

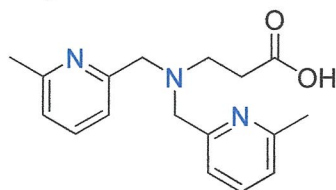
Válaszok Dr. Joó Ferenc bírálatában feltett kérdései:

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

A számítások során a 2,6-di-tercbutil-fenolt nem helyettesítettük 1,3-di-terc butil 2 propanollal. A 43. ábrán csak a jobb láthatóságért van így feltüntetve, mint a hogy a peroxo intermediereken is látszik nincsenek a ligandumok mind feltüntetve a rajzon, ami persze nem teljesen helyes, pl. R, R¹ stb. jelölést kellett volna használni, vagy megjegyezni az ábrafeliratban. A 73. hivatkozásban (M. I. Szávuly, M. Surducu, E. Nagy, M. Surányi, G. Speier, R. Silaghi-Dumitrescu és J. Kaizer, Dalton Trans. vol 45, pp. 14709-14718, 2016) az ábrafeliratban ez meg is van jegyezve.

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.

A rövidítés jegyzékben elírás történt és a szerkezet sem helyes valójában, a komplexképzéshez felhasznált ligandum a bisz(6-metil-2-piridilmetil)-amino-propionsav melynek rövidítése 6-Me₂-BPPH.



6-Me₂-BPPH

A szerkezetet és a rövidítést javítottam a 64-es irodalmi hivatkozás alapján (X. Zhang, H. Furuthachi, S. Fujinami, S. Nagatomo, Y. Maeda, Y. Watanabe, T. Kitagawa és M. Suzuki, J. Am. Chem. Soc., vol. 127, pp. 826-827, 2005.)

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

A GC mérések leírásánál a kolonna neve hibásan van megadva, a gázkromatográfiás mérésekhez Supelcowax 10 kolonnát használtunk.

Veszprém, 2019. 10. 22.

Szávuly Miklós István