



ELTE | TTK
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

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

2025. MÁRCIUS / MARCH 2025



TARTALOMJEGYZÉK

VÁLOGATÁS A KÉMIAI INTÉZET PUBLIKÁCIÓIBÓL – 2024/25. TÉL /	
SELECTIONS FROM THE INSTITUTE'S PUBLICATIONS – WINTER 2024/25	4
Szerves kémia és biokémia / Organic chemistry & biochemistry	4
Gyógyszerkémia / Medicinal chemistry	8
Analitika / Analytical chemistry	10
Égéstudomány / Combustion chemistry	10
Környezeti kémia / Environmental chemistry	11
Anyagtudomány és elektrokémia /	13
Material science and electrochemistry	
Asztrokémia és spektroszkópia / Astrochemistry & spectroscopy	19
Elméleti kémia / Theoretical chemistry	23
INTÉZETI SZEMINÁRIUMOK, 2025. TAVASZ /	
INSTITUTIONAL SEMINARS, SPRING 2025	25
TUDOMÁNYOS NAP / SCIENTIFIC DAY	28
SIKERES PÁLYÁZATOK / SUCCESSFUL PROPOSALS	28
NKKP EXCELLENCE	28
NKKP ADVANCED	29
NKKP STARTING	31
NKKP SNN	32
KKV FÓKUSZ 2024	33
MUNKATÁRSAINK KIEMELT ELŐADÁSAI /	
DISTINGUISHED PRESENTATIONS BY OUR COLLEAGUES	34
RÖVID HÍREK / SHORT NEWS	34

VÁLOGATÁS A KÉMIAI INTÉZET PUBLIKÁCIÓIBÓL – 2024/25. TÉL / SELECTIONS FROM THE INSTITUTE'S PUBLICATIONS – WINTER 2024/25

Az alábbi lista témakörök szerint rendezve nyújt válogatást munkatársaink 2024. december eleje és 2025. március 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 December 2024 to early March 2025. As this period is relatively short, it does not fully represent the diversity of research conducted at our institute.

Szerves kémia és biokémia / Organic Chemistry & Biochemistry

*Szebasztián Szaniszló, Imre G. Csizmadia, Imre Jáklí, Viktor Farkas, Máté Sulyok-Eiler, András Láng, Veronika Harmat, István Pintér, András Perczel**

Intramolecular Inhibition by Imidazole in Acid-Catalyzed Hydrolysis of Protected Carbohydrates

[Chemistry – A European Journal, 31, 2025, e202403319](#)

The present study reveals an unexpected anomaly observed in the acid-catalyzed hydrolysis of the 5,6-O-isopropylidene group in 3-O-protected D-glucosyl and D-allofuranose derivatives. Although the removal of the 5,6-O-isopropylidene

protecting group is typically rapid and quantitative under acidic conditions, an unexpected inhibition of this reaction is observed for the two C3-epimers, 3-O-imidazole sulfonyl moiety. X-ray data show a two-faced imidazole ring orientation in the crystal, while solution state NOE data reveal a critical interaction type between the isopropylidene and the imidazole rings. Advanced conformational searches coupled with ab initio molecular modeling illuminate and explain the NMR and kinetic data and lay the groundwork for the most plausible mechanism of this unprecedented inhibition. These results provide valuable insights into the cross-coupling of carbohydrate O-protecting groups and shed light on how specific ring orientations and steric effects can trigger the inhibition of an otherwise easily feasible reaction, such as an acid-catalyzed hydrolysis.

A szénhidrátkémiában jól ismert a vicinális diolok acetamid védelme, amelyet egyszerűen lehet kialakítani, és ezeket az acetamid származékokat majdnem olyan egyszerűen el is lehet hidrolizálni. Az ELTE Kémiai Intézet kutatói a D-glükó- és D-allofuranózok esetében egy olyan anomáliára figyeltek fel, amely során az 5,6-hidroxilcsoportról az acetamid védelem eltávolítása akadályba ütközik. Munkájuk során sikerült egy olyan mechanizmust leírni, amelyben a természetben katalizátorként ismert imidazol inhibitorként viselkedik. A mechanizmus során a protonált imidazolgyűrű C(2)-H atomja hidrogénkötést alakít ki az 5,6-dioxolán oxigénjével, ezáltal akadályozva a savkatalízist.

Szebasztián Szaniszló, Imre G. Csizmadia, Bálint Zsigulics, Péter Angyal, Bence Balázs Mészáros, János Daru, Szilárd Varga,* Tibor Soós**

Bioinspired Synthesis of (–)-Hunterine A: Deciphering the Key Step in the Biogenetic Pathway

[Chemistry – A European Journal, 31, 2025, e202404501](#)

A concise, bioinspired, and enantioselective synthesis of (–)-hunterine A, an odd 6/7/6/6/5 pentacyclic natural product, is described. The key step in the synthesis of this complex structure is an interim-template directed 6-exo selective epoxide ring-opening reaction, which is interwoven with a hydrolysis step of the indolenine hemiaminal template to create the unusual 7-membered azepine bridge motif. Our work not only refines the previously proposed biogenetic pathway, but also reveals the possible stereochemical prerequisite of the unique skeletal rearrangement, which provides a vantage point for understanding how (–)-hunterine A is likely to be generated in nature.

A tanulmány egy bioinspirált szintézist mutat be a (–)-hunterin A nevű természetes vegyület előállítására, amely egyedülálló gyűrűrendszerrel rendelkezik. A szintézis kulcsfontosságú lépése egy savas közegben lezajló vázátrendeződés, amely során egy 7-tagú gyűrűs motívum alakul ki. Az ELTE kutatói kvantumkémiai módszerekkel tárták fel az átrendeződés mechanizmusát és szokatlan gyűrű-

szelektivitását, amelyet a merev aspidospermaváz irányító hatása magyaráz. Számításaik szerint a természetes körülmények között végbemenő epoxidgyűrűnyitás feltehetően nem igényel enzimátikus irányítást, hanem a szubsztlát szerkezete határozza meg a szelektivitást. Eredményeik hozzájárulnak a természetes vegyületek reaktivitásának mélyebb megértéséhez, ahol a komplex vázrendszerek gyakran váratlan átalakulásokhoz vezetnek.

*Ádám Dudás, Ádám Gyömöre, Bence Balázs Mészáros, Stefánia Gondár, Renáta Adamik, Dániel Fegyverneki, Dávid Papp, Konrad Bernhard Otte, Sergio Ayala Jr, János Daru, József Répási, Tibor Soós**

Selective Reduction of Esters to Access Aldehydes Using Fiddler Crab-Type Boranes

[Journal of the American Chemical Society, 147, 2025, 1112](#)

The partial reduction of esters to aldehydes is a fundamentally important transformation for the synthesis of numerous fine chemicals and consumer goods. However, despite the many efforts, limitations have persisted, such as competing overreduction, low reproducibility, use of exigent reaction conditions and hazardous chemicals. Here, we report a novel catalyst family with a unique steric design which promotes the catalytic partial reduction of esters with unprecedented, near-perfect selectivity and efficiency. This metal-free catalytic method is ready to be placed at the disposal of chemists to provide valuable aldehyde intermediates and products and shows promise for streamlining synthetic methods in academic and industrial settings.

Az észterek részleges redukciója aldehidekké alapvető fontosságú lépés számos finomvegyszer és fogyasztási cikk előállításában. Ennek ellenére a folyamatnak eddig több korlátja volt, például a mellékreakcióként fellépő teljes redukció, a nehezen reprodukálható eredmények, az összetett reakciókörülmények és a veszélyes vegyszerek használata. Ebben a munkában, amelyhez az ELTE kémikusai elméleti modellezéssel járultak hozzá, egy új katalizátorcsoportot fejlesztettek ki, amelynek különleges térbeli kialakítása lehetővé teszi az észterek célzott átalakítását aldehidekké, kiemelkedő szelektivitással és hatékonysággal. Az új, fémentes katalitikus eljárás egyszerűen alkalmazható, és értékes alapanyagot biztosíthat a szintetikus kémia számára, mind laboratóriumi, mind ipari környezetben.

Péter Pál Fehér, Ferenc Béke, János T. Csenki, Zoltán Novák,* András Stirling**

Aziridination Exploited: A Mechanistic Study of the Divergent Reactivity of Trifluoropropenyl-iodonium Reagent toward N-nucleophiles

[European Journal of Organic Chemistry, 27, 2025, e202400779](#)

In this study, we use computations and experiments to explore mechanistic scenarios that govern the reaction between secondary amines and trifluoropropenyl iodonium triflate with the aim of rationalizing and predicting experimental outcomes. Based on the results from theory, we

have compiled a list of guidelines relevant to synthetic strategies and provide examples for the interpretation of selectivities. To demonstrate the viability of these strategies, we have performed directed experiments applying different reaction conditions to obtain the products predicted by our model. Additionally, qualitative microkinetic simulations based on our computations were carried out for further support.

Ebben a tanulmányban az ELTE Kémiai Intézetének munkatársai kísérleti úton, míg a HUN-REN TTK kutatói számítások segítségével vizsgálták, hogy milyen folyamatok irányítják a szekunder aminok és a trifluoropropenil-jodonium-triflát reakcióját. Céljuk volt, hogy megértsék és előre jelezzék a kísérletek eredményeit. Az elméleti számítások alapján olyan iránymutatásokat állítottak össze, amelyek hasznosak lehetnek a reakciók megtervezésében, és példákon keresztül mutatták be, hogyan lehet értelmezni a reakciók során kialakuló különbségeket. A módszer megbízhatóságának igazolására célzott kísérleteket végeztek, amelyek során különböző reakciókörülmények mellett sikerült előállítani azokat a termékeket, amelyeket a számítások előre jeleztek. Emellett további elemzéseket is végeztek, hogy még jobban alátámasszák az eredményeiket.

