

Bírálat

Török Patrik "Szelektív metalloenzim-inspirált oxidációk" című doktori (PhD) értekezéséről.

Török Patrik PhD munkájában vastartalmú redoxi enzimek modelljeinek tanulmányozását, fejlesztését és finomhangolását tűzte ki célul a ligandumok széles spektrumának változtatása során. Az ilyen modellek fejlesztésének jövőbeni ipari alkalmazásai olcsóbb termékeket eredményezhetnek, kevesebb energia és vegyszer felhasználásával, ami alátámasztja a téma tudományos és társadalmi jelentőségét is. Eredményei várhatóan széleskörű tudományos érdeklődésre tartanak számot. Ezért minden olyan újszerű kutatás üdvözlendő, mely a jelen doktori értekezéshez hasonlóan e folyamatok mélyebb megismerését segíti. Török Patrik témaválasztása tehát igen szerencsés és időszerű.

A dolgozat felépítése, tagoltsága arányos, gondolatmenete logikus, stílusa magyaros, gördülékeny. A dolgozat hatalmas mennyiségű kísérleti munkát és annak eredményeit mutatja be, érdemi része 131 számozott oldalból áll, amit 8 oldalon keresztül a magyar és angol nyelvű tézisek, majd a jelölt publikációs listája követ. A dolgozat 136 számozott ábrát és 14 táblázatot tartalmaz, melyek egyértelműek és világosak. Az irodalmi áttekintés 33 oldalon át taglalja a témával összefüggő eddigi releváns eredményeket, 210 szabályosan hivatkozott publikációt felsorolva. Ilyen mennyiségű irodalmi adat jól érthető, kritikai elemző feldolgozása egyértelművé tette számomra, hogy Patrik elméleti felkészültsége a tématerületéről kiváló. A jelölt ezen előismeretek alapján fogalmazta meg munkája célkitűzéseit.

Az 5 oldalnyi Kísérleti rész fejezetben a jelölt leírja a prekursor komplexek és származékaik előállítását, és egy kissé szűkszavúan fogalmazva felsorolja az alkalmazott módszereket is. Mentségére, ezen módszerek többsége elterjedt és így jól ismert a kémiai kutatásokban. Patrik munkája során a kutatási céloknak megfelelő, megbízható és modern módszereket alkalmazott. Kísérletei megtervezésének, kivitelezésének, valamint az eredmények kiértékelésének, matematikai kezelésmódjának alaposágához nem fűződik kétségem.

A dolgozat legnagyobb terjedelmű fejezete a 67 oldalas Eredmények és értékelésük rész. Patrik az irodalmi adatokkal összevetve, itt mutatja be az előállított komplexek jellemzését, valamint alkalmazhatóságukat kataláz enzimmodelleként, szerepüket HAT és OAT reakciókban jodozobenzol jelenlétében, valamint a folyamatok finomhangolásának lehetőségeit koligandumok segítségével. Mindehhez még 13 oldalnyi függelék járul 8 ábrával és 22 táblázattal, melyek nagyban segítik az olvasót az eredmények megértésében. A másfél oldalas Összefoglalás fejezet lényegre törően mutatja be a legfontosabb tudományos következtetéseket, melyek a bíráló véleménye alapján helytállóak.

A bíráló összességében egy esztétikus kiállítású, jól érthető, magas színvonalú dolgozatot olvashatott el. A bemutatott munka értékes, és érdemes doktori fokozat megszerzéséhez történő benyújtásra.

A dolgozat témájához 8 nemzetközi folyóiratban megjelent tudományos közlemény kapcsolódik, melyek közül Patrik hatban első szerzőként szerepel. Ezek mindegyike megfelel a szakterület által előírt követelményeknek. Társszerzőségével öt további közlemény is megjelent. Továbbá 11 tudományos fórumon/konferencián is bemutatta eredményeit. Ezzel Török Patrik teljesítette a publikációs aktivitásra vonatkozó követelményeket.

A dolgozatban bemutatott eredményeket, melyeket Patrik 7 tézispontban foglal össze, mint új tudományos eredményeket elfogadom. A disszertációban következő új tudományos eredményeket tartom legfontosabbnak:

(1) Előállított olyan új prekursor komplexeket, melyek μ -1,2-peroxo-divas(III) intermedierekké történő átalakításuk után alkalmasak kataláz enzim modellezésére. Azt is kimutatta, hogy alkalmasan megválasztott koligandumok segítségével az intermedier nukleofil, ambifil vagy elektrofil karakterűvé alakítható.

(2) A prekursorokból jodozobenzol segítségével olyan enzimmodelleket alakított ki, melyek képesek változatos reakciók lejátszódását elősegíteni, mint pl. a részletesen bemutatott hidrogén-, vagy oxigénatom transzfer folyamatok. Ezen reakciók mechanizmusára is javaslatokat tett.

(3) Kimutatta, hogy a jodozobenzol jelenlétében képződő prekursorok reaktivitása finomhangolható koligandumok segítségével, amire útmutatást fogalmazott meg, valamint azt is igazolta, hogy a katalitikusan aktív részecske a Fe(III)-OIPh és nem oxo-vas(IV) részecske.

A dolgozat előbírálati folyamatában is részt vettem, és az ott felmerült szakmai kérdéseim többségére a benyújtott értekezésben választ kaptam, valamint a kért javítások nagyrészt megtörténtek. Jelen dolgozat elolvasása után mindössze néhány kérdés/megjegyzés fogalmazódott meg bennem, melyek a következők:

-A 43. oldalon azt írja, hogy a 34. ábrán a komplexek félérték potenciáljait a λ_{\max} függvényében ábrázolja, azonban az ábrán hullámszámok szerepelnek.

-Az aktív intermedierek képződése az egyik ligandum kilépésével jár a prekursor komplexből. A kilépő ligandumot nem jelöli a 35. és 39. ábrákon. Ezek a folyamatok reverzibilisek? Ennek jelentősége lehet-e esetleg a katalitikusan inaktív μ -oxo, μ -hidroxo komplexek keletkezésének visszaszorításában ligandumfelesleg alkalmazásával. Esetleg ugyanez megoldható lenne egy alkalmas koligandum segítségével?

-A 9. táblázatban a P_1 és P_2 intermedierek helyett valószínűleg a J_1 és J_2 intermedierek által katalizált reakciók aktiválási paraméterei szerepelnek.


-Az 56. ábrán a körfolyamatban hogyan alakul vissza az oxo-vas(IV) részecske a Fe(II) kiindulási állapotba?

-A HAT, illetve OAT reakciókra felírhatók az 56. ábrához hasonló körfolyamatok?

-Kialakíthatók-e az előállított komplexekből olyan katalizátorok, melyek dioxigént használnak fel oxidálószerként?

A fentiekben felsorolt kérdések és észrevételek a munka érdemi részét nem befolyásolják. Mindent összevetve az értekezést alkalmasnak tartom nyilvános vitára, majd azt követően az egyetemi doktori fokozat megszerzésére.

Szeged, 2025. október 17.


Dr. Gyurcsik Béla
egyetemi docens