

# OPPONENSI VÉLEMÉNY

**Lukács Diána**

okleveles környezetmérnök

## **„KOMPLEX EGYENSÚLYI ÉS HATÉKONYSÁGI PARAMÉTEREK VIZSGÁLATA AZ ION- ÉS FOLYADÉKKROMATOGRÁFIÁBAN” című doktori (PhD) értekezéséről**

Lukács Diána a Pannon Egyetem Kémiai és Környezettudományi Doktori Iskolája keretében az Analitikai Kémia Intézeti Tanszéken végezte doktori (PhD) kutatómunkáját. Elméleti és gyakorlati munkája során a nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás oszlopok szemcseszerkezetével és nyomásesésével, valamint mintaoldatbeli és állófázisbeli komplexképződésen alapuló ioncsere-kromatográfiás elválasztásokkal foglalkozott. A nagyhatékonyságú folyadékkromatográfia területén a széleskörű használatának köszönhetően folyamatos fejlesztések zajlanak, így a témaválasztása minden tekintetben időszerű.

A doktori (PhD) értekezés felépítése követi a megkívánt formát, terjedelme megfelelő, olvasmányos, külalakja tetszetős. Az értekezés bevezetés és célkitűzés részében a Jelölt jól érthető, rövid áttekintést ad az általa kutatott tudományterületről és annak jelentőségéről. A kitűzött feladatainak ismertetése során megfelelően helyezi bele az olvasót a dolgozat témájába, és megadja az értekezés tartalmi utalását. Többek között kiemeli, hogy a közelmúltban a gadolínium, illetve a különböző Gd(III) tartalmú komponensek környezeti és biológiai mintákban történő vizsgálata egyre nagyobb figyelmet kapott, tekintettel a szabad Gd(III) toxikus hatására. Az ionkromatográfiás technikák lehetőséget nyújtanak a különböző Gd(III)-speciesszek minőségi és mennyiségi meghatározására, továbbá az egyes szerves és szervetlen mátrixionok meghatározását is lehetővé teszik.

Az irodalmi összefoglaló, amellyel, hogy a Jelölt alapos szakmai ismereteit tükrözi, a téma iránt érdeklődő laikusok számára is hasznos áttekintést nyújt a szakterületről. Részletesen bemutatja a kromatográfiás módszerek, alapfogalmak és elválasztások (lineáris- ill. ioncsere-kromatográfia) elméletét, valamint kitér a folyadékkromatográfiás kolonnák főbb fizikai és kémiai tulajdonságaira. A Jelölt színvonalasan, elemző módon dolgozta fel a vonatkozó szakirodalmat, a hivatkozások száma megfelel a doktori értekezéstől elvártaknak.

A felhasznált analitikai kémiai kísérleti és számítási módszerek korszerűek. Az első kettő folyadékkromatográfiás kutatási feladat elvégzéséhez alkalmazott modellek, számítási módszerek alapjai az értekezés irodalmi összefoglalójában kerültek bemutatásra. A Jelölt az oszloptöltetek szemcseméret eloszlás hatásának, kolonnatöltés minőségétől független, gyors, készülék- és oldószermentes vizsgálatára az általános sebességi modellt alkalmazta. Az oszlopbeli nyomásviszonyok retencióra és az elválasztás minőségére gyakorolt hatásának vizsgálata a Gibbs-féle szabadentalpia egyenlet és az egyensúlyi-diszperzív modell segítségével történt. A kísérleti rész a Jelölt és munkatársai által végzett ionkromatográfiás mérésekről ad leírást, vagyis az értekezés célkitűzés részében említett 3. és 4. feladatához kapcsolódóan tartalmazza a preparatív körülményeket és a vizsgálati eljárások főbb jellemzőit. Gadolínium-kelátok szerves és szervetlen mátrixban való elválasztását vizsgálta latex-alapú anioncserélőn, valamint karboxilátok és szervetlen anionok elválasztását tanulmányozta makrociklus alapú anioncserélő állófázison. A Jelölt kellő alaposítással ismerteti az ionkromatográfiával végzett kísérleti munkáit. Az ionkromatográfiás elválasztások mellett kiegészítő ICP-OES mérésekre is sor került. A Jelölt az értekezés későbbi részében (a 3.3.2. fejezetben) bemutatja az ICP-OES technikával kapott mérési eredményeit. Szembetűnő ugyanakkor, hogy a kísérleti részben

magáról az eljárásról csupán rövid utalást találunk. Kérem a Jelöltet, hogy a bírálatra adott válaszában röviden ismertesse a vizsgálati eljárás főbb jellemzőit.

Az értekezésben ismertetett kutatási eredmények igen alapos és eredményes munkát tükröznek. A feltüntetett táblázatok és ábrák, illetve az azokból levonható következtetések értelmezése, interpretálása nagyfokú precizitásról tanúskodik. A tudományos eredmények bemutatását és értékelését a Jelölt a 3. fejezetben a négy kitűzött kutatási feladata alapján csoportosítja. Ez a csoportosítás egyben a tézispontok szerinti felosztást is jelenti, melyeket szintén e négy nagyobb témakör alapján épít fel. A felépítési logikával egyetértek, valamint a bemutatott eredményeket a Jelölt új tudományos eredményeinek ismerem el.

