

Az értekezés tárgya új hordozós katalizátorok alkalmazása, fizikai jellemzői és katalitikus hatásuk vizsgálata egyes szerves vegyületek reakcióiban. Katalizátorként főleg palládiumot és platínát (nagyobbrészt palládiumot) alkalmazott, amelyet számos agyagásvány, mezopórusos szilikát, valamint grafit, ill. grafit-oxid hordozóra vitt fel. A különböző minták katalitikus tulajdonságait vizsgálta különböző vegyületek (4-8 szénatomos alifás, továbbá aromás gyűrűt is tartalmazó) szénhidrogének és karbonil vegyületek kettős kötéseinek, valamint (nagyreszt) hármass kötést tartalmazó telítetlen vegyületek szelektív — alkének képződését eredményező — hidrogénezésében.

A jelölt olyan katalizátorokat vizsgált, amelyek többségének hordozója is katalitikus tulajdonságokkal rendelkezhet bizonyos körülmények között; így a katalizátor a fémmel együtt rendkívül komplex rendszert alkot. A katalizátorok készítésében kolloidkémiai ismereteit használta fel, együttműködésben az SZTE Kolloidkémiai Tanszékével, míg a katalitikus reakciók vizsgálatához a „hagyományos” katalitikus tudás volt szükséges. Az értekezés egyik kiemelkedő jellegzetessége a szerző mindkét területen megmutatkozó szakértelme. Figyelemre méltó a katalizátorok jellemzésére használt számos műszeres vizsgálat (mint pl. EM, XRD) professzionális alkalmazása. A tudományos eredmények e szakterületek módszereinek értő kombinálásával születhettek meg.

Az értekezés nagy volumenű kísérleti anyagot tartalmaz. Nagyszámú, több, mint 20 különböző katalizátor szerkezetének és tulajdonságainak vizsgálatáról számol be, ezekről megbízható és értékes, további kutatásokban is jól hasznosítható információkat ad. Újnak tekintendő a tenzidek felhasználása a katalizátorok készítésére. Összesen 14 különböző szerves vegyület került alkalmazásra a különböző minták katalitikus hatásának (aktivitás és szelektivitás) vizsgálata végett. Az egyes minták katalitikus hatásának megállapítására 2-4 különböző reakciót alkalmazott, ezeket általában 2-3 katalizátor összehasonlítására használta a szerző. Az egyes katalizátoroknak az egyes reagensek tekintetében mutatkozó aktivitása és szelektivitása közötti különbségekre megfelelő magyarázatokat kapunk.

Az értekezés az alkalmazott katalizátorok szerint tagozódik fejezetekre. A katalitikus mérések egyik célja a legtöbb helyen az alkin-hidrogénezés sztereoszelektivitásának vizsgálata volt. Az e téren elért eredmények élénk nemzetközi érdeklődést váltottak ki. A katalizátorok egyik előnyös tulajdonsága volt, hogy a cisz-izomerek nagyobb szelektivitással képződtek. A szelektivitás változása a használt oldószertől függően utalt a katalizátor aktuális állapotára (pl. duzzadására). Figyelemre méltó eredmény immobilizált királis tenzidek alkalmazása benzaldehid és dietil-cink enantioszelektív reakciójában. Grafit-hordozós Pd katalizátorokon a készítési mód jelentősen befolyásolta a kettőskötés hidrogénezésében megmutatkozó aktivitást és szelektivitást, amit sikerült visszavezetni a Pd nanorészecskék méretére. A szerző elsők között alkalmazott katalizátor-hordozóként grafit-oxidot. Több módszert is kidolgozott e katalizátorok előállítására, az így készült mintákon az alkinekből keletkező alkének cisz-szelektivitása megközelítette a 100%-ot. Mezopórusos MCM-41-et is alkalmazott a Pd, és a Pt hordozójaként. Alkinek hidrogénezése során e mintákon is túlnyomóan cisz-alkének keletkeztek.

Az értekezés összefoglalása jól összegzi az elvégzett sokrétű munka jellegét, és hangsúlyozza a szerző saját eredményeit, amelyek megfelelnek az MTA doktora fokozat elnyeréséhez szükséges feltételeknek. A szerző az eredményeket 14 tézispontban fogalmazta meg. A bizottság mind a 14 tézispontban foglalt megállapítást új tudományos eredménynek fogadja el.

Az értekezés alapjául szolgáló publikációk jegyzéke 19, – az 1998-2008 években, a szerző kémiai tudományok kandidátusává minősítésének éve (1996) után – külföldi, ill. nemzetközi folyóiratban megjelent, angol nyelvű dolgozatból áll. Az e publikációkra kapott hivatkozások közel egyenletesen oszlanak meg az értekezésben szereplő négy tématerület között.

A fentiek alapján a Bíráló Bizottság javasolja az MTA doktora cím odaítélését Mastalir Ágnesnek.