

## **Birálat, Kunsági Máté Sándor: Anyagszerkezet vizsgálatok kvantumkémiai módszerekkel, című PhD értekezés tézisére.**

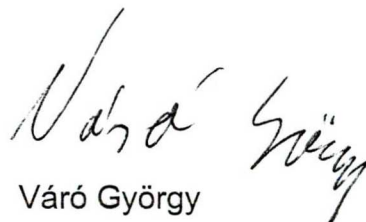
A 90-es évek elején sikeresen megvédett doctor univ. fokozat PhD fokozattá történő átminősítése céljából benyújtott tézis szép tudományos tevékenységet takar. A tézis 1993 - 95 között megjelent három cikkre (melyek össz impakt faktora: 2.88) és 95 - 96 között közlésre benyújtott három cikkre (melyek potenciális impakt faktora: 8.35) épül. A dolgozatok molekulaszervezet vizsgálatokat tartalmaznak, kvantumkémiai számítások segítségével. Ez részben kapcsolódnak a doctor univ. címért beadott "Adalékok a fluoreszcencia polarizációjának elméletéhez", amennyiben a fluoreszcencia polarizáció molekulaszervezeti okokra vezethető vissza, ahogy ezt a jelölt a tézisek megfelelő részében megmutatja. A tézis kivitelezése nagyon szép, a színes ábrák szemléletessé teszik a dolgozatot.

Az eredmények első három pontja a már megjelent cikkek anyagára támaszkodik, néhány komplexebb szerves molekula konformációváltásait tárgyalva, ezek protonáltsága függvényében. Az utána következő pontokban (4.-11.), a jelölt a GaAs kristály felületére kerülő  $As_2$  molekula reakcióútjával kapcsolatos elméleti vizsgálatait írja le, a molekulának a kristály felületbe való beépülése során. Ezek a tézispontok a közlésre benyújtott cikkekre támaszkodnak.

Két kérdésre szeretnék választ kapni a jelölttől. A tézis benyújtása óta változott-e a három közlésre benyújtott cikk státusza? Főleg arra gondolok, amelyet még 1995-ben nyújtott be. Nem tudom, ezen a tudományterületen mi a szokás, de általában egy éven belül el szokott dőlni, hogy a cikket elfogadják-e vagy sem.

A tézis 13. oldalán van egy állítás, mely szerint a felülettől 8 Å-nél nagyobb távolságra az ab-initio és az általuk kidolgozott számítási módszer a Lennard-Jones függvények felhasználásával, jól megegyeznek. Ez igaz, de amint a 10. ábra mutatja, itt már mindkét számított érték közel nullára esett. Kisebbs távolságnál viszont az eltérés a két különböző módon számított energiában nagy és a két módszer különböző távolságot ad az energia minimum helyére, vagyis a bekötődési távolságra. Tudná-e ezt kommentálni? Ezt azért is érzem fontosnak mert a 9. pontban említi, hogy az általuk kidolgozott módszert használja a lépcsős felületekre végzett számításoknál.

A tézisekben bemutatott anyagot alkalmasnak tartom a nyilvános védésre és sikeres védelem esetén javaslom a jelölt munkája alapján, a PhD fokozat odaítélését.



Váró György  
fiz. tud. doktora

Szeged, 1997 nov. 24

XII. 12-én jön vissza!

## OPPONENSI VÉLEMÉNY

Dr. Kunsági-Máté Sándor

egyetemi doktori címének Ph.D. fokozattá való  
átminősítése érdekében benyújtott téziseiről

