

Opponensi vélemény Tarczay György az MTA doktora címért benyújtott értekezéséről.

Tarczay György „Kísérleti és elméleti molekulaszpektroszkópai vizsgálatok III” c. dolgozata mögött impozáns közlemények állnak, s ezek alapján előrebocsájtható, hogy a szerzőt messzemenően érdemes az MTA doktora címre. Ez a megelőzés pusztán a dolgozatban összefoglalt tudományos eredmények alapján is megtehető, és akkor még nem beszéltünk arról a hatalmas munkáról, ami az eredmények megszületéséhez szükséges laboratórium létrehozását, felépítését jelenti. A felépítés ráadásul többféle értelemben is használandó. Nyilvánvaló a szó technikai-műszaki értelmezése, hiszen az eszközöket fizikailag meg- és össze kellett építeni, de ehhez szorosan hozzátartozik a stratégia kialakítása, a tervezés, továbbá a szükséges anyagiak megszerzése, hiszen nem egy gyártó által forgalmazott műszerről van szó. Mindez – mint a megszületett tudományos eredmények mutatják – sikerrel járt, és a fentiek csak aláhúzzák azt, ami az MTA doktora címet kiérdemlő jelölt talán legfontosabb sajátja: az önálló laboratóriumteremtő képességet. Az önálló kutatói tevékenység kiemelése szempontjából nagyon jónak tartom a szerzőtársakkal való együttműködések esetén ezeknek a nevesítését, ami egyúttal a sajátjának tekintendő munka elhatárolását jelenti. Mindez a dolgozat bevezetésében nagyon korrektül megtörténik, ugyanakkor több helyen – de nem minden közreműködő esetén - a dolgozat közben is említésre kerül. Talán szerencsésebb lett volna a dolgozatban magában esetlegesen szereplő kiemeléseket teljesen elhagyni, hiszen a bevezetőben rendszerezetten leírtak tökéletesen megfelelnek a célnak.

Maga a dolgozat 6 fejezetből áll, melyek közül bevezetőt követő „Kísérleti módszerek” címűt a fentiekben leírtak szerint a dolgozat érdemi részének kell tekinteni, mint a további négy fejezetben („Reaktív molekulák előállítása és vizsgálata mátrixizolációs

módszerrel”, „Kismolekulák konformációanalízise mátrixizolációs spektroszkópiával”, „Biomolekulák vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával” és „Alagúthatással történő konformációváltozás vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával”) leírt eredmények megalapozását. Az utóbbi négy fejezet mindegyike tartalmaz módszertani fejlesztéseket, illetve egyúttal érdekes és fontos kémiai rendszerek vizsgálatával foglalkozik, s a hangsúly hol az egyik, hol a másik kérdéskörre helyeződik.

Ismét kiemelem, a szerző – dicséretesen - hatalmas mennyiségű munkát végzett el, ezzel azonban egyúttal a dolgozat szabta kereteket feszegeti. A fenti problémára két válasz képzelhető el, vagy nagyon tömören de egyúttal kínosan gondos precizitással ír le mindent, vagy egyes eredményeket elhagy a dolgozathoz, hogy másik munkákat részletesebben, és ilyen módon érthetőbben tárgyaljon. A jelölt alapvetően az első és egyúttal nehezebb megoldást választotta (azzal együtt, hogy több helyen jelzi, hogy nem tér ki egyes eredmények részletezésre), és nézetem szerint a munkával kapcsolatos kritikai megjegyzéseim többnyire ezen döntés következményei.

Maga a dolgozat és a dolgozat címében szereplő számozás is kissé formabontó. Nem szokásos egy MTA doktori dolgozatot a PhD és a habilitáció III stációjának tekinteni, hiszen ez egy önállóan újat teremtő munka összefoglalása kell legyen, nem pedig az egyszerű folytatása egy általában mások (pl. a PhD téma vezetője) által kijelölt útnak. A jelölt által a bevezetésben leírtak, valamint a dolgozat alapján azonban meggyőzően kiderül, hogy a kutatói életpálya valóban az „előzményekkel” együtt teljesebben ki azzal együtt, hogy az MTA doktori értekezés keretében összegzett munkák mennyiségüket és minőségüket tekintve a korábbi fokozatszerzéstől elválaszthatóak, és új irányt adnak azaz messzemenően megállják helyüket.

