



Válasz Dr. Keglevich György bírálatára

Hálasan köszönöm Keglevich György Professzor Úrnak, hogy a nyári időszakban, a szűk határidők figyelembevételével is elvállalta doktori dolgozatom bírálatának elkészítését. Köszönöm a disszertációmmal kapcsolatban tett szakmai észrevételeit, javító szándékú megjegyzéseit, tanácsait.

A bírálatban szereplő kérdésekre válaszaim a következők:

1. *A harmadik részben a 16-oxo-18-nor-13 α -szteroidot tette hozzáférhetővé 2-lépéses ismert szintézis segítségével. A várt termék 68%-ot tett ki, míg egy hidrox-melléktermék 29%-ot. Kérdés, hogy mi a helyzet a fennmaradó 3%-kal?*

A 16-oxo-18-nor-13 α -szteroid előállítását többször is végrehajtottam és oszlopkromatográfiával választottam el egymástól a reakcióelegy komponenseit. A dolgozatban ismertetett hidrox-vegyületen kívül más melléktermék keletkezését nem tapasztaltam. Az ezen kísérletekből származó átlag adta az értekezésben bemutatott eredményeket. A fennmaradó 3% az át nem alakult kiindulási epoxid, valamint az izolálás során bekövetkező veszteség.

2. *Az újrahasznosíthatósággal kapcsolatban az a helyzet, hogy 3 egymást követő használat során a konverzió értékek rendre 98%, 44% és 31% volt. Ez a probléma csak a párolgó etilén-glikol kondenzáltatásával, vagy az alkohol veszteség pótlásával oldható meg. Történtek-e ilyen kísérletek?*

A kísérleteket során kis anyagmennyiségekkel dolgoztam: 0,1 mmol szteroidhoz 76 μ l (1,34 mmol) etilén-glikol volt szükséges. Ilyen kis mennyiségek esetében a kondenzáltatás nem kivitelezhető, ezért az elpárolgott etilén-glikol mennyiségét $^1\text{H-NMR}$ mérésekkel határoztam meg. A megfelelő mennyiséget pótolva vizsgáltam az újrafelhasználhatóságot,



amely során a hozamok csökkenése nélkül sikerült 5 cikluson keresztül előállítanom a várt terméket (dolgozat 81. ábra). Az alkohol kondenzáltatására és visszaforgatására akkor nyílt lehetőség, ha nagyobb mennyiségekkel dolgozunk. Vizsgáltam a méretnövelés hatását is (1 mmol szteroiddal), amely során 90%-os izolált hozamot értem el, azonban ekkor nem végeztem újrafelhasználhatósági kísérleteket.

3. Felvetődik a bírálóban a kérdés, hogy a CO₂-vel és egyéb komponensekkel reverzibilissé tett IF-ok elterjedésére mennyire lehet egy reális opció?

Ahhoz, hogy a reverzibilis ionfolyadékok széles körben elterjedhessenek az szükséges, hogy hatékonyságuk a korábban alkalmazott rendszerek (tipikusan NaOH és etanol) hatékonyságát megközelítse. A hozamok tekintetében (a legtöbb esetben) a szerves bázissal hasonlóan jó eredményt értem el, mint NaOH alkalmazásával. Mindazonáltal az alkalmazott guanidinek drágábbak, mint a NaOH, valamint a szén-dioxid eltávolításához viszonylag sok energia szükséges, így ipari szempontból a szervesetlen bázis + alkohol rendszerek egyelőre költséghatékonyabbak. Továbbá korlátozza az elterjedést az is, hogy a reverzibilis ionfolyadékok eddig csak Claisen-Schmidt-kondenzációban bizonyultak hatékonynak. Azonban úgy vélem, hogy további kutatásokkal a legtöbb báziskatalizált reakcióhoz tervezhető egy megfelelő ionfolyadék rendszer, amely esetben, ha a visszaforgatás is kellő hatékonysággal megvalósítható, akkor a zöld kémia irányelveit szem előtt tartva lehetőség nyílt az ilyen rendszerek szélesebb elterjedésére is.

Hálásan köszönöm Keglevich György Professzor Úrnak, hogy észrevételeivel és tanácsaival hozzájárult dolgozatom színvonalának emeléséhez.

Veszprém, 2023. szeptember 4.

Ispán Dávid
doktorjelölt