



ELTE | TTK
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

AZ ELTE KÉMIAI INTÉZETÉNEK TUDOMÁNYOS HÍRLEVELE
THE SCIENTIFIC NEWSLETTER OF ELTE INSTITUTE OF
CHEMISTRY

2024. SZEPTEMBER / SEPTEMBER 2024



TARTALOMJEGYZÉK

ELŐADÁSSOROZATOK, SZEMINÁRIUMOK / LECTURE SERIES, SEMINARS	4
INTÉZETI SZEMINÁRIUMOK ÉS KAPUY ELŐADÁS / INSTITUTIONAL SEMINARS INCLUDING KAPUY LECTURE	4
AZ ANALITIKAI KÉMIAI TANSZÉK SZEMINÁRIUMAI / ANALYTICAL CHEMISTRY SEMINARS	7
ALKÍMIA MA / ALCHEMY TODAY POPULAR LECTURE SERIES	7
VÁLOGATÁS AZ ELTE KÉMIAI INTÉZET PUBLIKÁCIÓIBÓL – 2024. NYÁR/ SELECTIONS FROM THE INSTITUTE'S PUBLICATIONS – SUMMER 2024	9
Gyógyszerkémia és bioanalitika / Medicinal chemistry and bioanalytics	9
Szerves kémia / Organic Chemistry	14
Szerkezeti biokémia / Structural Biochemistry	15
Analitikai és környezetkémia / Analytical and environmental chemistry	19
Asztrokémia / Astrochemistry	20
Reakciókinetika és reakciódinamika / Reaction kinetics and reaction dynamics	24
Elméleti és számításhoz kémia / Theoretical and computational chemistry	27
Oktatásmódszertan / Educational chemistry	32
Császár Attila különszám / Festschrift in Honour of Professor Attila G. Császár	33
TUDOMÁNYOS DIÁKKÖR / SCIENTIFIC STUDENTS' ASSOCIATIONS CONFERENCE TDK 2024/25	34
MUNKATÁRSAINK KIEMELT ELŐADÁSAI / DISTINGUISHED PRESENTATIONS BY OUR COLLEAGUES	35
RÖVID HÍREK / SHORT NEWS	36

ELŐADÁSSOROZATOK, SZEMINÁRIUMOK / LECTURE SERIES, SEMINARS

INTÉZETI SZEMINÁRIUMOK ÉS KAPUY ELŐADÁS / INSTITUTIONAL SEMINARS INCLUDING KAPUY LECTURE

A Kémiai Intézet szemináriumsorozatán szakmailag világszinten elismert vendégeink színvonalas előadásait hallgathatják az érdeklődők, javarészt angol nyelven. A sorozat része a Kapuy Elméleti Kémiai Laboratórium előadás-sorozata is. (Figyelem, ez idén szervezési okokból a többi előadástól eltérő időpontban kerül megrendezésre.) A Hevesy György Kémia Doktori Iskola doktoranduszai a szeminárium látogatásával kreditet gyűjthetnek, ehhez alá kell írniuk a jelenléti ívet. Az előadásokat pogácsa és üdítő kíséretében kötetlen beszélgetés követi. A december 4-i magyar nyelvű előadást a közeledő ünnepek alkalmából egy koccintás is követi. Minden előadásra, de különösen erre szeretettel várjuk nyugdíjas kollégáinkat is!

In the seminar series at the Institute of Chemistry, our distinguished guests give high-quality professional presentations, primarily in English, with a few exceptions. This series also includes the Kapuy Lecture Series organized by the Laboratory of Theoretical Chemistry. (Please note that this year, due to organizational reasons, it will take place at a different time than the other lectures.) Doctoral candidates enrolled in the Hevesy György Doctoral School of Chemistry can earn credits by attending the seminar, which requires them to sign the atten-

dance sheet. The presentations are followed by informal discussions accompanied by pastries and refreshments. The Hungarian-language lecture on December 4 will also feature a toast in celebration of the upcoming holidays. We warmly welcome our retired colleagues to all the lectures, especially this one!

October 02. (Wednesday) 15:00, Ortvy auditory (0.81)

[Dr. André K. Eckhardt](#)

Lehrstuhl für Organische Chemie II, Ruhr-University Bochum, Germany

Preparation and Spectroscopic Characterization of Interstellar Relevant Imine Species

Simple imines are frequently used as building blocks in the synthesis of more complex molecules. In solution imines are typically prepared from carbonyl compounds and ammonia or primary amines, respectively. The simplest aldimine, formaldimine (H_2CNH), has been discovered in space but cannot be isolated on Earth due to polymerization or oligomerization when concentrated. Aldimine building blocks play a key role in the formation of biorelevant molecules like amino acids or nucleobases in prebiotic chemistry. However, spectroscopic data of the compound class are rare or missing at all due to their high reactivity and the absence of molecular precursors for an on-demand mild generation. The overall goal of this project is to learn more about interstellar and prebiotic imine chemistry and characterize often proposed but yet elusive imine species. 1,2-Diiminoethane was photochemically prepared from explosive 1,2-diazidoethane in solid argon at 3 K and characterized by infrared

and UV/Vis spectroscopy. In aqueous solution the simplest diimine serves as a fundamental building block for imidazole heterocycles.

The simplest α -imino acid, namely glycine imine, was prepared by UV irradiation of azidoacetic acid in solid argon at 3 K and characterized by IR and UV/Vis spectroscopy. In aqueous solution at higher concentrations glycine imine undergoes self-reduction to glycine by oxidative decarboxylation chemistry. The imine serves a critical intermediate in prebiotic amino acid synthesis.

2-Iminoacetaldehyde was proposed as an interstellar molecule and prepared by photolysis of 2-azidoacetaldehyde in solid argon at 3 K and low-density amorphous water ice. The imine was characterized by characterized by infrared and UV/Vis spectroscopy.

References

- [1] **A. K. Eckhardt** *Chem. Commun.* **58**, 8484–8487 (2022).
- [2] **V. Paczelt, R. C. Wende, P. R. Schreiner and A. K. Eckhardt** *Angew. Chem Int. Ed.* **62**, e202218548 (2023).
- [3] **V. D. Drabkin, V. Paczelt and A. K. Eckhardt** *Chem. Commun.* **59**, 12715–12718 (2023).

October 16. (Wednesday) 15:00, Ortvy auditory (0.81)

[Univ. Prof. Dr. Hinrich Grothe](#)

TU Wien, Institute of Materials Chemistry, Getreidemarkt 9/BC, 1060 Vienna, Austria

The efficiency of ice-nucleating macromolecules from *Betula pendula* pollen

Various aerosols, including mineral dust, soot, and biological particles, can act as ice nuclei,

initiating the freezing of supercooled cloud droplets. Cloud droplet freezing significantly impacts cloud properties and, consequently, weather and climate. Some biological ice nuclei exhibit exceptionally high nucleation temperatures close to 0 °C. Ice Nucleating Macromolecules (INMs) found on pollen are typically not considered among the most active ice nuclei. Still, they can be highly abundant, especially for species such as *Betula pendula*, a widespread birch tree species in the boreal forest. Recent studies have shown that certain tree-derived INMs exhibit ice nucleation activity above -10 °C, suggesting they could play a more significant role in atmospheric processes than previously understood. Our study reveals three distinct INM classes active at -8.7 °C, -15.7 °C, and -17.4 °C are present in *Betula pendula*. Freeze-drying and freeze-thaw cycles noticeably alter their ice nucleation capability, and the results of heat treatment, size, and chemical analysis indicate that INM classes correspond to size-varying aggregates, with larger aggregates nucleating ice at higher temperatures in agreement with previous studies on fungal and bacterial ice nucleators. Our findings suggest that *Betula pendula* INMs are potentially important for atmospheric ice nucleation because of their high prevalence and nucleation temperatures.

November 14. (Thursday) 15:00, Bruckner auditory (063)

KAPUY LECTURE

Prof. Peter Knowles

Cardiff University, UK

How far can we go with single-configuration quantum chemistry?

Traditional quantum chemistry begins with the mean field model, where the orbital approximation leads to a single Slater determinant. Electron correlation effects are then introduced perturbationally, or through coupled-cluster theory, or modelled with a density functional. When correlation is strong, multiconfigurational reference methods offer a general flexible approach that avoids the qualitative failure of the Hartree-Fock reference, but they have the disadvantages of strong cost scaling with system size, and, in most cases, a lack of size extensivity. In this lecture I will explore the extent to which the useful domain of single-reference methods can be extended. The consideration will include alternative coupled-cluster formulations, new forms of perturbation theory, and extension to the correlation of electrons with vibrations (beyond Born-Oppenheimer) and photons (molecules in an optical cavity).

November 20. (Wednesday) 15:00, Ortvy auditory (0.81)

Prof. Edina Rosta

Department of Physics and Astronomy, University College London, London, UK

Enhanced Sampling Simulations of Biomolecular Systems

Phosphate catalytic enzymes are essential and ubiquitous to all forms of life. While structures of

these proteins are typically readily available, prediction and design of their function and activity is a key current challenge. Here we present computing intensive free energy calculation data and machine learning applications to predict catalytic activity for prototype examples including Ras [1]. Our work highlights the important role of coupled proton transfer steps in the catalytic mechanism using the finite-temperature string method. This allows us to use multiple collective variables that govern the reaction path. Identification of these collective variables in complex processes presents a major problem. We offer promising AI-driven algorithms to help identify essential reaction coordinates in biomolecular processes [2,3].

References

[1] Berta, D.; Gehrke, S.; Nyiri, K.; Vértessy, B. G.; Rosta, E. **Mechanism-Based Redesign of GAP to Activate Oncogenic Ras.** *JACS*, 2023, 10.1021/jacs.3c04330.

[2] Badaoui, M.; Buigues, P. J.; Berta, D.; Mandana, G. M.; Gu, H.; Földes, T.; Dickson, C. J.; Hornak, V.; Kato, M.; Molteni, C.; Parsons, S.; Rosta, E. **Combined Free-Energy Calculation and Machine Learning Methods for Understanding Ligand Unbinding Kinetics.** *J. Chem. Theory Comput.* 2022, 10.1021/acs.jctc.1c00924.

[3] Buigues, P.J.; Gehrke, S.; Badaoui, M.; Mandana, G. M.; Qi, T.; Bottegoni, G.; Rosta, E. **Investigating the Unbinding of Muscarinic Antagonists from the Muscarinic 3 Receptor.** *bioRxiv*; 2023, 10.1101/2023.01.03.522558.



December 4. (Szerda) 15:00, Ortvy terem (0.81)

Kiss László, Széchenyi- és Prima Primissima-díjas csillagász

HUN-REN Csillagászati és Földtudományi Központ

Horgosról a csillagokig és tovább – egy csillagász kalandozásai a nagyvilágban

Előadásomban bemutatom, hogyan válhat egy horgosi kisdíákból nemzetközileg elismert csillagász szakember, intézményvezető tudománymenedzser és egyben a média által kedvelt ismeretterjesztő tudós. Milyen impulzusok értek a falusi ég alatt, az inspiráló középiskolában és végül az egyetemen, ahol végképp eldőlt a szakmai sorsom? Mi kell ahhoz, hogy valaki helyt álljon bárhol a világban? Az életút mellett kitérek friss kutatásaimra a Naprendszerben és a más csillagok körül keringő bolygórendszerekben, földi és űrtávcsöves megfigyeléseken alapuló vizsgálataimra. Továbbá megosztom tapasztalataimat arról is, hogy a 21. században milyen módszerekkel lehet hatékonyan közvetíteni a tudományt, és hogyan keltethetjük fel az emberek, különösen a fiatalok érdeklődését a tudomány szépségei iránt.

AZ ANALITIKAI KÉMIAI TANSZÉK SZEMINÁRIUMAI / ANALYTICAL CHEMISTRY SEMINARS

Az Analitikai Kémia Tanszék néhány hetente, kedd délelőttönként tartja értekezleteit, amelyeket érdekes szemináriumok követnek 10:00 órától. A szemináriumi előadások nyitottak a Kémia Intézet munkatársai és

hallgatói előtt. Az aktuális program a [tanszék honlapján](#) követhető.

The Department of Analytical Chemistry holds its meetings every few weeks on Tuesday mornings, followed by engaging seminars starting at 10:00 AM. The seminar presentations are open to the staff and students of the Institute of Chemistry. The current schedule can be followed on the [department's website](#).

ALKÍMIA MA / ALCHEMY TODAY POPULAR LECTURE SERIES

Az ELTE Kémiai Intézet „Alkímia ma” programsorozata 2007 szeptembere óta hozza közelebb a modern kémiát és a legfrissebb kutatási eredményeket, főként felső tagozatos és középiskolás diákok számára. Az előadások azonban a nagyközönség számára is nyitottak, ingyenesek, személyesen is látogathatók, és online is követhetők, és visszamenőleg is megtekinthetők az „Alkímia ma” YouTube-csatornán. További információk a [sorozat Facebook-oldalán](#) találhatóak. Az előadások kéthetente kerülnek megrendezésre, váltásban az ELTE Fizikai Intézetének „Az atomoktól a Csillagokig” előadássorozatával. Az előadásokat látványos kísérleti bemutató követi.

Since September 2007, the „Alchemy Today” popular lecture series by the ELTE Institute of Chemistry has been bringing modern chemistry and the latest research findings closer to upper primary and high school students. The talks are also open to the general public, they are free of charge, and can be attended in person or followed online, and are available for later viewing on the [„Alchemy Today” YouTube channel](#).

