

## Vélemény Rajkó Róbert „Görbeillesztés nélküli komponensprofil -kinyerés az analitikai kémiaiában” című MTA doktori értekezéséről

Rajkó Róbert értekezését 20 szakmai publikációja alapján állította össze. Értekezésének létezett egy korábbi verziója, ahol egy más formát, a rövid összefoglalóval egybekötött szakmai publikációk változatot készített el, de a szakbizottság javaslatára ezt átírta „hagyományos” dolgozatra. Szándékosan írtam idézőjelekbe a „hagyományos” szót, mivel a mostani dolgozata is igazából 20 cikk egyesével való bemutatása. Ez a 20-as tagolás megtalálható a Célkitűzések fejezetben, a 4-5. fejezetekben, ahol 12+8-as tagolással röviden összefoglalja egyesével a cikkeket és a 6. fejezetben, ahol 20 tézist fogalmaz meg, egy-egy cikk alapján.

A dolgozat ebben a tagolásban sokszor nagyon tömör, több alfejezetnél is szükséges volt az eredeti szakcikk átnézése, sőt olyan is volt, ahol az azokban hivatkozott forrásokra is szükségem volt a megértéshez. Tipográfiai, szerkesztési és fogalmazási szempontból az értekezés megfelelő, betartja a tudományos kommunikáció szokásait. Nyelvtani szempontból egyedül az egybeírás-különírás szabályainál éreztem némi bizonytalanságot, az erre a célra készült akadémiai online alkalmazás többször más tagolást javasolt. A nemzetközi szakzsargon magyar megfelelőinek ezen a területen még nincs kialakult nomenklatúrája, néha, szubjektívan, máshogy fordítottam volna a kifejezéseket.

Véleményemet nem a fejezetek sorrendjében ismertetem, hanem először az 1., 2., 3. és 7. fejezeteket veszem sorra, majd utána térek rá a cikkenkénti tagolásnak megfelelően összevonva a 4., 5. és 6. fejezeteket. A téziszűzetet nem elemzem részleteiben, mivel az a 6. fejezethez képest pluszban egy oldalnyi bevezetőt (célkitűzést) és egyes téziseknél maximum egy-két mondatnyi bevezető információt tartalmaz. Úgy gondolom, hogy a 6. fejezet téziseinek véleményezése teljesen átfed a téziszűzet véleményezésével.

1. Bevezetés A fejezetben a kemometria, mint tudományág elhelyezése kapja a fő hangsúlyt. Maga a kemometria kb. 50 éves múltra tekint vissza. Rajkó Róbert jól mutatja be az önálló, illetve a más területekkel átfedő részeit. Annyi megjegyzésem lenne, hogy a mai kemometriát egyre kevésbé köthetjük az analitikai kémiához, a kemometria klasszikus adataalapú alkalmazásai, pl. csoportosítás osztályozás és modellezés az elmúlt években mind a preparatív, a műszeres és az elméleti-számítógépes területeken tömeges alkalmazásként jelent meg.

2. Célkitűzés Ha ilyen fejezetet olvasok, mindig az abszurd kép jelenik meg előttem, amikor valaki 20 évre előre leírja és közjegyzővel hitelesíti, hogy melyik nap mit fog kutatni és milyen eredménnyel. Ezért inkább úgy értelmezem, hogy a dolgozat összeállításakor levő célokról lehet itt szó. Ebben az esetben 20 cikk témájának 1-2 mondatos leírásáról van szó, megfelelő logikai sorrendben.

3. Irodalmi áttekintés A 20 cikk legalább 5 különböző irodalmi bevezetést igényelt volna, így ez a klasszikus irodalmi bevezetés pár-pár mondat és hivatkozás formájában a 4-5. fejezetek alfejezeteiben található. A 3. fejezet inkább egy matematikai összefoglaló a szinguláris érték felbontásról, a főkomponens-elemzésről, a többváltozós görbefelbontással való kapcsolatokról és a háromdimenziós adattömbök felbontásáról. Az összefoglaló tetszett, néhány olyan megállapítást is találtam, amelyeken korábban sose gondolkodtam el adatkértékelés során, pl. a forgatás- és skálainvarianciákkal kapcsolatban. Talán csak azzal a kijelentéssel nem értek egyet, hogy főkomponens-elemzéshez feltétlenül skálázni kell-e a mátrixot, ha nem korrelációs vagy kovariancia mátrixból indulunk ki.

