

Bírálat Szávuly Miklós István „Peroxo-divas(III) intermedierek jellemzése és reaktivitása oxigén atom transzfer (OAT) és hidrogén atom transzfer (HAT) reakciókban” című PhD értekezéséről

Szavuly Miklós PhD értekezését a Dr. Kaizer József egyetemi tanár által vezetett Kutatócsoportban, a Pannon Egyetem Kémiai és Környezetkémia Doktori Iskolájának hallgatójaként készítette el. A Kutatócsoport eddigi munkájával komoly nemzetközi elismerést vívott ki, az általuk hosszú ideje kutatott terület, a metalloenzim mimikumok előállítása, szerkezetvizsgálata és katalitikus aktivitásuk széleskörű, minden részletre kiterjedő jellemzése a modern kémiai kutatások egyik meghatározó vonala. Az értekezés témaválasztásának korszerűségéhez és időszerűségéhez tehát nem férhet kétség.

Az értekezés a tézisek négy angol és egy magyar nyelvű publikáció alapján készültek el, amelyek összesített hatása 12 feletti, és amelyek közül 4-nek a Jelölt az első szerzője, aki további két, a dolgozathoz közvetlenül nem kapcsolódó tudományos közlemény társszerzője is. Ennek alapján a Jelölt teljesítette a Doktori Iskola által a PhD értekezés benyújtásához szükséges tudománymetriai követelményeket.

Előbírálat A dolgozat előbírál

atát is én végeztem, jelen bírálatom első részében a Jelöltnek az előbírál

atban felvetett változtatási javaslatokkal kapcsolatos válasza

ira reagálok. A dolgozat és a téziszfüzetek átdolgozott változata alapvetően különbözött az előző verziótól, ez már sokkal kicsiszoltabb és gondosabban összeállított munka. Bár gépelési hibák itt-ott maradtak benne, számuk tolerálható. Örömmel nyugtáztam, hogy a Jelölt kérésemre megváltoztatta a dolgozat címét. A rövidítéseket tartalmazó táblázat a jelenlegi formájában már megfelel a célnak, bár a rRaman érzésem szerint még mindig hibásan szerepel benne. A Jelölt korrigálta az előbírál

atban kritizált ábra-számozási rutinját is, a mostani formában az ábrák számozása elfogadható. Jelentős mértékben javultak az ábraaláírások és a táblázatok aláírásai is, kár, hogy a végleges verzióban néhány ábra- ill. táblázat aláírása átcsúszott a következő oldalra. A szakirodalmi hivatkozások a végleges verzióban a szövegben is megjelenés sorrendjében szerepelnek (ez alól egy rövid bekezdés a kivétel a 8. oldalon). A Jelölt szemmel láthatóan erőfeszítéseket tett a matematikai egyenletek formattálásának javítására illetve a bennük valamint a szövegben szereplő rövidítések szinkronizálására ill. egységesítésére is. A vizsgált vegyületek jelölését illetve számozását is sikeresen megoldotta, jelen formájukban már jól követhetőek. A dolgozat Célkitűzése jelen formájában szintén elfogadható. Megelégedéssel nyugtáztam azt is, hogy a korábbi verzióból a Függelék részt jelentős mértékben átmozgatta a fő szövegbe, mint ahogyan azt is, hogy a kísérleti részt kéréseimnek többnyire megfelelően átdolgozta. Az Összefoglalás átdolgozott változata szintén megfelel az általános elvárásoknak. Az irodalmi hivatkozások formattálása a végleges verzióban egységes. Az értekezés korábbi verziójához képest a legjelentősebb változást a tézispontok megfogalmazásában érzékelttem. Jelen formájukban, mind tartalmi mind logikai szempontból megfelelnek az elvárásoknak.