Further information can be found on the series' [Facebook page](#). The lectures take place every two weeks, alternating with the „From Atoms to Stars” popular lecture series by the ELTE Institute of Physics. The lectures are followed by a spectacular experimental demonstration.

szeptember 19.

Iván Béla

Belefullad-e az emberiség a műanyag szemétkébe?

Kísérlet: Fecske Dóra

október 3.

Pajkossy Tamás

Az élet termodinamikai alapjai

Kísérlet: Kóczán György

október 17.

Dormán György és Róka András

A kémia evolúciója I. – A kémiai sokféleség eredete, kialakulása

november 7.

Rácz Anita

(N)IR spektrum + Kemometria: A klasszikus kísérletek kiváltása az élelmiszer- és anyagtudomány területén

Kísérlet: Vámos István

november 21.

Dormán György és Róka András

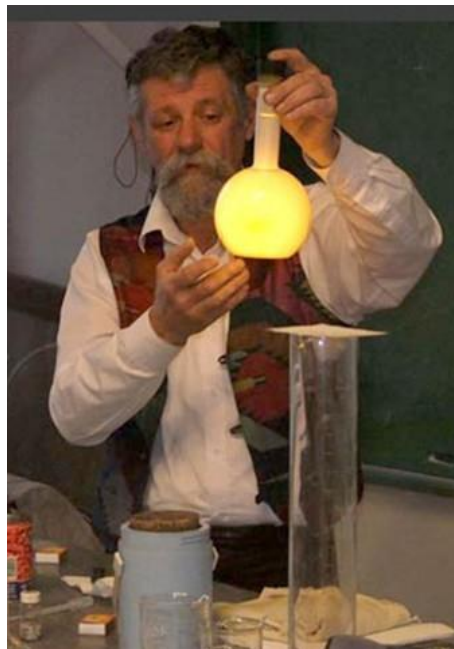
A kémia evolúciója II. – A kémiai sokféleség következménye, az élőszervezetek hozzájárulása

december 5.

Keszei Ernő

Miért nem szeretik a borok a fényt?

Kísérlet: Kocsis László Lajos



december 19.

Róka András

**Észbontó adventi alkímia
Az előadó kísérleteivel**

január 30.

Turányi Tamás

**Űrrakéták hajtóanyagai
Kísérlet: Holczer József**

február 13.

Tóth Gergely

A múlt és a jelen harca: kevés vagy sok paraméterrel modellezzünk?

Kísérlet: Keglevich Kristóf

február 27.

Dormán György és Róka András

A kémia evolúciója III. – A biológiai sokféleség kémiai háttere

március 13.

Salma Imre

**A különleges városi környezetek levegője
Kísérlet: Tüdős Éva**

március 27.

Béni Szabolcs

Oligoszacharidok a gyógyításban és egészségmegőrzésben

Kísérlet: Kiss Edina és Molnár István

április 10.

Dormán György és Róka András

A kémia evolúciója IV. – A kémiai sokféleség kiterjesztése mesterséges úton

VÁLOGATÁS AZ ELTE KÉMIAI INTÉZET PUBLIKÁCIÓIBÓL – 2024. NYÁR/ SELECTIONS FROM THE INSTITUTE'S PUBLICATIONS – SUMMER 2024

Az alábbi lista témakörök szerint rendezve nyújt válogatást munkatársaink június eleje és szeptember eleje között megjelent fontosabb publikációiról. Mivel ez az időszak rövid, ezért nem teljes mértékben reprezentálja az intézetben folyó kutatások sokszínűségét.

The following list, organized by topic, presents a selection of significant publications by our staff from early June to early September. As this period is relatively short, it does not fully represent the diversity of research conducted at our institute.

Gyógyszerkémia és bioanalitika / Medicinal chemistry and bioanalytics

Eszter Kalydi, Milo Malanga,* Thorbjørn Terndrup Nielsen,* Reinhard Wimmer, Szabolcs Béni**

Solving the puzzle of 2-hydroxypropyl β -cyclodextrin: Detailed assignment of the substituent distribution by NMR spectroscopy

[Carbohydrate Polymers, 338, 2024, 122167](#)

2-Hydroxypropyl- β -cyclodextrin (HPBCD) is one of the most important cyclodextrin derivatives, finding extensive applications in the pharmaceutical sector. Beyond its role as an excipient, HPBCD achieved orphan drug status in 2015 for Niemann-Pick type C disease treatment, prompting research into its therapeutic potential for various disorders. However, the acceptance of HPBCD as an active pharmaceutical ingredient may be impeded by its complex nature. Indeed, HPBCD is not a single entity with a well-defined structure, instead, it is a complex mixture of isomers varying in substituent positions and the degree of hydroxypropylation, posing several challenges for unambiguous characterization. Pharmacopoeias' methods only address the average hydroxypropylation extent, lacking a rapid approach to characterize the substituent positions on the CD scaffold. Recognizing that the distribution of substituents significantly influences the complexation ability and overall activity of the derivative, primarily by altering cavity dimensions, we present a straightforward and non-destructive method based on liquid state NMR spectroscopy to analyze the positions of the hydroxypropyl sidechains. This method relies on a single set of routine

experiments to establish quantitative assignment and it provides a simple yet effective tool to disclose the substitution pattern of this complex material, utilizing easily accessible (400 MHz NMR) instrumentation.

A 2-hidroxiopropil- β -ciklodextrin (HPBCD) egy fontos ciklodextrin származék, amelyet széles körben használnak a gyógyszeriparban. 2015-ben árva gyógyszer státuszt kapott a Niemann-Pick C típusú betegség kezelésére. A HPBCD pontos szerkezetének meghatározása azonban nehéz, mivel izomerek keveréke, amelyek eltérnek a hidroxipropil oldalláncok elhelyezkedésében és mennyiségében. A cikk egy egyszerű, folyadékfázisú NMR spektroszkópiai módszert mutat be, amely gyors és nem roncsoló módon segít az oldalláncok elhelyezkedésének azonosításában, hozzájárulva ezzel ezen fontos gyógyszeripari anyag szerkezeti jellemzőinek alaposabb megértéséhez és ezáltal annak minőségbiztosításához.

Adila Nazli, Muhammad Zafar Irshad Khan,* Ákos Rác,* Szabolcs Béni**

Acid-sensitive Prodrugs; A Promising Approach for Site-specific and Targeted Drug Release

[European Journal of Medicinal Chemistry, 276, 2024, 116699](#)

Drugs administered through conventional formulations are devoid of targeting and often spread to various undesired sites, leading to sub-lethal concentrations at the site of action and the emergence of undesired effects. Hence, therapeutic agents should be delivered in a controlled manner at target sites. Currently, stimuli-based drug delivery systems have demonstrated a remarkable potential for the

site-specific delivery of therapeutic moieties. pH is one of the widely exploited stimuli for drug delivery as several pathogenic conditions such as tumor cells, infectious and inflammatory sites are characterized by a low pH environment. This review article aims to demonstrate various strategies employed in the design of acid-sensitive prodrugs, providing an overview of commercially available acid-sensitive prodrugs. Furthermore, we have compiled the progress made for the development of new acid-sensitive prodrugs currently undergoing clinical trials. These prodrugs include albumin-binding prodrugs (Aldoxorubicin and DK049), polymeric micelle (NC-6300), polymer conjugates (ProLindac™), and an immunconjugate (IMMU-110). The article encompasses a broad spectrum of studies focused on the development of acid-sensitive prodrugs for anticancer, antibacterial, and anti-inflammatory agents. Finally, the challenges associated with the acid-sensitive prodrug strategy are discussed, along with future directions.

A hagyományos gyógyszerek esetén gyakran előfordul, hogy a hatóanyag nem célzottan jut el a szervezet különböző részeire, ami nemkívánatos mellékhatásokat okozhat és csökkentheti a kezelés hatékonyságát. Az új fejlesztések célja, hogy a hatóanyag pontosan a hatás helyén váljon elérhetővé. Mindez ma már megvalósítható olyan betegségekben, ahol a szöveti pH lokálisan alacsonyabb az egészséges szövetéhez képest: bizonyos daganatok, illetve gyulladások esetén. Itt a savérzékeny prodrugok (gyógyszer-előanyagok), vagyis a savas környezetben aktív hatóanyaggá alakuló származékok ígéretes megoldást kínálnak a pontos célba juttatásra. Mára számos olyan prodrugot fejlesztettek, amelyek

különösen a daganatterápiában mutatnak nagy hatékonyságot, de további vizsgálatok szükségesek a biztonságuk és hatékonyságuk teljes megértéséhez.

*Zsófia Garádi, András Dancsó, Vladimír Piskarev, Szabolcs Béni**

From mother's milk to structural insights: ^1H - ^{15}N NMR analysis of Lewis X antigen-bearing oligosaccharides isolated from human milk

[Carbohydrate Polymers, 347, 2025, 122534](#)

Human milk oligosaccharides (HMOs) are complex unconjugated glycans abundant in breast milk, with vital roles in infant nutrition and health. The structural elucidation of HMOs remains challenging due to their diverse compositions and isomeric complexities. This study presents a novel approach employing ^1H - ^{15}N NMR correlations to pinpoint and characterize HMOs, LN_H, LN_{nH}, and their fucosylated derivatives including those of bearing the Lewis X motif. Isolated from human milk, these hexa-, hepta-, and octasaccharides were extensively analysed by NMR. This enabled their first complete ^1H , ^{13}C and ^{15}N resonance assignments. Using ^1H - ^{15}N HSQC experiments, the distinctive ^1H - ^{15}N correlations of GlcNAc units within the HMOs provided structural fingerprints, allowing for unequivocal differentiation of isomeric structures and fucosylation patterns. Results demonstrate the potential of ^1H - ^{15}N NMR spectroscopy in decoding complex HMO structures, offering new perspectives on their detailed structural characterization and contributing to a deeper understanding of their potential benefits.

Az anyatej oligoszacharidok (HMOs) olyan

összetett molekulák, amelyek kulcsszerepet játszanak a csecsemők táplálásában és egészségében. A közlemény egy új módszer kifejlesztéséről számol be, a HMO-k szerkezetének meghatározására, amely ^1H - ^{15}N NMR spektroszkópiát alkalmaz. Ez a technika lehetővé teszi a HMO-k, különösen a GlcNAc (N-acetil glükózamin) egységek fukozilációs mintázatainak azonosítását ezáltal a szerkezetileg nagyon hasonló, de más biológiai funkciót betöltő HMO-k gyors megkülönböztetését. Az eredmények új perspektívát nyújtanak a HMO-k részletes szerkezetvizsgálatához, ami hozzájárulhat ezen molekulák jövőbeni gyógyászati/élelmiszeripari alkalmazásainak megértéséhez.

*Jacopo Gomena, Daniela Modena, Paola Cordella, Balázs Vári, Ivan Randelović, Adina Borbély, Michela Bottani, Diána Vári-Mező, Gábor Halmosi, Éva Juhász, Christian Steinkühler, József Tóvári, Gábor Mező**

In vitro and in vivo evaluation of Bombesin-MMAE conjugates for targeted tumour therapy

[European Journal of Medicinal Chemistry 277, 2024, 116767](#)

Targeted tumour therapy has proved to be an efficient alternative to overcome the limitations of conventional chemotherapy. The upregulation of the bombesin receptor 2 (BB2) in several malignancies and the advantages offered by peptide drug conjugates over antibody drug conjugates in terms of production and tumour targeting motivated us to synthesise and test bombesin conjugates armed with the tubulin binder monomethyl auristatin E. The widely used Val-Cit-PABC was initially included as

cathepsin cleavable self-immolative linker for the release of the free drug. However, the poor stability of the Val-Cit-conjugates in mouse plasma encouraged us to consider the optimised alternatives Glu-Val-Cit-PABC and Glu-Gly-Cit-PABC. Conjugate BN-EVcM1, featuring Glu-Val-Cit-PABC, combined suitable stability ($t_{1/2}$ in mouse and human plasma: 8.4 h and 4.6 h, respectively), antiproliferative activity in vitro ($IC_{50} = 29.6$ nM on the human prostate cancer cell line PC-3) and the full release of the free payload within 24 h. Three conjugates, namely BN-EGcM1, BN-EVcM1 and BN-EVcM2, improved the accumulation of MMAE in PC-3 human prostate cancer xenograft mice models, compared to the administration of the free drug. Among them, BN-EVcM1 also stood out for the significantly extended survival of mice in in vivo acute efficacy studies and for the significant inhibition of the growth of a PC-3 tumour in mice in both acute and chronic efficacy studies.

A kutatás célja egy olyan új daganatellenes gyógyszer kifejlesztése, amely hatékonyabban célozza meg a rákos sejteket, mint a hagyományos kemoterápia. Azt használták ki, hogy „bombesin receptor 2” molekula bizonyos daganattípusokban nagyobb mennyiségben található meg. A kutatók egy bombesinhez kötődő gyógyszert állítottak elő, amely egy erős sejtosztódást gátló anyagot, az általuk előállított MMAE molekulát juttatja célzottan a rákos sejtekhez. A kísérletek során sikerült olyan változatot találniuk, amely stabilabb volt az egér és emberi vérben, és jobban felhalmozódott a daganatos sejtekben, ezzel javítva a kezelés hatékonyságát.