Zsolt Fazekas, Dóra K. Menyhárd, András Perczel

LoCoHD: a metric for comparing local environments of proteins

[Nature Communications, 15, 2024, 4029](#)

Protein folds and the local environments they create can be compared using a variety of differently designed measures, such as the root mean squared deviation, the global distance test, the template modeling score or the local distance difference test. Although these measures have proven to be useful for a variety of tasks, each fails to fully incorporate the valuable chemical information inherent to atoms and residues, and considers these only partially and indirectly. Here, we develop the highly flexible local composition Hellinger distance (LoCoHD) metric, which is based on the chemical composition of local residue environments. Using LoCoHD, we analyze the chemical heterogeneity of amino acid environments and identify valines having the most conserved-, and arginines having the most variable chemical environments. We use LoCoHD to investigate structural ensembles, to evaluate critical assessment of structure prediction (CASP) competitors, to compare the results with the local distance difference test (IDDT) scoring system, and to evaluate a molecular dynamics simulation. We show that LoCoHD measurements provide unique information about protein structures that is distinct from, for example, those derived using the alignment-based RMSD metric, or the similarly distance matrix-based but alignment-free IDDT metric, which can lead to a better understanding of their function.

Ebben a munkában a HUN-REN-ELTE Fehérjemodellezési Kutatócsoport (Kémiai Intézet) kutatói egy olyan matematikai módszert mutatnak be, amely lehetővé teszi fehérjék háromdimenziós szerkezetének új alapokon történő összehasonlítását. A LoCoHD (Local Composition Hellinger

Distance) metrika egyedülálló abban, hogy nem csak a szerkezetet alkotó atomok helyzetét, hanem azok kémiai jellegét is figyelembe veszi. Az algoritmus a fehérjéket felépítő aminosavak lokális környezetét hasonlítja össze, azaz az adott aminosavat körülvevő atomok kémiai természetét, illetve azt a töltésmintázatot, amelybe az adott aminosav beleilleszkedik. A LoCoHD algoritmus egy többlépcsős protokollt használ a kémiai – tehát a funkció szempontjából is jelentős – szerkezeti különbségeket reprezentáló szám előállításához. Az első lépésben a fehérje valós atomjait úgynevezett primitív atomokká alakítja át, amelyek leírják az atom kémiai természetét, olyan jellemzőkkel, mint például „pozitív töltésű nitrogén” vagy „aromás szén”. Ezeket a címkéket az algoritmus automatikusan generálja, de a felhasználó könnyen módosíthatja őket. A második lépés az összehasonlítás referenciapontjainak – a horgonyatomoknak – a kiválasztása, amely szintén egyedi megfontolások szerint is történhet. A LoCoHD-értékek kiszámításakor az algoritmus minden egyes kiválasztott horgonyatom-párra elvégzi az összehasonlítást. A szerzők bemutatják, hogy a LoCoHD-értékek egyedülálló információt nyújtanak a fehérje szerkezetéről, ami a fehérjék működésének jobb megértéséhez vezethet.

Edit Wéber, Péter Ábrányi-Balogh, Bence Nagymihály, Dóra K. Menyhárd, Nikolett Péczka, Márton Gadanez, Gitta Schlosser, Zoltán Orgován, Ferenc Bogár, Dávid Bajusz, Gábor Kecskeméti, Zoltán Szabó, Éva Bartus, Attila Tököli, Prof. Gábor K. Tóth, Tibor V. Szalai, Tamás Takács, Prof. Elvin de Araujo, László Buday, András Perczel, Tamás A. Martinek, György M. Keserű**

Target-Templated Construction of Functional Proteomimetics Using Photo-Foldamer Libraries

[Angewandte Chemie International Edition, 64, 2025, e202410435](#)

Current methods for proteomimetic engineering rely on structure-based design. Here we describe a design strategy that allows the construction of proteomimetics against challenging targets without a priori characterization of the target surface. Our approach employs (i) a 100-membered photoreactive foldamer library, the members of which act as local surface mimetics, and (ii) the subsequent affinity maturation of the primary hits using systems chemistry. Two surface-oriented proteinogenic side chains drove the interactions between the short helical foldamer fragments and the proteins. Diazirine-based photo-crosslinking was applied to sensitively detect and localize binding even to shallow and dynamic patches on representatively difficult targets. Photo-foldamers identified functionally relevant protein interfaces, allosteric and previously unexplored targetable regions on the surface of STAT3 and an oncogenic K-Ras variant. Target-templated dynamic linking of foldamer hits resulted in two orders of magnitude affinity improvement in a single step. The dimeric K-Ras

ligand mimicked protein-like catalytic functions. The photo-foldamer approach thus enables the highly efficient mapping of protein-protein interaction sites and provides a viable starting point for proteomimetic ligand development without a priori structural hypotheses.

A gyógyszertervezés egyik fő kihívása a betegséget okozó fehérjék felszínén olyan kötőhelyek azonosítása, amelyek hozzáférhetőek, stabil kötődést biztosítanak gyógyszermolekulák számára és befolyásolhatják a fehérje működését. Ezzel a problémával foglalkoztak a HUN-REN-ELTE Fehérje-modellezési Kutatócsoport (Kémiai Intézet) munkatársai a HUN-REN-TTK és a Szegedi Tudományegyetem kutatóival együttműködve. Megközelítésük alapja egy helikális szerkezetű mikrofehérjéket (8 tagú peptideket) tartalmazó tesztmolekula-készlet, amelyet a stabil helikális váz felépülését garantáló mesterséges aminosavakból és két természetes aminosavból építettek fel úgy, hogy ez utóbbiak a hélix egy oldalára essenek. A 100 variánst a két természetes aminosav különböző kombinációival állították elő. Minden molekulát elláttak foto-kezeszközök kialakítására alkalmas csoporttal is, így a tesztmolekulák és a betegség- okozó fehérje között kialakuló gyenge kölcsönhatás UV besugárzást alkalmazva, kovalens kötés kialakításán keresztül „rögzíthető” – a tesztmolekulák így permanensen hozzákötethetők a célfehérje akár sekély

és dinamikusan változó kötősebeihez is. Az így kialakult stabil komplexek szerkezetmeghatározó módszerekkel (pl. NMR-spektroszkópia) vizsgálhatóak, ami lehetővé teszi a kötőhelyek helyzetének és kémiai preferenciájának pontos azonosítását. A szerzők azt is megmutatták, hogy a tesztmolekulák kötődési hatékonyságát és specificitását növelni lehet úgy, hogy azokat kovalensen összekapcsoljuk egy olyan eljárást alkalmazva, ami lehetővé teszi azoknak a tesztmolekulapároknak a kiválasztását, amelyek a fehérje felületén - önállóan is – egymás közelségében kötődnek. Igazolták azt is, hogy az így előállított minifehérjék a célfehérje partnereit mimikálni vagy akár helyettesíteni is képesek lehetnek, amely új perspektívákat nyit a gyógyszertervezés számára.

Erzsébet Várnagy, Gergő Tóth, Sándor Hosztafi, Máté Dobó, Ida Fejős, Szabolcs Béni**

Chiral Recognition Mechanism of Benzyltetrahydroisoquinoline Alkaloids: Cyclodextrin-Mediated Capillary Electrophoresis, Chiral HPLC, and NMR Spectroscopy Study

[Molecules, 30, 2025, 1125](#)

Some drugs and natural compounds exist in mirror-image forms (enantiomers) that can have different effects in the body, making their separation crucial. This study focused on laudanosine (a natural alkaloid) and its three related molecules, using special sugar-based compounds

called cyclodextrins (CyDs) to separate their enantiomers. Through capillary electrophoresis (CE), we identified the most effective CyDs, with certain negatively charged variants achieving the best separation. High-performance liquid chromatography (HPLC) was then used to purify the enantiomers, and their structures were confirmed using optical analytical techniques. Finally, nuclear magnetic resonance (NMR) experiments revealed how these molecules interact with CyDs at the atomic level, improving our understanding of their separation and potential applications.

A királis gyógyszermolekulák enantiomerjeinek biológiai hatása legtöbbször eltérő, mivel ezek eltérően léphetnek kölcsönhatásba a szervezet makromolekuláival. Kutatásban a benziltetrahydroizokinolin-alkaloidok egy csoportját vizsgálták, hogy jobban megértsék ezek enantiomerjeinek kémiai kölcsönhatásait. Gyűrűs oligoszacharidokat (ciklodextrineket: CyD) használtak az enantiomerek elválasztáshoz kapilláris elektroforézis (CE) és folyadékkromatográfia (HPLC) segítségével. Az izolált enantiomerek CyD-nel kialakított kölcsönhatásait mágneses magrezonancia spektroszkópiával (NMR) elemezték, hogy atomi szintű információt kapjanak az enantiomerekre jellemző kölcsönhatásoktól. Az eredmények hozzájárulhatnak a pontosabb királis analízishez és új gyógyszerfejlesztési stratégiákhoz.

Analitika / Analytical chemistry

Péter S. Szakály, Dávid Papp, Arnold Steckel, Erzsébet Varga, Gitta Schlosser*

Characterization of Sugammadex-Related Isomeric Cyclodextrin Impurities Using Cyclic Ion Mobility High-Resolution Mass Spectrometry

[Journal of the American Society for Mass Spectrometry 36, 2025, 258](#)

Cyclic ion mobility–mass spectrometry (cIM-MS) is a powerful technique for separating and identifying isomeric mixtures of compounds. When coupled with chromatography, cIM-MS creates a multidimensional separation system, with high resolving power and peak capacity. In this study, we report the cyclic ion mobility separation and high-resolution mass spectrometry identification of four regioisomers of a Sugammadex-related impurity, abbreviated as Di-OH-SGM. Separation using multipass cyclic ion mobility was achieved by selecting the $[M + 2Na]^{2+}$ ion, while other adducts, such as $[M + Na]^+$, $[M + 2H]^{2+}$, $[M + H + Na]^{2+}$, and $[M - 2H]^{2-}$ did not yield isomer separation. Two methods were developed for ion mobility separation of the isomers: a conventional multipass method and a slicing method. Isomer assignment was based on the characteristic fragment ions. The collision cross section values ($^{cTW}CCS_{N_2}$) of the resolved cyclodextrin isomers were also determined. Ion mobility separation of structurally different fragment ions was demonstrated. Additionally, by coupling cIM-MS with reversed-phase liquid chromatography (HPLC-cIM-MS), two-dimensional separation of the isomers was achieved. The isomers, separated using HPLC-cIM-MS, were identified with

the same approach as with cIM-MS alone, and their elution order provided insights into their relative hydrophobicity.

A ciklikus ionmobilitás-tömegspektrometria (cIM-MS) egy hatékony módszer izomerkeverékek komponenseinek elválasztására és a komponensek azonosítására. Az ELTE Kémiai Intézetének kutatói ebben a közleményben két különböző cIM módszert dolgoztak ki egy, csak izomerkeverékben létező, ciklodextrin-eredetű (CD) szennyező négy konstitúciós izomerjének cIM elválasztására és tömegspektrometriás azonosítására. Az izomer szerkezetű, karakterisztikus fragmens-ionok ionmobilitási elválasztását is bemutatták, továbbá demonstrálták a CD analitikában még kevésbé elterjedt cIM-MS technika alkalmazhatóságát és hatékonyságát.

