 Független hivatkozások: 15
12. H. M. Quiney, P. Barletta, [G. Tarczay](#), A. G. Császár, Oleg L. Polyansky, J. Tennyson
Two-electron Relativistic Corrections to the Potential Energy Hypersurface and Vibration-rotation Levels of Water
Chem. Phys. Lett. 344, 413 (2001)
Impakt faktor: 2,364 Hivatkozások: 35 Független hivatkozások: 14
13. [G. Tarczay](#), A. G. Császár, W. Klopper, H. M. Quiney
Anatomy of Relativistic Energy Corrections in Light Molecular Systems
Mol. Phys. 99, 1769 (2001)
Impakt faktor: 1,735 Hivatkozások: 84 Független hivatkozások: 44
14. S. Ullrich, [G. Tarczay](#), X. Tong, C. E. H. Dessent, K. Müller-Dethlefs
A ZEKE Photoelectron Spectroscopy and Ab Initio Study of the of the Cis- and Trans- Isomers of Formanilide: Characterizing the Cationic Amide Bond?
Phys. Chem. Chem. Phys. 3, 5450 (2001)
Impakt faktor: 1,787 Hivatkozások: 28 Független hivatkozások: 19
15. S. Ullrich, [G. Tarczay](#), K. Müller-Dethlefs
A REMPI and ZEKE Spectroscopic Study of the Phenol·Kr and Phenol·Xe van der Waals Complexes
J. Phys. Chem. A 106, 1496 (2002)
Impakt faktor: 2,765 Hivatkozások: 18 Független hivatkozások: 16
16. S. Ullrich, [G. Tarczay](#), X. Tong, C. E. H. Dessent, K. Müller-Dethlefs
ZEKE Photoelectron Spectroscopy of the Cis- and Trans- Isomers of the Aromatic Amide, Formanilide
Angew. Chem. Int. Ed. 41, 166 (2002)
Impakt faktor: 7,671 Hivatkozások: 33 Független hivatkozások: 18
17. S. Ullrich, [G. Tarczay](#), X. Tong, Mark S. Ford, C. E. H. Dessent, K. Müller-Dethlefs
A REMPI and ZEKE Spectroscopic Study of the Trans-formanilide·argon van der Waals Cluster
Chem. Phys. Lett. 351, 121 (2002)
Impakt faktor: 2,526 Hivatkozások: 6 Független hivatkozások: 1
18. S. Ullrich, X. Tong, [G. Tarczay](#), C. E. H. Dessent, K. Müller-Dethlefs
Hydration of a Cationic Amide Group A ZEKE Spectroscopic Study of Trans-formanilide·Water
Phys. Chem. Chem. Phys. 4, 2897 (2002)
Impakt faktor: 1,838 Hivatkozások: 10 Független hivatkozások: 6