Ágnes Ábrahám, Gergő Gyulai, Judith Mihály, Andrea Horváth, Orsolya Dobay, Zoltán Varga, Éva Kiss, Kata Horváti

Optimizing lipopeptide bioactivity: The impact of non-ionic surfactant dressing

[Journal of Pharmaceutical Analysis, 2024, 101020](#)

The aim of the research is to increase the applicability of lipopeptides as drugs. To this end, non-ionic triblock copolymers, namely poloxamers, were applied. The physico-chemical properties of poloxamers vary depending on the length of the blocks, so different types were experimented with. Systems containing different additives were systematically investigated, and the change in the critical micelle concentration of the poloxamers at 25 and 37 °C in different media was assessed. In addition, the cytotoxicity of the different poloxamer micelles on three different cell lines was evaluated, and based on the results, Plur104, Plur123, and Plur127 were selected. Fatty acid elongated derivatives of a short antibacterial peptide (pL1), a medium-sized anticancer peptide (pCM15), and a branched-chain vaccine antigen (pATIPC) were used as lipopeptide models, and their formulations with the selected poloxamers were investigated. The solubility and homogeneity of the lipopeptides were significantly increased, and dynamic light scattering (DLS) measurements showed the formation of small particles of around 20 nm, which were well reproducible and storable. Similar homogenous micelle formation was observed after freeze-drying and reconstitution. The pL1 lipopeptide, formulated with the selected poloxamers, exhibited enhanced antibacterial activity with significantly reduced haemolytic side effects. The pCM15 peptide, when incorporated into poloxamer micelles,

showed significantly enhanced cytotoxicity against tumor cells. Additionally, the internalization rate of pATIPC peptide formulated with poloxamers by antigen-presenting model cells exceeded that of the unformulated peptide. Our results demonstrate the potential of poloxamers as promising tools for the formulation of lipopeptides and for the optimization of their selectivity.

A kutatás célja a lipopeptidek gyógyszerként való alkalmazásának javítása volt. Poloxamereket, egy speciális típusú triblock kopolimert, használtak, amelyek különböző hosszúságú blokkokkal rendelkeznek, és így eltérő tulajdonságokkal bírnak. Az eredmények alapján a poloxamerek javítják a lipopeptidek oldhatóságát és stabilitását, növelik az antibakteriális hatékonyságot, csökkentik a hemolitikus mellékhatásokat, és hatékonyabbá teszik a lipopeptidek célsejtekbe való bejutását.

*Dániel Horváth, Pál Stráner, Nóra Taricska, Zsolt Fazekas, Dóra K. Menyhárd,*András Perczel**

Influence of Trp-Cage on the Function and Stability of GLP-1R Agonist Exenatide Derivatives

[Journal of Medicinal Chemistry 2024](#)

Exenatide (Ex4), a GLP-1 incretin mimetic polypeptide, is an effective therapeutic agent against diabetes and obesity. We highlight the indirect role of Ex4's structure-stabilizing Trp-cage (Tc) motif in governing GLP-1 receptor (GLP-1R) signal transduction. We use various Ex4 derivatives to explore how Tc compactness influences thermal stability, aggregation, enhancement of insulin secretion, and GLP-1R binding. We found that

Ex4 variants decorated with fortified Tc motifs exhibit increased resistance to unfolding and aggregation but show an inverse relationship between the bioactivity and stability. Molecular dynamics simulations coupled with a rigid-body segmentation protocol to analyze dynamic interconnectedness revealed that the constrained Tc motifs remain intact within the receptor–ligand complexes but interfere with one of the major stabilizing contacts and recognition loci on the extracellular side of GLP-1R, dislodging the N-terminal activating region of the hormone mimetics, and restrict the free movement of TM6, the main signal transduction device of GLP-1R.

Az Exenatid peptid hatóanyagot hatékonyan alkalmazzák a cukorbetegség és az elhízás kezelésében. Fontos szerkezeti része, a Trp-kalitka elnevezésű szerkezeti elem, amely stabilizálja a molekulát. Az ELTE kutatói különböző Ex4 változatokat vizsgáltak, amelyben felderítették, hogy ezen szerkezeti elem miként befolyásolja a gyógyszerhatóanyag variánsok stabilitást és a biológiai aktivitását. Bizonyították, hogy bár a stabilabb változatok jobban ellenállnak a denaturációnak és az aggregációnak, azonban kevésbé hatékonyan kapcsolódnak a receptorokhoz, ami csökkenti a gyógyszer hatását. Szimulációk segítségével megmutatták, hogy a túl merevített hatóanyag szerkezetek akadályozzák a receptorok megfelelő aktivációját, ezért bizonyos fokú szerkezeti rugalmasság elengedhetetlen a hatékonyság szempontjából.

Szerves kémia / Organic Chemistry

Mihály Viktor Pilipecz,* Tamás Róbert Varga, Zoltán Vincze, [Gitta Schlosser](#), [Dávid Papp](#), [András Simon](#), Zoltán Mucsi, Péter Nemes

Synthesis of various dihydro-thiazole and selenazole heterocycles

[European Journal of Organic Chemistry, 2024, e202400510](#)

We prepared numerous thiazole derivatives from push-pull alkenes such as nitroenamines, enaminoester, and enaminoitrils in a two-step reaction with thiocyanate ion. The first step was the formation of the thiocyanate-substituted push-pull alkene from an iodine-containing intermediary. We demonstrated this sequence through the preparation and identification of the iodine-substituted enamines. In the second step, thiazole ring closure took place in methanol, at room temperature. The imino group of the condensed thiazole ring systems was successfully acylated. The same reaction sequence with potassium selenocyanate resulted in two selenocyanate and a selenazole heterocyclic derivatives. The mechanism of the reaction with thiocyanate ion and the heterocycle formation was investigated by computational methods. We performed quantum chemical calculations, involving both the thermodynamic and the kinetic aspects of the ring closure reaction.

A kutatók különféle tiázolszármazékokat és azok szelénanalógját szintetizáltak. Számítógépes módszerekkel vizsgálták a reakció mechanizmusát és a gyűrűszerkezet kialakulását, beleértve a termodinamikai és kinetikai szempontokat is. Az ELTE kutatói

tömegspektrometriai mérésekkel járultak hozzá a munkához.

[Sándor Góbi](#),* [Barbara Keresztes](#), [Anita Schneiker](#), [György Tarczay](#)

Hydrogen-atom-assisted processes on thioacetamide in *para*-H₂ matrix – formation of thiol tautomers

[Physical Chemistry Chemical Physics, 26, 2204, 21589](#)

Thioacetamide (TA) has been isolated in low-temperature *para*-H₂ matrices and it has been exposed to H atoms. In accordance with previous experimental results, TA exclusively exists in its more stable thione tautomeric form in the freshly deposited matrix. However, upon H atom generation, the bands belonging to the precursor start decreasing with the simultaneous appearance of new bands. By comparing the position of these new peaks with earlier results obtained in *para*-H₂, they can be undoubtedly attributed to the presence of the higher-energy thiol tautomeric forms of TA. No other products could be observed, except for NH₃. Quantum-chemical computations have been invoked to understand the mechanism behind the observed thione–thiol tautomerization assisted by H atoms. Accordingly, tautomerization starts with barrierless H-atom addition on the S atom of the thione resulting in the formation of the intermediate 1-amino-1-mercapto-ethyl radical (H₃C–Ċ(SH)–NH₂), which has been detected tentatively for the first time. The second step is a barrierless H-atom induced H-abstraction from the –NH₂ moiety of the H₃C–Ċ(SH)–NH₂ radical. A comprehensive mechanism for tautomerization is proposed based on the experimental and theoretical

results. Although earlier studies showed the possibility of TA thione–thiol tautomerization in cryogenic matrices achieved by energetic UV irradiation, the present study points out that this can also take place through a barrierless pathway by simply exposing the TA molecules to H atoms. As such, this is the first evidence for the occurrence of such a reaction in a matrix-isolated environment. The current results also help us better understand the mystery behind thione–thiol tautomerization in low-temperature environments.

Normál körülmények között a tioacetamid (TA) kizárólag a stabilabb tion tautomer formájában létezik. Azonban alacsony hőmérsékletű *para*-H₂ mátrixban H-atomok hatására a tion spektrumvonalai csökkenni kezdtek, miközben új vonalak jelentek meg, amelyek a magasabb energiájú tiol tautomer formáknak felelnek meg. A kísérletek és kvantumkémiai számítások azt bizonyították, hogy a tion-tiol tautomerizáció mechanizmusa egy reakciógát nélküli H-atom addícióval, majd az azt követő, amincsoportról rörténő H-atom leszakítással írható le. Az eredmények új betekintést nyújtanak a tion-tiol tautomerizáció folyamatába alacsony hőmérsékletű környezetben.

Szerkezeti biokémia / Structural Biochemistry

Péter Ábrányi-Balogh, [Dávid Bajusz](#), [Zoltán Orgován](#), [Aaron B. Keeley](#), [László Petri](#), [Nikolett Péczka](#), [Tibor Viktor Szalai](#), [Gyula Pálffy](#), [Márton Gadanez](#), [Emma K. Grant](#), [Tímea Imre](#), [Tamás Takács](#), [Ivan Randelović](#), [Marcell Baranyi](#), [András Marton](#), [Gitta Schlosser](#), [Qirat F. Ashraf](#), [Elvin](#)

[D. de Araujo](#), [Tamás Karancsi](#), [László Buday](#), [József Tóvári](#), [András Perczel](#), [Jacob T. Bush](#), [György M. Keserű*](#)

Mapping protein binding sites by photoreactive fragment pharmacophores

[Communications Chemistry 7, 2024, 168](#)

Fragment screening is a popular strategy of generating viable chemical starting points especially for challenging targets. Although fragments provide a better coverage of chemical space and they have typically higher chance of binding, their weak affinity necessitates highly sensitive biophysical assays. Here, we introduce a screening concept that combines evolutionary optimized fragment pharmacophores with the use of a photoaffinity handle that enables high hit rates by LC-MS-based detection. The sensitivity of our screening protocol was further improved by a target-conjugated photocatalyst. We have designed, synthesized, and screened 100 diazirine-tagged fragments against three benchmark and three therapeutically relevant protein targets of different tractability. Our therapeutic targets included a conventional enzyme, the first bromodomain of BRD4, a protein-protein interaction represented by the oncogenic KRas^{G12D} protein, and the yet unliganded N-terminal domain of the STAT5B transcription factor. We have discovered several fragment hits against all three targets and identified their binding sites via enzymatic digestion, structural studies and modeling. Our results revealed that this protocol outperforms screening traditional fully functionalized and photoaffinity fragments in better exploration of the available binding sites and higher hit rates observed for even difficult targets.

A fragenszűrés egy olyan módszer, amely

segít új gyógyszerek kifejlesztésében, különösen nehezen kezelhető célpontok esetén. Ez a módszer kis molekulákat, úgynevezett fragmentumokat használ, amelyek segítségével a kutatók felfedezhetik, hogyan kötődnek ezek a molekulák a célfehérjékhez. A legújabb technika, amelyet a közlemény bemutat, egy új, érzékenyebb szűrési eljárást alkalmaz, amely lehetővé teszi, hogy még nehezen hozzáférhető fehérjékhez is könnyen találjanak kötődési helyeket, így jobb találati arányokat érhetünk el.

Zsolt Dürvanger, Fruzsina Bencs, Dóra K. Menyhárd, Dániel Horváth, András Perczel*

Solvent induced amyloid polymorphism and the uncovering of the elusive class 3 amyloid topology

[Communications Biology 7, 2024, 968](#)

Aggregation-prone-motifs (APRs) of proteins are short segments, which – as isolated peptides – form diverse amyloid-like crystals. We introduce two APRs - designed variants of the incretin mimetic Exendin-4 - that both display crystal-phase polymorphism. Crystallographic and spectroscopic analysis revealed that a single amino-acid substitution can greatly reduce topological variability: while LYIQWL can form both parallel and anti-parallel β -sheets, LYIQNL selects only the former. We also found that the parallel/anti-parallel switch of LYIQWL can be induced by simply changing the crystallization temperature. One crystal form of LYIQNL was found to belong to the class 3 topology, an arrangement previously not encountered among proteinogenic systems. We also show that subtle environmental changes lead to crystalline assemblies with

different topologies, but similar interfaces. Spectroscopic measurements showed that polymorphism is already apparent in the solution state. Our results suggest that the temperature-, sequence- and environmental sensitivity of physiological amyloids is reflected in assemblies of the APR segments, which, complete with the new class 3 crystal form, effectively sample all the originally proposed basic topologies of amyloid-like aggregates.

Az aggregációra hajlamos minták (APRs) olyan rövid fehérje szegmensek, amelyek önálló peptidként különféle amyloid-szerű kristályokat képeznek. Két, az Exendin-4 peptidekből tervezett APR-t vizsgáltak, amelyek mindegyike különböző kristályszerkezeteket mutatott. Az elemzés során kiderült, hogy egyetlen aminosav cseréje jelentősen csökkentheti a kristályszerkezetek variabilitását. Az egyik peptid a hőmérséklet változásával is módosíthatja a kristályszerkezetét, míg a másik egy új, eddig nem ismert kristályszerkezetet képvisel. Ezek a kutatások segítenek megérteni, hogyan alakulnak ki különféle fehérjeaggregátumok, ami fontos lehet az amyloid betegségek, mint például az Alzheimer-kór, jobb megértésében és kezelési lehetőségeinek fejlesztésében.