Égéstudomány / Combustion chemistry

Boyang Su, Tibor Nagy, * Máté Papp, Tamás Turányi*

Reduction-assisted parameter optimization of the ethylene chemistry in the AramcoMech 2.0 combustion mechanism

[Combustion and Flame 273, 2025, 113976](#)

Kinetics parameter optimization of the ethylene chemistry in the AramcoMech 2.0 mechanism (493 species and 2716 reactions) was carried

out against a large collection of indirect (1440 data points in 153 data sets) and direct (936 data points in 58 data sets) experimental data. The indirect data collection consisted of ignition delay time measurements in shock tubes covering a temperature range of 930–2230 K and a pressure range of 0.28–63.3 atm, and laminar burning velocity measurements at preheat temperatures from 298 to 650 K, and pressures from 0.5 to 10 atm. Due to the large size of the model and the data collection, direct optimization was not feasible; therefore, we applied the recently proposed Reduction-Assisted Parameter Optimization-Based Model Development (RAPOD) procedure. First, using the Simulation Error Minimization Connectivity Method (SEM-CM), a reduced mechanism with 75 species and 612 reactions was obtained that performs similarly to the detailed mechanism regarding the indirect measurements used. This smaller model could be simulated around 50 times faster enabling efficient optimization with moderate computational effort on the large number of experimental targets. Then, influential reactions of the reduced model were identified using the novel PCALIN method, which is based on principal component analysis of the local sensitivity matrix scaled with experimental data uncertainty and parameter uncertainty. The Arrhenius parameters ($\ln A$, n , E/R) in 18 reactions were optimized within their prior uncertainty domain against the data collection. Finally, the optimized parameters were transferred to the original AramcoMech 2.0 mechanism, whose performance was shown to improve in a similar fashion as that of the reduced model. The uncertainties of the model results were considerably reduced due to the significant reduction of the uncertainties of most of the optimized rate coefficients.

Az etilént ritkán használják tüzelőanyagnak, de az etilén égése kémiájának pontos ismerete fontos a koromképződés megértéséhez az összes szénhidrogén égésénél. Su és munkatársai összeszejtötték az etilén égésére az összes közölt mérési adatot és kiválasztották azt a szakirodalomban közölt reakciómechanizmust, amellyel a legjobban sikerült reprodukálni a mérési adatokat. Ez az "AramcoMech 2.0" mechanizmus volt, amelyik 493 anyagfajta 2716 reakciólépését tartalmazza. Su és munkatársai meghatározták azt a legkisebb mechanizmust (75 anyagfajta 612 reakciólépése), amelyik ugyanolyan jól írja le a mérési adatokat. Ezután illesztették ennek a kisebb mechanizmusnak a legfontosabb reakciósebességi paramétereit a mérési adatokhoz és így egy olyan reakciómechanizmust kaptak, amely jelenleg a legjobban írja le ennek az égésének olyan mérési adatait, mint a gyulladási idő, lángsebesség és a füstgáz összetétele az égés után. Az ezzel a mechanizmussal kapott szimulációs eredményeknek a számított bizonytalansága sokkal kisebb, mint az eddigi mechanizmusokkal számított eredményeknek.

Környezeti kémia / Environmental chemistry

Meritxell Garcia-Marlès, * ..., Imre Salma, Máté Vörösmarty, Tamás Weidinger, ..., Xavier Querol*

Source apportionment of ultrafine particles in urban Europe

[Environment International, 194 2024, 109149](#)

There is a body of evidence that ultrafine particles (UFP, those with diameters ≤ 100 nm) might have significant impacts on health. Accordingly, identifying sources of UFP is essential to develop abatement policies. This study focuses on urban Europe, and aims at identifying sources and quantifying their contributions to particle number size distribution (PNSD) using receptor modelling (Positive Matrix Factorization, PMF), and evaluating long-term trends of these source contributions using the non-parametric Theil-Sen's method. Datasets evaluated include 14 urban background (UB), 5 traffic (TR), 4 suburban background (SUB), and 1 regional background (RB) sites, covering 18 European and 1 USA cities, over the period, when available, from 2009 to 2019. Ten factors were identified (4 road traffic factors, photonucleation, urban background, domestic heating, 2 regional factors and long-distance transport), with road traffic being the primary contributor at all UB and TR sites (56–95 %), and photonucleation being also significant in many cities. The trends analyses showed a notable decrease in traffic-related UFP ambient concentrations, with statistically significant decreasing trends for the total traffic-related factors of -5.40 and -2.15 % yr^{-1} for the TR and UB sites, respectively. This abatement is most probably due to the implementation of European emissions standards, particularly after the introduction of diesel particle filters (DPFs) in 2011. However, DPFs do not retain nucleated particles generated during the dilution of diesel exhaust semi-volatile organic compounds (SVOCs). Trends in photonucleation were more diverse, influenced by a reduction in the condensation sink potential facilitating new particle formation (NPF) or by a decrease in the emissions of UFP precursors. The decrease of primary PM emissions and

precursors of UFP also contributed to the reduction of urban and regional background sources.

A legfontosabb légköri egészségi kockázatot az aeroszolok okozzák a nagyvárosokban, így Budapesten is. Ebben a cikkben modellezés segítségével meghatározták a részecskeszám legfontosabb forrástípusait. Ezek közé tartozik a gépjárművek emissziója, amelyben megkülönböztethetők a közepeken illékony és a szilárd (korommagvú) komponensek, valamint a légköri nukleáció – vagyis az a folyamat, amely során a részecskék a levegőben keletkeznek – által képződött részecskék. A modellezést saját mérésekre támaszkodva és egységes módszertani keretben végezték el az ELTE Kémiai Intézetének kutatói, 17 másik európai és 1 amerikai város kutatóival közösen, ami lehetővé tette az egyes országok közötti összehasonlítást és a sajátosságok feltárását is. Az ilyen háttérismeretek segítenek a levegőminőség fejlesztésében és az egészségre gyakorolt káros hatások csökkentésében, különösen azzal, hogy támogatják a szennyező forrásokra szabott hatékonyabb szabályozások kidolgozását.

László Kótai, * Ernő Tamics, Zoltán Homonnay, Márk Windisch, Kende Attila Béres

The Crucial Role of Additives in the Properties of Perlite- and Gypsum-Based Superabsorbent Composites I: The Development of Com-

posite Carrier Materials for Biological Mosquito Larva-Killing Agents
[Journal of Composites Science, 8, 2024, 534](#)

The increase in the risks of mosquito-transmitted serious diseases or viral infections generates strong motivations to find new and efficient solutions for controlling blood-sucking mosquitoes. There are selective protein toxins such as BTI (*Bacillus thuringiensis israelensis*) used to kill mosquito larvae, which require carrier materials that keep the active ingredient on the surface of the water where the mosquito larvae feed. Environmentally friendly and effective composite carrier materials consisting of gypsum and perlite with controlled floating and sinking times were developed. The partial closing of open pores with modified cellulose derivatives as carboxymethyl cellulose (CMC) or cricket made from corn starch and hot water were used to ensure the slow dissolution of "CMC corks" in the pores, which can control the floating and sinking properties as well. The carrier composites were combined with BTI toxins such as 4% Vectobac WP (5000 ITU (international toxic unit)) toxin, resulting in a 90–100% killing rate against different tests (*Culex pipiens*) and various naturally abundant mosquito larva species. The stability test of the BTI-containing new carrier materials shows good applicability at flooded/dried/re-flooded areas where the flooding is temporary thus the composites can be applied as preventive treatment as well.

A közlemény egy szúnyogirtásra használt készítmény előállítását és működését mutatja be. A módszer szenzációsan kombinálja a gipsz, a cement és a

karboximetil-cellulóz (CMC – ez tapétáragasztóként is ismert) tulajdonságait, aminek az az eredménye, hogy a szúnyogirtó szer egy lyukacsos adszorbensre lesz felvíve, amelyből a víz felszínére szórt szemcsés készítmény részecskéiből addig oldódik ki a szúnyoglárvákra ártalmas mérge, amíg azok lebegni képesek, majd ezután vízzel telítődve természetes anyagként süllyednek le víztest medrébe. Ez alatt az idő alatt mérgeanyag – elvégezve a lárvák irtásának a feladatát – el is bomlik. A módszer nagy jelentőségét hazánkban (Balaton, Velencei-tó) nem kell külön hangsúlyozni.

**Anyagtudomány és elektrokémia /
Material science and electrochemistry**

Kende Attila Béres, Zoltán Homonnay, Laura Bereczki, Vladimir M. Petruševski, Attila Farkas, Zsuzsanna Czégény, Péter Németh, Péter Pekker, Fanni Béres-Szilágyi, Tomáš Stryšovský, Libor Kvítek, Ágnes Gömöry, László Kótai*

Studies on a Urea-Complexed Iron(III) Dichromate, a Precursor of Chromium-Rich Nanospinel Catalysts Prepared for the Reductive Transformation of Carbon Dioxide

[Inorganic Chemistry, 64, 2025, 3427](#)

Energy-saving and cost-efficient reaction routes to prepare highly active catalysts for CO₂ hydrogenation or solid oxide fuel cells (SOFCs) are enormously important. In this paper, we report a detailed study of a dichromate salt of [Fe(urea)₆]³⁺, a member of the [M(urea)₆]³⁺ com-

plex family (M = Fe, Al, Mn, Cr, V, or Ti) with oxidizing anions, which is a promising precursor of a Cr-rich mixed chromium iron oxide catalyst prepared at a low temperature in the solid phase. The single-crystal X-ray structure, various (infrared, ultraviolet–visible, and Raman) spectroscopic studies, and thermal analysis (differential scanning calorimetry and thermogravimetric analysis/mass spectrometry) of [hexakis(urea-O)iron(III)] dichromate $\{[\text{Fe}(\text{urea-O})_6]_2(\text{Cr}_2\text{O}_7)_3\}$ and its decomposition products confirmed the presence of a quasi-intramolecular redox reaction between the urea ligands and dichromate anions. The redox reactions result in various mixed Cr–Fe oxides with amorphous structure, whereas above 550 °C, the crystal structure and composition of the final products depend on the atmosphere during the thermal decomposition. The iron–chromium mixed oxides are potential catalysts in CO₂ hydrogenation that afford CO, CH₄, C₂H₆, and C₃H₈. Furthermore, our Mössbauer spectroscopy studies show a possible electron hopping between the FeII and FeIII ions at the tetrahedral sites of the spinel structure, which suggests that the formed chromite is also a potential SOFC material. Our study also demonstrates that hexaureairon(III) dichromate is a selective oxidation agent of sulfur-containing organic compounds.

