

VÁLASZ

Dr. Kégl Tamás

Keszei Soma József „Szenzorként alkalmazható ferrocénszármazékok előállítása”
című PhD értekezéséről írt bírálatára

Mindenekelőtt szeretném megköszönni Dr. Kégl Tamás bírálatát, illetve tanácsait és hasznos észrevételeit.

A válaszaim a bírálatban felmerült kérdésekre a következők:

1. *Az 5a és 5a' izomerek közti energiagát számítása tartalmazott-e oldószer korrekciót? A kísérleti és számításos eredmények elég jó egyezést adtak, azonban érzésem szerint (amennyiben ezek gázfázisú értékek) szolvatációval tovább lehetne pontosítani az aktiválási szabadentalpia értékét.*

Az 5a és 5a' izomerek közötti energiagát számítása sajnos nem tartalmazott oldószer korrekciót, aminek oka az volt, hogy a kísérletekben alkalmazott oldószerek kismértékű polaritása alapján csak mérsékelt oldószerhatásra számítottunk. Bírálom észrevételével egyetértek, a jövőbeli munkám során mindenképpen nagyobb hangsúlyt fektetek az oldószermodellek használatára, hiszen ilyen módon jóval pontosabb eredmények érhetők el.

2. *A Szerző a 38-39 oldalakon ezt írja: „Az optimált szerkezetből (33. ábra) látszik, hogy az 5a vegyülethez hasonlóan a pirimidingyűrű egyik nitrogénje és a C–N–C–N láncban távolabbi karbamid-nitrogén között egy belső hidrogénkötés alakul ki, így ebben az esetben is két izomer képzelhető el”. Az ilyen kérdések tisztázásához az egyik legalkalmasabb eszköz a Bader-analízis (más néven QTAIM módszer) mely rengeteg egyéb előnye mellett a kötésiútvonalakkal „láthatóvá” tudja tenni az intramolekuláris (és persze az intermolekuláris) hidrogénkötéseket. Sőt, az Espinosa-féle összefüggés segítségével (E. Espinosa, E. Molins, C. Lecomte, Chem. Phys. Lett., 1998, 285, 170.) a kötéskritikus pontban számított potenciális energiasűrűségből becsülhető az intramolekuláris hidrogénkötés energiája is. Történnek esetleg ilyen próbálkozások az intramolekuláris hidrogénkötések energiájának felderítése érdekében?*

A dolgozatomban bemutatott számítások jellemzően a kísérleti eredmények alátámasztását, valamint a vizsgált komplexek különböző tulajdonságainak összehasonlítását, tendenciák megfigyelését célozták, így nem tartottam szükségesnek az intramolekuláris hidrogénkötések energiájának becslését vagy meghatározását. Mindezek mellett, bírálom észrevételével teljes

mértékben egyetértek, az említett kvantumkémiai módszerek alkalmazása valóban rengeteg előnnyel jár, így a jövőben mindenképpen igyekszem beépíteni ezeket a munkámba.

3. Majdnem ugyanez a kérdés merült fel bennem a gazda-vendég komplexekkel kapcsolatban is (2. táblázat). A QTAIM számításokon kívül informatívak lehetnek még az NCI (noncovalent interaction) elektronszerkezeti számítások, melyek kitűnően alkalmasak a van der Waals kölcsönhatások vizualizálására is.

Ismételten szeretném megköszönni bírálóm javaslatát, az NCI elektronszerkezeti számítások lehetővé teszik a vonzó és taszító kölcsönhatások azonosítását, valamint ezek bemutatását is, ami további munkám szempontjából mindenképpen előnyös lehet.

4. Az NTO pályákhoz a Szerző egy próbaverziós szoftvert használt; csak megjegyezném, hogy ha rendelkezésre áll a GaussView program, akkor azzal is lehet NTO-kat megjeleníteni, amennyiben azok le lettek generálva a `pop=nto` paranccsal.

Sajnos a GaussView program jogtiszta verziója nem állt rendelkezésemre, ezért igyekeztem olyan szoftvert találni, amely alkalmas a kívánt számítások elvégzésére, valamint ábrák elkészítésére. Így bukkantam rá a Chemmision szoftverre, amely szerencsére nemcsak hogy alkalmasnak bizonyult a feladatra, de felülmúlta a várakozásaimat és nagyban megkönnyítette a munkámat.

Ismételten köszönöm Dr. Kégl Tamásnak munkám részletes és mélyreható elemzését. Az értekezésemről alkotott kedvező véleménye és hasznos észrevételei jelentős segítséget jelentenek számomra jövőbeni munkám pontosabb, hatékonyabb megvalósításában.

Veszprém, 2021. 06. 03.



Keszei Soma József