

BÍRÁLAT

Lakk-Bogáth Dóra

NEM-HEM VASTARTALMÚ MODELLEK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS GYAKORLATI ALKALMAZÁSAI

c. PhD értekezéséről

Lakk-Bogáth Dóra PhD kutatását a Pannon Egyetem Szerves Kémia Intézeti Tanszékén végezte Dr. Kaizer József témavezetésével, egy olyan kutatócsoportban, melyből már számos, igen értékes munka került ki. Ez a dolgozat is szépen beleillik ebbe a sorba: a jelölt egy érdekes, biokémiai és ipari szempontból is fontos területen végzett részletes kinetikai vizsgálatokat, melyekhez a modern kinetika mérési- és számolási módszereit használta fel: nem-hem monovas-tartalmú enzimek szerkezeti modelljeként új, királis, ötfogú ligandumokat és vaskomplexeiket állították elő, amelyeket prekuzorként használtak királis oxovas(IV) intermedierek képzéséhez. Az oxovas(IV) komplexeket jellemezték szerkezetileg és kinetikailag is hidrogénatom- és oxigénatom-transzfer reakciókban. Emellett a ciklohexanon-származékok Baeyer-Villiger oxidációjára is új katalitikus rendszert vizsgáltak meg (katalizátorként egy nem-hem Fe(II)-komplexet, oxidálószerként dioxigént és redukálószerként aldehidszármazékokat alkalmazva). Mindezek alapján kijelentem, hogy a dolgozat és a mögötte lévő tudományos munka alkalmas arra, hogy ennek alapján a szerző megszerezze a doktori (PhD) fokozatot.

A dolgozat formai bírálatával kapcsolatban viszonylag egyszerű helyzetben vagyok, mert ugyanezen dolgozat előzetes bírálója is voltam, amikor is – az egyébként előzetes formájában is szép kivitelű dolgozathoz – javaslatokat tehettem, melyeket a jelölt nagyrészt elfogadott és a jelen dolgozatot már ennek megfelelően állította össze. Így aztán természetesen továbbra is fenntartom a dolgozat szerkesztésével, nyelvezetével, felépítésével kapcsolatos pozitív véleményemet.

Az értekezés megítélésem szerint minden tekintetben teljesíti a Pannon Egyetem által támasztott formai követelményeket. A témaválasztás időszerűségét a dolgozat háttérül szolgáló tudományos publikációk is egyértelműen bizonyítják.

Az értekezés irodalmi összefoglalója a témával összefüggő fontosabb tudományos előzményeket tartalmaz, s azokat elemző módon dolgozza fel. A kutatási célok megfogalmazása támaszkodik a már ismert tudományos eredményekre.

A munka során alkalmazott módszerek korszerűek, megbízhatók, alkalmasak a célokként megfogalmazottak vizsgálatára és a felmerülő kérdések megnyugtató megválaszolására.

A kutatási eredmények feldolgozása színvonalas. Az eredményeket a dolgozat szerzője – ahol lehet – összeveti a szakirodalomban megjelent, hasonló munkákban tapasztaltakkal. Mindezek alapján a levont következtetéseket, valamint a megfogalmazott tézispontokat megalapozottnak tartom. A tézispontokat új tudományos eredményként ismerem el.

A dolgozat táblázatai és ábrái egyértelműek, világosak, jól szerkesztettek és informatívak.

A hivatkozások megadása következetesen alkalmazza az irodalomban fellelhető több lehetséges formátum egyikét.

A dolgozat jól szerkesztett munka, tagolása követi a szokásokat.

A dolgozat külső megjelenése esztétikus, a szöveg stílusa nagyrészt megfelel a magyar tudományos köznyelvnek (néhány megjegyzésemért azért pontokba szedve sorolom fel).