A közlemény tárgya olyan vegyes vas-króm-oxid katalizátorok előállítás, amelyek alkalmasak CO₂ hidrogénezésére, ami során CO mellett akár hosszabb szénláncú szénhidrogének is keletkezhetnek. Az ilyen célra előállított katalizátorok gyártása során korábban pl. az egyes fémoxidok keverékét reagáltatták magas hőmérsékleten. A cikkben bemutatott módszer karbamiddal komplexált vas dikromát sójából indul ki (ez az ún. prekursor, $[\text{Fe}(\text{urea-O})_6]_2(\text{Cr}_2\text{O}_7)_3$), amelynek hevítése már nagyon alacsony hőmérsékleten (azaz nagyon költségkímélő

módon) szolgáltatja a kívánt katalizátort. Ráadásul a már kezdeti molekuláris szintű vas-króm keveredés miatt közvetlenül egy nanoszemcsés, igen nagy felületű katalizátor keletkezik. A keletkező spinell szerkezetben Mössbauer-spektroszkópiával kimutattak egy gyors elektroncserét egy a vas által elfoglalt rácshelyen, ami összefüggésben lehet a katalizátor redox tulajdonságaival.

Laura Bereczki, *Kende Attila Béres*, Éva Kovács, Attila Bényei, Robert Hühn, Džonatans Miks Melgalvis, *Zoltán Homonnay*, László Kótai, Petra Bombicz, and Toms Rekis*

Incommensurate Displacive and Occupational Modulation in Hexakis(Urea-O)Iron(III) Nitrate

[Crystal Growth & Design 25, 2025, 1148](#)

The structure of hexakis(urea-O)iron(III) nitrate is found to be incommensurately modulated. It is described in (3 + 1)-dimensional superspace adopting the superspace group $C2/c(\sigma_1 0 \sigma_3)00$ with the modulation wave vector $\mathbf{q} = -0.7394(7)\mathbf{a}^* + 0.9390(8)\mathbf{c}^*$. Up to the third-order satellite reflections are observed in the diffraction data collected at 100 K. Consequently, there is an anharmonic displacive modulation present in the hexacoordinated iron(III) complex. Nitrate ions are found in two symmetrically independent sites in the unit cell and form two disordered ensembles with three disordered components and two disordered components, respectively. The latter site is located near a 2-fold axis, resulting in a total of four disorder components for this molecular site. Along with the displacive modulation for the nitrate ions, there is also a complex occupational modulation present. Possible origins of the modulation are discussed.

A közlemény a hexakis(karbamid-O)vas(III)-nitrát szerkezetének nagyon pontos meghatározását tárgyalja egykristály-röntgendiffraktometria módszerével. Megmutatták, hogy a szerkezetben a nitrátionok pontos helye nem jól meghatározott, azok egy anharmonikus rezgés által módosulnak, amitől a röntgendiffraktogramban az eredeti cella helyett supercellák (az eredeti elemi cella többszörösei) is megfigyelhetők.

*Kende Attila Béres, Zoltán Homonnay, László Kótai**

Review on Synthesis and Catalytic Properties of Cobalt Manganese Oxide Spinel ($\text{Co}_x\text{Mn}_{3-x}\text{O}_4$, $0 < x < 3$)

[Catalysts 15, 2025, 82](#)

The cobalt manganese oxides, especially the spinels and related (multiphase) materials described with the formula $\text{Co}_x\text{Mn}_{3-x}\text{O}_4$ ($0 < x < 3$), are widely used catalysts in a range of processes in significant industrial and environmental areas. The great diversity in the phase relations, composition, and metal ion valences, together with ion and vacancy site distribution variations, results in great variety and activity as catalysts in various industrially important redox processes such as the removal of CO or volatile organic substances (VOCs) from the air and oxidative destruction of pollutants such as dyes and pharmaceuticals from wastewater using peroxides. These mixed oxides can gain application in the selective oxidation of organic molecules like 5-hydroxyfurfural or aromatic alcohols such as vanillyl alcohol or in the production of fuels and other valuable chemicals (alcohols, esters) with the Fischer–Tropsch method. In this review, we summarize these redox-based reactions in light of the chemical and phase composition of the

catalysts with the formula $\text{Co}_x\text{Mn}_{3-x}\text{O}_4$ with $0 < x < 3$.

E közleményben a szerzők a vegyes kobalt-mangán spinell oxidok $\text{Co}_x\text{Mn}_{3-x}\text{O}_4$, $0 < x < 3$ tudományos irodalmát tekintik át, elsősorban a szintézismódszerekre és az oxidok katalitikus tulajdonságaira, valamint azok felhasználására tekintettel. A cikk a folyóirat felkerésére született.

Nina Popov, Sara Marijan, Luka Pavić, Snežana Miljanić, Krešo Zadro, Ljerka Kratočil Krehula, *Zoltán Homonnay, Ernő Kuzmann, Shiro Kubuk, Ahmed Ibrahim, Stjepko Krehula**

Influence of Al³⁺ ions on the direct hydrothermal formation and properties of hematite ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) nanorods

[Journal of Alloys and Compounds 1018, 2025, 179223](#)

Aluminium can often be found in natural hematite ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) where it partially replaces iron, while a partial Al-for-Fe substitution in synthetic hematite can greatly affect its properties and performances in different applications. In this work, the influence of Al³⁺ ions on the hydrothermal formation of hematite nanorods, as well as on different properties and photocatalytic activity of the obtained Al-doped hematite nanoparticles, was investigated. A direct hydrothermal method with iron(III) chloride and 1,2-diaminopropane was used for the synthesis of uniform hematite nanorods. The influence of the presence of various molar fractions of Al³⁺ ions during this hydrothermal process on the formation mechanism and physico-chemical properties (structural, morphological, vibrational, optical, electrical, magnetic) of obtained hematite nanoparticles was investigated. The presence of Al³⁺ ions in the reaction mixture prevented the formation of goethite phase during the hydrothermal synthesis of hematite. A gradual change in the

shape of the formed hematite particles from long and thin hexagonal nanorods to shorter and thicker hexagonal nanorods, nanoprisms and nanoplates with increased molar fractions of Al^{3+} ions was observed. Incorporation of Al^{3+} ions into the crystal structure of hematite by Al^{3+} -for- Fe^{3+} substitution caused a gradual decrease in the unit cell size, hyperfine magnetic field, Morin transition temperature and electrical conductivity, as well as a gradual increase in the crystallite size and optical band gap. Significant changes in magnetic and vibrational properties were also observed. Prepared samples were evaluated as photocatalysts for the degradation of RhB dye by the heterogeneous photo-Fenton process and very good photocatalytic activities of all samples (pure and doped) were observed.

A cikk szerzői arról számolnak be, hogy a hematit ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) hidrotermális szintézise során az Al^{3+} -ionok hogyan befolyásolják a keletkezett termék különböző fizikai és kémiai tulajdonságait: részecskeméret, részecskealak, elemi-cellaparaméterek, vezetési tulajdonságok, szilárdtest-optikai tulajdonságok. Az utóbbiak különösen azért fontosak, mert az egyébként szigetelő tulajdonságú hematitot a tiltotsáv-szélesség variálásával olyan fotokatalizátorrá lehet alakítani, amely látható fény hatására is katalizálja a szennyvizek szerves szennyezőinek oxidatív lebontását. Ezt a katalitikus tulajdonságot a szerzők Rodamin-B (egy színes szerves anyag) modellvegyület lebontásának tanulmányozásával vizsgálták, és jelentős katalitikus aktivitást tapasztaltak.

Nore Stolte*, János Daru*, Harald Forbert, Jörg Behler, Dominik Marx

Nuclear Quantum Effects in Liquid Water Are Marginal for Its Average Structure but Significant for Dynamics

[Journal of Chemical Physics Letters, 15, 2024, 12144](#)

Isotopic substitution, which can be realized in both experiment and computer simulations, is a direct approach to assess the role of nuclear quantum effects on the structure and dynamics of matter. However, the impact of nuclear quantum effects on the structure of liquid water as probed in experiment by comparing normal to heavy water has remained controversial. To settle this issue, we employ a highly accurate machine-learned high-dimensional neural network potential to perform converged coupled cluster-quality path integral simulations of liquid H_2O versus D_2O at ambient conditions. We find substantial H/D quantum effects on the rotational and translational dynamics of water, in close agreement with the experimental benchmarks. However, in stark contrast to the role for dynamics, H/D quantum effects turn out to be small, on the order of $1/1000$ Å, on both average intramolecular and H-bonding structures of water. The most probable structure of water remains nearly unaffected by nuclear quantum effects, but effects on fluctuations away from average are appreciable, rendering H_2O substantially more "liquid" than D_2O .

A tanulmány a nehézvíz (D_2O) és a könnyűvíz (H_2O) szerkezeti és dinamikai tulajdonságait veti össze nagy pontosságú, gépi tanulásra alapozott po-

tenciálok és útintegrál-szimulációk segítségével. Az eredmények szerint bár az izotópeffektusok kevésbé befolyásolják a víz átlagos szerkezetét, a dinamikai tulajdonságok jelentős eltéréseket mutatnak a H_2O és a D_2O között. A szimulációk megbízhatóságát alátámasztja, hogy az alkalmazott módszer-tannal kapott eredmények pontos egyezést mutatnak a korábbi kísérleti adatokkal, mind a diffúziós állandók, mind más egyéb dinamikus szerkezeti jellemzők tekintetében.