Az alábbiakban az egyes fejezetekről, a bennük leírt eredményekről részletesen írok, illetve teszek fel kérdéseket, melyek az olvasás közben felmerültek.

3. fejezet „Reaktív kismolekulák előállítása és vizsgálata mátrixizolációs módszerekkel”:

3.1. Tiofulminsav – 3.2. Nitril-szulfidok és tiazirinidok – 3.3. [H, C, N, Se] izomerek — 3.4. Nitril-szelenidek valamint 3.5. [2C, 2N, 2S] és [2C, 2N, 2Se] fejezetek.

A pszeudohalogének családjának vizsgálatáról szóló fejezet – ez a dolgozatnak is az egyik jelentős részét teszi ki – számos korábban nem (vagy nem kellő bizonyossággal) jellemzett pszeudohalogen vegyület detektálásáról számol be MI körülmények között, gondos precizitással elvégzett gyakran többlépcsős fotokémiai átalakítások eredményeképpen. A sok eredmény értékét emeli, hogy a hasonló vegyületek viselkedése nem minden esetben húzható egy kaptafára. A fejezetek végén az olvasónak mégis hiányérzete támad. Nyilvánvalóan látszik az elvégzett hatalmas munka, melynek eredményeképpen sok részletkérdést (új vegyületek azonosítása, spektroszkópiai tulajdonságaik, stabilitásuk, átalakulásuk jellemzői) sikerült megválaszolni. Ugyanakkor egy MTA doktori dolgozat megírásának (ha már meg kell azt írni – vö. 5 lap utolsó sor) az értelmét az adhatja meg, hogy ebben a pályázó az általa elért részeredményeket összefoglaló, s az összefüggéseket bemutató leírására adódik lehetőség. Így a fejezet végén jól esett volna a olvasni valami általános összefoglaló következtetést a vizsgált pszeudohalogének tulajdonságairól, a heteroatomok és a helyettesítők szerepéről. A fejezet elején, és a későbbiekben is többször szerepel (pl 17. oldal, 19. oldal), hogy ezen vegyületek érdekességét az esetleges linearitásuk, cikloaddíciós reakcióik, csillagközi térben való fellelhetőségük adják meg. Ezekre a felvetett kérdésekre, s a megválaszolásuk során a mátrix izolációs technika segítségével kapott információk szerepére, jelentőségére a hiányolt összefoglaló elemzés választ adhatott volna, persze ennek a védés során is szerét lehet ejteni.

A fentiekhez kapcsolódó egyik konkrét kérdésem az FCNS UV spektrumával kapcsolatos. A dolgozat 17. oldalán látható 3.2.1. ábrán d-vel jelölt spektrumot az FCNS-hez rendelték. Ez a spektrum jelentős mértékben eltér az MeCNS illetve HCNS spektrumoktól, továbbá a későbbiekben (30. oldal) tárgyalt ClCNS spektrumtól is, mivel megjelenik egy viszonylag intenzív sáv 350 nm-nél. A kis energiájú elektronátmenet létét a számítások is alátámasztják (3.2.4. táblázat). Általánosságban az elektronszívó F helyettesítő csoport nem okoz jelentős vöröseltolódást az elektrongerjesztések esetén. Azon kívül, hogy a számítások a sáv helyét az elvárható pontossággal megjósolják, indokolható-e (azaz valamilyen elektronszerkezeti, vagy molekulageometriai jelenséggel összefüggésbe hozható-e) ez az észlelés?

