

A bírálóbizottság értékelése

A bizottság elfogadja az Oláh Julianna által megfogalmazott 15 db tézispontot. Összefoglalásul a bizottság a következő fontosabb pontokat emelné ki, mint újonnan lefektetett tudományos eredményeket:

1. A citokróm P₄₅₀ enzimek reaktivitása kapcsán:

QM/MM számításaival Oláh Julianna kimutatta, hogy a citokróm P₄₅₀ enzimek esetén az egyes CYP izoformák aktív formájának reaktivitása nagyon hasonló, így metabolit prediktálás során gyakorlatilag ezek azonosnak tekinthetőek. Ezen felül rámutatott, hogy az enzimes család esetén nem mindig érvényes a közelség/reaktivitás paradigma. Eredményei alapján javaslatot tett arra, hogy a predikációs képesség növeléséhez célszerű lenne a metabolikus út átmeneti állapotainak szerkezetét is figyelembe venni dokkolásos vizsgálatok esetén.

2. Ezen irányhoz kapcsolatosan Oláh Julianna vizsgálta kétatomos gázok és hemtartalmú rendszerek kölcsönhatásait is, mely során a bizottság új tudományos eredményként értékeli, hogy kidolgozott egy olyan módszert, amellyel gázok és hemtartalmú fehérjék közti reakció mechanizmusa vizsgálható a gázok diffúziójának és a kémiai kötés kialakulásának figyelembevételével.

3. Feltérképezte az izopropil-malát dehidrogenáz enzim mechanizmusát is, melynek során azonosította a katalízisben szerepet játszó legfontosabb aminosavakat, és azt, hogyan fejtik ki katalitikus hatásukat.

4. Biomimetikus nitrógen-fixáló katalizátorok kapcsán meghatározta az **EP₃Fe-N₂**-típusú nitrógenfixálásra alkalmas bioszervetlen katalizátorok katalitikus ciklusának termodinamikai profilját, amely során két fő lépést definiált: a redukciós szakaszt és a regenerációs szakaszt. Kimutatta, hogy utóbbiban megszűnik a nitrógenredukció termodinamikai hajtóereje, és az itt keletkező intermedierok lehetnek a katalizátorok deaktivációjának és a hidrogénfejlődési mellékreakcióknak kiindulópontjai. Eredményei alapján megállapította, hogy az elegyben képződő hidrogén gáz katalizátorméregként viselkedik.