19. G. Vass, [G. Tarczay](#), G. Magyarfalvi, A. Bödi, L. Szepes
HeI Photoelectron Spectroscopy of Trialkylaluminum and Dialkylalane Compounds and their Oligomers
Organometallics 21, 2751 (2002)
Impakt faktor: 3,215 Hivatkozások: 5 Független hivatkozások: 5
20. J. M. Gonzales, C. Pak, R. S. Cox., W. D. Allen, H. F. Schaefer, III, A. G. Császár, [G. Tarczay](#)
Definitive Ab Initio Studies of Model S_N2 Reactions $CH_3X + F^-$ ($X=F, Cl, CN, OH, SH, NH_2, PH_2$)
Chem. Eur. J. 9, 2173 (2003)
Impakt faktor: 4,353 Hivatkozások: 104 Független hivatkozások: 62
21. S. Gopalakrishnan, C. C. Carter, L. Zu, V. Stakhursky, [G. Tarczay](#), T. A. Miller
Rotationally Resolved B-X Electronic Spectra of Both Conformers of the 1-Propoxy Radical
J. Chem. Phys. 118, 4954 (2003)
Impakt faktor: 2,950 Hivatkozások: 24 Független hivatkozások: 5
22. M. L. Liu, C. L. Lee, A. Bezant, [G. Tarczay](#), R. J. Clark, T. A. Miller, B. C. Chang,
Dispersed Fluorescence Spectra of the CCl_2 A-X Vibronic Bands
Phys. Chem. Chem. Phys. 5, 1352 (2003)
Impakt faktor: 1,959 Hivatkozások: 28 Független hivatkozások: 22
23. [G. Tarczay](#), S. Gopalakrishnan, T. A. Miller
Theoretical Prediction of Spectroscopic Constants of 1-alkoxy Radicals
J. Mol. Spectrosc. 220, 276 (2003)
Impakt faktor: 1,395 Hivatkozások: 24 Független hivatkozások: 14
24. L. Zu, J. Liu, [G. Tarczay](#), P. Dupré, T. A. Miller
Jet-cooled Laser Spectroscopy of the Cyclohexoxy Radical
J. Chem. Phys. 120, 10579 (2004)
Impakt faktor: 3,105 Hivatkozások: 7 Független hivatkozások: 3
25. J. Jin, I. Sioutis, [G. Tarczay](#), A. Bezant, S. Gopalakrishnan, T. A. Miller
Dispersed Fluorescence Spectroscopy of Primary and Secondary Alkoxy Radicals
J. Chem. Phys. 121, 11780 (2004)
Impakt faktor: 3,105 Hivatkozások: 14 Független hivatkozások: 9
26. [G. Tarczay](#), S. J. Zalyubovsky, T. A. Miller
Conformational Analysis of the 1- and 2-Propyl Peroxy Radicals
Chem. Phys. Lett. 406, 81 (2005)
Impakt faktor: 2,438 Hivatkozások: 20 Független hivatkozások: 7
27. [G. Tarczay](#), T. A. Miller, G. Czakó, A. G. Császár
Accurate ab initio determination of spectroscopic and thermochemical properties of mono- and dichlorocarbenes
Phys. Chem. Chem. Phys. 7, 2881 (2005)
Impakt faktor: 2,519 Hivatkozások: 32 Független hivatkozások: 28
28. Z. Kolos, D. Knausz, J. Rohonczy, E. Vass, [G. Tarczay](#), G. Pongor
On the use of empirically corrected theoretical procedures in preparative chemistry: Synthesis, spectroscopic and theoretical studies on 1,3-bis(trimethylsilyl)benzimidazol-2-one
Chem. Phys. 318, 191 (2005)
Impakt faktor: 1,934 Hivatkozások: 2 Független hivatkozások: 0
29. [G. Tarczay](#), G. Magyarfalvi, E. Vass
Towards the Determination of the Absolute configuration of Complex Molecular Systems: Matrix Isolation Vibrational Circular Dichroism Study of (R)-2-Amino-1-propanol
Angew. Chem. Int. Ed. 45, 1775 (2006)
Impakt faktor: 10,232 Hivatkozások: 38 Független hivatkozások: 31