A. Ibrahim,* M. Razum, L. Pavić, Zoltán Homonnay, Ernő Kuzmann, A. Santić, M.Y. Hassaan, K. Akiyama, S. Kubuki

Enhancing cyclability of $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_5\text{-P}_2\text{O}_5$ ceramic cathode for high-performance sodium-ion batteries through heat treatment

[Materials Chemistry and Physics, 332, 2025, 130231](#)

Due to the ability to form more open structures, glass and glass-ceramic materials can accommodate larger Na^+ ions and enable rapid solid-state diffusion of Na^+ at room temperature (RT). Regardless of the larger ionic radius of Na, iron-based mixed-vanadium-phosphate ceramics show promising potential as cathode materials in sodium-ion batteries (SIBs). However, their practical applicability is significantly hindered by slow Na^+ diffusion and low intrinsic electrical conductivity. In the present study, a ceramic sample with the composition of $5\text{Na}_2\text{O-45Fe}_2\text{O}_3\text{-10V}_2\text{O}_5\text{-40P}_2\text{O}_5$, denoted as (5NFVP), was synthesized before (BHT) and after heat treatment (HT) at 500, 600, and 700 °C for 2h to be used as a cath-

ode material in SIBs. The outstanding electrochemical performance of the 5NFVP ceramic is attributed to improved electronic and ionic conductivity and enhanced structural stability during Na^+ insertion/de-insertion. This is supported by various analyses, including X-ray diffraction (XRD), X-ray absorption near edge structure (XANES), ^{57}Fe Mössbauer spectroscopy, and electrochemical impedance spectroscopy (EIS). All prepared samples show two doublets, with the first doublet associated with $\text{Fe}^{3+}(\text{T}_d)$, confirming the XRD results that indicate the main crystalline phase of FePO_4 . The second doublet observed in the 5NFVP-HT500 and 600 °C is related to $\text{Fe}^{3+}(\text{O}_h)$, while 5NFVP-BHT exhibits a large δ value of 1.19 mm s^{-1} , indicating the presence of $\text{Fe}^{2+}(\text{O}_h)$ due to NaFePO_4 crystalline phase. The Fe-K absorption edge analysis reveals that 5NFVP-HT600 °C ceramics predominantly consist of Fe^{3+} , whereas 5NFVP-BHT has the most abundant Fe^{2+} compared with HT samples. The largest DC conductivity is achieved by the 5NFVP-HT600 °C ceramic, reaching $5.08 \times 10^{-9} \text{ S cm}^{-1}$ at RT. The initial capacity of 5NFVP-HT ceramics is approximately doubled compared to 5NFVP-BHT. The 5NFVP-HT600 °C ceramic as a cathode demonstrates excellent long-cycling stability, retaining 60 % of its capacity over 100 cycles under a current rate of 50 mA g^{-1} . These findings underscore the significant potential of 5NFVP-HT 600 °C for advanced energy storage systems, given its affordability and robust cyclability.

A szerzők azt vizsgálták, hogy a jövőbeli Na-ion-akkumulátorokban esetleg alkalmazásra kerülő $\text{Fe}_2\text{O}_3\text{-V}_2\text{O}_5\text{-P}_2\text{O}_5$ összetételű üvegből készült elektródok tulajdonságai hogyan javíthatók a feltöltési és kisülési ciklusok számának növelése érdekében. Az

akkumulátorokban alkalmazott elektrodok esetében kulcsfontosságú a lehető legtökéletesebb regenerálódás egy ciklus folyamán. Ebből a szempontból az üveg eleve viszonylag rendezetlen szerkezete nagyon fontos. A szerzők a ciklusok folyamán bekövetkező szerkezeti degradációt több más módszer mellett Mössbauer-spektroszkópiával vizsgálják, ami a töltés-átlépési folyamatok szempontjából kulcsfontosságú vas kémiai állapotát méri nagy érzékenységgel. A ciklusszám növelése érdekében különböző hőkezelési módszerek eredményeit mutatják be.

Ádám Kapdos, Mária Ujvári, Noémi Kovács, Zsolt Szakály, Ágota Busai, Panna Sólyom, Vitali Grozovski, Pavel Moreno-García, Peter Broekmann, Soma Vesztergom*

Modelling the chronopotentiometric response of constant current hydrogen evolution from dilute solutions of strong acids

[Journal of Catalysis, 4421, 2025, 115872](#)

Cathodic hydrogen generation from unstirred dilute acids ($2 < \text{pH} < 7$) often results in the vicinity of the electrode turning alkaline. Potential transients recorded at constant current exhibit a sharp step at the moment of surface neutralisation, and the stepped chronopotentiograms convey important information with regard to the rate of both the electrode reaction and of mass transport. Here we present a robust model that, although it contains only three variable parameters, can fit chronopotentiometric measurements. The reaction rate and charge transfer coefficients obtained from the fitting can be combined into a pH

dependent exchange current density of HER that can be used for benchmarking the catalytic activity of different electrode materials, while the obtained diffusion coefficient can be applied in simple formulae to estimate the characteristic time of surface neutralisation and the rate of propagation of the neutrality front.

Az egyenáramú vízbontás – a katódon hidrogénfejlődést eredményező – folyamata az elektrokémia legrégebben vizsgált problémája; mégis, a folyamat néhány fontos kérdése a mai napig tisztázatlan. Mi történik akkor, ha a folyamat alapvetően savas közegben zajlik, de a katódos hidrogénfejlődésnek köszönhetően az elektród környezete semlegesítődik, vagy akár el is lúgosodik? Hogyan hat ez vissza a katódfolyamat sebességére, az elektrolyzis fenntartásához szükséges feszültségre? Mi történik az elektród környezetében az oldattal, milyen lesz az elektród felületére merőleges pH-profil időbeli alakulása? Ezen kérdések tisztázása nemcsak alapkutatási probléma, de az elektrolyzist használó ipari technológiák fejlesztésének is egyik kulcsa. A Vesztergom Soma vezetésével működő MTA-ELTE Lendület Határfelületi Elektrokémia Kutatócsoport újabb publikációja kísérletekkel és a matematikai modellezés eszközeivel talál választ az elektrokémia egyik legfontosabb problémájára.

Dávid P. Jelenfi, Attila Tajti, Péter G. Szalay*
Molecular conductance calculations of single-molecule junctions

using projection-based density functional embedding

[Journal of Chemical Physics 162, 2025, 034101](#)

Single-Molecule Junctions (SMJs) are key platforms for the exploration of electron transport at the molecular scale. In this study, we present a method that employs different exchange-correlation density functionals for the molecule and the lead domains in an SMJ, enabling the selection of the optimal one for each part. This is accomplished using a formally exact projection-based density-functional theory (DFT-in-DFT) embedding technique combined with the non-equilibrium Green's function method to predict zero-bias conductance. The effectiveness of this approach is illustrated through transport calculations on SMJs with benzene-1,4-diamine and its tetramethylated and tetrafluorinated variants, using the CAM-B3LYP range-separated hybrid functional for the embedded molecule and the Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) functional for the electrodes. The findings indicate a substantial improvement in the accuracy of the predicted zero-bias conductance compared to traditional modeling using the PBE functional across the entire system. The causes for the noted improvement are demonstrated through the examination of alterations in the energy levels of the embedded molecule, along with variations in the electrode–molecule interactions.

Számos fontos kémiai és biológiai folyamatban zajlik molekuláris szintű töltéstranszport, például a fotoszintézisben, a fehérjék jelátvitelében vagy különböző kémiai reakciók során. Egy izgalmas jövőbeli alkalmazás lehetne,

ha molekulákból építhetnének áramköröket. Ehhez első lépésként az egyes molekulák vezetőképességét kell mérni, ami kísérletileg is megvalósítható (Single Molecular Junction, SMJ): ha egy molekula két molekuláris méretű hegygel rendelkező vezető közé illeszkedik, megváltoztatja a rendszeren áthaladó áram erősségét. Könnyű belátni, hogy egy ilyen, szemmel nem látható, parányi rendszerrel rendkívül nehéz kísérletezni, ezért az elméleti számítások elengedhetetlenek a mérések értelmezéséhez. Kollégáink ebben a cikkben egy ilyen számítási módszert tökéletesítettek, amelynek pontosságát sikerült két-háromszorosára növelni.

Asztrokémia és spektroszkópia / Astrochemistry & spectroscopy

Ala'a A. A. Azzam, Jonathan Tennyson,* Sergei N. Yurchenko, Tibor Furtenbacher, Attila G. Császár*

MARVEL Analysis of High-Resolution Rovibrational Spectra of $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{18}\text{O}$

[Journal of Computational Chemistry, 46, 2025, e27541](#)

A large set of validated experimental transitions and empirical rovibrational energy levels are reported for the fifth most abundant carbon dioxide isotopologue, $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ (in a shorthand notation, 638). Validation of the transitions and determination of the empirical energy levels are based on a compiled and carefully checked dataset, collected from 35 literature sources, containing

12 348/7432 measured/unique lines in the wave-number range of 578–9318 cm^{-1} . The MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) protocol, built upon the theory of spectroscopic networks, not only validates the vast majority of the measured transitions, but also yields 3975 empirical rovibrational energy levels, with uncertainty estimates compliant with the experimental uncertainties of the transitions.

Ez a tanulmány a szén-dioxid ötödik leggyakoribb izotopológjának, a $^{16}\text{O}^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ -nak kísérletileg észlelt spektroszkópiai átmeneteit vizsgálja és empirikus rezgési-forgási energiaszintjeit közli. Az átmenetek ellenőrzését és az energiaszintek meghatározását egy gondosan ellenőrzött, 35 szakirodalmi forrás alapján összeállított adatbázis segítségével sikerült elvégezni, mely összesen 12 348 mért, illetve 7432 egyedi spektrumvonalat tartalmaz az 578–9318 cm^{-1} hullámszám tartományban. A MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) protokoll, amely a spektroszkópiai hálózatok elvén alapul és amelyet az ELTE Kémiai Intézetében Császár Attila és munkatársai fejlesztettek, nemcsak a mért átmenetek döntő többségét ellenőrzi és hitelesíti, hanem a globális analízis eredményeként 3975 rezgési-forgási energiaszintet is képes meghatározni. Ez a munka, illetve a többi, nemzetközi együttműködésben a $^{16}\text{O}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{18}\text{O}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$, $^{17}\text{O}^{12}\text{C}^{18}\text{O}$ és $^{18}\text{O}^{13}\text{C}^{18}\text{O}$ molekulákkal végzett hasonló elemzések eredményei lehetővé teszik a spektrumok alapos megértését és még a kis intenzitású sávok azonosítását is. Az

ilyen típusú munkák elengedhetetlenek nemcsak a földi és világűrben észlelhető színeképek elemzése során, hanem a légköri üvegházhatás-modellek fejlesztésekor is.