Anyagtudomány és elektrokémia / Material science and electrochemistry

Alain Rieder, Julia Lorenzetti, Iván Zelocualtecatl Montiel, Abhijit Dutta, Anna Iarchuk, Marta Mírolo, Jakub Drnec, Francesca Lorenzutti, Sophia Haussener, Noémi Kovács, Soma Vesztergom,* Peter Broekmann*

Studying Electrolyte Penetration Phenomena in Gas Diffusion Electrodes Applied to CO₂ Electrolysis

[Small Methods 2024, 2400200](#)

A carbon paper-based gas diffusion electrode (GDE) is used with a bismuth(III) subcarbonate active catalyst phase for the electrochemical reduction of CO₂ in a gas/electrolyte flow-by configuration electrolyser at high current density. It is demonstrated that in this configuration, the gas and catholyte phases recombine to form K₂CO₃/KHCO₃ precipitates to an extent that after electrolyses, vast amount of K⁺ ions is found by EDX mapping in the entire GDE structure. The fact that the entirety of the GDE gets wetted during electrolysis should, however, not be interpreted as a sign of flooding of the catalyst layer, since electrolyte perspiring through the GDE can largely be removed with the outflow gas, and the efficiency of electrolysis (toward the selective production of formate) can thus be maintained high for several hours. For a full spatial scale quantitative monitoring of electrolyte penetration into the GDE, (relying on K⁺ ions as tracer) the method of inductively coupled plasma–mass spectrometry (ICP–MS) assisted energy dispersive X-ray (EDX) tomography is introduced. This new, cheap and robust tomography of non-uniform aspect ratio has a large planar span that comprises the entire GDE surface area and a submicrometer depth resolution, hence it can provide quantitative information about the amount and distribution of K⁺ remnants inside the GDE structure, in three dimensions.

A szénszövet alapú rétegek fontos szerepet játszanak olyan eszközökben, amelyek a szén-dioxid átalakítását végzik elektromos

áram segítségével. Ezek a rétegek egyik oldalukon a gázzal, másik oldalukon pedig a folyadékkal érintkeznek. Ez a réteg lehetővé teszi, hogy a szén-dioxid, a víz és az elektromonok találkozzanak és reakcióba lépjenek, ami a kívánt átalakulást eredményezi. Ez csak akkor működik jól, ha a réteg nem ázik át teljesen, mert ha ez megtörténik, az eszköz hatékonysága jelentősen csökken. Ezért nagyon fontos megérteni, hogyan hat a folyadék a rétegre. A Vesztergom Soma által vezetett kutatócsoport egy új módszert dolgozott ki a Berni Egyetemen együttműködve, amely lehetővé teszi annak vizsgálatát, hogy mennyire és milyen módon ázik át ez a réteg. A módszer során egy különleges technikát alkalmaznak, amely megmutatja, hol maradtak hátra sónyomok a rétegben, és ezeket az eredményeket három dimenzióban lehet megjeleníteni. Ez az új módszer hatékonyabb és olcsóbb alternatívája lehet a jelenleg használt, drágább technikáknak.

Ahmed Ibrahim,* Kazuhiko Akiyama, Irfan Khan, Bofan Zhang, Ahmed Salah Ali, Katalin Sinkó, János Rohonczy, Zoltán Homonnay, Ernő Kuzmann, Marta Razum, Luka Pavić, Stjepko Krehula, Marijan Marciuš, Shiro Kubuki

Novel sol-gel route for expanding the glass forming region of tin phosphate glass for secondary battery electrode applications

[Journal of Alloys and Compounds 997, 224, 174930](#)

This paper investigates the relationship between electrical conductivity and structure of $x\text{SnO}_2-(100-x)\text{P}_2\text{O}_5$ ($x\text{SnP}$) samples with 'x' ran-

ging from 40 to 90 mol%. The $x\text{SnO}_2-(90-x)\text{P}_2\text{O}_5$ glass was successfully prepared with a wider chemical composition of SnO_2 concentration from 50 to 80 mol% by the sol-gel method. The ^{40}SnP and ^{90}SnP samples exhibited notably high σ 's of 1.79×10^{-4} and $6.40 \times 10^{-3} \text{ Scm}^{-1}$ attributed to their elevated levels of proton conductivity. ^{90}SnP as cathode demonstrated the highest initial capacity, achieving 37.97 mAh g^{-1} and maintaining a capacity retention of 48.15% after 100 cycles. ^{40}SnP and ^{90}SnP exhibited a large initial capacity of 375 mAh g^{-1} and 470 mAh g^{-1} , as anode materials in SIBs.

A kutatás új elektród anyagok fejlesztésével foglalkozik, amelyek úgynevezett szol-gél technikával készülnek, és a tüzelőanyag-cellaiban való alkalmazásukat célozzák meg. A tanulmány az $x\text{SnO}_2-(100-x)\text{P}_2\text{O}_5$ ($x\text{SnP}$) összetételű anyagok elektromos vezetőképességét vizsgálja. A kutatás során olyan speciális módszereket alkalmaztak, mint a ^{31}P -MAS NMR és a ^{119}Sn -Mössbauer spektroszkópia, amelyek segítségével részletes információkat nyertek az anyagok szerkezetéről és tulajdonságairól. Az elektromos vezetőképesség mérések is hozzájárultak a vizsgálathoz. Az eredmények szerint a ^{40}SnP és ^{90}SnP összetételű anyagok mutatták a legjobb vezetőképességet. Ezek az új anyagok lehetőséget adhatnak arra, hogy üveg- és nanokristályos kerámiákat használjunk szilárdtest akkumulátorokban, ami jelentős előrelépést jelenthet az energiatárolási technológiákban.

Zoltán Tóth,* Balázs Nagy, Péter Ádám, Katalin Sinkó, Ottó Temesi, György Bálint Lak, Zalán Veress, András Nagy, Emil Viktor Hodl, Levente Dudás

Thermal Performance Characterization of Battery Insulation on ATL-1 Picosatellite Mission.

[Journal of Engineering and Applied Sciences Technology, 6 2024, 1](#)

The ATL-1 2PQ format picosatellite was a collaborative experiment involving two companies, H-ION Research, Development and Innovation Ltd., and ATL cPlc., along with the Budapest University of Technology and Economics and the Eötvös Loránd University. This mission spanned approximately 11 months during which ATL-1 orbited in low Earth orbit. The aim of the project was the development of functional test used for the thin-layer insulation of the batteries. Three different, aluminium oxide-based, specially structured newly developed thermal insulation materials were used to insulate the batteries (developed at ELTE). These three materials were as follows: porous fibre, composite, and cryogel. Thermal insulation properties of the materials were investigated by three types of study: (i) thermal insulating intensity, (ii) temperature cyclicity resulted in by the orbit-determined solar irradiant flux variation and (iii) response time of the temperature change to the start and termination of solar irradiation due to orbiting the Earth ("daytime-nighttime" variation for the satellite). According to the results the porous fibre has the best thermal insulation properties.

Az űrjárművek, műholdak, repülőgépek fokozott igényrel lépnek fel minél jobb és minél könnyebb szigetelő anyagok iránt. Az ELTE-n kifejlesztettek különböző ultrakönnyű, nagy porozitású, kiváló szigetelőképességű alumínium-oxid alapú, nanoszerkezetű anyagokat. Az ATL-1 műhold feladata ezeknek az anyagoknak a tesztelése volt a világűrben. A három kiválasztott, 1 mm vastagságban alkalmazott anyag hőszigetelőképességét három szempontból értékelték: szigetelő

intenzitás, forgás következtében fellépő hőmérséklet ciklítás és a hőmérséklet-változásra adott válaszidő függvényében. A legjobb eredményt a nanopórusos szálrendszer hozta.

Analitikai és környezetkémia / Analytical and environmental chemistry

Nani Apriyana,* Marta Keller, Szabolcs Béni, Andrea Cattaneo, Victor G. Mihucz

Impact of vegetarian and vegan cooking on indoor air quality

[Applied Spectroscopy Reviews, 59, 2024, 850](#)

Plant-based diets are increasingly popular nowadays due to their benefits for human health and the environment. Vegan cooking activities also generate pollutants that might affect human health. Compared to outdoor air quality, indoor air quality (IAQ) is still underrated. Moreover, there is a lack of guidelines for pollutants generated in commercial and residential kitchens. The aim of this review was to characterize emission of pollutants arising from cooking of plant-based dishes and necessary instrumentation. Due to scarcity of studies focusing on IAQ for vegan cooking, emission data on the most common indoor air pollutants—fine particulate matter, polycyclic aromatic hydrocarbons, aldehydes, and ketones as well as volatile organic compounds—during cooking of plant-based and vegetarian dishes as well as of edible oil published in the past 10 years were used to estimate IAQ in kitchens. Attempt to define guideline values for air pollution in kitchens has also been made.

Ez az összefoglaló cikk a növényi alapú ételek főzése során keletkező légszennyező anyagokat és azok hatásait vizsgálja a beltéri levegőminőségre (IAQ). A növényi alapú étrendek egyre népszerűbbek egészségügyi és környezetvédelmi előnyeik miatt, azonban a főzés során keletkező szennyező anyagok, mint például a finom részecskék, policiklusos aromás szénhidrogének, aldehidek, ketonok és illékony szerves vegyületek, befolyásolhatják az emberek egészségét. A cikk összegzi az elmúlt 10 évben publikált kutatásokat, és megpróbálja meghatározni az egészséges beltéri levegőminőségre vonatkozó irányelveket a növényi alapú főzés esetében. Az ilyen adatok segíthetnek a konyhai légszennyezés csökkentésében, ami különösen fontos az egészséges beltéri környezet fenntartásához.

Csaba Kirckeszner, Noémi Petrovics, Aliz Széles, Yelena Koshman, Bálint Sámuel Szabó, Zoltán Nyiri, Márton Novák, Tamás Rikker, Zsuzsanna Eke*

Comprehensive study of retention influencing gas chromatographic parameters affecting linear retention indices

[Journal of Chromatography A, 1729, 2024, 465052](#)

Retention in gas chromatographic systems has a central role in the identification of compounds even if detectors providing spectral information are used. But linear retention indices (LRI) of a single compound originating from multiple sources tend to vary greatly, probably due to differences in the experimental settings of the determinations. The effect of gas chromatogra-

phic parameters on LRI has been investigated using 41 compounds – previously identified from food contact plastics – and n-alkanes (n-C7–n-C40) used as reference series. As the reproducibility of LRIs under the same conditions is generally very good, the smallest changes in the settings often caused statistically significant, though irrelevant changes in the LRI values. Therefore, a multicriterial scoring-ranking system has been worked out to highlight the LRI value differences. Our results highlight that column length, heating rate, and film thickness can all be the reasons of the varying published LRI values. We also demonstrated that for the reproduction of LRI data, the chemistry (and not simply the polarity) of the stationary phase is crucial.

A gázkromatográfiás elemzések során a vegyületek azonosításában a retenció idő kulcsszerepet játszik, még akkor is, ha nincs elérhető tömegspektrum. Azonban a vegyületek azonosításához használt adatbázisokban található retenció indexek (LRI) gyakran jelentősen eltérnek egymástól, ami főként a különböző mérési beállításokból adódik. Ebben a kutatásban 41 vegyületet vizsgáltak, és egy speciális pontrendszer segítségével elemezték, hogy mely paraméterek befolyásolják leginkább az LRI értékeket. A vizsgálat kimutatta, hogy a vivőgáz típusa és áramlási sebessége, valamint az oszlop átmérője alig befolyásolja az LRI-t, míg az oszlop hossza, az állófázis vastagsága és a felfűtési sebesség jelentős hatással vannak rá. A legnagyobb befolyást azonban az állófázis kémiai szerkezete gyakorolja a mérési eredmények megbízhatóságára. Ezek az eredmények segítenek pontosabban kiválasztani a megfelelő adatokat az adatbázisokból, így a vegyületek azonosítása

könnyebb és pontosabb lesz.

Asztrokémia / Astrochemistry

*Barbara Keresztes, Basheer Azaad, Anita Schneider, Sándor Góbi, Gopi Ragupathy, Péter G. Szalay, György Tarczay**

H-atom-assisted formation of key radical intermediates in interstellar sugar synthesis: New insights from *para*-H₂ matrix isolation experiments

[Astronomy and Astrophysics, 689, 2024, A21](#)

Despite the identification of the smallest sugar molecule, glycolaldehyde (GA), in the interstellar medium (ISM), its mechanism of formation in the ISM is still not fully understood. A more profound understanding of the interstellar chemistry of GA and related molecules could provide insights into whether larger sugar molecules can also form and survive under such conditions. The primary objectives of this research are to delve into the sugar formation mechanism in the ISM, especially in dark molecular clouds; unravel intricate details of H-atom-mediated reactions involving glyoxal (GO), GA, and ethylene glycol (EG); and identify intermediates playing potential roles in the formation of larger sugars or serving as intermediates in the destruction reaction paths of sugar molecules. The study utilizes the *para*-H₂ matrix isolation method with infrared (IR) spectroscopic detection and quantum chemical computations to investigate H-atom reactions of GO, GA, and EG at a low temperature. Several radical products were spectroscopically identified that might be key active species in the interstellar formation of larger sugar molecules.