30. E. Mátyus, G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#)
[Conformers and Photochemistry of Propyl Nitrites: A Matrix Isolation Study](#)
J. Phys. Chem. A 111, 450 (2007)
 Impakt faktor: 2,918 Hivatkozások: 12 Független hivatkozások: 6
31. P. Rupper, E. N. Sharp, [G. Tarczay](#), T. A. Miller
 Investigation of Ethyl Peroxy Radical Conformers via Cavity Ringdown Spectroscopy of the A-X Electronic Transition
J. Phys. Chem. A 111, 832 (2007)
 Impakt faktor: 2,918 Hivatkozások: 18 Független hivatkozások: 5
32. G. Pohl, A. Perczel, G. Magyarfalvi, E. Vass, [G. Tarczay](#)
[A Matrix Isolation Study on Ac-Gly-NHMe and Ac-L-Ala-NHMe, the Simplest Chiral and Achiral Building Blocks of Peptides and Proteins](#)
Phys. Chem. Chem. Phys. 9, 4698 (2007)
 Impakt faktor: 3,343 Hivatkozások: 32 Független hivatkozások: 20
33. G. Pohl, A. Perczel, G. Magyarfalvi, E. Vass, [G. Tarczay](#)
[A Matrix Isolation Study on the Least Flexible Natural Amino Acid Diamide, Ac-L-Pro-NH₂, a Frequent Structural Element of \$\beta\$ - and \$\gamma\$ -turns of Peptides and Proteins](#)
Tetrahedron 64, 2126 (2008)
 Impakt faktor: 2,897 Hivatkozások: 14 Független hivatkozások: 7
34. V. Stakhursky, I. Sioutis, [G. Tarczay](#), T. A. Miller
 Computational Investigation of the Jahn-Teller Effect in the Ground and Excited States of the Tropyli Radical, Part I: Theoretical Calculation of Spectroscopically Observable Parameters
J. Chem. Phys. 128, 084310 (2008)
 Impakt faktor: 3,149 Hivatkozások: 4 Független hivatkozások: 3
35. I. Sioutis, V. Stakhursky, [G. Tarczay](#), T. A. Miller
 Experimental Investigation of the Jahn-Teller Effect in the Ground and Excited States of the Tropyli Radical, Part II: Vibrational Analysis of the A-X Electronic Transition
J. Chem. Phys. 128, 084311 (2008)
 Impakt faktor: 3,149 Hivatkozások: 6 Független hivatkozások: 5
36. [G. Tarczay](#), S. Góbi, G. Magyarfalvi, E. Vass
[Model Peptide - Water Complexes in Ar Matrix: Complexation Induced Conformation Change and Chirality Transfer](#)
Vibrational Spectroscopy (invited article, Prominent Young Vibrational Spectroscopists issue) 50, 21 (2009)
 Impakt faktor: 1,931 Hivatkozások: 13 Független hivatkozások: 7
37. T. Pasinszki, M. Krebsz, G. Bazsó, [G. Tarczay](#)
[First Isolation and Spectroscopic Observation of HCNS](#)
Chem. Eur. J. 15, 6100 (2009)
 Impakt faktor: 5,382 Hivatkozások: 9 Független hivatkozások: 4
38. T. Beke, C. Somlai, G. Magyarfalvi, A. Perczel, [G. Tarczay](#)
[Chiral and achiral conformational building units of \$\beta\$ -peptides: A matrix isolation conformational study on Ac- \$\beta\$ -Ala-NHMe and Ac- \$\beta\$ -HAla-NHMe](#)
J. Phys. Chem. B 113, 7918 (2009)
 Impakt faktor: 3,471 Hivatkozások: 9 Független hivatkozások: 7
39. T. Pasinszki, G. Bazsó, M. Krebsz, [G. Tarczay](#)
[A matrix isolation and computational study of the \[C, N, F, S\] isomers](#)
Phys. Chem. Chem. Phys. 11, 9458 (2009)
 Impakt faktor: 4,116 Hivatkozások: 7 Független hivatkozások: 3