Hasonló kérdés vetődik fel a metil-nitril-szulfid (17. oldal), és a metil-nitril-szelenid (43. oldal) UV spektrumai kapcsán is. Míg a metil csoportok — elektronküldő hatásuknak tulajdonítva — általában mérsékelt vöröseltolódást okoznak az UV — VIS spektrumokon, a HNCS-hez képest a vöröseltolódás csak néhány nm, a MeNCSe esetén HNCSe-hez képest pedig egyenesen kékeltolódás tapasztalható. Lehet-e minderre egy egyszerű magyarázatot adni?

Itt vetődik fel egy a dolgozat szerkesztését bíráló megjegyzés is. A vizsgálatok során gyakran egy mátrix izolált vegyület fotokémiai bontásával állítják elő a vizsgálni kívánt rendszerint instabil molekulát. A diszkusszió során a jelölt többször követi azt a felépítést, hogy a fotolízis során változó UV spektrumot mutatja be annak igazolására, hogy változás bekövetkezett, majd a keletkező vegyületek azonosítására az UV spektrumnál jóval informatívabb IR illetve Raman spektroszkópiát használja. Mindezek után visszatér az UV spektrumra, és TD DFT vagy magasabb szintű számítási eredmények felhasználásával alátámasztja, hogy a korábban vizsgált UV spektrum valóban az IR alapján azonosított anyagnak a fotolízis során változó UV spektruma szerepelt a korábbi ábrán. Noha a kísérleti

adatok elemzésekor nyilvánvalóan a rezgési spektrumokból levont következtetések bírtak a szükséges információ tartalommal, és természetesen ezek voltak perdöntőek, a dolgozatot olvasó szempontjából szerintem hasznosabb lett volna a mért spektrumok mellett – mintegy megelőlegezve a végső következtetést rögtön szerepeltetni a számított gerjesztési spektrum adatokat is.

A 3.3. fejezet bevezető mondatában szerepel: A ([H,N,C,Se]) globális potenciálenergia felületet számításokkal sem vizsgálták még. Itt a pontosság kedvéért megemlíteném, hogy a 71-es közleményben ha nem is a teljes potenciálfelületet, de több izomer relatív energiáját meghatározták G1 módszerrel.

A 3.6. fejezet: E fejezet egy érdekes kutatási irány első eredményeinek a tömör leírása, és gondolom, a szerző szándéka szerint arra szolgál példaként, hogy nem csak pszeudohalogén típusú rövid élettartamú molekulákat vizsgált. Véleményem szerint azonban nem lett volna értéktelenebb a dolgozat, ha ez a két oldal kimarad belőle.

4. Kismolekulák konformációanalízise mátrixizolációs spektroszkópiával.

E fejezet jelentős mértékben módszertani jellegű, a vizsgált molekulák talán nem is annyira saját maguk miatt érdekesek, hanem azért, mert a kidolgozott mérési módszereket más rendszerekre való alkalmazás során is lehetett használni.

A 4.1. fejezetben leírt SQM skálafaktorok különböző számítási szintekre történt kifejlesztése a következő fejezetekben leírt vizsgálatok kiindulópontja. Noha a módszer nem új, az Ar mátrixban mért molekulákra vonatkozó skálafaktorok meghatározása érdekes, és a későbbi munkák során hasznosnak bizonyuló eredmény.

A 4.2. fejezetben leírt MI-VCD spektroszkópiai alkalmazási lehetőségeinek továbbfejlesztésében a jelölt nemzetközi szinten is élenjáró tevékenységet végzett, az általa

végzett mérések segítségével a korábbiaknál jóval nagyobb számú konformer azonosítása válik lehetségessé.

A 4.3. – 4.6. fejezetben egyenként leírt technikák végiggondolt, precíz és ötletes felhasználásával egyes speciálisabbnak tűnő esetben sikeresen kaptak választ konformációs kérdésekre. Minden egyes konkrét példa egyúttal mutatja a mátrixizolációs technikában rejlő lehetőségeket, bővíti a laboratórium rendelkezésére álló eszköztárat.

