



UNIVERSITAS SCIENTIARUM SZEGEDIENSIS
SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Tanszékvezető: Dr. Kiss Tamás egyetemi tanár

Opponensi vélemény Várnagy Katalin „Az Imidazolgyűrű szerepe a fémionmegkötésben: oldalláncban több donorcsoportot tartalmazó peptidek és származékaik átmenetifém komplexeinek egyensúlyi és redoxi sajátságai” című MTA doktori értekezéséről

Várnagy Katalin értekezését a Debreceni Egyetem Szervetlen é Analitikai Kémiai Tanszékén, a hazai bioszervetlen kémiai kutatások egyik elismert központjában készítette, ahol a fémionok peptidekkel való kölcsönhatásának vizsgálata hosszú évtizedekre tekint vissza. Ezekkel a vizsgálatokkal közelebb juthatunk a fémtartalmú fehérjék kötőhelyeinek általános sajátságait, törvényszerűségeit meghatározó tényezők megismeréséhez. A fémionok megkötésében meghatározó szerepet játszó egyik aminosav a hisztidin, illetőleg annak imidazol oldallánca. A jelölt több mint egy évtizedes munkájával arra vállalkozott, hogy természetes és szintetikus modell molekulák segítségével felderítse, hogyan befolyásolja a hisztidin aminosav száma, aktuális helye, környezete, stb. annak sajátságait a fémionok megkötésében és ennek milyen hatása lehet a metalloenzim vagy metalloprotein sajátságaira, pl. a redoxi tulajdonságaira, amit a CuZnSOD enzim esetén vizsgált. A 3-4. oldalon 7 alpontban megfogalmazott célkitűzéseit, amennyire azt egy kutatásról el lehet mondani, maradéktalanul teljesítette és számos új tudományos eredménnyel gazdagította a bioszervetlen kémia irodalmát.

Eredményeit jól felépített, arányos és annak ellenére, hogy egy nagy témakörrel foglalkozik eléggé olvasmányos értekezésbe foglalta össze. Ezt a sok magyarázó ábra segíti, de az, hogy a szerző az összefoglaló stabilitási állandó táblázatokat a dolgozat végén a mellékletben közli kifejezetten gátolják. A dolgozat nyelvezete magyaros. Két apró megjegyzésem van csak. A folyók szoktak zajlani a reakciók lejátszódnak. Másrészt a proteinnek van magyar megfelelője, ami csak elvétve használ a szerző. A határozott névelő használatával esetenként szűken bánik a szerző a határozatlannal viszont talán bővebben a kelletténél. Úgy érzem ez az angol nyelvismerettel általánosan terjedőben van. A dolgozat kivitele példamutató, elírás, nyomtatási hiba elvétve található benne.



UNIVERSITAS SCIENTIARUM SZEGEDIENSIS
SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Tanszékvezető: Dr. Kiss Tamás egyetemi tanár

Mielőtt a kérdéseimre rátérnék, még egy megjegyzésem volna. Nem hiszem, hogy a PSQUAD és a SUPEQAD számítógépes programok egymás továbbfejlesztett változatai volnának. Mindkettő ugyanarról az alapról a SCOGS programról indult és párhuzamosan fejlődtek a 70-es években.

A dolgozat olvasása közben a következő kérdések fogalmazódtak meg bennem.

1. Nem teljesen világos, hogy a Cu(II)-BPMA és Cu(II)-BIMA komplexek jelentősen eltérő $\log(K_1/K_2)$ értékeire vonatkozó értelmezés. Valószínűleg a szerző jót gondolt a ligandumok koordinációs fogszámáról, de pontatlanul fogalmazott. Elmondaná helyesen a koordinációs viszonyokat.
2. A Zn(II) komplexek NMR spektrális viselkedésénél lehetett-e a lassú csere tartományba eső folyamatokat megfigyelni, ami az NMR spektrumban egyértelműen megfigyelhető lett volna.
3. A szerző részletesen tanulmányozta a CuZnOD enzim szerkezeti modelljét, szerkezet kialakulását befolyásoló alapvető tényezőket releváns fémionok komplexeinél. Meglepőnek tartom ugyanakkor, hogy még csak kísérletet sem tett – legalább is értekezésében nem említi – hogy heterodinukleáris imidazoláto-hidas komplexek előállításával illetve oldatbeli vizsgálatával próbálkozott volna. Miért?
4. Azt találták, hogy a csak oldalláncon keresztüli koordináció esetén a koordinálódó imidazol-N-ek számának növekedésével nő ezen komplexek stabilitása és 4 Im-N esetén ez már a fiziológiás pH-n lejátszódik. Az 53. ábra szerint a többi komplex esetén pedig már savas pH-n. Nem világos a megfogalmazás, hiszen a nagyobb stabilitás kisebb pH-n való komplexképződésnek kedvez.



UNIVERSITAS SCIENTIARUM SZEGEDIENSIS
SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék

Tanszékvezető: Dr. Kiss Tamás egyetemi tanár

Az értekezés tézispontjait tartalmazó füzet a követelményeknek megfelel. A tézispontokba szedett megállapításokat új tudományos eredményeknek elismerem. A jelölt jelen értekezésben összegzett eredményei 26 nemzetközi folyóiratban megjelent közleményen alapulnak, melyből 13-nak első vagy levelező szerzője. Mindezek, plusz az a sok éves ismerettség alapján, amely során a jelölt egész szakmai pályáját végig követhettem úgy érzem meggyőződéssel javasolhatom Várnagy Katalin munkájának nyilvános vitára bocsátását és sikeres védelem esetén számára az MTA doktora fokozat odaítélését.

Szeged, 2014. február 2.

Kiss Tamás D.Sc.
Egyetemi tanár