Thomas Salomon, Carlo Baddeliyanage, Carla Schladt, Irén Simkó, **Attila G. Császár**, Wesley G. D. P. Silva, Stephan Schlemmer, Oskar Asvany*

High-resolution leak-out spectroscopy of HHe_2^+

[Physical Chemistry Chemical Physics](#), 27, 2025, 4826

Applying a novel and universal action spectroscopic technique, called leak-out spectroscopy, this paper revisits the ν_3 proton shuttle motion of the symmetric linear molecule $\text{He-H}^+-\text{He}$. For this, a 4 K cryogenic ion trap apparatus has been combined with a high-resolution quantum cascade laser operating around 1300 cm^{-1} . Seven rovibrational lines of this fundamental three-nucleus-four-electron system are recorded, demonstrating the suitability of the leak-out method for such fundamental hydrogen–helium cations.

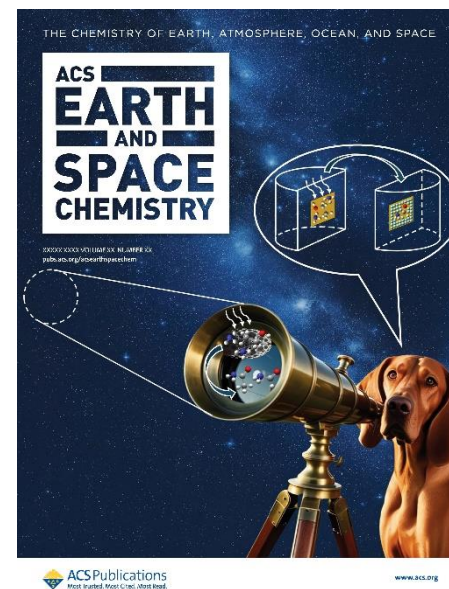
Egy új és általánosan alkalmazható molekulaszpektroszkópiai technika, az úgynevezett *leak-out* spektroszkópia segítségével ez a tanulmány eddig nem elérhető pontossággal vizsgálja a szimmetrikus, lineáris $\text{He-H}^+-\text{He}$ molekula rezgési-forgási mozgását. A mérési módszer egy 4 K hőmérsékletű ioncsapdát és egy nagy felbontású kvantum-kaszád lézert igényel. Az előzetes nagypontosságú kvantumkémiai számításokkal teljes összhangban a kísérlet során ennek a

három atommagból és négy electronból álló rendszernek hét spektrumvonalát sikerült megfigyelni, ami azt is igazolja, hogy a *leak-out* módszer alkalmas ilyen alapvető, egzotikus, az asztrofizika számára is fontos hidrogén–hélium kationok vizsgálatára.

Barbara Keresztes, Sándor Góbi, Anita Schneider, György Tarczay*

Cosmic-Ray-Driven Chemistry in the $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}/\text{NH}_3$ Interstellar Ice Analog

[ACS Earth and Space Chemistry](#), 2025



Ethyl alcohol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) and ammonia (NH_3) are prominent molecules in interstellar medium (ISM). Studying their astrochemically relevant reactions is crucial to advancing our understanding of astrochemical processes. To model astrochemically relevant ices on interstellar grain surfaces, pure $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$, pure NH_3 , and

$\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}/\text{NH}_3$ ices were deposited onto a cold substrate. The effects of cosmic ray irradiation, an important driver of ISM chemistry, were simulated by using 5 keV electron bombardment. Subsequently, the desorption of reaction products from the icy mantles into the gas phase was modeled through temperature-programmed desorption (TPD). The compositional changes in the ice were continuously monitored during the TPD experiments. In separate experiments, desorbed molecules were captured and isolated in an Ar matrix for identification. Chemical changes were monitored by using Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. Electron irradiation induced the formation of various species on the ices. For pure $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ice, the reaction products included CH_4 , CH_3CH_3 , CH_2CH_2 , $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_3$, CH_2CHOH , CH_2O , CH_3CHO , CH_2CO , $\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{CH}_3$, CH_3COOH , CO , CO_2 , HCO , H_2COH , CH_3OH , CH_2CHCHO , and HCOOH . For pure NH_3 ice, the experimental results were consistent with previous studies. In the case of $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}/\text{NH}_3$ ice mixtures, in addition to the products detected in single-component experiments, the formation of N- and O-containing organic molecules such as acetamide ($\text{CH}_3\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$), formamide (NH_2CHO), and isocyanic acid (HNCO) was observed. These findings contribute to our understanding of the chemical evolution of prebiotic molecules in the ice phase of the ISM.

Az ELTE kutatói az etil-alkohol ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$) és az ammónia (NH_3) csillagközi környezetben zajló reakcióit vizsgálták, hogy jobban megértsék az asztrofizikai jegekben, pl. csillagközi porszemcsék felületére kifagyott anyagban lezajló kémiai folyamatokat. A kísérletek során tiszta etil-alkoholból, tiszta ammóniából és ezek keverékéből álló jégmintákat bombáztak elektronokkal, ami a csillagközi térben ható koz-

mikus sugárzást modellezte, majd megvizsgálták, milyen molekulák keletkeznek és hogyan változik az anyagok összetétele. Az eredmények alapján az ilyen jeges környezetekben számos szerves vegyület, köztük prebiotikus jelentőségű molekulák, például acetamid és formamid is létrejöhet. A kísérleteket a saját tervezésű és építésű VIZSLA (Versatile Ice Zigzag Sublimation Setup for Laboratory Astrochemistry) nevű berendezéssel hajtották végre, amely a hasonló asztrofizikai modellezésekhez készült eszközkhöz képest megbízhatóbban és sokkal érzékenyebben tudja kimutatni a sugárzás hatására keletkező, majd szublimációval távozó molekulákat.

Anita Schneiker, Sándor Góbi, Barbara Keresztes, György Tarczay*

Spectroscopic characterization of radicals formed by hydrogen-atom abstraction from γ -valerolactone and γ -butyrolactone

[Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy](#), 330, 2025, 125677

γ -valerolactone (GVL) and its unmethylated counterpart, γ -butyrolactone (GBL), are important compounds with a wide range of potential uses. For example, GVL is proposed as an ideal alternative renewable energy source, while GBL can be utilized as an electrolyte. Understanding the combustion mechanisms of these compounds is crucial for optimizing their use as energy sources and monitoring the products formed during combustion. During pyrolysis, reactions with hydrogen atoms play a key role. Although the reactions of lactones with hydrogen

atoms have been studied at higher temperatures using theoretical and computational methods, the spectroscopic data for the radicals produced during these reactions remain incomplete. Such data could, however, be valuable for tracking radical mechanisms. This study investigated these reactions at 3.1 K using the *para*-H₂ matrix-isolation technique. The conditions provided by this method are particularly well-suited for studying radicals, in contrast to the conditions used in pyrolysis studies. IR spectroscopy was employed to monitor the reactions, enabling us to observe the vibrational spectra of the resulting radicals. These spectroscopic data could offer valuable insights for further exploring the combustion processes of GVL and GBL.

A γ -valerolaktont (GVL) ideális tulajdonságai miatt ígéretes bioüzemanyag-jelöltnek tartják. Ennek egy származéka, a γ -butirolakton (GBL) szintén kedvező tulajdonságokkal rendelkezik, habár a GVL-lel szemben ez az anyag mérgező, mivel az emberi szervezetben drog előanyaga-ként viselkedik. Ennek ellenére felhasználása széleskörű, például elektrolitként alkalmazják akkumulátorokban. Ezeknek a vegyületeknek, illetve reakcióiknak a vizsgálata különösen fontos, mivel a pontos spektrális jellemzők ismerete alapvető a termékek azonosításához, legyen szó azok égéséről magas hőmérsékleten vagy reaktív molekulákkal való kölcsönhatásukról a magas légkörben alacsony hőmérsékleten. Az ELTE Kémiai Intézet kutatói alacsony hőmérsékleten vizsgálták a H-atom reakciókat és azok reaktív termékeit, és ennek eredményeként megismerhettük e termékek egyedi spektrumát.

Elméleti kémia / Theoretical chemistry

Tamás Szidarovszky*

Ab initio study on the dynamics and spectroscopy of collective rovibrational polaritons

[Journal of Chemical Physics](#), 162, 2025, 034117

Accurate rovibrational molecular models are employed to gain insight in high-resolution into the collective effects and intermolecular processes arising when molecules in the gas phase interact with a resonant infrared (IR) radiation mode. An efficient theoretical approach is detailed, and numerical results are presented for the HCl, H₂O, and CH₄ molecules confined in an IR cavity. It is shown that by employing a rotationally resolved model for the molecules, revealing the various cavity-mediated interactions between the field-free molecular eigenstates, it is possible to obtain a detailed understanding of the physical processes governing the energy level structure, absorption spectra, and dynamic behavior of the confined systems. Collective effects, arising due to the cavity-mediated interaction between molecules, are identified in energy level shifts, in intensity borrowing effects in the absorption spectra, and in the intermolecular energy transfer occurring during Hermitian or non-Hermitian time propagation.

A mikrovilág apró szereplőit, az atomokat és a molekulákat a kvantumfizika segítségével kell értelmeznünk. Így van ez a fény esetében is, ha a fényt mikrométerű térrészbe szorítjuk be. Egy érdekesség ezzel kapcsolatban, hogy a fény kvantumelmélete szerint,

ha minél kisebb, tükröző falú dobozba zárjuk a fényt alkotó fotonokat, azok annál erősebbek lesznek, azaz egy foton annál nagyobb elektromos teret tud létrehozni. Ez azért érdekes egy vegyész számára, mert a molekulákat töltött részcscskék (az atommagok és elektronok) alkotják, melyekre a fotonok által keltett elektromágneses tér segítségével erőt lehet kifejteni. A kvantumfizika nyelvén a nagyerejű fotonok hatása úgy jelenik meg, hogy a foton és a molekula összeolvad, létrehozva egy fény-anyag keveréket, amit polaritonnak hívunk. A kutatás célja pontos elméleti modellek kidolgozása és alkalmazása annak fel-térképezésére, hogy a polaritonok létrejötte hogyan befolyásolja molekulák fizikai és kémiai tulajdonságait, pl. szerkezetét, fényelnyelési tulajdonságait. E publikáció a több molekulából álló polaritonokat, a kvantált sugárzási tér által közvetített, molekulák közötti kölcsönhatásokat vizsgálja részletesen.