A 4.7. pontban leírt NIR (MIR) besugárzás nyújtotta különböző lehetőségeket, ezen belül kiemelten a lézert felhasználva a saját munkákon alapuló példákon keresztül és technikai trükköket is leírva megmutatja hogy a korábban elért eredményekhez képest további fontos információkhoz lehet jutni például konformerek megtalálásában. A több értékes eredményből levont következtetésekkel kapcsolatban az egyikkel kapcsolatban (ez a 4a tézispontban is megfogalmazódik) kérdés vethető fel. A 2-klór-propionsav NIR-lézer sugárzással kezelt MI-IR spektrum asszignációjából (74. oldal) egy olyan konformer (**3c**) jelenlétére következtettek, mely nem bizonyult minimumnak a (B3LYP/aug-cc-pVTZ) számítások szerint. Mindezt azzal magyarázták, hogy az adott szerkezet csak a mátrixban tud stabilan megmaradni, mátrixban kialakuló üreg nem teszi lehetővé a molekula relaxációját egy a gázfázisban is molekulaként viselkedő valódi minimumba. Noha a fenti magyarázat lehetséges, a leírtak alapján lehetséges, hogy az alkalmazott számítási szinten egy szerkezet nem minimum, ugyanakkor más szinten annak bizonyul. A jelen esetben például nem tartom kizártnak, hogy diszperzió-korrigált funkcionált, vagy MP2 módszert használva a **3c** szerkezet minimumnak adódna.

5. Biomolekulák vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával fejezet.

5.1. Aminosavak konformációanalízise fejezet:

A fejezetben leírtak egyértelműen bizonyítják, hogy a jelölt laboratóriumában elért eredmények jelentősen gyarapítják a korábbi ismereteket, amelyhez a korábbi fejezetekben leírt élenjáró módszerek használata adott lehetőséget olyan sokat vizsgált alpmolekulák esetén, mint a glicin vagy az alanin.

A 79. oldalon szereplő mondathoz „Ha a termikus korrekciókat is figyelembe vesszük, azaz szabadentalpiával számolunk...” megjegyezném, hogy a termikus korrekció eredménye nem feltétlenül a szabadentalpia, melyet az entalpiából TS „korrekcióval” kapunk. Létezik, és használatos fogalom az energia termikus korrekciója is, mely a totálenergiához a zérusponti rezgési járulékokon túlmenően hozzáadja az egyes (rezgési) nívóknak egy adott hőmérsékleten való statisztikus betöltöttségéből következő energiajárulékot. Ha ezen termikus korrekciókat vesszük figyelembe, még nem jutunk el a szabadentalpiához.

5.2. A glicin UV-fotolízise fejezet:

A glicinnek, mint egy alpmolekulának a fotolízis vizsgálatát, a korábbiakhoz képest pontosabb, informatívabb spektrumok felvételét jelentős eredménynek tartom. A vizsgálat során sikerült a korábbiakban nem (meggyőzően) azonosított metil-amint megtalálni, azonban a jelölt nem említi, hogy a korábbi kísérletekben megtalált ammóniát, vagy a feltételezett egyéb bomlásterméket (imin stb.) sikerült-e megtalálni a saját vizsgálat körülményei között.

Nem egészen világos számomra a fotoionizációs kísérlettel (Schwell munkája) való összevetés. A fotoionizáció során először egy glicin gyökkation képződik, melynek bomlástermékeit vizsgálják tömegspektroszkópiával. A gyökkation bomlása nem hasonlít szükségszerűen a gerjesztett állapotú molekula bomlásához. A két reakcióút között akkor vélelmezhető hasonlóság, ha a glicin első gerjesztett állapota Rydberg-jellegű. Ez volna a helyzet?

A 99. oldal 1. bekezdés végén szerepel a következő mondat egy a COOH bomlásáról:
„... alacsony hőmérsékleten nem mehet végbe, mivel ez egy erősen exoterm reakció.”

