

Válasz Simonyi Miklós, professzor emeritus tudományos tanácsadó bírálataira

Válasz

Simonyi Miklós, professzor emeritus tudományos tanácsadónak a „*Természetes eredetű és szintetikus heterociklusok sztereokémiai vizsgálata*” című MTA doktori értekezésemről írt bírálataira

Mindenekelőtt megköszönöm a Bírálómnak, hogy alaposan tanulmányozta az értekezésemet és méltatta kutatási eredményeimet, valamint felhívta a figyelmemet a dolgozatomban előforduló elírásokra és pontatlanságokra.

Bírálóm kérdéseire és megjegyzéseire az alábbiakban válaszolok:

1) *A bevezetésben említi, hogy az egyes kötés körüli rotáció konfigurációs különbséget okozhat, ha elég lassú ahhoz, hogy izolálni lehessen. Ez így igaz, de a kiroptikai spektroszkópia szempontjából nem csak az izolálható királis konformerek befolyásolják a spektrumot, hanem azok is, amelyek nemkovalens kötésekkel egy felületen (pl. fehérje molekulán) stabilizálódnak. Ez a jelenség nagyon látványos indukált CD spektrumokat hoz létre.*

Egyetértek a Bírálóm megjegyzésével.

2) *A papyracillánsav-metil-acetálja (66a) homokirálisnak bizonyult a papyracillánsavval (68. oldal). A vegyületekben 3 aszimmetriacentrum van, közülük a 4- és 7-szénatomok konfigurációja megegyezik, de a 6-metil ellentétes térállása miatt ezek inkább diasztereomerek.*

A **66a** papyracillánsav származék C-4 kiralitáscentrumához kapcsolódó metil csoport hátrafelé mutat, ami a túl rövid kötés és a felbontás miatt sajnos nem látszik egyértelműen az értekezésben. Így a **66** és **66a** származékok homokirálisok.

3) *A 73. ábra aláírásában a lila vonal nem 1'(R)-101, hanem 1'(S)-102, ahogy a spektrumon helyesen látszik.*

Bírálómnak teljesen igaza, a 73. ábra aláírásában (1'S)-**102**-t kellett volna a lila színnel jelölt spektrumhoz rendelni.

4) *A 94. ábrán a C8a,O1,C2,C3 torziós szög pozitív. Miért nem a magasabb CIP prioritású O1,C8a,C5a,O4 torziós szöget használja?*

A félszék konformációjú benzol kondenzált heterociklusok helicitásának jellemzésére hagyomány szerint az $\omega_{C_{8a},O1,C2,C3}$ torziós szöget használjuk, mivel ez tartalmazza a C-2 atomot, aminek pozíciója lényegesen eltér benzol gyűrű síkjától. A bíráló által javasolt $\omega_{O1,C8a,C5a,C4}$ torziós szög nulla körüli értéket adna.

5) *A c betű a 10. oldalon egyszer fénysebességet, egyszer koncentrációt jelöl.*

Valóban szerencsésebb lett volna külön jelölést használni a fénysebességre és a koncentrációra.

6) *A Fresnel egyenletben (11. oldal) λ_o a fény vákuumban mért sebessége cm-ben cm-ben mért sebesség nincs, a λ szimbólum a hullámhosszra van fenntartva.*

A fény vákuumban mért sebességének egysége a Fresnel egyenletben cm/s. A hiba az E. L. Eliel, S. H. Wilen: Stereochemistry of Organic compounds könyv vonatkozó részének fordításából adódott. Innen származik a λ_o jelölés is a fény vákuumban mért sebességére, amit valóban célszerűbb lett volna másképpen jelölni.

7) *Ugyanitt a fajlagos forgatóképesség számítására a koncentrációt nem g/ml-ben, hanem nehezen érthető történeti okokból g/100ml egységben mérik.*

A 11. oldalon a fajlagos forgatóképesség mérésére megadott képletben a koncentráció g/ml egysége helyesen szerepel. Ha a forgatóképesség mérésénél hagyományosan használt g/100 ml egységet akarjuk használni, akkor egy 100-as szorzót kell a képlet nevezőjébe helyeznünk.

8) *A közelmúltban Snatzke és munkatársai . . . ref. 78 (32-33. old). A hivatkozott dolgozat több mint 30 éves.*

A bírálónak igaza van, hogy egy több mint 30 éves cikk esetén a „közelmúlt” kifejezés nem helyénvaló.

Végezetül ismételtlen megköszönöm Bírálómnak, hogy a tudományos tevékenységemről elismerő véleményt alakított ki és támogatta a doktori értekezés nyilvános vitára bocsátását.

Debrecen, 2014. február 26.

Kurtán Tibor
egyetemi docens