A csillagközi tér kémiai viszonyainak laboratóriumi szimulálása komoly kihívás, mivel extrém, földi körülmények között nehezen előállítható viszonyokat kell teremteni. Az ELTE kutatói arra kerestek választ, hogy a csillagközi molekulafelhőkben zajló kémiai folyamatok során létrejöhetnek-e nagyobb cukormolekulák glioxálból, illetve a rádiócsillagászati módszerekkel már azonosított glikolaldehidből vagy etilén-glikolból. A kutatás központi kérdése az volt, hogy a csillagközi molekulafelhőkre jellemző körülmények között, hidrogénatomok jelenlétében keletkezhetnek-e olyan közti-termékek, amelyekből nagyobb molekulák épülhetnek fel. A kutatócsoport az általuk fejlesztett VIZSLA nevű asztrokémiai berendezést használta, amely pontosan képes szimulálni a csillagközi tér körülményeit laboratóriumi környezetben. A kísérletek során több reaktív gyököt is sikerült azonosítani, amelyek kulcsszerepet játszhatnak a nagyobb cukormolekulák képződésében. Ez a kutatás új távlatokat nyit a komplex szerves molekulák csillagközi keletkezésének megértésében.

*Anita Schneider, Sándor Góbi, Gopi Ragupathy, Barbara Keresztes, Gábor Bazsó, György Tarczay**

Investigating H-atom reactions in small PAHs with imperfect aromaticity: A combined experimental and computational study of indene (C₉H₈) and indane (C₉H₁₀)

[The Journal of Chemical Physics 160, 2024, 214303](#)

Polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) are

widely recognized as catalysts for interstellar H₂ formation. Extensive exploration into the catalytic potential of various PAHs has encompassed both theoretical investigations and experimental studies. In the present study, we focused on studying the reactivity of an imperfect aromatic molecule, indene (C₉H₈), and its hydrogenated counterpart, indane (C₉H₁₀), as potential catalysts for H₂ formation within the interstellar medium. The reactions of these molecules with H atoms at 3.1 K were investigated experimentally using the *para*-H₂ matrix isolation technique. Our experimental results demonstrate that both indene and indane are reactive toward H atoms. Indene can participate in H-atom-abstraction and H-atom-addition reactions, whereas indane primarily undergoes H-atom-abstraction reactions. The H-atom-abstraction reaction of indene results in the formation of the 1-indenyl radical (**R**₁) (C₉H₇) and H₂ molecule. Simultaneously, an H-atom-addition reaction forms the 1,2-dihydro-indene-3-yl radical (**R**₂) (C₉H₉). Experiments also reveal that the H-atom-abstraction reaction of indane also produces the **R**₂ radical. To the best of our knowledge, this study represents the first reporting of the infrared spectra of **R**₁ and **R**₂ radicals. The experimental results, combined with theoretical findings, suggest that indane and indene may play a role in the catalytic formation of interstellar H₂. Furthermore, these results imply a quasi-equilibrium between the investigated molecules and the formed radicals via H-atom-addition and H-atom-abstraction reactions.

Az MTA-ELTE Lendület Laboratóriumi Asztrokémia Kutatócsoportja kis policiklusos aromás szénhidrogének (PAH-ok) szerepét

vizsgálta a csillagközi hidrogénmolekulák képződésében, különös tekintettel az indén (C_9H_8) és hidrogénezett változata, az indán (C_9H_{10}) reakcióképességére, melyeket már korábban azonosítottak a csillagközi térben. A kísérletek során H-atomokkal reagáltatták ezeket a molekulákat 3,1 K hőmérsékleten, a VIZSLA nevű asztrokémiai kutatóberendezést használva, *para*- H_2 mátrix izolációs technikával. Eredményeik szerint mind az indén, mind az indán reakcióba lép H-atomokkal: az indén H-atom leszakadási és H-atom addíciós reakciókban vesz részt, míg az indán elsősorban H-atom leszakadási reakciókat mutat. Az indén H-atom elvonása során 1-indenil gyök (C_9H_7) és H_2 molekula képződik, míg H-atom addícióval 1,2-dihidro-indén-3-il gyök (C_9H_9) keletkezik.

Az indán H-atom leszakadása során szintén az utóbbi gyök képződik. A cikk elsőként közli e két gyök infravörös spektrumát, ami lehetőséget ad arra, hogy azonosítsák ezeket a csillagközi térben. Az eredmények rávilágítanak, hogy a nem tökéletes aromás rendszerrel rendelkező kis PAH molekulák, mint az indán és az indén, hozzájárulhatnak a csillagközi hidrogén képződéséhez, és hogy az észlelt reakciók egyensúlyi állapothoz vezethetnek a vizsgált molekulák és az azonosított gyökök között a csillagközi térben.

Wim Ubachs,* Attila G. Császár, Meissa L. Diouf, Frank M. J. Cozijn, Roland Tóbiás*

A Network Approach for the Accurate Characterization of Water Lines Observable in Astronomical Masers and Extragalactic Environments

[ACS Earth Space Chemistry, 2024](#)

The water molecule, crucial to the chemical composition and dynamics of the universe, is typically identified in its gas phase via radio and submillimeter transitions, with frequencies up to a few THz. To understand the physicochemical behavior of astronomical objects, accurate transition frequencies are required for these lines. From a set of 26 new and 564 previous Lamb dip measurements, utilizing our ultrasensitive laser-based spectrometers in the near-infrared region, ultrahigh-precision spectroscopic networks were set up for $H_2^{16}O$ and $H_2^{18}O$, augmented with 40 extremely accurate frequencies taken from the literature. Based on kHz-accuracy paths of these networks, considerably improved line-center frequencies have been obtained for 35 observed or predicted maser lines of $H_2^{16}O$, as well as for 14 transitions of astronomical significance of $H_2^{18}O$. These reference frequencies, attached with 5–25 kHz uncertainties, may help future studies in various fields of astrochemistry and astrophysics, in particular when precise information is demanded about Doppler-velocity components, including the gas flows of galactic cores, the kinematics of planetary nebulae, or the motion in exoplanetary atmospheres.

A vízmolekula (H_2O) izotopológjai alapvető szerepet játszanak az univerzum kémiai összetételének alakulásában. A csillagközi térben leggyakrabban a víz gázfázisú változatát azonosítják rádió és milliméter alatti hullámhosszakon, az ilyen észlelések értelmezéséhez rendkívül pontos nyugalmi frekvenciaadatok szükségesek. Ebben a kutatásban egy különlegesen érzékeny lézeres spektrométerrel a víz 590 rezgési-forgási spektrumvonalát mérték meg a közeli infravörös tartományban (minden vonal mérése legalább egy órát vesz igénybe), ezek között

új és a csoport által korábban mért adatok is szerepelnek. A méréseket Hollandiában végezték, míg az ELTE munkatársai a mérendő spektrumvonalak kiválasztását, azok helyének pontos becslését végezték, illetve a spektrumok kiértékelésében is segítettek az általuk kifejlesztett hálózatelméleti módszerek segítségével, és így rendkívül pontos adatokat kaptak a $H_2^{16}O$ és $H_2^{18}O$ izotopológok különböző tisztán forgási átmeneteire. Ezek a pontos frekvenciák - és nem a megmérték- kulcsfontosságúak a csillagközi megfigyelések során. Az eredmények nemcsak a csillagközi objektumok, például galaxisok magjaiban lévő gázok áramlását, planetáris ködök kinematikájának vagy exobolygók légkörének mozgását segítik megérteni, hanem a vízmolekula spektrális vonalainak pontos ismerete lehetővé teszi, hogy ezeket a vonalakat kiszűrjük a rádióasztrológiai mérések során. Ezáltal más, esetleg gyengébb jelekkel rendelkező molekulák is azonosíthatóvá válnak, hozzájárulva a csillagközi kémiai folyamatok mélyebb megértéséhez.

E. V. Petrova, A. V. Chukin, G. Varga, Zoltán Dankházi, G. Leitus, I. Felner, **Ernő Kuzmann, Zoltán Homonnay**, V. I. Grokhovsky, M. I. Oshtrakh*

Characterization of bulk interior and fusion crust of Calama 009 L6 ordinary chondrite

[Meteoritics and Planetary Science, 2024](#)

Fragment of Calama 009 L6 ordinary chondrite recovered in the Atacama Desert was chosen for a complex study of the bulk interior and the fusion crust by scanning electron microscopy (SEM) with energy-dispersive spectroscopy

(EDS), X-ray diffraction (XRD), magnetization measurements, and Mössbauer spectroscopy. SEM demonstrated the presence of Fe-Ni-Co grains, troilite and chromite inclusions in both the bulk interior and the fusion crust as well as many veins with ferric compound. EDS showed variations in the Ni concentration within the metal grains and within one metal phase in the grain. XRD revealed some differences in the contents of various phases in the bulk interior and in the fusion crust. XRD indicated the presence of magnesioferrite in the fusion crust as well as the formation of goethite nanoparticles with the mean size of 9 nm in both the bulk interior and the fusion crust. Magnetization measurements demonstrated the ferrimagnetic-paramagnetic phase transition in chromite at 44 K and low values of the saturation magnetization moments (6.46 and 3.26 emu g^{-1} at 100 K) for the bulk interior and the fusion crust, respectively, due to the lack of Fe-Ni-Co alloy as a result of weathering. The Mössbauer spectra of the bulk interior and the fusion crust showed some differences in the number and relative areas of spectral components. The revealing of the Mössbauer spectral components related to ^{57}Fe in the M1 and M2 sites in olivine and orthopyroxene as well as determining the Fe^{2+} occupations of these sites from XRD permitted us to estimate the temperature of equilibrium cation distribution for these silicates which are (i) 662 K (XRD) and 706 K (Mössbauer spectroscopy) for olivine and (ii) 893 K (XRD) and 910 K (Mössbauer spectroscopy) for orthopyroxene.

A Calama 009 L6 kondrit meteorit darabját vizsgálták az Atacama-sivatagból, hogy feltárják a belső szerkezetét és az olvadási kérgét. A kutatás során pásztázó elektronmikroszkópiát (SEM), röntgen-

diffrakciót (XRD), mágneses méréseket és Mössbauer-spektroszkópiát alkalmaztak. A SEM kimutatta a Fe-Ni-Co szemcséket és kromit zárványokat, míg az XRD magnezioferrit és goethit nanorészecskék jelenlétét azonosította. Mágneses mérések fázisátmenetet jeleztek a kromitban 44 K-nál, ami a meteorit üridőjárású kopását mutatja. A Mössbauer-spektroszkópia alapján megállapították az olivin és ortopiroxén egyensúlyi kation eloszlási hőmérsékleteit (olivin: 662 K és 706 K, ortopiroxén: 893 K és 910 K). Az eredmények fontos információkat nyújtanak a meteoritok képződési folyamatairól.

Reakciókinetika és reakciódinamika / Reaction kinetics and reaction dynamics

Krisztina Kurin-Csörgei, István Szalai, Miklós Orbán*

Radical chain mechanism for the $S_2O_8^{2-}$ - $S_2O_3^{2-}$ -Cu(II) flow system explains high-amplitude pH oscillations in the NH_4OH -modified version

[RSC Advances 14, 2024, 22939](#)

Peroxodisulfate is well known as an important reagent in analytical, environmental and other branches of chemistry, as well as in industrial processes. One of the most studied oxidative reactions peroxodisulfate participates in as an oxidizer is the Cu(II)-catalyzed peroxodisulfate-thiosulfate reaction. When carried out in a flow reactor, this system shows oscillatory dynamics characterized by periodic changes in the Pt-potential and $[O_2]$ while it only displays variation in the pH with a few tenths of unit magnitude. Our recent experiments unveiled an

increase of the amplitude of the pH oscillations that exceeds 4 units when NH_4OH was introduced into the oscillatory flow system. The dynamics of Cu(II)-catalyzed peroxodisulfate-thiosulfate reaction has been described in detail but the chemical mechanism explaining the oscillatory behavior has not been established. Based on what is known about the uncatalyzed reaction between peroxodisulfate and thiosulfate in the literature, we have developed a mechanism that includes radical chain reactions which can explain the oscillatory phenomena. The proposed mechanism includes 13 reactions with the radical ions $SO_4^{\cdot-}$, $S_2O_3^{\cdot-}$, $S_2O_8^{\cdot-}$, OH^{\cdot} and two acid-base equilibria, including the dissociation equilibrium of NH_4OH accounting for its effect on the amplitude of pH oscillations. Using this model, we successfully simulated the behavior of this system: (1) the evolution of the concentrations of the initial reagents, radicals, and catalyst over time in batch configuration, (2) the periodic changes in the concentrations of radicals and the oxidized and reduced forms of the catalyst, pH and $[O_2]$ in flow conditions. Our model also explains the amplification of the pH cycles without impacting the redox processes when NH_4OH is added, which is a novel phenomenon observed in nonlinear chemical reactions. The high amplitude pH oscillations we report in the peroxodisulfate-thiosulfate-Cu(II)- NH_4OH flow reaction may enable future applications where this system may serve (a) as a core oscillator in coupled chemical systems, or (b) as a pH oscillator capable of running in a closed reactor configuration.

Az „Oscilláló kémiai reakciók” kutatási projekt során a kutatócsoportnak sikerült olyan rendszert létrehozni, amelyben a pH-érték (azaz a savasság vagy lúgosság

mértéke) jelentősen, nagy kilengéssel (körülbelül 4-es pH különbség) változik 30-50 percenként, mind átfolyásos, mind álló reaktorban. Ezt a nagy pH-ingadozást egy korábbi, kisebb pH-változású rendszer módosításával érték. A jelenség magyarázatára javasoltak egy mechanizmust, amit számítógépes szimulációkkal is teszteltek. Az új rendszer hasznos lehet olyan rendszerekben, ahol pH-érzékeny kémiai, fizikai vagy biokémiai folyamatokat kell szabályozni.