Nore Stolte,* János Daru, Harald Forbert, Dominik Marx, Jörg Behler

Random Sampling Versus Active Learning Algorithms for Machine Learning Potentials of Quantum Liquid Water

[Journal of Chemical Theory and Computation](#), 21, 2025, 886

Training accurate machine learning potentials requires electronic structure data comprehensively covering the configurational space of the system of interest. As the construction of this data is computationally demanding, many schemes for identifying the most important structures have been

proposed. Here, we compare the performance of high-dimensional neural network potentials (HDNNPs) for quantum liquid water at ambient conditions trained to data sets constructed using random sampling as well as various flavors of active learning based on query by committee. Contrary to the common understanding of active learning, we find that for a given data set size, random sampling leads to smaller test errors for structures not included in the training process. In our analysis, we show that this can be related to small energy offsets caused by a bias in structures added in active learning, which can be overcome by using instead energy correlations as an error measure that is invariant to such shifts. Still, all HDNNPs yield very similar and accurate structural properties of quantum liquid water, which demonstrates the robustness of the training procedure with respect to the training set construction algorithm even when trained to as few as 200 structures. However, we find that for active learning based on preliminary potentials, a reasonable initial data set is important to avoid an unnecessary extension of the covered configuration space to less relevant regions.

Ez a munka összehasonlítja a véletlen mintavételezést és az aktív tanulási algoritmusokat a gépi tanuláson alapuló potenciálok fejlesztése esetén. A tanulmány a standard állapotú folyékony víz példáján végezte a vizsgálatot, és minden szimuláció során útintegrál szimulációval írta le nukleáris kvantumeffektusokat. A publikáció konklúziója, hogy a véletlen mintavétel kisebb tesztelési hibákat eredményezett az aktív tanulással összehasonlítva, adott méretű training

halmaz esetén. Továbbá azt is kimutatta, hogy bár az aktív tanulás nagyobb konfigurációs térre terjedt ki, az így kapott egzotikus szerkezetek nem javítják a modellek teljesítményét a szimulációk során. A munka kiemeli, hogy a véletlen mintavétel és az aktív tanulás hasonló minőségű modelleket eredményez, ha elegendő mennyiségű adat áll rendelkezésre, és hogy a vizsgált kvantum, kondenzált víz esetén már 200 struktúra is elegendő a modell jó teljesítményéhez.

*Gábor Náray-Szabó**

The early history of Hungarian quantum chemistry: From physics to applications in chemistry and biology

[Advances in Quantum Chemistry, 2025](#)

Hungarian quantum chemistry started with Pál Gombás, one of the masters of the statistical theory of atoms. His main achievement was the development of pseudopotentials for the treatment of exchange and correlation effects in atoms. He was professor of physics at the Budapest Technical University and had a lot of Hungarian followers, who extended and refined his methods at home and abroad. Camille Sándorfy graduated in Szeged, Hungary, then he left for Paris, later to Montréal, where he became full professor. He elaborated a quantum chemical method for the treatment of saturated hydrocarbons, furthermore he had important results in spectroscopy. Later he became interested in the nature of H-bonds and developed the theory of anethesia. Imre Csizmadia graduated at the Buda-

pest Technical University, then he left for Canada and did several computations on organic molecules, among them sulphyllimines, peptides and reaction mechanisms, e.g. the Wolff-rearrangement.

A cikk a magyar kvantumkémiai kutatások első eredményeiről számol be, Gombás Pál munkásságától kezdődően, aki új módszert dolgozott ki az atomok elektronszerkezetének leírására. Sándorfy Camille Szegeden végzett, majd külföldön folytatta munkáját. Kvantumkémiai módszereket fejlesztett ki szénhidrogének vizsgálatára, és a hidrogénkötések, valamint az érzéstelenítés elméletével is foglalkozott. Csizmadia Imre pedig Kanadában végzett számításokat szerves molekulák szerkezetére és reakcióira, például a Wolff-átrendeződésre.

INTÉZETI SZEMINÁRIUMOK, 2025. TAVASZ / INSTITUTIONAL SEMINARS, SPRING 2025

A Kémiai Intézet szemináriumso-rozatán szakmailag világszinten elismert vendégeink színvonalas előadásait hallgathatják az érdeklődők, java-részt angol nyelven. 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.

In the seminar series at the Institute of Chemistry, our distinguished guests give high-quality professional presentations, primarily in English, with a few exceptions. Doctoral candidates enrolled in the Hevesy György Doctoral School of Chemistry can earn credits by attending the seminar, which requires them to sign the attendance sheet. The presentations are followed by informal discussions accompanied by pastries and refreshments.

13 February (Thu) 15:00, Gróh auditory (062)

[Oskar Asvany](#)

I. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Germany

Investigating molecular ions with leak-out-spectroscopy

Leak-out-spectroscopy (LOS) is a rather novel ion-trap-based action spectroscopy method. LOS exploits the fact that vibrational energy of a laser-excited ion can be converted into kinetic energy in a collision with a suitable neutral molecule or atom. The ions are thus accelerated and may leave the trap towards a detector. By counting the "leaked-out" ions as a function of the laser wavelength, a spectrum is generated. The invention of LOS has boosted the spectroscopy of molecular ions, as it is a universal and very sensitive technique. In this presentation, I will focus on the application of LOS to astrophysically relevant cations, in particular on exotic ions consisting of only helium and hydrogen. Such systems are also interesting because they are few-particle-systems and therefore serve as a testing ground for high-level theoretical approaches!

27 February (Thu) 15:00, Gróh auditory (062)

[Marko Novinec](#)

Faculty of Chemistry and Chemical Technology, University of Ljubljana, Slovenia

Papain-like peptidases – allostery, oligomerization and protein engineering

Papain-like cysteine peptidases, called cysteine cathepsins in animals, are predominantly monomeric, single-domain endopeptidases with a broad substrate specificity. In recent decades, several human cathepsins have been associated with various diseases, and their inhibition has been explored as a potential treatment, albeit with limited success. These seemingly simple enzymes have been shown to have sophisticated regulatory mechanisms. We have shown that some, e.g. cathepsin K, can be allosterically regulated by polyanionic polymers such as glycosaminoglycans as well as by small molecule effectors, and molecular dynamics simulations have shown that effectors stabilise pre-existing conformations of the active site. We have also extended our work to cathepsin C, which is an exception in the family as it is a homotetramer and not a monomer. It showed similar susceptibility to small molecule effectors as the monomeric enzymes, but otherwise no additional behaviour that depends on its oligomeric state, such as cooperativity. Interestingly, a recombinant monomeric variant of the enzyme had nearly identical functional properties to the tetramer. Based on these results and the biotechnological potential of these enzymes, we are continuing our research to improve them through protein engineering. Our goal is to produce oligomeric variants with improved functional properties, such as cooperativity. To this end, we have also developed a novel system for the detection of protein homodimerization in *Escherichia coli*, which is currently being tested for use in protein engineering and drug discovery.

6 March (Thu) 15:00, Gróh auditory (062)

[Vasíl' \(László\) Andruch](#)

Institute of Chemistry, Faculty of Science, Pavol Jozef Šafárik University in Košice, Slovakia

Development of green analytical procedures

The aim of this presentation is to summarize the developments in the field of green analytical chemistry at the Department of Analytical Chemistry of the P.J. Šafárik University in Kosice. We will focus on the following questions: Green chemistry principles vs Green analytical chemistry (GAC) principles; How to satisfy the GAC? Important components of analytical procedures in the aspect of GAC. Practical consequences of GAC principles for selected parameters of analytical process. Milestones in GAC. Application of the liquid drop in analytical chemistry. Sample pre-treatment. Conventional liquid–liquid extraction (LLE) vs liquid-phase microextraction (LPME). Main categories of LPME, advantages and limitations. Dispersive liquid-liquid microextraction (DLLME), evolution, factors affecting DLLME/DLPME, advantages, disadvantages, problems, limitations of the technique. Various modes of DLLME. DLLME vs DLPME. Acronyms. Automation. Coupling of DLLME to detection techniques. Single drop microextraction (SDME). Application of the optical probe in analytical chemistry. Application of green solvents (deep eutectic solvents). Green metrics.

20 March (Thu) 15:00, Gróh auditory (062)

[Philipp Spitzer](#)

Fachdidaktikzentrum Chemie, Universität Graz, Austria

Communicating, Experiencing and Understanding Chemistry – Science Communication Between Outreach and Education

Science communication takes many forms—from public events to social media—but how effective are these approaches in reaching and educating school students? While universities are highly active in public engagement, do these efforts truly reach young audiences? What role do social media play, and where does real learning happen? I will discuss insights from our projects and their impact, focusing on the Chemical Christmas Lecture and social media outreach. Using the GlacierXperience project as an example, I will also highlight how out-of-school learning can be designed to engage students with current scientific topics, provide information, and give a glimpse into actual scientific research. This talk invites a discussion on how we can bridge the gap between outreach and education—ensuring that science communication not only inspires but also fosters deeper understanding.

3 April (Thu) 15:00, Gróh auditory (062)

[László Somogyi](#)

Circular Chemicals at MOL Group, Hungary

Circular Chemistry at MOL

24 April (Thu) 15:00, Gróh auditory (062)

[Gyula Pálfi](#)

Institute of Biochemistry, ETH Zürich, Switzerland

From SARS-CoV-2 membrane proteins to protein-RNA phase separation – how can we use multi-faceted bioNMR spectroscopy as a Swiss knife?

BioNMR spectroscopy is a powerful and versatile tool for exploring the structure, dynamics, and interactions of biomolecules. In this talk, I

will illustrate its broad applications through recent studies on viral membrane proteins and biomolecular phase separation.

First, I will present solid-state NMR investigations of SARS-CoV-2 accessory membrane proteins, highlighting their structural features, oligomerization, and potential interactions with host proteins. These findings provide insights into their roles in viral pathogenicity.

Second, I will discuss how solution-state NMR reveals the molecular mechanisms underlying protein-RNA phase separation, a key process in cellular organization. By examining the phase behavior of hnRNP1 and its interactions with RNA, we gain a deeper understanding of ribonucleoprotein assembly and function.

These examples showcase how advanced NMR techniques can address fundamental questions in structural biology and biophysics, offering a molecular-level perspective on complex biochemical phenomena.