7. fejezet A fejezet igazából rövid összefoglalója Rajkó Róbertnek a nemzetközi tudományos közéletben levő aktivitásáról, illetve a dolgozatban nem érintett tudományos eredményeiről. A tudományos közéletben Rajkó Róbert mind a hazai szervezései (pl. KeMoMo), mind a görbefelbontással foglalkozó legismertebb kutatók kommunikációjának és rendszeres konferenciáinak iniciátoraként jól ismert. A bemutatott további kutatások három részre oszthatóak, ahol közreműködőként segített adatok

értelmezésénél, ahol a dolgozat témájától nagyon eltérő témában kutatott, vagy ahol az eredmények olyan módon lettek publikálva, amit kevésbé preferálnak az MTA-n, pl. arXiv. A fejezet jól tükrözi, hogy Rajkó Róbert tudományos munkássága messze túlmutat a 20 tézisbe foglalt közleményen. Az ebben a 7. fejezetben levő rövid ismertetéseket nem véleményeztem, mivel nem jelennek meg tézisekben, illetve a leírások részletessége alapján érdemben nem is minősíthetők.

4-6. fejezetek A következőkben egyesével veszem végig a 4-5. fejezet összesen 20 alfejezetét és a hozzájuk tartozó 20 tézist a 6. fejezetből. Ezek tartalmát minden esetben összevettem a megfelelő 20 publikációval. A tagolásnál feltüntettem azt is, hogy melyik fő téma területéhez csatolom azokat, pl. BP: Borgen-ábra, LS: Lawton-Sylvestre-ábra, 3D: háromdimenziós adattömb felbontása.

#### 4.1 alfejezet – P1 cikk (2005) – 1. tézispont -BP

Az ebben a fejezetben leírt kutatást tekinthetjük Rajkó Róbert első lépésének a görbeillesztés nélküli komponens meghatározás területén. Az 1985-ös Borgen-Kowalski cikkben szereplő ábra előállítására új geometriai módszert dolgoztak ki a P1 cikkben, pontosabban a belső és a külső polinom számolására átfogalmazták a problémát a Matlabban szereplő `convhull` és `cddmex` eljárásokkal megoldhatóvá. A cikk egyik jelentősége, hogy numerikusan matematikai program segítségével rutinszerűen elvégezhetővé tette az itt Borgen-ábrának keresztelt számolást, a másik jelentősége, hogy előhozta a kialakulófélben levő, a megoldástartományból csak egy elemet kiadó párhuzamos módszerek (pl. MCR-ALS) elvi hiányosságait. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.2 alfejezet – P2 cikk (2006) – 2. tézispont - BP

Az itt bemutatott eredményeket tartom szinte a legfontosabbnak, vagyis hogy az U vagy a V térben (SVD szerint bal és jobboldali sajátvektorok terében) értelmezett belső és külső poligonok között kapcsolatot hozott létre, ami lehetővé teszi, hogy pl. csak a két belső poligon számolására egyszerűsítsük a problémát, majd azoknak megfelelő átvitelével kapjuk meg a külső poligonokat. Ez a természetes dualitásnak nevezett tulajdonság szerintem alapvető kiindulási pontja lett a téma összes későbbi kutatójának. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.3 alfejezet – P3 cikk (2009) – 3. tézispont - BP

A rotációs bizonytalanság számszerűsítésére külön-külön a spektrális és a koncentráció térben 2009-ben Rajkó Róberték bevezetik a megoldási tartományok és a külső poligon hányadosát. A cikkben bemutatják a korábbi min-max két adaton alapuló módszer pontatlanságát. *A módszerek összehasonlításánál nem tiszta számomra, hogy ugyanolyan normával számolt Borgen-ábrán levő terület arányok és min-max értékek szerepelnek-e a táblázatban?* Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.4 alfejezet – P4 cikk (2009) – 4. tézispont - BP