Janka Borsó, Máté Papp, Viktor Józsa, Tamás Turányi*

Modelling of JP-8 distributed combustion using a HyChem mechanism under gas turbine conditions

[Results in Engineering, 23, 2024, 102596](#)

The critical advantages of liquid fuels in aviation over alternative energy carriers imply their dominance in the upcoming decades. The Mixture Temperature Controlled (MTC) combustion concept allows spatially homogeneous, efficient burning (distributed combustion) with low pollutant emission. MTC combustion of jet fuel JP-8 was investigated in an atmospheric burner, and the measured pollutant concentrations in the flue gas were reproduced using the Hybrid Chemistry (Hy-Chem) approach employing Perfectly Stirred Reactor simulations. Using this robust approach comes with losing spatiotemporal characteristics if the mixture homogeneity assumption is globally valid. The effect of residence time and pressure under typical gas turbine operating conditions was investigated. Stable combustion was present above 3 ms residence time at all pressures, while the lower limit was 0.3 ms.

The residence time interval of stable operation could be extended by applying flue gas recirculation. NO emission can be reduced by increasing the operating pressure, while the N_2O production is dominant only up to 20 bar and in the 10–100 ms residence time range. CO emission vanishes above 10 ms residence time. Ultra-low emission operation requires >20 bar pressure and 10 ms residence time with distributed combustion, requiring larger combustion chambers for future jet engines.

A repülőgépek többsége gázturbinákat használ és ezek sok nitrogén-oxidot (NO, NO_2 és N_2O) bocsátanak ki, amelyek szmogot és savas esőt okoznak, valamint hozzájárulnak az ózonréteg vékonyításához. A mai gázturbinákban egyes helyeken magas a hőmérséklet („forró helyek”) és itt keletkezik a nitrogén-oxidok legnagyobb része a levegő nitrogénjéből. A BME kutatói kifejlesztettek egy módszert arra, hogy az égések során ne keletkezzenek ilyen forró helyek és az elképzelésüket légköri nyomású laboratóriumi kísérletekkel igazolták. Az ELTE kutatói számítógépes szimulációkkal sikeresen reprodukálták ezeket a kísérleti eredményeket és megmutatták, hogy ez az új módszer várhatóan a nagy nyomáson üzemelő repülőgépi gázturbinákban is sikeresen alkalmazható lesz a környezeti terhelés csökkentésére.

András Gy. Szanthoffer, Máté Papp, Tamás Turányi*

Identification of well-parameterised reaction steps in detailed combustion mechanisms – a case study of ammonia/air flames

[Fuel, 2024](#)

Testing detailed combustion mechanisms typically concludes that some mechanisms reproduce the experimental data well at most conditions but are inaccurate at other conditions. However, other mechanisms may perform well under these conditions. A better mechanism (“mosaic mechanism”) may be obtained by identifying the overall best-performing mechanism and loaning the most important reaction steps and their rate parameters from another mechanism with good performance at the conditions where the overall best model is ill-performing. A new algorithm based on this approach is presented here, which is successfully applied using a comprehensive collection of NH_3 /air laminar burning velocity data (348 data points in 61 data series) and eight recent detailed NH_3 combustion mechanisms. The suggested new mosaic mechanism is an improved version of the CEU-2022 mechanism and provides a better reproduction of the utilised data than the previously published mechanisms. The proposed algorithm can be applied to any chemical kinetics system and any other types of experiments. All data needed to apply the algorithm to various combustion systems are already available or can be generated with minimal human effort using the experimental data files, mechanisms, and codes available on the [ReSpecTh website](#).

Az emberiség történetében a különböző anyagok égetése már az őskorban elkezdődött, bár természetesen az ősemberek nem ismerték az égés fizikai és kémiai hátterét. Ma is gyakran használjuk az égést, hiszen például egy autó motorjában az üzemanyag égetése, egy kémiai folyamat

termeli azt az energiát, amivel menni tud az autó. Az égési folyamatok során rengeteg, akár több tízezer kémiai reakció játszódik le egyszerre az égéstérben. Az égésen alapuló berendezések megtervezéséhez, és új, kedvezőbb tulajdonságú üzemanyagok fejlesztéséhez és alkalmazásához szükséges ezen kémiai reakciólépések sebességének pontos ismerete. Napjainkban kiemelten fontos terület olyan alternatív üzemanyagok kutatása, amelyek megújuló energiaforrások felhasználásával előállíthatók elő. Az ammónia nem tartalmaz szénatomot, így szén-dioxid-kibocsátás nélkül elégethető, ezért alkalmas lehet arra, hogy nagy mértékben kiváltsa a jelenleg energiatermelésre használt fosszilis tüzelőanyagokat. Ebben a munkában egy új módszer kifejlesztését mutatjuk be, amellyel az eddigieknél pontosabb égéskémiai modellt hozhatunk létre tetszőleges tüzelőanyag esetén. Az ELTE kutatói a módszert sikeresen alkalmazták ammónia/levegő gázelegyek égetésének pontosabb leírására.

*Márton Kovács, Máté Papp, András Gy. Szantoffer, István Gy. Zsély, Tibor Nagy, Tamás Turányi**

Optimization of a methanol/ NO_x combustion mechanism based on a large amount of experimental data

[Fuel 375, 2024, 132544](#)

Investigating the methanol (CH_3OH) / nitrogen-oxides (NO_x) combustion system is an important task since methanol is a promising alternative to fossil fuels, and its interactions with nitrogen oxides are significant due to environmental effects. The performances of the recently available detailed mechanisms

in simulating the experimental results are still unsatisfactory. The aim of this work is to develop a more reliable reaction mechanism using parameter optimization. First, the Glarborg-2018 mechanism was updated with the rate parameters of the previously optimized H_2/NO_x and methanol mechanisms of ELTE. A large collection of literature data was compiled, which consists of direct measurements and theoretical determinations of the rate coefficients (2175 data points in 130 data series), indirect measurements of the formaldehyde (CH_2O)/ NO_x and $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NO}_x$ system in homogenous reactors (2373 data points in 225 data series), and the neat CH_3OH and CH_2O subsystems in homogenous reactors and flames (689 data points in 68 data series). Using code Optima++, we optimized the rate parameters of the 24 most important elementary reactions that were identified by the recent PCALIN (Principal Component Analysis of the Parameter-Uncertainty and Data-Uncertainty Scaled Local Sensitivity Matrix with Linear Corrections) active parameter selection method as most influential. The optimized rate coefficients were assessed in detail and compared with literature data. The optimized mechanism can reproduce the $\text{CH}_2\text{O}/\text{NO}_x$ and $\text{CH}_3\text{OH}/\text{NO}_x$ combustion experimental data on average within their 3.5σ experimental uncertainty, which means it performs significantly better than the previously published mechanisms, which have average errors larger than 5σ . The reproduction of neat CH_3OH and CH_2O experimental data also improved. The optimized mechanism was also tested on experimental data of the H_2 , H_2/NO_x , syngas, and syngas/ NO_x combustion systems. In all cases, the optimized mechanism reproduced these experimental data better than the initial mechanism, although these

data were not used as optimization targets.

Napjaink egyik legnagyobb kihívása a globális felmelegedés megállítása, és a fosszilis tüzelőanyagok használatának visszaszorítása. Ezek égetése során számos környezetszennyező melléktermék keletkezhet, ilyenek például a nitrogén-oxidok (NO_x). Az NO és NO_2 a légkörbe jutva a savas esők és a fotokémiai szmog kialakulásáért felelős, a N_2O még a szén-dioxidnál is erősebb üvegházhatású gáz. Egy alkalmas alternatív üzemanyag lehet a metanol, amelyet elő lehet állítani biometanolként, például takarmányfűvekből, fákból, növényi maradványokból vagy rizskorpából. Fontos, hogy ismerjük, milyen reakciók játszódnak le az égési folyamatok során a metanol és nitrogén-oxidok között. Ezt részletes reakciókinetikai mechanizmusokkal lehet megtenni. Ebben a publikációban számítógépes szimulációk segítségével egy metanol/ NO_x mechanizmust fejlesztettek ki az ELTE Reakciókinetikai Laboratóriumának kutatói. Az új mechanizmus lehetővé teszi, hogy minden korábbiánál pontosabban lehessen szimulálni a kísérleti eredményeket a metanol/ NO_x égési folyamatokra.

Elméleti és számítási kémia / Theoretical and computational chemistry

*Bence Balázs Mészáros, Károly Kubicskó, Dávid Dorián Németh, János Daru**

Emerging Conformational-Analysis Protocols from the RTCONF55-16K Reaction Thermochemistry Conformational Benchmark Set

[Journal of Chemical Theory and Computation](#)



[20, 2024, 7385](#) [ChemrXiv](#)

RTCONF55-16K is a new, reactive conformational data set based on cost-efficient methods to assess different conformational analysis protocols. Our reference calculations underpinned the accuracy of the CENSO (Grimme et al. J. Phys. Chem. A, 2021, 125, 4039) procedure and resulted in alternative recipes with different cost-accuracy compromises. Our general-purpose and economical protocols (CENSO-light and zero, respectively) were found to be 10–30 times faster than the original algorithm, adding only 0.4–0.7 kcal/mol absolute error to the relative free energy estimates.

Ez ELTE kutatói egy új módszert dolgoztak ki, amely gyors és költséghatékony elemzést tesz lehetővé a kémiai reakciókban részt vevő molekulák különböző térszerkezeteinek vizsgálatára. A kutatók létrehoztak egy adatbázist, amely több mint 16 000 különböző molekuláris elrendezést tartalmaz 55

reakcióhoz. A módszer célja, hogy gyorsabb, mégis pontos eredményeket nyújtson a molekulák energiájának számításában. Az új eljárások akár 30-40 szer gyorsabbak lehetnek, mint a korábbi eljárások, miközben a hibahatár minimális marad. Különösen hasznosnak bizonyult a legstabilabb molekulaformák gyors meghatározása, ami segít a reakciók energetikai jellemzésében. Az új protokollok alkalmazása különösen ajánlott a flexibilis molekulák vizsgálatánál, mivel ezek esetében jelentős eltérések lehetnek a különböző térszerkezetek energiái között. Ez a módszer jelentős előrelépés lehet a számítógépes kémia területén, mivel gyors és pontos eredményeket biztosít alacsony számítástechnikai háttérigénnyel.

*Ayaki Sunaga, Gustavo Avila, Edit Mátyus**

Variational Vibrational States of Methanol (12D)

[Journal of Chemical Theory and Computation, 2024](#) [arXiv](#)

Full-dimensional (12D) vibrational states of the methanol molecule (CH_3OH) have been computed using the GENIUSH-Smolyak approach and the potential energy surface from Qu and Bowman (2013). All vibrational energies are converged better than 0.5 cm^{-1} with respect to the basis and grid size up to the first overtone of the CO stretch, ca. 2000 cm^{-1} beyond the zero-point vibrational energy. About 70 torsion-vibration states are reported and assigned. The computed vibrational energies agree with the available experimental data within less than a few cm^{-1} in most cases, which confirms the good accuracy of the potential energy surface. The computations are carried out using curvi-



linear normal coordinates with the option of path-following coefficients, which minimize the coupling of the small- and large-amplitude motions. It is important to ensure tight numerical fulfillment of the $C_{3v}(M)$ molecular symmetry for every geometry and coefficient set used to define the curvilinear normal coordinates along the torsional coordinate to obtain a faithful description of degeneracy in this floppy system. The reported values may provide a computational reference for fundamental spectroscopy, astrochemistry, and for the search of the proton-to-electron mass ratio variation using the methanol molecule.

A ELTE Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoportja a metanolmolekula (CH_3OH) rezgési energiaszintjeit nagyon pontosan számolták ki egy speciális matematikai módszerrel, amely 12 dimenzióban vizsgálja a molekulát. A számítások annyira precízek, hogy a kapott eredmények csak

nagyon kicsit térnek el a kísérletek során mért értékektől. Ez azt jelenti, hogy a metanol rezgéseit most már nagyon pontosan ismerjük, és ez az információ fontos lehet például az asztrofizikában vagy a molekuláris spektroszkópiában. A kutatás nagyszerűsége abban rejlik, hogy egy bonyolult rendszert sikerült ilyen pontosan leírni, ami segíthet más tudományterületeken is.

*Balázs Rácsai, Dávid Ferenc, Ádám Margócsy, Edit Mátyus**

Regularized relativistic corrections for polyelectronic and polyatomic systems with explicitly correlated Gaussians

[The Journal of Chemical Physics \(Communication\) 160, 2024, 211102](#) [arXiv](#)

Drachmann's regularization approach is implemented for floating explicitly correlated Gaussians (fECGs) and molecular systems. Earlier applications of drachmannized relativistic corrections for molecular systems were hindered due to the unknown analytic matrix elements of $1/r_{ix}1/r_{iy}$ -type operators with fECGs. In the present work, one of the $1/r$ factors is approximated by a linear combination of Gaussians, which results in calculable integrals. The numerical approach is found to be precise and robust over a range of molecular systems and nuclear configurations, and thus, it opens the route towards an automated evaluation of high-precision relativistic corrections over potential energy surfaces of polyatomic systems. Furthermore, the newly developed integration approach makes it possible to construct the matrix representation of the square of the electronic Hamiltonian relevant for energy lower-bound as well as time-dependent com-

putations of molecular systems with a flexible and high-precision fECG basis representation.