Kérem, fejtsse ki részletesen, mit ért ezen kijelentés alatt!

5.3. Modellpeptidek konformációanalízise fejezet:

Ezen fejezet eredményei igen érdekesek, hiszen az itt megjelenő szerkezeti jellemzők a valódi peptidek szerkezetét is jelentős mértékben meghatározhatják. Különösen érdekes, hogy viszonylag sok modellpeptidet sikerült vizsgálni, s a témakörből több közlemény is született, ezzel általános megállapítások megtételére is lehetőséget nyitva.

A fejezet esetén különösen szembetűnően jelentkezik az a probléma, hogy a tömörségre való törekvés különösen szerkesztési hibákkal párosulva az olvasást megnehezíti, és összességében a leírt eredmények mennyiségének növelése magának a dolgozatnak az értékét nem emeli. A 103. oldalon az A-Gly-NHMe rendszer tárgyalása hirtelen átvált az Ac-L-Ala-NHMe rendszer tárgyalásába, még külön bekezdés sem könnyíti meg az olvasó dolgát. A 110. oldalon az U jellel jelölt Ac-β-HGly-NHMe konformerek egy mindössze öt soros bekezdésben történő tárgyalása a másik oldalra elhelyezett vonatkozó 5.3.12. ábra megemlézése nélkül szintén inkább nehezíti, mint könnyíti a megértést. A fentiek elhagyása árán nyert helyen talán be lehetett volna mutatni összefoglalóan a preferált szerkezeti elemeket, melyek a jelen munkák alapján a különböző modellpeptidek esetén kedvezményezettek.

A 103. oldal 5.3.3. ábráján a súlyfaktorokkal összegzett számolt (e ábrarész, folytonos vonal) spektrumban kb. 1490 cm^{-1} -nél egy intenzív sáv található meg, melynek nincs nyoma az MI spektrumokban. Kérem jelöltet, hogy diszkutálja ennek vélhető okát (dimerizáció? A

számítások által túlbecsült intenzitás? A számítások hibájából adódó pontatlanság a relatív energiák és így a súlyfaktorok megállapításánál?)

A fejezetben tárgyalt rendszerek esetén a számított relatív energiák alapján meghatározott súlyfaktorokat használják a mért spektrumok szimulációjára. Ez általában a B3LYP funkcionál felhasználásával (különböző bázisokon) kapott eredményeket jelent. Ismert tény, hogy ezen funkcionál diszperziós hatásokat rosszul ír le, és ennek a nagyobb rendszerek esetén (véltőleg ide tartoznak a prolint tartalmazó rendszerek) a konformerek relatív energiáját a számítások pontatlanul becslik. Erre a kísérleti eredményekkel való összehasonlítás után többször történik utalás. Történtek-e/történnek-e próbálkozások diszperziós korrekciót tartalmazó funkcionálok használatára?

5.4. Modellpeptidek vízzel alkotott komplexeinek vizsgálata fejezet:

A vízzel alkotott komplexekről leírt eredményeket nagyon fontosnak tartom, hiszen a valós biológiai rendszerekben is ilyen kölcsönhatásokkal kell számolni, és a jelölt vizsgálatai is egyértelműen mutatják a vízzel való kölcsönhatás szerepét a modellpeptidek szerkezetére.

A fejezetben leírtakkal kapcsolatban az a kérdés merült fel, hogy míg a (hőkezelt mátrix) kísérleti spektrumának hozzárendelése során vízklaszterekre utaló spektrális jellemzőket találtak (5.4.2. ábra legfelső részlete), addig a számításoknál csak egyetlen vízmolekulával való kölcsönhatást tételeztek fel. Tekintettel arra, hogy az egy vízmolekulával optimált szerkezetek közül nem mindenhol lineárisak a protonhidak, elképzelhető, hogy víz dimerrel stabilabb szerkezetekhez lehetne jutni.