40. [G. Tarczay](#), P. G. Szalay, J. Gauss
First-Principles Calculation of Electron Spin-Rotation Tensors
J. Phys. Chem. A 114, 9246 (2010)
Impakt faktor: 2,732 Hivatkozások: 6 Független hivatkozások: 6
41. S. Góbi, K. Knapp, E. Vass, Z. Majer, G. Magyarfalvi, M. Hollósi, [G. Tarczay](#)
[Is \$\beta\$ -homo-proline a pseudo- \$\gamma\$ -turn forming element of \$\beta\$ -peptides? An IR and VCD spectroscopic study on Ac- \$\beta\$ -HPro-NHMe in cryogenic matrices and solutions](#)
Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 13603 (2010)
Impakt faktor: 3,453 Hivatkozások: 8 Független hivatkozások: 4
42. M. Krebsz, B. Hajgató, G. Bazsó, [G. Tarczay](#), T. Pasinszki
[Structure, Stability, and Generation of CH₃CNS](#)
Australian J. Chem. 63, 1686 (2010)
Impakt faktor: 1,681 Hivatkozások: 5 Független hivatkozások: 3
43. G. Bazsó, [G. Tarczay](#), G. Fogarasi, P. G. Szalay
[Tautomers of cytosine and their excited electronic states: a matrix isolation spectroscopic and quantum chemical study](#)
Phys. Chem. Chem. Phys. 13, 6799 (2011)
Impakt faktor: 3,573 Hivatkozások: 17 Független hivatkozások: 14
44. S. Góbi, E. Vass, G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#)
[Effects of strong and weak hydrogen bond formation on VCD spectra: a case study of 2-chloropropionic acid](#)
Phys. Chem. Chem. Phys. (Weak Hydrogen Bonds - Strong Effects? Special Issue) 13, 13972 (2011)
Impakt faktor: 3,573 Hivatkozások: 10 Független hivatkozások: 8
45. C. Fábri, T. Szidarovszky, G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#)
[Gas-Phase and Ar-Matrix SQM Scaling Factors for Various DFT Functionals with Basis Sets Including Polarization and Diffuse Functions](#)
J. Phys. Chem. A 115, 4640 (2011)
Impakt faktor: 2,946 Hivatkozások: 13 Független hivatkozások: 7
46. G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#), E. Vass
[Vibrational Circular Dichroism](#)
Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science 1, 403 (2011)
Impakt faktor: nincs megh. Hivatkozások: 15 Független hivatkozások: 12
47. M. Krebsz, G. Májusi, B. Pacsai, [G. Tarczay](#), T. Pasinszki
[Generation and Spectroscopic Identification of Selenofulminic Acid and Its Methyl and Cyano Derivatives \(XCNSe, X=H, CH₃, NC\)](#)
Chem. Eur. J. 18, 2646 (2012)
Impakt faktor: 5,831 Hivatkozások: 1 Független hivatkozások: 0
48. Z. Szekrényes, K. Kamarás, [G. Tarczay](#), A. Llanes-Pallas, T. Marangoni, M. Prato, D. Bonifazi, J. Björk, F. Hanke, M. Persson
Melting of Hydrogen Bonds in Uracil Derivatives Probed by Infrared Spectroscopy and ab Initio Molecular Dynamics
J. Phys. Chem. B 116, 4626 (2012)
Impakt faktor: 3,607 Hivatkozások: 3 Független hivatkozások: 2
49. G. Bazsó, S. Góbi, [G. Tarczay](#)
[Near-Infrared Radiation Induced Conformational Change and Hydrogen Atom Tunneling of 2-Chloropropionic Acid in Low-Temperature Ar Matrix](#)
J. Phys. Chem. A 116, 4823 (2012)
Impakt faktor: 2,771 Hivatkozások: 5 Független hivatkozások: 3

