

Bírálat

Szávuly Miklós István *Peroxo-divas(III) intermedierek jellemzése és reaktivitása oxigén atom transzfer (OAT) és hidrogén atom transzfer (HAT) reakciókban c.*,
doktori (PhD) értekezéséről

Szávuly Miklós István a Pannon Egyetem Kémiai és Környezettudományi Doktori Iskolájában Dr. Kaizer József egyetemi tanár témavezetésével, egy már hosszabb idő óta nemzetközileg is elismert eredményeket elért kutatócsoport keretében végezte kutatómunkáját. Munkájának színvonalát jelzi, hogy az értekezésben is tárgyalt legfontosabb eredményei öt tudományos közleményben láttak napvilágot, melyek közül három a szakma kiemelkedő színvonalú, Q1 besorolású folyóiratában jelent meg. Ez egyrészt azt is mutatja, hogy a kutatott téma terület iránt komoly nemzetközi érdeklődés mutatkozik meg, másrészt pedig azt, hogy a Jelölt egyértelműen és magas színvonalon teljesítette a Pannon Egyetem doktori szabályzatában előírt publikációs követelményeket.

A Jelölt kutatásai kétmagvú μ -oxo- vagy/és μ -peroxovas-komplexek előállítására és jellemzésére, továbbá egyes szubsztrátumok oxigén atom transzfer (OAT) vagy hidrogén atom transzfer (HAT) révén történő oxidációjának vizsgálatára irányultak. Ennek keretében több új ligandumot és számos új vaskomplexet állított elő, melyeket kellő precizitással, több szerkezetvizsgáló módszer együttes alkalmazásával jellemzett. Megállapította, hogy ezek a komplexek részben Baeyer-Villiger típusú OAT reakciókban (ciklikus ketonok oxidációja), részben pedig hidrogén atom transzferrel lejártszódó oxidációkban (fenolok oxidációja) vesznek részt. Mindemellett kataláz típusú katalitikus aktivitást is mutatnak a H_2O_2 bontásában. Mindezt figyelembe véve joggal tekinthetők egyes természetes oxidoreduktáz enzimek szintetikus analógjainak, mind szerkezeti mind funkcionális szempontból. Különösen érdekes felismerés, hogy egyes μ -oxo- μ -peroxodivas-komplexek kettős reaktivitást mutatnak, mind nukleofil, mind elektrofil reakciópartnerrel képesek oxidációs reakcióba lépni.

Az értekezésben (és a kutatások alapján készült közleményekben) összefoglalt munka magas színvonalú. Egyaránt szerepelnek benne részletes reakciókinetikai vizsgálatok, spektroszkópiai és röntgendiffrakciós mérések és elméleti számítások, azaz a levont következtetések több oldalról is alátámasztást nyertek. Az értekezés szakmailag koherens, követhető felépítésű, nyelvezete méltó módon mutatja be azokat a szép kutatási eredményeket, melyeket Szávuly Miklós PhD kutatómunkája során elért.

A Tézisek jó mutatják be az elvégzett munka lényegét és valamennyi tézispontot új tudományos eredményként fogadom el. (Megjegyzem, hogy a magam részéről az új eredmények még feszebb megfogalmazásának, egyértelműbb kiemelésének a híve vagyok, de erről a közfelfogás nem egységes.)

Egy ilyen terjedelmű írásműben mindig lehet apróbb hibákat találni, bár az előzetes vitára készülve és azt követően a dolgozat ebből a szempontból rendkívül sokat javult. Mindössze néhány kisebb jelentőségű megjegyzésem, kérdésem van.

1. Az értekezés 48. oldalán található 43. ábra szerint az oxidálandó DTBPh-t (2,6-di-terc-butyl-fenol) a számítások során 1,3-di-terc-butyl-2-propanollal helyettesítették.

- Olyan nagy volt a számítási nyereség, hogy érdemes volt ezt a helyettesítést elvégezni? Hiszen az egyik vegyület aromás, a másik alifás és az -OH csoport savassága jelentősen különbözhet.

- A helyettesítés ellenére az ábrán az adatok a DTBPh és megfelelő származékai adataiként vannak feltüntetve. Véleményem szerint ez nem jogos.

2) A Rövidítések jegyzékében a 6-Me₂-BPP rövidítés bisz-(6-metil-2-piridilmetil)-amin-t jelöl. Ugyanakkor a 21. oldalon található 19. ábrán ugyanez a rövidítés egy 1,2-ciklohexándiamin származékhoz tartozik.

3) Apróság, de a gázkromatográfiás azonosításhoz használt kolonna valószínűleg nem Super Cowax 10, hanem Supelcowax 10 volt.

Mindent összevetve az értekezésben foglalt kutatási eredmények és a kiváló publikációs teljesítmény alapján Szávuly Miklós István doktori (PhD) értekezését elfogadásra javaslom.

Debrecen, 2019. október 21.



Joó Ferenc
prof. emer.
az MTA r. tagja