Az analitikában közismert, hogy spektroszkópiai adatok kiértékelésénél kiemelt fontosságú, hogy az adatok előkezelése során milyen normalásokat hajtunk végre. Az SMCR esetében ez valójában a norma kérdésére vezet. Ennél a tézispontnál ezekkel a normákkal kapcsolatos vizsgálat található, egy szisztematikus sorozata a cikkben Borgen-normának elnevezett lehetőségekről. Kiderül, hogy a rotációs bizonytalanság számérétkei norma függőek. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.5 alfejezet – P5 cikk (2010) – 5. tézispont - LS

A bemutatott kutatás a kétkomponensű rendszerekre alkalmazható Lawton-Sylvestre ábrán mutatja be azok analitikus megoldását valamint a Tauler és Meader-féle iteratív módszerek alkalmazhatóságát és a forgatási mátrix elemeinek geometriai értelmezését. Tehát a technika ugyanaz, mint amikor a háromkomponensű Borgen-ábrán értelmezzük a dolgokat, de itt tulajdonképpen az egész SMCR

megközelítést elindító kétkomponensű rendszerről van szó. A cím is mutatja, hogy ebben az esetben nem egy konkrét alkalmazás kidolgozásáról, hanem az LS-ábra értelmezhetősége és annak a következményeit tekinthetjük eredménynek. Nem titkolt célja volt a kutatásnak egy ezekre az esetekre alkalmazható Matlab kód közzététele. Elsőre nehezen tudtam megítélni egy ilyen jellegű publikáció súlyát a nagyon speciális témája miatt, de a három elméleti csoport is rendszeresen hivatkozta ezt a cikket. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.6 alfejezet – P6 cikk (2013) – 6. tézispont - BP

Ez az első kutatás a doktori értekezés sorozatában, amelyet Rajkó Róbert Hamid Abdollahival közösen készített. A kutatás két részre osztható, egy új rácskeresési módszer adaptációjára az SMCR területek megtalálásához, illetve annak az esetnek a vizsgálata, amikor az egyik tisztakomponens spektrális profilját ismerjük. A rácskeresési módszer időigényes, de jól működik mind zajos, mind zajmentes adatokra. Az eredmények közül számomra a legérdekesebb spektrális kényszer alkalmazásának a hatása a Borgen-ábrára. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.7 alfejezet – P7 cikk (2014) – 7. tézispont - LS, BP

Ebben a cikkben Rajkó Róberték összefoglalják és egységes szemlélettel áttekintik az eddigi elméleti eredményeket és 2-3 komponensű rendszerekre. Mindemellett bemutatják az erre a célra elkészült számítógépes kódot. Kicsit gondban vagyok a kapcsolódó tézisponttal, mivel az eredmények egy része már korábbi cikkekben (tézispontokban) is szerepel, ugyanakkor itt van a téma összefoglalva, illetve a praktikus használat szempontjából bemutatva. Szóval Rajkó Róbert cikk/tézis alapú megközelítése talán itt nem a legjobb választás, ehhez a cikkhez jobb lett volna a téma alapú tézispontok alkalmazása és ezt több korábbi cikk téziseihez lehetett volna szétdarabolni. *A fejezet és a cikk összhangban van. A tézispont tartalmi szempontból egyezik azok témájával, de a más pontokkal való átfedését problémásnak látom.*

#### 4.8 alfejezet – P8 cikk (2015) – 8. tézispont - BP

A profilbecslés egyértelműsége a kérdés, ahol a kiindulási pont az ún. Manne-féle tételek. A munkában ellenpéldával cáfolják a Manne-féle 3. tételt és a Borgen-ábrák segítségével új egyértelműségi szabályokat vezetnek be. A szabályokat Borgen-ábrán levő geometriai és spektrum alapú módon is megfogalmazzák, illetve egyértelműségi kategóriákat vezetnek be. Gyakorlati szempontból ennek a munkának az elméleti eredményeit kifejezetten fontosnak tartom. és a hozzákapcsolódó tételt is fontosnak tartom. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.9 alfejezet – P9 cikk (2016) – 9. tézispont - BP

A cikket közösen jegyzik a témában kutató csoportok vezetői. Kutatói berkekben nagyon ritka az ilyen összefogás egy területen, főleg, ha mint egymással konkurens módszerek fejlesztőiként nézzük őket. Tekinthetjük összefoglaló cikknek az MCR és az SMCR területéről, de fontosabb a cikk összehasonlító jellege. Három módszert vizsgálnak és minősítenek. Rajkó Róbert korábbi munkája az etalonnak tekinthető Borgen-ábrák részleteinek felderítésével esszenciális volt ennek a munkának a létrejöttéhez. Ez a kutatás, összefoglalás és összehasonlítás szerintem az egyik legjobb bevezető erre területre. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.10 alfejezet – P10 cikk (2017) – 10. tézispont – 3D