A kromatográfiás oszloptöltet szemcseméret eloszlásának elválasztási hatékonyságra gyakorolt hatását eltérő szemcseszerkezetek és molekulaméret tartományok esetében modellezte. Megállapította például, hogy a tömörmagvú fázisok szűkebb szemcseméret eloszlása hozzájárul az ezen fázisokkal töltött oszlopok megnövekedett hatékonyságához, különösen nagyméretű molekulák esetén. Az oszlopbeli nyomásesés elválasztásra gyakorolt hatásvizsgálata során rámutatott arra, hogy a nyomásesés és a komponens moláris adszorpciós térfogatváltozása a retenciós tényező és a vándorlási sebesség mellett, a hatékonysági paraméterek alakulására is befolyással van, mely hatás nagyméretű molekulák elválasztása során nem hagyható figyelmen kívül. Számításokkal igazolta továbbá, hogy az oszlopbeli sávsvölésedést a komponensek megnövekedett kilépési sebessége részben vagy teljes mértékben kompenzálhatja. Kiemelte, hogy a szemcseméret eloszlás hatásával kapcsolatban született eredmények a folyadékromatográfiás oszloptöltetek fejlesztési irányainak kijelölésére vonatkozóan szolgáltatnak hasznos információt, míg a kolonnák nyomásesésének elválasztási hatékonyságra gyakorolt hatására vonatkozó eredmények a HPLC–UHPLC módszertranszferek során nyújtanak segítséget a retenciós viselkedés, elsősorban nagyméretű molekuláknál jelentkező változásának értelmezésében. Kérem a Jelöltet, hogy röviden foglalja össze a fejlesztési irányokra vonatkozó elképzeléseit, javaslatait a vizsgálati eredményeinek tükrében.

A Gd-kelátok szervesen mátrixban való anioncsere-kromatográfiás elválasztásának vizsgálata során a kísérleti adatbázis rögzítése mellett elméleti modellt vezetett le a komponensek retenciójának előrejelzésére különböző elúciós körülmények (pH, ionerősség) esetén. Az optimális mozgófázis összetétel megadása mellett mintaelőkészítési eljárást dolgozott ki nyomnyi Gd(III) fémion mátrixterhelt mintákból történő reprezentatív mennyiségi meghatározására. A kutatási eredmények igazolják, hogy a csatolt technikák mellett az egyszerűbb műszer és kevésbé terhelő vegyszerigényű ionkromatográfia is alkalmas lehet a különböző Gd(III)-speciesszek minőségi és mennyiségi meghatározására, míg a kidolgozott retenciós modell mintamátrix-specifikus módszerek kidolgozásához nyújthat segítséget. A Jelölt az értekezés célkitűzés részében felsorolja a szóba jövő csatolt technikákat. Kérem, hogy egy összehasonlító elemzés keretében ismertesse az újonnan kidolgozott ionkromatográfiás eljárásnak a csatolt technikához viszonyított előnyeit, sajátosságait.

A kriptand állófázison végzett kísérleti munka a szervesen anionok és karboxilátok makrociklikus anioncserélőn történő elválasztása során lejátszódó egyensúlyi folyamatok részletesebb megismeréséhez ad hasznos ismereteket. Olyan adatbázist hozott létre, mely különböző karbonsav- és szervesen anionok alkáli-hidroxid elúcióval, eltérő elválasztási körülmények esetén mutatott retenciós adatait tartalmazza. Az értekezésben részletesen bemutatott újonnan kidolgozott retenciós modell-rendszer a megfelelő elúciós körülmények meghatározásához járul hozzá.

A doktori értekezés összefoglaló része, valamint a tézisfüzet jól érthető áttekintést ad a Jelölt által elvégzett elméleti és gyakorlati kutatómunkáról, valamint a legfontosabb vizsgálati eredményeket és az azokból levonható következtetéseket is kiválóan ismertetik.

Külön említést érdemel, hogy az értekezés témájához közvetlenül kapcsolódó, illetve tématerületét érintő közlemények (4 db) és konferencia előadások (21 db) száma a Jelölt eredményes tudományos munkásságát bizonyítja. A Jelölt 3 db számszerű impakt faktor értékkel rendelkező, angol nyelvű tudományos folyóiratcikk társszerzője, illetve 1 db angol nyelvű referált folyóiratcikk első szerzője. Kiemelendő továbbá, hogy az összesített impakt faktor értéke meghaladja a 9-et, valamint publikációira független hivatkozásokat is találunk.

**Összességében a Jelölt az értekezésben leírt munkát magas színvonalon, a kitűzött céloknak megfelelően, és következetesen hajtotta végre. A Jelöltet értekezése és eddigi tudományos munkássága alapján érdemesnek tartom a PhD-fokozatra. Az értekezés elfogadását és nyilvános vitára való bocsátását javaslom.**

Győr, 2019. szeptember 6.

*Nagyné Dr. Szabó Andrea*  
Nagyné Dr. Szabó Andrea  
PhD (kémiai tudományok)  
egyetemi docens  
Széchenyi István Egyetem  
Fizika és Kémia Tanszék