9. A tézisekben összefoglalt tudományos eredmények értékelése

(a bírálóbizottság állásfoglalása a jelölt téziseiről, az azokban lefektetett új tudományos eredményekről, a tézisek elfogadása vagy elutasítása, az értekezés tudományos eredményeinek tételes értékelése)

A Jelölt tudományos eredményeinek tézisszerű összefoglalása a Bizottság értékelése alapján a következő:

A Jelölt kutatási tevékenysége két fő részre bontható: eszköz- és módszerfejlesztés, illetve a szuperkritikus széndioxid (scCO2) felhasználási területeinek bővítése. Az értekezésben számos új tudományos eredmény került bemutatásra a szuperkritikus szén-dioxid különböző felhasználási lehetőségeiről. Ezek alapján a scCO2-ot három különböző szerepkörben használta: oldószerként, reagensként és kicsapószerként.

Tézisek és legfontosan kutatási eredmények összefoglalása:

1. **Jelölt munkája során elsőként valósított meg *in situ* rezolválást, diasztereomersó-képzést és a sóképzést követő extrakciós elválasztást tiszta szuperkritikus szén-dioxidban.**

Megállapította, hogy a CO2 nyomása befolyásolja a diasztereomer sók egyensúlyi arányát, és bizonyos nyomástartományban (10-22 MPa) a szelektivitás ugrásszerűen megváltozik. A fizikai paraméterek alapos vizsgálata eredményeként megmutatta, hogy 35-55°C hőmérséklettartományban – a nyomásváltozáshoz képest – a hőmérséklet változása kisebb mértékben befolyásolja a diasztereomer arányt.

A kutatások eredményei feltárták, hogy a rezolválószerként alkalmazott primer aminok felhasználása során a diasztereomer só kialakulásával járó reakció sebességmeghatározó lépése a karbamát köztitermék képződése.

1. **Szuperkritikus szén-dioxidot antiszolvensként alkalmazó, diasztereomer só kicsapásos kristályosítására alkalmas eljárást dolgozott ki.**

Az eljárás legfontosabb paramétereiként a nyomást, a hőmérsékletet, a szerves oldószer- és a sókoncentrációt jelölte meg.

Elsőként bizonyította, hogy a gyenge savak és bázisok sói megfelelő mértékben oldódnak scCO2-ban és alkohollal alkotott elegyeiben.

1. **A scCO2-ot alkalmazó diasztereomer képzésen alapuló eljárásokban keletkező szilárd fázisok vizsgálata segítségével, és a fázisdiagramok ismeretében arra a következtetésre jutott, hogy a rezolválási rendszer optimálása és a hatékonyságának növelése megvalósítható.**

Röntgen pordiffrakciós mérések alapján valószínűsítette, hogy a *transz*-ciklohexán-1,2-diol borkősavval csak egyféle stabil diasztereomer komplexet képez. Erre a megfigyelésre építve egy, az eddig rendelkezésre álló ismert eljárásoknál gyorsabb és egyszerűbb rezolválási eljárást dolgozott ki, amely ee>99% tisztaságban eredményezi mindkét enantiomert, továbbá lehetővé teszi a rezolválószer tisztítás nélküli újrafelhasználhatóságát.

1. **Új megoldásokat dolgozott ki enantiomer-tiszta vegyületek előállítására scCO2 felhasználásával.**

4/B

Ebben a megközelítésben végezte el a 4-fenilazetidin-2-on gyűrűnyitási reakcióját immobilizált lipáz segítségével scCO2-ban.

Elsőként dolgozott ki ibuprofen – 1-feniletán-1-amin és ibuprofén – 2-amino-2-feniletán-1-ol fél molekvivalens rezolválószer alkalmazásán alapuló rezolválási eljárást, melynek segítségével >99% enantiomertisztaság érhető el három egymást követő rezolválási lépésben.

Gáz antiszolvens frakcionálással történő átkristályosítás hatékonyságának vizsgálata során megállapította, hogy az optimalizált rezolválást követően az ibuprofén-1-feniletán-1-amin, az ibuprofén – 2-amino-2-feniletán-1-ol esetében kettő, a mandulasav – 1-feniletán-1-amin és a 4-klórmandulasav – 1-fenil-etán-amin esetén pedig három átkristályosítás szükséges >99% optikai tisztaság eléréséhez.

1. **Modulárisan változtatható, nagynyomású készülékeket tervezett és a használatukhoz szükséges módszereket és eljárásokat fejlesztett a kémiai kutatásokhoz.**

A készülékfejlesztési kutatások során kialakított egy nagynyomású mérőrendszert, amelynek segítségével mintavételi lehetőség nyílik a reakcióelegyekből, valamint azok folyadék/fluid fázisaiból.

Az újonnan tervezett és kidolgozott rendszer segítségével, scCO2 felhasználásával elsőként állított elő szén-dioxid adduktokat imidazólium alapú ionos folyadékokban, és leírta az adduktok képződési kinetikáját a hőmérséklet függvényében.

A folyamatos működésre is képes reaktorrendszerben *Candida antarctica* lipáz B által katalizált észteresítési reakció segítségével valósította meg a *transz*-ciklohexán-1,2-diol kinetikus rezolválását nagy szelektivitással.

Hatékony módszert dolgozott ki 1-feniletanol *Candida antarctica* lipáz B által katalizált észteresítési reakció segítségével megvalósított kinetikus rezolválására és a termékek elválasztására.

Új kísérleti berendezést tervezett és alakított ki, amely 80-200 °C hőmérséklettartományban és <30 MPa nyomáson stabil üzemeltetés mellett alkalmas geokémiai folyamatok modellezésére víz(l)/scCO2/vizsgált anyag (s) háromfázisú rendszerben.

A berendezésben elvégzetek kísérletek eredményeként igazolta, hogy a széles körben használt geokémiai modellek módosítása szükséges a szén-dioxid kőzetekben történő tárolásának megbízható előrejelzéséhez. Megállapítását arra alapozza, hogy a fedőkőzetre jellemző modell agyagásványokban a lejátszódó ioncsere és az oldódási folyamatok a jellemzően homokkő tárolókőzetben sokkal gyorsabbak, mint azt az eddigi modellekben feltételezték.

Aerogélek szárítására alkalmas berendezést alakított ki, melynek segítségével összehasonlította az aerogélek első szárítási szakaszában a folyadék és scCO2, illetve a teljes szárítás során az elegy kritikus nyomásánál nagyobb nyomású CO2-dal végzett oldószereltávolítás hatékonyságát. Az összehasonlító kísérletsorozat eredményeként megállapította, hogy scCO2 alkalmazása esetén 30%-kal rövidebb szárítási idő szükséges.

A scCO2 segítségével állított elő fullerénnel töltött egyfalú szén nanocsövet, és a mellékreakciók kiküszöbölése céljából alacsony hőmérsékleten elsőként sikerült egyfalú szén nanocsőbe fullerénhez kapcsolt lumineszcens lantanonida komplexet, valamint koronént bevinnie.

A reakcióparaméterek optimalizálását követően, scCO2-ban jól oldódó azofestékkel polikarbonát impregnálását valósította meg.