A dolgozat végleges verziójának bírálata A dolgozat végleges verziója 143 oldalas, 119 irodalmi hivatkozást, 107 ábrát és 30 táblázatot tartalmaz. Tartalmazza a PhD értekezésekben szokásos indító formai elemeket: angol és magyar nyelvű összefoglalást, rövidítésjegyzéket, stb. A dolgozat érdemi része egy rövid, egy oldalas bevezetéssel kezdődik, amit egy közel 20 oldalas irodalmi áttekintés követ. Ebben a gazdagon illusztrált, szépen felépített fejezetben a Jelölt főként a metalloenzimek és modellvegyületeik bemutatására összpontosított. Az egy oldalas Célkitűzés fejezetben logikai sorrendbe teszi a dolgozatban vizsgált ligandumokat ill. komplexeket, azokat funkciójuk szerint is csoportosítva.

A dolgozat érdemi része (Eredmények és értelmezésük) 83 oldal terjedelmű, két alfejezetből áll. Az elsőben a dolgozat tárgyát képező Fe-komplexek kataláz aktivitását, hidrogén atom transzfer reakcióban való részvételét, a Baeyer-Villiger reakcióban mutatott reaktivitását, valamint az ambifil (μ -oxo)(μ -1,2-peroxo)-divas(III) intermedier reakcióit ill. elektrofil- és nukleofil tulajdonságait mutatta be. A második részben a Jelölt kísérletet tesz katalitikus rendszerek kidolgozására mono- és divas(III) tartalmú komplexekkel, alkoholok, szulfidok és 2-amino-fenol katalitikus oxidációjában.

Az eredmények bemutatását egy szépen megírt 16 oldalas kísérleti rész követi. Az 5 oldalas összefoglalás szép és igényesen összeállított befejezése a tekintélyes mennyiségű és komoly szakmai felkészültséget igénylő kísérleti munkát és nagyszámú új tudományos eredményt bemutató dolgozatnak.

A tézislevelet magyar és angol nyelven is rendelkezésemre bocsátotta a Jelölt. Tudományos eredményeit 5 fő- és 17 altézispontban foglalta össze. A tézispontok logikája követi a dolgozat érdemi részének felépítését. A tézispontokat elfogadom új tudományos eredményekként.

Az értekezés olvasása közben felvetődött kérdéseim.

1. Katalitikus kísérleteiket főként acetonitril oldószerben végezték, ugyanakkor a munka inspirációja nyilvánvalóan biológiai rendszereken, vizes közeg feltételezésén alapul. A munkából levont következtetések valamilyen formában átvihetők-e vizes közegre, illetve lát-e esélyt arra, hogy a munkában vizsgált reakciókat vizes közegben is tanulmányozhassa?
2. A 24. ábrán a kísérletileg kapott pontok és a kihúzott (számított?) vonal között jelentős, szisztematikus eltérés látszik. Hasonló figyelhető meg a 74. ábrán is. Mi erre a magyarázat?
3. A dolgozatban több ábrán is az O-H kötéserősség függvényében ábrázolta a $\log k_{ox}$ értékeket. Az O-H kötéserősségre vonatkozó adatokat hogyan határozta meg?
4. A 42. és 43. ábrákon a kataláz ill. a 2,6-DTBPh oxidációs reakciójára számolt gátak értékeit mutatja be. Pontosan milyen gátakról van itt szó és ebből hogyan következik pl. az, hogy a 2,6-DTBPh esetében az $S = 1$ spinállapot a kedvezményezett a reakció szempontjából?
5. A 64. ábrán bemutatott adatokat telítési görbéként értelmezi a szövegben, de az adatok az ábra alapján 32 és 42% között (feltehetően a kísérleti hibahatáron belül) nagyjából véletlenszerűen változnak, tehát állandónak tekinthetők. Biztos abban, hogy ez valóban telítési görbének nevezhető?

6. A 75. ábrán a 14. komplex kataláz aktivitás mintha maximum görbe szerint változna – ez valóban így is van vagy csak az ábrázolás hibája? Hasonló gondjaim vannak a 96. ábrán bemutatott görbével is.

Összegezve, a fent felsorolt kérdéseim és kritikai megjegyzéseim a dolgozat lényeges megállapításait nem érintik, az elvégzett munka mind mennyiségét mind minőségét illetően megfelel a doktori fokozat elnyeréséhez szükséges kritériumoknak. Sikeres védelem esetén támogatom a Jelölt számára a PhD cím odaítélését.

Szeged, 2019. október 15.



Dr. Sipos Pál
egyetemi tanár