50. G. Bazsó, G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#)
[Near-Infrared Laser Induced Conformational Change and UV Laser Photolysis of Glycine in Low-Temperature Matrices: Observation of a Short-Lived Conformer](#)
J. Mol. Struct. (Light-Induced Processes in Cryogenic Matrices Special Issue) 1025, 33 (2012)
 Impakt faktor: 1,404 Hivatkozások: 10 Független hivatkozások: 5
51. T. Vörös, G. Bazsó, [G. Tarczay](#), T. Pasinszki
[Matrix-Isolation Spectroscopic and Computational Study of \[2C, 2N, 2S\] Isomers](#)
J. Mol. Struct. (Light-Induced Processes in Cryogenic Matrices Special Issue) 1025, 117 (2012)
 Impakt faktor: 1,404 Hivatkozások: 0 Független hivatkozások: 0
52. G. Bazsó, G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#)
[Tunneling Lifetime of the ttc/Vlp Conformer of Glycine in Low-Temperature Matrices](#)
J. Phys. Chem. A 116, 10539 (2012)
 Impakt faktor: 2,771 Hivatkozások: 10 Független hivatkozások: 8
53. G. Bazsó, E. E. Najbauer, G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#)
[Near-Infrared Laser Induced Conformational Change of Alanine in Low-Temperature Matrices and the Tunneling Lifetime of Its Conformer VI](#)
J. Phys. Chem. A 117, 1952 (2013)
 Impakt faktor: 2,771 Hivatkozások: 6 Független hivatkozások: 5
54. G. Pohl, E. Gorrea, V. Branchadell, R. M. Ortuño, A. Perczel, [G. Tarczay](#)
[Foldamers of \$\beta\$ -Peptides: conformational preference of peptides formed by rigid building blocks. The first MI-IR spectra of a triamid nanosystem](#)
Amino Acids 45, 957 (2013)
 Impakt faktor: 3,914 Hivatkozások: 0 Független hivatkozások: 0
55. T. Vörös, G. Bazsó, [G. Tarczay](#)
[Matrix Isolation and Computational Study of the \[H, C, N, Se\] Isomers](#)
J. Phys. Chem. A, nyomtatásban
 Impakt faktor: 2,771 Hivatkozások: 0 Független hivatkozások: 0
56. B. Botka, M. E. Füstös, H. M. Tóháti, K. Németh, G. Klupp, Z. Szekrényes, D. Kocsis, M. Utczás, E. Székely, T. Váczi, [G. Tarczay](#), R. Hackl, T. W. Chamberlain, A. N. Khlobystov, K. Kamarás
 Interactions and chemical transformations of coronene inside and outside carbon nanotubes
Small, nyomtatásban
 Impakt faktor: 7,823 Hivatkozások: 0 Független hivatkozások: 0
57. T. Pasinszki, M. Krebsz, [G. Tarczay](#), C. Wentrup
 Photolysis of Dimethylcarbamoyl Azide in Argon Matrix: Spectroscopic Identification of Dimethylamino Isocyanate and 1,1-Dimethyldiazene
J. Org. Chem., nyomtatásban
 Impakt faktor: 4,564 Hivatkozások: 0 Független hivatkozások: 0
58. M. Krebsz, [G. Tarczay](#), T. Pasinszki
[Generation and Spectroscopic Identification of ClCNS, ClNCS, and NCCNS](#)
Chem. Eur. J., nyomtatásban
 Impakt faktor: 5,831 Hivatkozások: 0 Független hivatkozások: 0
59. A. Tajti, L. A. Mück, Á. L. Farkas, M. Krebsz, T. Pasinszki, G. Tarczay, P. G. Szalay
[Unraveling the photoisomerization mechanism of FCNS \$\rightleftharpoons\$ FC\(NS\)](#)
Phys. Chem. Chem. Phys., beküldve
 Impakt faktor: 3,829 Hivatkozások: 0 Független hivatkozások: 0
60. E. Najbauer, G. Bazsó, S. Góbi, G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#)
[Exploring the Conformational Space of Cysteine by Matrix Isolation Spectroscopy Combined with Near-Infrared Laser Induced Conformational Change](#)
 beküldés előtt

B. Angolnyelvű összefoglalók és könyvfejezetek

1. L. Szepes, [G. Tarczay](#)
High Energy Spectroscopy: Photoelectron Spectrometers,
fejezet J. C. Lindon, G. E. Tranter, John L. Holmes (Szerk.) *Encyclopedia of Spectroscopy and Spectrometry* c. könyvben,
1. kiadás Academic Press Ltd, UK, 1999; 2. kiadás Elsevier 2010; 3. kiadás Elsevier 2014.
Hivatkozások: 1 Független hivatkozások: 1
2. A. G. Császár, [G. Tarczay](#), M. L. Leininger, Oleg L. Polyansky, J. Tennyson, W. D. Allen
Dream or Reality Complete Basis Set Full Configuration Interaction Potential Energy
Hypersurfaces,
chapter J. Demaison and K. Sarka (Eds.) *Spectroscopy from Space*, NATO ARW Series C,
Kluwer, Dordrecht, 2001.
Hivatkozások: 60 Független hivatkozások: 19