A doktori dolgozat első munkája a három utas adattömbökkel kapcsolatban. Szimulált adatsorokkal bemutatták, hogy a Kruskal-féle szükséges és elégséges kritériuma a lineáris felbontás egyértelműségének valójában csak elégséges kritérium  $F=2$  és  $F=3$  esetben is. A példák alapján szóban értelmezhető szabályokat is megadnak. *Ennél a pontnál merült fel bennem, hogy itt miért nem sáv jellegű megoldások szerepelnek. A dolgozatban nem, de a cikkben találtam erre utalást, de nem értettem. A következő pont a kétkomponensű esetre választ adott a kérdésekre, de mi a helyzet a háromkomponensű háromutas adattömböknél a forgatási bizonytalansággal? Foglalkoztak-e itt a*

sávmegoldásokkal Rajkó Róberték, vagy bárki más? Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.11 alfejezet – P11 cikk (2016) – 11. tézispont – LS, 3D

Ebben a munkában a kétkomponensű háromutas adattömbök SMCP felbontását végezték el analitikus módon az adattömb kétdimenzióba való alakításával. A dolgozatban nem, de a cikkben szerepelnek a sávmegoldások is. A felbontásuk, ha jól értem, univerzális és nem tartalmaz további megkötéseket, mint pl. a cikkben felsorolt módszerek, ahol a megkötések miatt látszólagosan egyértelmű felbontásokat kapnak. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

#### 4.12 alfejezet – P12 cikk (2020) – 12. tézispont – (LS), BP

Ebben a munkában két és háromkomponensű rendszerek ritka adatmátrixainak tulajdonságait vizsgálták LS-ábrákon és Borgen-ábrákon. Bemutatták, hogy a háromkomponensűnél a megoldásokat a külső poligonon találhatjuk, illetve teljesen 0 tartalmú sorok-oszlopok esetén a külső poligonokon levő megoldások tartalmazzák a legtöbb zérusértéket. Az L1, L1, L2 normák közül pedig csak az L0 minimalizálása vagy az L2 maximálása ad korrekt választ, ellentétben a szakirodalomban javasolt L1 használattal szemben. A munka jó szemléltetése annak, hogy az SMCR grafikus szemlélete mire képes, hogyan értelmezheti vagy kritizálhatja a néha ad hoc módon kialakult módszereket. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont, bár a tézisben és a fejezetben nem szerepel a kétkomponensű rendszerekre vonatkozó rész.

#### 5.1 alfejezet – P13 cikk (2007) – 13. tézispont – validáció

Ebben a pontban olyan téma szerepel, amellyel több éve részleteiben foglalkozom. A kidolgozott randomizációs-permutációs teszt jó lehetőségnek tűnik a látens változók számának egy újfajta meghatározására, ahol az adott látens változó hatását az ún. chance correlation egy sokaságával hasonlítjuk össze. Saját tapasztalataim alapján egyes lépéseket máshogy választottam volna, pl. a torzított duplex mintavételezés helyett random tanító/teszt felosztást végeztem volna, és mivel módszertani a fejlesztés, többször ismételve. Ezzel a fejezettel és a kapcsolódó tézisponttal azonban egészen más jellegű problémába futottam bele. Mivel nem sikerült minden részletét megértenem a fejezetnek, sőt a mögötte levő cikk se tartalmazta a reprodukáláshoz szükséges információt, így eljutottam a cikkben a 16. hivatkozáshoz, ahol minden részletre választ kaptam. *Az eredeti Faber és Rajkó által jegyzett cikket 2006. szeptember 27-én küldték be, 2007. május 21-én fogadták el és 2007. május 25-én jelent meg. A 16. hivatkozás egy hatszerzős jóval részletesebb cikk, amelyben Rajkó Róbert nem szerepel, csak társszerzője Faber. Ezt a cikket 2006. augusztus 7-én küldték be, 2007. március 12-én fogadták el és 2007. szeptember 4-én jelent meg. Mindkét cikk ugyanazt a módszert mutatja be, mint új és sajátfejlesztésű módszert. A P13-as cikk adatsora szerepel a Wiklund et al. (DOI: 10.1002/cem.1086) cikkben is. Nem látom át a helyzetet, de szükségesnek érzem az 5.1 fejezet és különösen a tézispont érvényességéhez, hogy pontosan ismert legyen Rajkó Róbert hozzájárulása ehhez a témához. Szóval van két átfedően megjelent cikk, egy közös szerzővel, aki nem Rajkó Róbert, és egy halom közös állítással a cikkek tudományos nívójára vonatkozóan.*