Az ELTE Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoportja egy speciális matematikai módszert fejlesztett ki, amellyel molekulák tulajdonságait lehet nagyon pontosan kiszámítani. Eddig azért volt nehéz bizonyos számításokat elvégezni, mert bonyolult matematikai elemeket kellett kezelni, de most egy új trükkel ezeket egyszerűsítették. Ez a módszer lehetővé teszi, hogy nagy pontossággal számítsanak ki energiákat és egyéb fontos jellemzőket különböző molekuláknál, ami segíthet új anyagok felfedezésében vagy pontosabb kémiai elemzésekben. Az eredmények nagyon ígéretesek, mert egy széles körben alkalmazható és robusztus megoldást kínálnak.

*Péter Hollósy, Péter Jeszenszki, Edit Mátyus**
One-Particle Operator Representation over Two-Particle Basis Sets for Relativistic QED Computations

[Journal of Chemical Theory and Computation](#)
[20, 2024, 5122](#) [arXiv](#)

This work is concerned with two-spin-1/2-fermion relativistic quantum mechanics, and it is about the construction of one-particle projectors using an inherently two-particle, “explicitly correlated” basis representation necessary for good numerical convergence of the interaction energy. It is demonstrated that a faithful representation of the one-particle operators, which appear in intermediate but essential computational steps, can be constructed over a many-particle basis set by accounting for the full Hilbert space beyond the physically

relevant antisymmetric subspace. Applications of this development can be foreseen for the computation of quantum-electrodynamics corrections for a correlated relativistic reference state and high-precision relativistic computations of medium-to-high-Z helium-like systems, for which other two-particle projection techniques are unreliable.

A közlemény két egymással kölcsönhatásban lévő, úgynevezett „spin-1/2” részecske relativisztikus kvantummechanikai leírásával foglalkozik. A cél az volt, hogy egy olyan módszert fejlesszenek ki, amely segít pontosan kiszámítani a részecskék közötti kölcsönhatási energiáit. Ehhez egy bonyolult matematikai alapot használtak, amely figyelembe veszi a teljes kvantummechanikai tér összes lehetőségét, nem csak a fizikailag fontos részeket. Ez a módszer lehetővé teszi, hogy a relativisztikus kvantumelektrodinamika elmélete nagyon pontos számítások révén alkalmazható legyen atomi és molekuláris rendszerekre.

*Ádám Nonn, Ádám Margócsy, Edit Mátyus**
Bound-State Relativistic Quantum Electrodynamics: A Perspective for Precision Physics with Atoms and Molecules

[Journal of Chemical Theory and Computation](#)
[20, 2024, 4385](#) [arXiv](#)

Precision physics aims to use atoms and molecules to test and develop the fundamental theory of matter, possibly beyond the Standard Model. Most of the atomic and molecular phenomena are described by the QED (quantum electrodynamics) sector of the

Standard Model. Do we have the computational tools, algorithms, and practical equations for the most possible complete computation of atoms and molecules within the QED sector? What is the fundamental equation to start with? Is it still Schrödinger's wave equation for molecular matter, or is there anything beyond that? This paper provides a concise overview of the relativistic QED framework and recent numerical developments targeting precision physics and spectroscopy applications with common features with the robust and successful relativistic quantum chemistry methodology.

A kutatás célja, hogy atomok és molekulák segítségével vizsgálják az anyag alapvető elméleteit, esetleg olyan új felfedezéseket téve, amelyek túlmutatnak a jelenlegi fizikai modelleken. A legtöbb atomos és molekuláris jelenséget a kvantumelektrodinamika írja le, ami a Standard Modell része. A kutatás arra keresi a választ, hogy rendelkezünk-e a megfelelő eszközökkel és módszerekkel ahhoz, hogy a lehető legpontosabban kiszámoljuk az atomok és molekulák viselkedését ezen elmélet alapján. A tanulmány áttekintést ad a legújabb számítási módszerekről, amelyek a precíz fizikai mérésekhez és megfigyelésekhez kapcsolódnak.

Dávid Péter Jelenfi, Attila Tajti, Péter G. Szalay*
Interpretation of molecular electron transport in ab initio many-electron framework incorporating zero-point nuclear motion effects

[Journal of Computational Chemistry](#) 45, 2024, 1968 [ChemRxiv](#)

A computational methodology, founded on chemical concepts, is presented for interpreting the role of nuclear motion in the electron transport through single-molecule junctions (SMJ) using many-electron ab initio quantum chemical calculations. Within this approach the many-electron states of the system, computed at the SOS-ADC(2) level, are followed along the individual normal modes of the encapsulated molecules. The inspection of the changes in the partial charge distribution of the many-electron states allows the quantification of the electron transport and the estimation of transmission probabilities. This analysis improves the understanding of the relationship between internal motions and electron transport. Two SMJ model systems are studied for validation purposes, constructed from a conductor (BDA, benzene-1,4-diamine) and an insulator molecule (DABCO, 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octane). The trends of the resulting transmission probabilities are in agreement with the experimental observations, demonstrating the capability of the approach to distinguish between conductor and insulator type systems, thereby offering a straightforward and cost-effective tool for such classifications via quantum chemical calculations.

Ez a kutatás a molekuláris vezetés vizsgálatával foglalkozik, amelynek fontos szerepe lehet a számítógépek miniaturizálásában. A cél az, hogy megértsük, hogyan viselkedik egy molekula, amikor két arany elektróda közé helyezjük, és rajta áramot vezetünk keresztül. A kutatás kimutatta, hogy a molekula rezgései segítenek az elektronoknak átjutni az elektródák között, anélkül, hogy az elektronok valójában végig mennek a molekulán. Ez az eredmény különösen érdekes, mert a klasszikus fizikában nem lenne

erre magyarázat, de a kvantummechanika keretein belül lehetséges ilyen jelenségek előfordulása. A módszerrel olyan rendszereket is vizsgálhatók, amelyek vezetők vagy szigetelők, ami fontos lehet a jövő elektronikai eszközeinek fejlesztésében.

András Gombás, Péter R. Surján,* Ágnes Szabados**

Analysis and Assessment of Knowles' Partitioning in Many-Body Perturbation Theory

[Journal of Chemical Theory and Computation](#) 20, 2024, 5094

A detailed analysis of a new partitioning in many-body perturbation theory recently proposed by Knowles (J. Chem. Phys. 156, 011101, 2022), termed "perturbation adapted partitioning" (PAPT), is presented. Level shift and orbital rotation effects are identified as gears of the zero-order Hamiltonian. These two components are examined separately, revealing that, in themselves, neither of the two is competitive with the combined effect. The success of PAPT can be attributed to determining a set of molecular orbitals and corresponding orbital energies that can systematically outperform the canonical orbitals and Koopmans' energy-based Møller–Plesset partitioning. The self-consistent version of the method is also tested in terms of energy and convergence. Previous numerical studies are further complemented with an application to an inherent multireference example and an investigation of van der Waals interaction energies. In addition, a rigorous mathematical analysis of the consequence of the linear dependence of projection functions on the

solution of the Knowles' equations is provided.

AZ ELTE Elméleti Kémia Laboratóriumának munkatársai egy új elméleti módszert dolgoztak ki, amely segíthet a molekulák viselkedésének pontosabb előrejelzésében. A vegyületek vizsgálata történhet kísérletekkel vagy számítógépes modellezéssel, és a cél az, hogy a két megközelítés közelebb kerüljön egymáshoz. A bemutatott új matematikai módszer javítja a molekulák energiájának és szerkezetének számítását, ezzel pontosabb eredményeket nyújt. A módszer olyan elvek alapján működik, amelyek lehetővé teszik, hogy a bonyolult egyenleteket könnyebben és hatékonyabban oldjuk meg, és ezáltal jobban megértsük az anyagok tulajdonságait és kölcsönhatásait. Ez különösen fontos lehet például a van der Waals erők és más gyenge kölcsönhatások vizsgálatánál.

Oktatásmódszertan / Educational chemistry

*Dániel Kovács, Fanni Sebák, C. Lilla Szabó, Andrea Bodor**

Determination of Phosphorus Content in Cola Drinks by ^{31}P NMR Spectroscopy Using External Calibration and Standard Addition Approaches

[Journal of Chemical Education](#) 101, 2024, 2524

Both undergraduate and graduate students in chemistry are generally introduced to nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy as a structure determination tool focusing on ^1H and ^{13}C measurements. However, NMR has also become an efficient analytical instrument with

various applications including routine food analysis and quantitative impurity determination. These quantitation possibilities are rarely encountered in university laboratory practicals, especially in combination with the measurement of other nuclei. In the present paper, we introduce a laboratory practical regarding the determination of the phosphorus content of a cola drink sample using quantitative ^{31}P NMR (^{31}P qNMR) spectroscopy. Two different calibration approaches are utilized: the external calibration based on dilution series and sequential standard addition. The described experiments have been done by bachelor students in chemistry for more than 10 years and have been part of a bioanalytical chemistry course for biotechnological engineering students for 2 semesters now. Experience has shown that this laboratory practical helps students understand various basic principles of calibration in quantitative instrumental analysis and provides a better understanding of how to run NMR measurements, while data evaluation conveys numerous important concepts. As tested, the practical can also be successfully used in online and distance education.

Az ELTE Kémiai Intézetében 10 éve oktatott NMR spektroszkópai laborgyakorlat bemutatása. A műszeres analitikai laborgyakorlat keretében üdítőital foszfortartalmának meghatározása a cél. Kiválóan alkalmas olyan fogalmak tanítására, gyakorlására, mint:

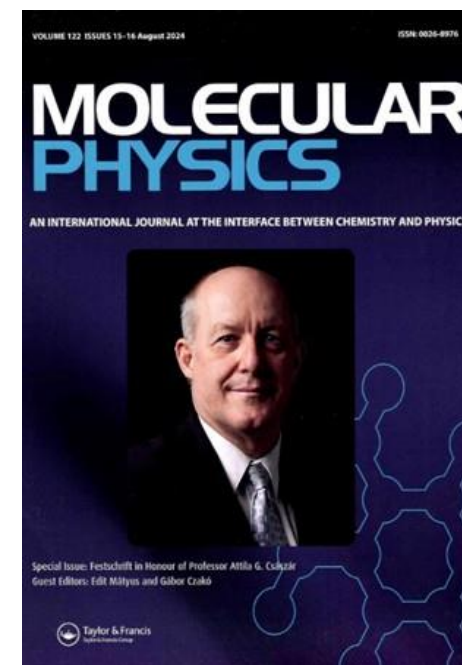
- kalibrációs görbe, hígítási sor;
- standard addíció
- X magok NMR spektroszkópiája: ^{31}P NMR
- kvantitatív NMR mérések.

A gyakorlat a Bruker céggel közösen átdolgozásra került a széleskörben elérhető [#EducatetoResonate](#) NMR Edulabs formá-tummá.

Császár Attila különszám / Festschrift in Honour of Professor Attila G. Császár

Császár Attila 65. születésnapja alkalmából a [Molecular Physics](#) egy dupla különszámmal jelentkezett. Itt most csak az *ELTE-s kollégák* és korábbi *ELTE-s doktoranduszok* cikkeit listázzuk. A teljes cikklista elérhető a folyóirat honlapján. (Korábban Szalay Péter születésnapjára is megjelent [Molecular Physics különszám](#).) Gratulálunk Császár Attilának, és köszönjük, hogy öregbítette Intézetünk hírnevét is!

A special issue of [Molecular Physics](#) was published on the occasion of his 65th birthday of Prof. Attila Császár. Here we list only contributions by *ELTE colleagues* and *former doctoral students*. The full list of 24 articles is available on the journal's website. (Last year, another [special issue of](#)



[Molecular Physics](#) was also published in honour of Prof. Péter Szalay.) Congratulations to Prof. Attila Császár, and thank you for enhancing the reputation of our Institute.

Edit Mátyus, Gábor Czakó

Foreword to the Festschrift in honour of Professor Attila G. Császár: molecules (always) in motion

Csaba Fábri

Practical guide to the statistical mechanics of molecular polaritons

Péter R. Surján, Ágnes Szabados, András Gombás

Real eigenvalues of non-hermitian operators

Xiangkun Wu, Patrick Hemberger, Andras Bodi

Enlightening salt: enthalpy of formation of gaseous sodium chloride by photoelectron photoion coincidence spectroscopy

Réka A. Horváth, Mihály Kállay

Basis set limit MP2 energies for extended molecules via a reduced-cost explicitly correlated approach

Yuji Fukuda, Tamás Szidarovszky, Masao Nakata, Akiyoshi Hishikawa, Kaoru Yamanouchi

Ion-core switching in Rydberg series of XeKr

Anita Schneiker, György Tarczay

Cryogenic gastronomy at The Restaurant at the End of the Universe – exploring interstellar serine synthesis from α -glycyl radical and other ingredients

Ádám B. Szirmai, Bónis Barcza, Attila Tajti, Péter G. Szalay

Accuracy of projected atomic virtual orbital space in embedding applications

TUDOMÁNYOS DIÁKKÖR / SCIENTIFIC STUDENTS' ASSOCIATIONS CONFERENCE TDK 2024/25

A tudományos diákköri mozgalom a tudomány iránt érdeklődő hallgatókat segíti, hogy bevezetést nyerjenek a kutatói életbe. Az ELTE Kémiai Intézet hallgatói alap-, mester- és tanárszakos képzéseken túl is részt vehetnek kutatásokban, ha csatlakoznak egy témavezetőhöz és kutatócsoportjához. Munkájuk eredményeit az évente megrendezett Intézeti TDK, és a kétévente megrendezett országos TDK (OTDK) konferenciákon mutatják be.