C. Magyar nyelvű összefoglalók és könyvfejezetek

1. [G. Tarczay](#), L. Szepes
Fémorganikus vegyületek spektroszkópiája és szerkezetkutatása,
fejezet F. Faigl, L. Kollár, A. Kotschy, L. Szepes *Szerves fémvegyületek kémiája* c. tankönyvben,
Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001.
2. G. Bazsó, G. Magyarfalvi, [G. Tarczay](#)
[A mátrixizolációs technika: molekulakomplexektől reaktív gyökökig](#)
Magyar Kémiai Folyóirat 112, 137 (2006)
3. I. P. Csonka, B. Sztáray, [G. Tarczay](#), G. Vass, L. Szepes
Szerves fémvegyületek és molekulakomplexek tanulmányozása fotoionizációs módszerekkel
Magyar Kémiai Folyóirat 113, 7 (2007)
4. G. Bazsó, S. Góbi, G. Magyarfalvi, G. Zügner, A. Demeter, T. Turányi, S. Dóbbé, [G. Tarczay](#)
[Az ELTE TTK Lézerlaboratóriuma: Első eredmények és kutatási perspektívák](#)
Magyar Kémiai Folyóirat 118, 65 (2012)
5. M. Krebsz, G. Bazsó, B. Pacsai, G. Májusi, [G. Tarczay](#), T. Pasinszki
[Nitril-szulfidok és nitril-szelenidek előállítása és spektroszkópiai jellemzése mátrixizolációs technikával](#)
Magyar Kémiai Folyóirat 118, 72 (2012)
6. [G. Tarczay](#), E. Vass, S. Góbi, G. Magyarfalvi
[Rezgési optikai aktivitás – Abszolút konfiguráció és konformáció meghatározása](#)
Magyar Kémiai Folyóirat 119, 53 (2013)
7. [G. Tarczay](#)
Rezgési spektroszkópiai módszerek
fejezet Sohár Pál (szerk.) *A gyógyszerkutatás műszeres módszerei* c. könyvben, kézirat beküldve

D. Népszerűsítő közlemények

1. [G. Tarczay](#)
A fémkomplexek szerkezetéről
Középiskolai Kémiai Lapok 31, 8 (2004)
2. J. Orgoványi, [G. Tarczay](#)
Ahol a madár sem járt: A csillagközi tér kémiája
Középiskolai Kémiai Lapok 34, 351 (2007)

3. V. Tamás, [G. Tarczay](#)
A „lusta”, a „rejtett” és társaik – nemesgázok és vegyületeik előállítása
Középiskolai Kémiai Lapok 40, 73 (2013)

E. Meghívott előadóként tartott plenáris előadások nemzetközi konferenciákon

1. [Biomolecules and Their Complexes in Low-Temperature Matrices](#)
Physics & Chemistry of Matrix Isolated Species, Gordon Research Conference, 2009, Oxford, UK.
(plenary lecture, invited speaker)
2. [Biomolecules in inert matrices: Limitations and perspectives](#)
Matrix 2011, 2011,
Vancouver, Canada ('chair's remarks' lecture, invited speaker)
3. [Generation, chemistry and spectroscopy of \[X, C, N, Y\] species \(X=H, F, CH₃, NC, Cl; Y=S, Se\)](#)
Matrix 2011, 2011,
Vancouver, Canada (plenary lecture, invited speaker)
4. [NIR Laser induced and spontaneous conformational changes by H-atom tunneling of amino acids in low-temperature matrices](#)
Chemistry and Physics at Low Temperatures, 2013,
Jyväskylä, Finland (plenary lecture, invited speaker)