5.5. Nukleobázisok fejezet:

A fejezet bevezetésében szerepelnek a tautomerek kialakulásának fontossága a genetikai kód hibáinak szempontjából, illetve a karcinogén hatást kiváltó UV fény hatására bekövetkező fotokémiai tautomerizáció vizsgálata. Noha az UV spektrum pontos megértése valóban fontos kiinduló lépés a fotokémiai folyamatok leírásához, úgy vélem, hogy a jelen fejezet végén leírtak legfontosabb eredménye nem annyira a fotokémia megértésének előkészítése, hanem az, hogy a kísérletileg meghatározott tautomerarány (és a szimulált spektrum) segítségével a korábbiaknál pontosabban le tudták írni az UV spektrumot, beleértve a 210 nm körül mutatkozó vállat, alátámasztva egyúttal a jelölt által korábban körültekintően meghatározott tautomerarány helyességét.

A 121. oldalon második bekezdésben szereplő **3b** vélhetőleg **3a** (lásd Bírálati függelék: sajtóhibák). Hiányolom annak indoklását, **3b**-t mely az 5.5.1 táblázatban, illetve vélhetően (lásd Bírálati függelék: sajtóhibák) az 5.5.2. táblázatban mint második **3a** oszlop miért nem vizsgálták?

Az 5.5.3. ábrán szereplő szimulált spektrum elnyelése 150 nm-nél kisebb hullámhosszakon gyakorlatilag 0-vá válik. Ennek nyilvánvaló oka, hogy a számítás során véges számú gerjesztést, vettek figyelembe (energiasorrend szerint). Nyilvánvaló, hogy a molekulának a VUV tartományban is jelentős elnyelése van, ott további átmenetek találhatók. Szerencsésebb lett volna mindezt jelölni, pl. a 200 nm alatti szimulált spektrumot szaggatott vonallal, és egy vonatkozó megjegyzéssel ellátva. Valószínűsíthető, hogy a kísérleti spektrumon 200 nm alatt induló, s az ábráról a többi spektrumtartományhoz képest nagyobb zajt mutató letörés sem feltétlenül csökkenő intenzitást mutat, hanem a mátrix kezdődő elnyelése miatti mű-jel.

6. Alagúthatással történő konformációváltozás vizsgálata mátrixizolációs technikával fejezet:

A fejezetben összefoglalt eredmények a korábbiakban már ismertetett MI technikával izolált karbonsav funkciót tartalmazó molekulák (2-klór-propionsav, glicin, alanin, cisztein) alagúthatással történő cisz – transz átalakulásának (az OH csoport hidrogénjének helyzete változik) vizsgálatával foglalkozik. A jól szerkesztett és megírt fejezetben a jelölt megállapítja, hogy a vizsgált molekula szerkezetén kívül a mátrixüreg jelentős szereppel bír az alagutazás sebességére. Különösen érdekes, hogy lassú folyamatokban (mintegy 4 nap mérési idővel) lejátszódó folyamatokat is vizsgáltak. Ennek kapcsán említi a jelölt, hogy hosszabb mérések esetén a mátrix stabilitása már problémát okozhat. Kérdésem, hogy a mátrixstabilitás kvantifikálható-e, a jelöltnek vannak-e a saját készüléken erre vonatkozó vizsgálatai, illetve a párolgásból, stb. adódó mátrixinstabilitás korrekcióba vehető-e?

Végül egy általánosan megfogalmazódó kérdés. A MI technika során ismétlődően felmerül az „üreg effektus”, vagyis a vizsgált célmolekulának az öt körbevevő mátrix molekuláival való kölcsönhatása a mátrixmolekulák különböző elrendeződése esetén. Felmerül a kérdés, hogy a különböző mátrixmolekulák kedvezményezett elrendeződésére léteznek-e valamilyen ismeretek (pl gömbszerű, hengeres stb. üreg). Milyen próbálkozások történtek a különböző mátrix-üregek és bennük helyet foglaló molekulák modellezésére elméleti kémiai számításokkal (a 24. oldalon található egy folyamatban lévő számításokra vonatkozó utalás)? Hasonló vizsgálatok vízklasszeterkben kialakuló üregekre, és azokban elhelyezkedő molekulákra ismertek.