Tézisfüzetében Dr. Kunsági-Máté Sándor nem foglalta be tézisei közé egyetemi doktori értekezésének eredményeit, csupán az "Előzmények" -ben tesz említést róluk. Ez formai hiba (ld. "A doktori képzés...szabályzata, JATE", 17.§ (6) pont), ugyanakkor annyiban érny is, hogy a Ph.D. fokozat megszerzésének publikációs követelményeit a Jelölt egyetemi doktori értekezésének megvédése (1993) óta kifejtett munkájával (is?) teljesíti: a tézisek publikációs listája 3, referált nemzetközi lapban közölt cikket tartalmaz (bár ezek egyikét (Colloids and Surfaces A, 1993) nem használja fel a tézisekben), emellett 3 közlésre *beküldött* cikket és számos konferencia-anyagot találhatunk benne. A számomra megküldött anyag a társszerzők lemondó nyilatkozatait nem tartalmazza. Nem találtam benne utalást a Jelölt egyetemi doktori értekezésének megvédése *előtti* (pl. az említett értekezésben felhasznált) publikációira. Csupán érdeklődésből kérem, közölje ezek listáját. A tézispontok túlnyomó részét (3.-11.) megjelent, vagy közlésre elfogadott, referált folyóiratcikk nem támasztja alá, csupán a közlésre beküldött cikkekben és néhány hazai konferencia-anyagban szerepelnek (legalábbis az 1996-os keltezésű Tézisek szerint). Ezzel kapcsolatban **megkérdem**: (1) Mi lett a sorsa a közlésre beküldött kéziratoknak?

A továbbiakban nem foglalkozom a számomra egyébként megküldött, logikus, precíz, átfogó irodalmi ismereteket és széleskörű, igen alapos munkát tükröző, világosan megírt egyetemi doktori disszertációval, mivel annak bírálata nem feladatom. (Ezt igen sajnálom, mert saját érdeklődési körömhöz jóval közelebb esik, mint a kvantumkémia. Remélem, ez utóbbi tudományterületen opponenstársam otthonosabban mozog, mint én.)

Kunsági-Máté Sándor nyilvánvalóan folyamatos tudományos kutatómunkát végez egyetemi doktori címének megszerzése óta, olyannyira, hogy szinte teljesen más tudományterületre, a kvantumkémiai módszerekkel végzett anyagszerkezet vizsgálatokra váltott át. Bár a tézisekben részletesen megmagyarázza, mi vezette őt a spektroszkópiától idáig, mégsem látok olyan szoros kapcsolatot a jelen tézисjegyzék és a spektroszkópiai tulajdonságok között, ami a tézисfüzet alcímét indokolná. Az új téma választása igen szerencsés: modern, emellett széleskörű érdeklődésre tart számot, hiszen a fizika, a kémia, a biológia tudományának, valamint ezek gyakorlati alkalmazásainak rendkívül széles területein nyilvánvaló az igény az anyagszerkezet kvantumkémiai vizsgálatára, s ezt az igényt a kvantumkémia és a számítástechnika mai fejlettségi szintjén egyre inkább ki is lehet elégíteni.

Az elért eredményeket a téziszűzet logikusan, lényegretörően fejt ki. Formája szép, külön ékességei a gondosan elkészített, színes (!) ábrák. A benne leírt tézisek azonban, sajnos, nem elegendők az eredmények megértéséhez és megítéléséhez, még a mellékelt publikációkkal együtt sem, mivel több tézispont (pl. a 7. és 8.) kifejtése még azokban sem található meg. Igen zavaró formai hiba, hogy a tézispontokból hiányzik a hivatkozás az azokat alátámasztó saját publikációkra. Megjegyzem, hogy a tézisekben az ilyenkor kötelező egyes szám első személyű igealakok helyett többes szám első személyűket használ a Jelölt, amit szerénységének tudok be. A beadott anyag általában gondos munka eredménye, bár akadnak benne "gondatlanságok", pl.: az 1994-es J. Mol. Struct. cikkben számos helyen (pl. Table 3) előfordul, hogy az eV és kcal/mol egységben egyaránt feltüntetett energiaértékek megadásának pontossága szembeszökően eltérő, olyannyira, hogy az eV -ban 2 értékes jegyre közölt adat pontossága a kcal/mol -ba való átszámítás eredményeképp 5 értékes jegyre javul..., a közlésre beküldött (itt jegyzem meg, hogy "sended" igealakot (Tézisek 17. o., mindhárom alkalommal) az angol, azt hiszem, nem ismer, helyette pl. a "submitted for publication", vagy -mivelhogy a Tézisek nyelve magyar- sokkal inkább a "közlésre beküldve" megjelölést kellett volna használni) kéziratok angolsága, valamint a gépelés gondossága nem üti meg az ilyenkor elvárható szintet (pl. az előbbire ld. a [6] cikk (Tézisek 17. o.) "Conclusion" -jét, az utóbbira az [5] "Abstract" -jét).

