



# SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

## TERMÉSZETTUDOMÁNYI ÉS INFORMATIKAI KAR

### Szerves Kémiai Tanszék

**Dr. habil. Pálinkó István, az MTA doktora, egyetemi docens**

Tel.: 62 544 288, Fax: 62 544 200, e-mail: [palinko@chem.u-szeged.hu](mailto:palinko@chem.u-szeged.hu)

---

#### Bírálat

Tarczay György: *Kísérleti és elméleti molekulaszpektroszkópiai vizsgálatok III* című  
MTA doktori értekezéséről

Amikor az értekezés megérkezett azt hittem, hogy az egyik kötet elveszett a postán. Nem gondoltam, hogy az aránylag vékony kötet maga a munka, kerestem az eredeti közleményeket tartalmazó második kötetet. Nem is könnyen békültem meg azzal, hogy ilyen nincs, és most is az a véleményem, hogy szerencsésebb lett volna, ha van az a bizonyos második kötet. Bele lehetett volna olvasni a közleményekbe, dolgokon el lehetett volna mészlázni. Persze elő lehetett volna ásni az eredeti közleményeket, de ez túlságosan sok extra munkát jelentett volna, így ezt nem is tettem meg. Végülis az értekezés így is követhető és elbíráható volt.

A munka szép kiállítású, a szöveg jól követhető, az ábrák is szépen kivitelezettek, az ábraalírások jól megfogalmazottak. Az értekezés szinte nem tartalmaz elütést sem. Talán, ha egyet vettem észre, de ez ennél több említést nem is érdemel.

Az értekezés mögött álló munka egyik fő érdemének a műszerfejlesztést tekintem, hiszen ez tette lehetővé érdekes, hogy másként nem vagy nehezen megközelíthető problémákat kísérletileg kezelhessenek. A műszerfejlesztés legalább ekkora érdeme az, hogy más problémák megoldása is lehetségessé válik a továbbiakban.

Az értekezés sokféle, szerteágazó kísérleti munka eredményeinek leírását tartalmazza. Minden altéma érdekes, kutatásra érdemes, sokszor hiánypótló, az elért eredmények jelentősek.

A számításos kémiai munka kiváló és nagyon releváns kiegészítője a kísérleteknek, hiszen a kísérletek is többnyire izolált molekulákra, molekularészletekre vonatkoznak. Mivel a vizsgált rendszerek mérete viszonylag kicsi, ezért, nagyon helyesen, magas elméleti szintű számolások történtek.

Az eredmények jól publikáltak, érdekes, hogy egyelőre nem túlságosan hivatkoztak. Ennek talán két oka is van. Az egyik feltehetően az, hogy az ilyen méréseket lehetővé tevő rendszerek száma nem túl nagy, és ott ahol van, meglehet, más problémákon dolgoznak, azaz ezeken a jelölt által kutatott területeken aránylag kevesen tevékenykednek. A másik talán az, hogy sok közlemény nem túl régen került a tudományos nyilvánosság elé, így még kevés idő volt a hivatkozások gyűjtésére.

Globálisan megfogalmazva a téziszűzetben leírt eredmények mindegyikét újnak vagy újszerűnek fogadom el, részletesebb elemzésüket a következőkben teszem meg.

Amint azt már említettem a 0. tézispontot nemcsak teljes értékűnek fogadom el, hanem a munka egyik legfontosabb részének tekintem. *Mindazonáltal felmerült bennem a kérdés, hogy vajon ilyen kísérleti berendezést lehet-e vásárolni, vajon nem arról van-e szó, hogy nincs elég pénzünk a vásárlásra, és olcsóbb saját magunk megcsinálni (ilyet elég gyakran láttam, sőt magam is tapasztaltam)?*

Ide tartozónak tekintem és ugyancsak maradéktalanul új eredményekként fogadom el a mátrixizolációs vizsgálatokhoz fejlesztett kísérleti és elméleti módszereket, azaz az 1.a–1.d tézispontokat.

A fejlesztett módszerek kiváló használhatóságát mutatják a további tézispontokban leírt eredmények.

Különösen érdekesnek tartom a kis élettartamú molekulákkal és gyökökkel elért eredményeket. Sok ilyen molekulát először sikerült megvizsgálni, illetve az ismertek esetén sikerült a rendelkezésre álló spektroszkópiai információkat kiegészíteni. Ha ez csupán „sporteredmény” lenne, azt is értékelném, de ezeknek a reaktív molekuláknak nagy az asztrokémiai fontosságuk, a gyökök pedig légkörkéimiai szempontból jelentősek. Kiemelendőnek tartom azt, hogy nemcsak a molekulák, gyökök mintegy statikus jellemzésére alkalmas a rendszer, hanem különféle vegyületek átalakulásának (fotolízisének) dinamikája is követhető. *Vajon lehetséges-e a kísérleti módszerrel kis élettartamú ionok (pl. karbéniumionok) szerkezetvizsgálata?*

A módszer alkalmasnak bizonyult aminosavak és különféle modellpeptidek konformer- és tautomereloszlásának vizsgálatára. Sikerült jónéhány kérdésre választ kapni, eddig nem ismert konformereket találni, rezgési átmeneteiket asszignálni. *Itt felmerült bennem az a kérdés, hogy mekkora az molekula, amelyre még kielégítő pontosságú kísérleti és számításos eredmények nyerhetők, valamint az is, hogy aggregátumok, pl. savdimerek konformációs sajátosságai kísérletileg vizsgálhatók-e?*

Nagyon érdekesek az alagúthatással történő átalakulások vizsgálata során nyert eredmények, különösen a rövid felezési idejű, eddig nem ismert aminosav-konformerek felfedezése.

Tarczay György akadémiai doktori értekezése – és még inkább nyilvánvalóan az értekezés alapját képező közlemények –, nagyon sok értékes és érdekes eredményt tartalmaz. Az új/újszerű eredmények mennyisége és minősége bőségesen kielégítik az MTA doktora címhez megkívántakat, így egyértelmű, hogy mind a nyilvános vita kitűzését, mind a doktori mű elfogadását javaslom.

Szeged, 2014. október 31.