#### 5.2 alfejezet – P14 cikk (2009) – 14. tézispont – BP

A fejezetben az MCR-ALS iterációs módszer vizsgálata történik meg a Borgen-ábra segítségével. Az iteráció során a módszer megsértheti a nemnegativitási feltételt. A feltételsértés kikerülhető a cikkben javasolt algoritmikus változásokkal. *Az alfejezetben kicsit nagyvonalúsnak érzem a kemometria geometriájának nevezni az LS és Borgen-ábrákat. Úgy gondolom, a többváltozós görbefeletbontás az egyik fontos, de az alkalmazások száma szerint messze nem a legjelentősebb területe a kemometriának.* Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

### 5.3 alfejezet – P15 cikk (2010) – 15. tézispont – BP

A fejezet alapját adó közlemény igen rövid, alapjában egy kritikája (commentje) Lopes et al. cikkének és az ott levő számos állításnak. Úgy is nevezhetném, hogy ez egy harcos cikk, ahol a görbefelbontás számos módszeréről elterjedt téves vagy pontatlan értelmezéseket támadja Rajkó Róbert a 2005-ben revitalizált Borgen-ábra segítségével. *A fejezetben, a cikkben és annak kiegészítő részében, valamint a tézisben is számos állítás szerepel. Ezek elég sommásak, átfednek a korábbiakkal és önmagukban Rajkó Róbert korábbi munkáinak ismerete nélkül nehezen is értelmezhetőek. Nem tudom, hogy az irodalmi előzmény tisztázása tézisben szerepeltethető tudományos eredmény-e.*

### 5.4 alfejezet – P16 cikk (2006) – 16. tézispont – 3D

A kutatás során szimulált és HPLC/FT-IR mérések kiértékelésével próbálkoztak PARAFAC2 algoritmussal és annak egy módosításával. A szimulált adatsoron jól működött a módosított módszer, de a valós adat esetében szubjektív adatredukciót kellett végrehajtani, ami csökkentette az új módszer univerzalitását. A fejezet elején SMCR kiértékelés is be lett ígérve, de ezt se a cikkben, és szerencsére így a tézispontban se találtam meg. Egyébként az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

### 5.5 alfejezet – P17 cikk (2006) – 17. tézispont – meloxikám-mannit MCR-ALS X-ray

Az alfejezetben a cikknek a pordiffrakciós mérés MCR-ALS segítségével való kiértékelése szerepel. Számomra nagyon érdekes, hogy a görbefelbontás egy sikeres megoldás itt, mivel korábban sokat foglalkoztam folyadékok hagyományos és vegyes anyagok kiszögű diffrakciós méréseinek szimulációs értelmezésével. Érdekes, hogy sikerült megkapni mind a három parciális intenzitást a görbefelbontással. Az alkalmazott hullámhossz és szögtartomány alapján azonban előre is meg tudtam volna jósolni, hogy a „keverék” jel főleg, vagy akár kizárólagosan is csak az olvadékos eljárás esetén jelenik meg. Az őrléses esetben a szemcseméretetek olyan nagyok, hogy igazából egymás mellett kettő, a diffrakció szempontjából szinte nem kölcsönható rendszerről kapunk jelet, vagyis az intramolekuláris tartományban a mannit-mannit és a meloxikám-meloxikám parciális függvények lesznek a meghatározók. Csak az olvadék eljárásnál lesz számottevő arányban molekuláris távolságra a két különböző molekula, súlyt adva a meloxikám-mannit vegyes parciális intenzitásnak. Emiatt úgy gondolom, hogy tudományos eredménynek tekintem az MCR-ALS használatát a parciális intenzitások meghatározására, de ezek arányai természetes következményei az elkészítésnek és a spektrális megjelenés nem egy új harmadik forma létezését jelenti, hanem csak vegyes parciális nagyobb súlyát. A tiszta mannit vagy meloxikámhoz képest ez egy keverék, ez teljesen várható volt az olvadékeljárásakor. *A kapott harmadik görbe nem a keverék forma diffrakciós jele, hanem a vegyes parciális intenzitás függvény. A blend forma teljes jele tartalmazza mind a három parciális intenzitást.* Ha molekulárisnál nagyobb léptékű strukturális rendezettség felderítése lett volna a cél, ahhoz kisszögű szórást kellett volna alkalmazni.