A Jelölt szemiempirikus MINDO/3 módszerrel kiszámította, hogyan változik meg a vizsgált fluorofór molekulák konformációja protonáció hatására, milyen az energetikai szempontból kedvezményezett protonálódási út, hogyan függ a molekula teljes energiája, egyes atomjainak töltése, valamint a molekula egyes részein elhelyezkedő atomok össztöltése a szabad gyűrű elfordulási szögétől (1.-3. tézispont). Ezek az eredmények elősegítik a fluoreszcencia jellemzőkben megfigyelt változások, a protonációs folyamat, valamint a katalízis mélyebb megértését. A modern félvezetőipar egyik (különösen a nagyfrekvenciás ill. a nagysebességű infravörös adatátviteli alkalmazásokban) legfontosabb anyaga, a gallium-arzenid kristály növesztésével, a kristály felületi sajátságaival kapcsolatos kérdések tisztázásában nyújtanak segítséget a 4.-11. tézispontokban leírt vizsgálatok. Ezek során a Jelölt *ab initio* módszerrel meghatározta egy  $As_2$  molekulának a kristály felületéhez vezető reakcióútját és kölcsönhatási energiájukat. *Ab initio* módszerrel nagy pontossággal kiszámította az egyes atom-párok kölcsönhatási energia-görbéit, ezekre Lennard-Jones típusú potenciálfüggvényeket illesztve előállította e párpotenciálok analitikus alakjait, amelyek segítségével meghatározta a kristály felülete feletti potenciális energiateret mind sík, mind pedig lépcsős felület esetére. Megállapította, hogy a sík felület feletti tér -amint az várható- a kristályszerkezet rendezettségét tükrözi, magyarázatot adott arra, hogy a kristály növesztése során a felületen miért nem alakulnak ki 10-15 atomi rétegnél magasabb lépcsők, és miért nem juthatnak felületi diffúzióval az egyik lépcsőről a másikra az arzénatomok. Mindezeket jelentős, új eredményeknek fogadom el.

További kérdéseim a következők:

- (2) A kapott anyagban nem ismerteti a szemiempirikus számításai során használt MINDO/3 módszert. Kérem, tegye ezt meg!
- (3) Megerősítik-e kísérleti tények az 1. tézispontban felsorolt eredményeket ("...megállapítottuk, hogy az irodalmi adatokkal ellentétben..."; az idevágó cikk ui. csak a Theochem. -ben közölt, tehát valószínűleg elméleti alátámasztásra hivatkozik)?
- (4) Miért tér el szembeszökően a protonált 2,2'-bipiridil molekula teljes energiáját a torziós szög függvényében megadó görbe lefutása a tézisekben (2. ábra piros görbéje; ennek  $180^\circ$  -nál MAXIMUMA van) az 1995 -ös Theochem. -cikkben (Fig. 2; ezen viszont MINIMUM látható  $180^\circ$  -nál) közölttől?
- (5) Kérem, mutassa be, hogyan illeszkedik az *ab initio* módszerrel kiszámított párpotenciálokhoz az optimalizált paraméterű Lennard-Jones függvény! Mennyiben igazolja a Tézisek 10. ábrája a 6. tézispont utolsó mondatának állítását?
- (6) A 7. és 8. tézispontok a kapott anyag alapján (nem szerepelnek a közlésre beküldött cikkekben sem) nem ítélték meg. Kérem, fejtse ki ezeket részletesen!
- (7) Mennyiben számít újdonságnak, hogy a 9. tézispont szerint "... a potenciális energiatér feltérképezésével a molekulát megközelítő részecske (pl. katalizátor) támadáspontja is meghatározható", tekintettel arra, hogy az ionok vagy ionikus szubsztrátok molekulák felületéhez való kötődését (pl. biológiai makromolekulák esetén; ld. pl. Tiede, D. et al. Biochemistry 32, 4515-4531 (1993)) már régóta a felület elektrosztatikus potenciáltérképe alapján vizsgálják?

A fentiek alapján megállapítom, hogy Dr. Kunsági-Máté Sándor bemutatott anyaga nyilvános védeésre alkalmas, annak sikeres lezajlása esetén javasolom számára a Ph.D. tudományos fokozat odaítélését.

Szeged, 1997. december 5.



Laczkó Gábor  
a fizikai tudomány doktora