Így is, hogy másodjára olvastam a dolgozatot, még merültek fel kérdéseim és megjegyzéseim, melyeket az alábbiakban írok le (a kérdéseket számozva is, a megjegyzéseket csak pontokba sorolva):

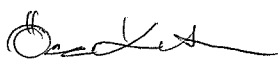
- 1) Tapasztalatai alapján az Ön rendszereinél a DFT számolással (pl. 39. oldal, 28. ábra) kapott eredmények jó összhangban vannak a kísérletileg meghatározott értékekkel? Mekkora eltéréseket tartana már jó egyezésnek a mért és a számolt értékek között?
- 2) A 7., 12.-16., 18.-19. táblázatokban az aktiválási paraméterek hibája véleményem szerint nem egészen van rendben: a $\Delta H^\ddagger$ és $\Delta S^\ddagger$ értékek hibájának a hányadosa meg kellene, hogy adja a mérések átlagos hőmérsékletét. (G. Lente, I. Fábián, A.J. Poë, *New Journal of Chemistry*, 2005, **29**, 759-760). Mivel magyarázza, hogy ez az eredményeinél nincs így? Hogyan történt ezeknek a méréseknek a kiértékelése? (Pl. a 38. ábrához és 12. táblázathoz tartozó eredeti adatsort a függelék 5. táblázatából (95. oldal) lehet kiolvasni, és erre nekem a következő aktiválási paraméterek jöttek ki nemlineáris illesztéssel: $E_A = (57 \pm 5)$ kJ/mol, $\Delta H^\ddagger = (54 \pm 5)$ kJ/mol, $\Delta S^\ddagger = (-72 \pm 17)$ J/mol/K (ez utóbbinál már az érték is más, mint a szerző által a dolgozatban megadott, nem csak a hiba)).
- A 7., 12.-16. és 18.-19. táblázatokban az aktiválási entrópiát 25 °C-ra adja meg, noha az Eyring-egyenletnek csak úgy van értelme, ha ez független a hőmérséklettől.

- A függelék 3. táblázatának (92. oldal) a fejlécében az szerepel, hogy 25 °C-ra vonatkoznak az adatok, ezzel szemben a táblázatban egy külön oszlopban szerepelnek a hőmérsékletek (298–313 K).
 - A 41. ábrán (49. oldal), 47. ábrán (53. oldal), 52. ábrán (56. oldal) az ábrafeliratban az olvasható, hogy „A megfigyelt reakciósebesség értékek (k_{obs}) ...”, valójában itt mindenhol a sebességi együttható értékeket ábrázolja a koncentráció függvényében. Érdemes ilyen esetekben ügyelni a pontos megfogalmazásra.
 - A 17. táblázatban (62. oldal) tizedespont szerepel vessző helyett.
- 3) A 80. oldalon azt írja le, hogy kalibráló oldatsorozatot készített a GC mérésekhez és belső standardot is használt. Ebből az következik számomra, hogy kvantitatív meghatározást is szeretett volna csinálni. Ugyanakkor az oxidációs reakciók vizsgálatánál az oldatösszetételben már nincs belső standard. Tényleg próbált kvantitatív kiértékelést csinálni? Miért „adta fel”?
 - 4) Ugyanezen az oldalon az UV-Vis kísérleteknél azt írja, hogy „Beleöntöttük egy 1 cm-es úthosszú küvetába mindkét oldatot, és hozzáadtuk a hidrogén-peroxidot, majd 0,5 percenként mintát vettünk.” Miért volt szükség mintavételre?
 - 5) A kísérleti rész szerint diódasoros spektrofotométert (Agilent8453) használt. Látt-e nyomát fotokémiai hatásoknak a kísérletei során?

Összességében úgy érzem, hogy az értékezés mögött jelentős és sokoldalú kísérleti munka áll. Kérdéseim és megjegyzéseim ellenére sincs kétségem afelől, hogy Lakk-Bogáth Dóra doktori értekezése és a mögötte álló munka alkalmas a PhD fokozat megszerzésére, ezért az dolgozatot

elfogadásra javaslom.

Pécs, 2018. szeptember 16.



Dr. Ősz Katalin

egyetemi docens

PTE, TTK, Általános és Fizikai Kémiai Tanszék