### 5.6 alfejezet – P18 cikk (2006) – 18. tézispont – meloxikám-mannit, BP, dissol.

A fejezet szorosan összefügg az 5.5 fejezetben bemutatott rendszerekkel, de most a görbefelbontással vizsgált tulajdonság a kioldódás volt. A Borgen-ábrák jól demonstrálják, hogy itt is sávmegoldások vannak, most a három anyag (mannit, meloxikám és juice) mindegyikére. Merőben eltérő alkalmazás a korábbiakhoz képest, jól mutatja az SMCR megközelítés és a háromkomponensű esetben a Borgen-ábrák univerzalitását. Ha Rajkó Róbert nem a cikkenkénti tézispontok rendszerében gondolkozott volna, akkor számomra tematikailag ez és az előző tézis egybe vonható lenne. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

### 5.7 alfejezet – P19 cikk (2017) – 19. tézispont – BP

A bemutatott kutatás valamennyire folytatásának tekinthető a Manne-tételek vizsgálatával kapcsolatosnak (4.8 fejezet). Elúciós profilok példáján kerül bemutatásra a rangvesztés, illetve, hogy ez

nem feltétlenül azonos az adott szakaszon figyelembe veendő komponensszám csökkenéssel. A rangvesztés esetei a 4.8-ban bevezetett kategóriákhoz hasonlóan itt is a Borgen-ábra geometriai eseteivel lettek kapcsolatba hozva. Az alfejezet a cikknek csak egy részét tartalmazza, bár pont a rangvesztéses táblázat helyett jobb lett volna a cikk ábráját idevenni. Az alfejezetnek és az ide tartozó közlemény érintett részének megfelel a tézispont.

5.8 alfejezet – P20 cikk (2017) – 20. tézispont – adatok tere

Az alfejezetben az analit zavaró körülmények közti meghatározásának egy geometria kiértékelési módszerét dolgozták ki, alapjában kihasználva a felbontáskor megjelenő jobb és a baloldali sajátvektor terek dualitását. A cikk értelmezhető úgy, hogy a Borgen-ábrákon észlelt dualitás itt most más kiértékelési problémára lett felhasználva. A módszer segítségével közvetlenül hibabecslést is kapunk a számolás során, ez kiemeli a többi módszer közül. A módszer mindenféle előnye ellenére félek, hogy a műszerközpontú analitikai kémikusok miként fogják ezt alkalmazni, illetve standard módszerként implementálva lesz-e valaha. Az ötlet és a megvalósítás nem lett volna lehetséges a közreműködők igen magas absztrakciós képességei nélkül. Be kell vallanom, hogy sajnos nem értettem meg a geometriai konstrukciót részleteiben, de az eredményt hasznosnak tartom. Az alfejezetnek és az ide tartozó közleménynek megfelel a tézispont.

Ha statisztikát készítek a fenti cikkekről, 13 esetben a Borgen-ábra fejlesztése vagy alkalmazása a téma, a Lawton-Sylvestre-ábra 4 alkalommal van tárgyalva, háromdimenziós adattömbök 3 alkalommal vannak a kutatások középpontjában. A 13 Borgen-ábrás cikk is mutatja, hogy Rajkó Róbert eredményei kikerülhetetlenek ezen a területen, nem hiába szerepel az újabb szakirodalomban Borgen-Rajkó ábra néven. Ennek eléréséhez Rajkó Róbertnek nem csak revitalizálnia kellett ezt a szemléltetési módot, hanem tényleg mindenki számára jól számolhatóvá és értelmezhetővé kellett tennie. Sőt, rengeteg konfliktus során jutott el oda, hogy a konkurens módszerek fejlesztői elismerték Rajkó Róbert jogos kritikáját. Ma 3 komponensű rendszerek esetén a görbeillesztés nélküli komponensprofil-kinyerés golden standardja a Borgen-ábra, a többi módszer egyszerűségük miatt használt közelítő eljárások, részleges megoldáshalmazokkal. Nem ismerem az MTA doktora cím teljesítőinek átlagos publikációs és tudományos impaktját, de Rajkó Róbert esetében a Borgen-Rajkó ábra önmagáért beszél.

