

Válaszok Dr. Sipos Pál bírálatában feltett kérdéseire:

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?

A szakirodalomban találunk rá példát, hogy hasonló peroxo komplexeket részben vizes közegben vizsgálnak. A mi esetünkben/általunk vizsgált rendszerben a víz hatással van a peroxo részecske stabilitására, nagyobb mennyiségben, a peroxo gyorsan elbomlik, így nehéz a méréseket vizes fázisban végezni.

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?

A pontokra egyenest illesztettem excel segítségével az esetleges eltérések ezzel magyarázhatóak.

3. A dolgozatban több ábrán is az O-H kötése erősség függvényében ábrázolta a log k_{ox} értékeket. Az O-H kötése erősségre vonatkozó adatokat hogyan határozta meg?

Az O-H kötése erősségekre vonatkozó adatokat szakirodalomból néztem ki 84-es irodalmi jegyzék (Y.-R. Luo, Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies. Taylor & Francis: Boca Raton, 2007).

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?

A hidrogén atom absztrakció megvalósulásához szükséges potenciális energia értékek és a reakciógátak vannak feltüntetve. A 43. ábrán látható, hogy az S = 2 spinállapot esetében nem alakul ki hidrogénkött addukt a szubsztrátum és az oxidálószer között, valamint nem lehetett ezt a spin állapotot optimalizálni. A számolás során kapott összes energia érték az S = 1 spin állapotot részesíti előnyben.

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?

A százalékban kifejezett ¹⁸O beépülést ábrázolva a H₂¹⁸O-as víz koncentrációjának függvényében egy telítési görbét kapunk ez a 63. ábra. A 64. ábrán bemutatott adatokat a ¹⁸O beépülést ábrázolja a ciklooktén koncentrációja függvényében, amely valóban nem telítési görbe. Ez a szövegben el lett írva. A 64. ábra valójában azt mutatja, hogy a beépülés nem függ a szubsztrátum koncentrációjától.

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.

Valóban így van, a 75. illetve a 96. ábrán a kataláz aktivitása során egy telítési görbét kaptunk, amelynek maximum értéke van.

Veszprém, 2019. 10. 16.

A handwritten signature in blue ink, reading 'Szávuly Miklós', written over a horizontal dotted line.

Szávuly Miklós István