A dolgozat kapcsán szeretném megjegyezni, hogy noha egy értekezés a lezárt eredményeket kell számba vegye, a jelen munkában sok helyen szerepelt utalás folyamatban lévő munkákra, illetve jövőbeni tervekre. Én ezeket a tulajdonképpen formabontó

megjegyzéseket örömmel olvastam, hiszen ezek mutatják a Tarczay-laboratórium munkájában rejlő potenciált.

Össességében Tarczay Györgyöt „Kísérleti és elméleti molekulaszpektroszkópai vizsgálatok III” című dolgozata, és a benne leírt munka alapján messzemenően érdemesnek tartom az MTA doktora cím megszerzésére. A nyilvános védés kitűzését és a cím odaítélését javaslom.

Nyulászi László

Budapest, 2014 december 30

Bírálati függelék:

Sajtóhibák, szerkesztési pontatlanságok:

15. oldal 3.1.2. táblázat fejléce: ... alaprezéseinek eltolódása (in cm^{-1} –ben)

16. oldal 9. sor: — a HSNC és a HSNC izomerek

16. oldal 3.2. Nitril-szulfidok és tiazirinok fejezet 1. sora: tiofulminsav (HNCS)

17. oldal 3.2.1. ábra: Az aláírás hibás, az n, illetve m betűvel jelölt spektrumok nem szerepelnek, k és l kétszer szerepel.

29. oldal 3.2.6 és 3.2.7 táblázat aláírásaiban a 3.3.5 táblázat lábjegyzetre való hivatkozás helytelen.

33. oldal 3. sor: A HNCX és NXNC között...

45. oldal: 3. 4. 3 ábraaláírásáról hiányzik a c ábrarészlet megadása.

46. oldal 3.4.2 táblázat: CH_3CNSe helyett NCCNSe

47. oldal: több ízben szerepel a [2N,2C,2X] szimbólum, amikor valójában egyértelműen a kénvegyületről ([2N,2C,2S]) van szó.

54. oldal: 3.6.2 ábra aláírása, hiányzik az a – e jelölések magyarázata.

63. oldal: (karcolásmentes ablak)

63. oldal: Több ízben szerepel a robusztus, egy alkalommal a robusztus kifejezés.

79. oldal 5.1.1. ábra: Hiányzik a mértékegység (kJ/mol?) megadása.

103. oldal 5.3.3. ábra: A szövegben szerepel, hogy az ábrán látható az amid A tartomány, azonban az ábrán ez a tartomány nem szerepel.

104. oldal: A CHCl_3 dipólusmomentuma nem erősebb, hanem nagyobb a DCM-nél.

104. oldal alján szereplő mondatnak nincs értelme.

106. oldal: 3.5.5 ábra helyesen 5.5.5. ábra

109. oldal: kromofórcsoport külön írva nekem szebben mutatna.

115. oldal 5.4.2. ábra: Az ábra aláírásában szereplő a), b) és c) ábrarészek az ábrán magán nem szerepelnek, így csak kitalálni lehet, hogy melyik ábrarészen mi szerepel.

119. oldal: 5.5.2 ábra aláírása glicin helyett citozin.

120. oldal: 5.5.2 ábra aláírása cisztein helyett citozin ugyanitt az utolsó oszlop **3a** helyett **3b**

121. oldal 2. bekezdés: A szövegben két ízben szereplő **3b** valószínűleg **3a**, ekkor a szöveg érthetővé válik, és ekkor a szövegben leírt adatok megegyeznek az 5.5.1 táblázatban szereplő adatokkal.

132. oldal: 10. sor: $48,0 \pm 1$ órát, and $99,3 \pm 2$ órát