Külön feladatom, hogy a korábban részletezett alfejezet/cikk/tezis pontokból külön nyilatkozzak a tézispontok elfogadásáról. Úgy gondolom, hogy a tézispontok jelenlegi szerkezete, vagyis az egy cikk – egy tezis megoldás nem volt optimális, de mivel így készült az értekezés, elfogadom ezt a szerkezetet. A tézispontokra általánosan jellemző, hogy túl hosszúak és részletesek, átírást nem kérem, de így elveszik a pontok igazi tartalma a részletes leírásban. Örölnék, ha a védésen valamilyen tömörebb formában is megjelenének. Mind a 20 tézispontot tartalmilag elfogadom, kivéve a:

7. tezis A fejezet és a cikk összhangban van a tézisponttal ugyanakkor ez az alfejezet a téma egy összefoglalása. Emiatt ez tézispont tartalmi szempontból egyezik több másik tézisponttal. Nem tudom, hogy önálló pontként megállja-e a helyét, vagy más tézispontokba kellene beilleszteni ezt a közleményt azok támogatására.

13. tezis Nem látom át a helyzetet, de szükségesnek érzem az 5.1 fejezet és különösen a tézispont érvényességéhez, hogy pontosan ismert legyen Rajkó Róbert hozzájárulása ehhez a témához. Ahogy korábban részleteztem, van két átfedően megjelent cikk, egy közös szerzővel, aki nem Rajkó Róbert, és egy halom közös állítással a cikkek tudományos eredményei vonatkozóan. Jelenleg információ hiányában ezt a tézispontot nem tudom elfogadni.

15. tezis A tézispont több állítást tartalmaz. Rajkó Róbertnek megfontolásra javaslom, hogy esetleg az első két bekezdést elhagyja. Ezek egyike egy irodalmi előzmény tisztázása, a másik pedig egy

pontosítása a kritizált cikknek a forgatási bizonytalanság univerzalitásáról, ami szinte bármelyik másik cikkében is megjelenő kijelentés.

17. tézis. Itt tudományos eredménynek tekintem az MCR-ALS használatát a parciális intenzitások meghatározására, de ezek arányai természetes következményei a minták elkészítésének. A spektrális megjelenés nem egy új harmadik forma létezését jelenti, hanem csak a vegyes parciális nagyobb súlyát. A tiszta mannit vagy meloxikámhoz képest ez egy keverék, de ez teljesen várható volt az olvadékeljáráskor. Tehát a kapott harmadik görbe nem a keverék forma diffrakciós jele, hanem a vegyes parciális intenzitás függvénye. A blend forma teljes jele tartalmazza mind a három parciális intenzitást. A tézispont eszerinti módosítását javaslom.

**Összefoglalva az előzőket, úgy gondolom, hogy Rajkó Róbert értékes, úttörő jellegű kutatásokat végzett eddigi életpályája alatt. Ezek mennyisége, minősége, ismertsége és tudományos súlya kielégítik a címhez elvárt színvonalat. A doktori munka tudományos eredményeit elegendőnek tartom az MTA doktora cím megszerzéséhez. Az értekezésében 20 releváns és nívós publikációt egyesével foglalt össze és mindegyikhez egy-egy tézispontot rendelt. Számomra szokatlan ez a forma, illetve hosszúnak és kevésbé a lényegre koncentrálónak tartom így a tézispontokat, de azokat a fenti négy tézispontra vonatkozó megjegyzéseim korlátaival mind elfogadom. A nyilvános védés kitűzését javaslom.**

Budapest, 2024. február 19.



Tóth Gergely

PhD, egyetemi docens

ELTE Kémiai Intézet