2024. december 7-én 9:00 órai kezdettel kerül megrendezésre a 2024–2025-ös tanév Kari Kémiai Tudományos Diákköri Konferenciája, amelyre az ELTE hallgatóinak dolgozatait várjuk kémia szakterületen. Az Intézeti TDK Konferencián való részvétellel hallgatóink nevezési jogot szerezhetnek a 2025-ben Debrecenben tartandó Országos TDK Konferenciára. A konferenciára nevezni 2024. október 30-án 17:00 óráig lehet egy online jelentkezési lap kitöltésével, majd a dolgozatokat 2024. november 8-án 17:00 óráig kell beküldeni (digitális formában). A konferencia pontos helyszínéről és a részletes programról később, a dolgozatok beérkezése után adunk tájékoztatást a [Kémia Szakterületi TDK honlapján](#).

The Scientific Student's Association movement offers students passionate about science an opportunity to step into the world of research. At the ELTE Institute of Chemistry, students can engage in research beyond their bachelor's,

master's, or teaching programs by joining a supervisor and their research group. Their findings are showcased at the annual Institute TDK and the biannual national TDK (OTDK) conferences.

The Chemistry Scientific Student Conference of the Science Faculty of ELTE 2024–2025 will take place on 7 **December 2024, starting at 9:00**. ELTE students in chemistry are invited to submit their papers. Participation in this event will qualify students for the **National TDK Conference 2025**, in Debrecen. The deadline for conference registration is **30 October 2024, by 17:00**, via an online form. Papers in digital format must be submitted by **8 November 2024, 17:00**. The exact location and detailed program will be available later on the [Chemistry TDK website](#), following the submission of papers.

MUNKATÁRSAINK KIEMELT ELŐADÁSAI / DISTINGUISHED PRESENTATIONS BY OUR COLLEAGUES

Munkatársaink és doktoranduszaink számos előadást tartanak hazai és nemzetközi konferenciákon. Terjedelmi korlátok miatt itt csupán a 2024. júniusától szeptember közepéig terjedő időszakban nemzetközi konferenciákon tartott meghívott előadásokat és más egyetemeken bemutatott szemináriumi előadásokat ismertetjük.

Our colleagues and graduate students present at numerous domestic and international conferences. Due to space constraints, we will only outline the invited presentations given at

international conferences and seminar talks held at other universities during the period from June to mid-September 2024.

- András Perczel delivered an invited talk at the [Final iNEXT-Discovery Annual Consortium Meeting](#), held in Brno, Czech Republic, from 10 to 14 June, 2024.
- Attila Császár delivered an invited talk at the [Spectroscopy and Dynamics of Coupled Anharmonic Vibrations of Floppy Molecular Systems](#) workshop, held in Telluride, CO, USA, from 10 to 14 June, 2024.
- Attila Császár gave an invited talk at University of Colorado, Boulder, CO, USA on 21 June, 2024.
- Edit Mátyus delivered an invited talk at the [18th Strasbourg Seminars: European Seminar on Computational Methods in Quantum Chemistry \(ESCMQC\)](#), held from 26 to 28 June 2024 in Copenhagen, Denmark.
- András Perczel delivered an invited talk at the [Chemistry Towards Biology 11](#) conference, held in Krakow, Poland, from 1 to 4 July, 2024.
- Edit Mátyus presented an invited talk at the [8th High-Dimensional Quantum Dynamics Workshop: Techniques, Challenges, and Applications](#) held from 16 to 19 July, 2024 in Hamburg, Germany.
- János Daru was an invited speaker at the [CECAM workshop on Machine Learning Potentials: From Interfaces to Solution](#), held from August 27 to August 29, 2024, at Ruhr University Bochum.
- Péter Surján gave an invited talk at the [19th Central European Symposium on Theoretical Chemistry \(CESTC\)](#), which took place in Sveti Martin na Muri, Croatia, from 11 to 14 September, 2024.

RÖVID HÍREK / SHORT NEWS

At the “Highlighting Organic Chemistry in Hungary” event, organized by the European Chemical Society, seven Hungarian research groups were given the opportunity to present their work, including the [MTA-ELTE Protein Modeling Research Group](#). The recorded presentations [can be accessed here](#), where after a brief introduction, a summary of some of our current research topics can be seen between minutes 12 and 43.

Az Európai Kémiai Társaság által szervezett „Highlighting Organic Chemistry in Hungary” rendezvényen hét magyar kutatócsoport kapott lehetőséget a bemutatkozásra, köztük az [MTA-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoportja](#). A [felvett előadások itt érhetők el](#), ahol a rövid bevezető után, a 12 és 43 perc között látható néhány aktuális kutatási témánkat összefoglalója.

Kristóf Ferentzi, a PhD student at the ELTE Hevesy György Doctoral School of Chemistry and a member of the HUN-REN-ELTE Protein Modeling Research Group and Structural Chemistry and Biology Laboratory (supervisor: Viktor Farkas), was awarded the Medzihradzky Kálmán Lecture Prize. This prize recognizes the best presentations delivered at the annual scientific meeting of the Peptide Chemistry Working group of the Hungarian Academy of Sciences (MTA). This year’s meeting took place in Balatonszemes from May 27 to 29.

Ferentzi Kristóf, az ELTE Hevesy György Kémia Doktori Iskola PhD-hallgatója, a

HUN-REN-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport és Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium munkatársa (témavezetője: Farkas Viktor) Medzihradzky Kálmán Előadói Díjban részesült. Ezzel a díjjal az MTA Peptidkémiai Munkabizottság éves tudományos ülésén elhangzott legjobb előadásokat ismerik el. Az idei előadóülést május 27–29. között Balatonszemesen rendezték meg.

In June 2024, **Edit Mátyus**’s research proposal on „Molecular Quantum Electrodynamics” received funding from the MTA Lendület Program.

2024 júniusában az MTA Lendület Programja támogatást ítelt oda Mátyus Edit „Molekuláris Kvantumelektrodinamika” című kutatási pályázatának.

In June 2024, an interview with **Zoltán Novák** about the work of the MTA-ELTE Lendület Research Group for Sustainable Catalytic Processes, which he leads, was published on the MTA website.

Az MTA honlapján 2024 júniusában [interjú](#) jelent meg Novák Zoltánnal az általa vezetett MTA-ELTE Fenntartható Katalitikus Eljárások Lendület Kutatócsoport munkájáról.

As part of the ERASMUS+ acaSTEMy (Trans-national STEM teacher education focusing on transversal competences and sustainability education) project, the Institute of Chemistry at ELTE organized a hybrid seminar on July 2, 2023, titled „Health and Medicine in the New Era,” featuring presentations from Gedeon Richter and EGIS pharmaceutical companies. Participants from eight countries attended the conference. Both a [short](#) and [long](#) version of the video-recorded

seminar are available on YouTube.

Az ERASMUS+ acaSTEMy (Határokon átnyúló STEM tanárképzés a transzverzális kompetenciákra és a fenntarthatósági oktatásra összpontosítva) projekt keretében az ELTE Kémiai Intézete 2023. július 2-án hibrid szemináriumot szervezett „Egészség és orvostudomány az új korszakban” címmel, amelyen a Gedeon Richter és az EGIS gyógyszergyárak szakértői is előadást tartottak. A konferencián nyolc ország szakemberei vettek részt. A szeminárium [rövid és hosszú](#) változata videofelvétel formájában megtekinthető a YouTube-on.

Kende Béres, a 4th-year PhD student (supervisors: Zoltán Homonnay and László Kótai), was awarded the Youth Prize at the [ISIAME 2024](#), the International Conference on the Industrial Applications of the Mössbauer Effect, held at the International Conference Center in Kitakyushu, Japan, from August 27 to September 9, 2024.

Béres Kende IV. éves PhD-hallgató (témavezetők: Homonnay Zoltán – Kótai László) Ifjúsági díjban részesült az [ISI-AME 2024](#), a Mössbauer Effektus Ipari Alkalmazásainak Nemzetközi Konferenciáján, Japán, Kitakyushu, Nemzetközi Konferencia Centrum (2024. augusztus 27. – szeptember 9).

Jonathan Clayton (Department of Civil, Construction and Environmental Engineering, Center for Water Quality Research, The University of Alabama) is conducting research at the Institute of Chemistry under the U.S. Fulbright program until May 2025. During his research, the PhD student is investigating the role of pressure transients in drinking water distribution

networks in mobilizing arsenic species. The aim of the research is to identify pathways of arsenic contamination in drinking water distribution systems and to reduce consumers’ exposure to arsenic. **Jonathan Clayton (Department of Civil, Construction and Environmental Engineering, Center for Water Quality Research, The University of Alabama) az egyesült államokbeli Fulbright program keretében a Kémiai Intézetben végez kutatómunkát 2025 májusáig. Kutatómunkája során a PhD-hallgató az ivóvízelosztó-hálózat nyomástranzienseinek az arzénspeciezek mobilizálásában játszó szerepét vizsgálja. A kutatómunka az ivóvízelosztó rendszerekben előforduló arzénszennyeződési útvonalak azonosítására és a fogyasztók arzénkitettségének csökkentésére irányul.**

Starting from September 1, 2024, our institute will host Professor **Daniel Hector Laria** as a visiting professor for a six-month period. Professor Laria is from the University of Buenos Aires and the Argentine National Atomic Energy Commission. He earned his PhD at the University of California, Berkeley, under the supervision of David Chandler. His research interests lie in condensed matter physics, computational chemistry (physics), and biophysics. To date, [Professor Laria](#) has published approximately 80 scientific papers with over 2,000 independent citations. He has been invited to our institute by László Túri and will collaborate with the Chemical Informatics Laboratory. In addition to his research, Professor Laria will also contribute to teaching by offering a PhD course titled „Selected Topics

on Statistical Mechanics of Liquids” at the Hevesy György Doctoral School of Chemistry. His visit is supported by the University Excellence Fund.

Intézetünk 2024. szeptember 1-től 6 hónap időtartamra vendégprofesszorként látja vendégül Daniel Hector Laria professzort, aki a Buenos Aires-i egyetem és az Argentín Nemzeti Atomenergia Ügynökség professzora. Laria professzor PhD címét a Berkeley Egyetemen szerezte David Chandler mellett. Laria professzor kutatási érdeklődése a kondenzált fázisú fizika, számítógépes kémia (fizika) és a biofizika tárgykörébe esik. Daniel Laria eddig körülbelül 80 tudományos publikációt alkotott, 2000-nél több független hivatkozással. [Laria professzor](#) Türi László meghívására érkezett intézetünkbe, ahol a Kémia Informatikai Laboratóriummal kooperációban dolgozik. Daniel Laria kutatásai mellett az oktatásban is részt vesz intézetünkben, Selected Topics on Statistical Mechanics of Liquids címmel doktori kurzust tart a Hevesy György Kémia Doktori Iskolában. Daniel Laria meghívását az [Egyetemi Kiválósági Alap](#) támogatása tette lehetővé.

The [Hungarian Space Chemistry Research Network](#), with the participation of the [MTA-ELTE Lendület Astrochemistry Research Group](#), was formed to advance research by creating complex laboratory conditions to model space processes. Using cutting-edge equipment, the network enables precise monitoring of radiation-induced physical and chemical changes in solid, ice, and gas phase samples. This research supports the study of natural space phenomena, human

activity in space, and contributes essential data for mission planning. In international collaborations, the network’s scientists explore molecular synthesis in interstellar matter, and the origins of life-essential organic molecules. The network also plays a key role in the Horizon2020 Europlanet 2024 project and supports missions like the study of Jupiter’s icy moons.

Az [MTA-ELTE Lendület Asztrókémiai Kutatócsoport](#) részvételével megalakult a [Magyar Űrkémiai Kutatási Hálózat](#), azzal a céllal, hogy előmozdítsa a kutatást az űrben lezajló folyamatok modellezésére irányuló komplex laboratóriumi körülmények létrehozásával. Csúcstechnológias eszközeik segítségével a hálózat lehetővé teszi a sugárzás által kiváltott fizikai és kémiai változások pontos nyomon követését szilárd, jég és gáz halmazállapotú mintákban. A kutatások hozzájárulnak a természetes űrbeli jelenségek és az emberi tevékenység vizsgálatához, valamint alapvető adatokat szolgáltatnak űrmissziók tervezéséhez. Nemzetközi együttműködésekben a hálózat kutatói a csillagközi anyagban történő kémiai átalakulásokat és az élethez szükséges szerves molekulák keletkezési mechanizmusait vizsgálják. A hálózat kulcsszerepet játszik a Horizon2020 Europlanet 2024 projektben, és olyan missziókat is támogat, mint például a Jupiter jeges holdjain lezajló folyamatok kutatása.

Kata Nóra Enyedy and **Csaba Fábri** have been awarded the prestigious János Bolyai Research Fellowship by the Hungarian Academy of Sciences.

Kata Nóra Enyedy and Csaba Fábri were

awarded the János Bolyai Research Fellowship of the Hungarian Academy of Sciences.

The construction of the [SuperSmartLab](#) will begin in mid-October, construction of the physical chemistry and organic chemistry teaching laboratories, as well as the reconstruction of the heating system will start in in early November.

A [SuperSmartLab](#) építése október közepén kezdődik, míg a fizikai kémia és szerves oktató laborok rekonstrukciója, valamint a fűtőkorszerűsítési munkák november elején indulnak.

To subscribe:

Feliratkozás a hírlevélre:

<https://listbox.elte.hu/mailman/listinfo/elte-ki-tud-hirlev>



ELTE
TTK