8 May (Thu) - TBD

[John F. Stanton](#)

Chemistry – Quantum Theory Project, University of Florida, USA

TBA – Honorary Professorship Lecture on Pázmány Day

29 May (Thu) 15:00, Gróh auditory (062)

[Ákos Vértess](#)

Department of Chemistry, The George Washington University, Washington, USA

Metabolomics of Single Cells in their Natural Environment

In multicellular organisms, cells assemble into tissues with specific functions. Tissue embedded cells operate a selection of metabolic pathways for the synthesis and degradation of a collection

of small molecules that serve growth, signaling, and reproduction. Capturing the spatiotemporal distributions of metabolites, including lipids, with cellular granularity gives new insight into the functioning of tissues. We have developed ambient ionization techniques for mass spectrometry (MS) that can report on the metabolite content of functioning cells with high throughput and targeting capabilities. Image analysis and morphometry of brightfield and fluorescence microscope images are used to target selected cell types, followed by mid-IR laser ablation of individual cells. The ablation plume is ionized by an electrospray (laser ablation electrospray ionization, LAESI). Ion mobility separation (IMS) of the produced ions is followed by time-of-flight or Fourier transform ion cyclotron resonance MS for the determination of cellular metabolite abundances. Cell-type specific small molecule compositions are determined and correlated with active metabolic pathways characteristic to cellular functions. Metabolite abundance distributions reflect population heterogeneity through metabolic noise levels and reveal hidden cellular phenotypes segregated into subpopulations functioning in specific metabolic states. Examples of spatial metabolomics are presented for various cell types including human hepatocytes, Arabidopsis thaliana and onion epidermal cells, and root nodule cells of soybean in nitrogen fixing symbiosis with rhizobia.

TUDOMÁNYOS NAP / SCIENTIFIC DAY

The Institute's Science and Report Day, along with the Alumni Meeting, will be held on May 22–23. The detailed program will be available on the Institute's website from early April.

Az Intézet Tudományos és Beszámolónapját, valamint az Alumni találkozót május 22–23-án rendezzük meg. A részletes program április elejétől elérhető lesz az Intézet honlapján.

SIKERES PÁLYÁZATOK / SUCCESSFUL PROPOSALS

NKKP EXCELLENCE

Edina Rosta

Deciphering the Code of Phosphate Catalysis: QM, MM, and ML Methods
Foszfát katalízis kódjának feltörése: QM, MM és ML módszerekkel
50 250 000 HUF

The heart of life is the intricate dance of phosphate-catalytic enzymes, molecules that convert energy into motion. These molecular machines, found in all organisms and every living cell, are incredibly efficient and precise. Scientists have long been fascinated by these natural marvels, but recreating them in a lab has been a daunting task.

To tackle this challenge, we propose to use a combination of computer simulations and artificial intelligence. We plan to develop novel sophisticated methods that can predict the behaviour of molecules at an atomic level. By understanding how phosphate catalytic enzymes interact and move, we can design new molecules with specific properties.

The ultimate goal is to create tiny, man-made molecular machines that can perform tasks like delivering medicine to specific cells or cleaning up pollution. These machines could revolutionize

fields like medicine, materials science, and energy production. This research has the potential to unlock a new era of technological innovation. By successfully mimicking the efficiency and precision of natural molecular machines, materials and devices with unprecedented capabilities can be created.

Az élet szíve az energiát mozgássá alakító fehérje molekulák bonyolult tánca, ami foszfát-kémián alapul, és minden életformában mindenütt jelen van. Ezek a molekuláris gépek, amelyek minden élő sejtben megtalálhatóak, hihetetlenül hatékonyak és pontosak. A tudósokat régóta lenyűgözték ezek a természeti csodák, de laboratóriumi de novo újratermelésük nehéz, nagyrészt megoldatlan probléma.

Ennek a kihívásnak a megoldására számítógépes szimulációk és mesterséges intelligencia kombinációjának alkalmazását javasoljuk, kifinomult modellek fejlesztésével, amelyek képesek megjósolni a molekulák viselkedését atomi szinten. Ha megértjük, hogy ezek a molekulák hogyan hatnak egymásra és hogyan mozognak, új molekulákat tervezhetünk meghatározott tulajdonságokkal.

A végső cél foszfát-kémián alapuló molekuláris gépek megértése, és ezáltal olyan apró, ember alkotta gépek létrehozása, amelyek képesek különböző feladatokat ellátni, mint a gyógyszerek eljuttatása meghatározott sejtekhez vagy a szennyezés eltávolítása. Ezek a gépek olyan területeket forradalmasíthatnak, mint az orvostudomány, az anyagtudomány és az energiatermelés.

Ez a kutatás a technológiai innováció új korszakát nyithatja meg. A természetes molekuláris gépek hatékonyságának és pontosságának utánzásával soha nem látott képességekkel rendelkező anyagokat és eszközöket lehet létrehozni.

NKKP ADVANCED

Andrea Bodor

Atomic-Level Characterization of Molecular Crowding and Phase Separation of Single-Stranded DNA-Binding (SSB) Proteins

A molekuláris zsúfoltság és az egy-szálú DNS-kötő (SSB) fehérjék fázisszeparációjának atomi szintű jellemzése

119 940 000 HUF

One of the consequences of modern scientific advancements is that we are getting closer to describing cellular phenomena in greater detail. Within cells, liquid-liquid phase separation (LLPS) can lead to the formation of protein condensates. The atomic-level characterization of proteins involved in LLPS can be achieved using advanced NMR spectroscopy, whose findings contribute to the development of various biological and medical applications.

The single-stranded DNA-binding (SSB) protein plays a critical role in DNA metabolism by stabilizing single-stranded DNA while also participating in phase separation. Investigating SSB can help us understand how it contributes to cellular functions and influences cell viability and genome stability. Our results highlight the role of intrinsically disordered protein regions and liquid-liquid phase separation, suggesting new potential therapeutic targets.

The NMR spectroscopy methods we aim to develop will provide detailed insights into the dynamics and structure of proteins in molecularly crowded environments. Modeling such conditions offers a more accurate understanding of protein behavior within cells, enhancing our knowledge of biological systems and facilitating the design of novel therapeutic strategies.

A modern tudományos vívmányok egyik következménye, hogy egyre közelebb kerülünk a sejtekben történő jelenségek leírásához. A sejtekben folyadék-folyadék fázisszeperáció (LLPS) során fehérjekondenzátumok jönnek/jöhetnek létre. Az LLPS jelenségben részt vevő fehérjék atomi szintű leírása korszerű NMR spektroszkópiás vizsgálatokkal tehető meg, melynek eredményei számos biológiai és orvosi alkalmazás kifejlesztéséhez járulnak hozzá. Az SSB fehérje kritikus szerepet játszik a DNS metabolizmusában, stabilizálva az egyszálú DNS-t, ugyanakkor részt vesz fázisszeperációban. Vizsgálata segíthet megérteni, hogyan járul hozzá az SSB a sejtfunkciókhoz, és hogyan befolyásolja a sejtek életképességét és a genom stabilitását. Eredményeink rávilágítanak a rendezetlen fehérje szakaszok és a folyadék-folyadék fázis szeperáció szerepére, új terápiás célpontok azonosítását valószínűsítik. A kifejlesztetni kívánt NMR spektroszkópiai módszerekkel részletes képet kaphatunk a fehérjék mozgásáról, szerkezetéről a molekulárisan zsúfolt környezetben. Az ilyen környezetek modellezése pontosabb betekintést nyújt a fehérjék sejten belüli viselkedésébe, javítva a biológiai rendszerek megértését és új terápiás lehetőségek kidolgozását.

Imre Salma

The Effects of Aerosols on Urban Air Quality and Climate

Az aeroszol hatásai a városi levegőminőségre és éghajlatra

120 000 000 HUF

Ágnes Szabados

Correlation, Localization, and Frame Theory

Korreláció, lokalizáció és a frame elmélet

48 000 000 HUF

The project focuses on theoretical research with chemical applications. Nobel Prize-winning physicist Paul Dirac predicted as early as 1929 that chemistry could be described using quantum mechanics, and the field of quantum chemistry has been developing continuously ever since. The reason for this century-long research effort is that the fundamental equations of quantum mechanics can only be solved relatively easily in extreme cases, such as systems with very few or infinitely many degrees of freedom, with statistical methods applicable to the latter. The challenge for quantum chemistry lies in describing molecules, which have many but finitely many degrees of freedom.

The solution in this context involves the development of approximate quantum chemical models and mathematical techniques, along with computational strategies.

The project addresses open questions in quantum chemistry that arise when describing the correlated motion of electrons in molecules, as well as in systems where electron correlation is often neglected. Localization, as a concept, can be exploited in both cases.

Localization is a perspective-shaping concept that aids in interpreting quantum chemical results. Moreover, it plays a crucial role in the development of efficient approximate computational schemes. This statement applies both to high-accuracy electron correlation calculations and to the description of very large systems with

relatively moderate accuracy. Our aim is to combine well-established localization techniques in quantum chemistry with mathematical methods borrowed from the field of information technology.

A projekt tárgya elméleti kutatás, kémiai alkalmazásokkal. Paul Dirac Nobel-díjas fizikus már 1929-ben megjósolta, hogy a kémia a kvantummechanika segítségével leírható. A kvantumkémia fejlődése azóta is töretlen. A százéves skálán folyó kutatást az magyarázza, hogy a kvantummechanika alapegyenletei csak olyan, szélsőségesnek számító esetben oldhatók meg viszonylag egyszerűen, mint a nagyon kevés vagy a végtelen sok szabadsági fokkal bíró rendszerek, az utóbbiakra a statisztikai módszerek alkalmazhatók. A kvantumkémia számára a sok, de véges szabadsági fokú molekulák leírása jelenti a kihívást.

A megoldást ebben a helyzetben közelítő kvantumkémiai modellek és matematikai technikák kidolgozása jelenti, melyekhez számítási stratégiák fejlesztése is szükséges.

A projekt a kvantumkémia olyan nyitott kérdéseivel foglalkozik, amelyek felmerülhetnek a molekulákat alkotó elektronok korrelált mozgásának leírásakor, de olyan rendszereknél is, amelyek leírásában a korrelációk gyakran elhanyagolásra kerülnek. A lokalizáció, mint eszköz, mindkét esetben kiaknázható.

A lokalizáció egy szemléletformáló fogalom, segíti a kvantumkémia eredményeinek értelmezését. Emellett jelentős szerepet kap hatékony közelítő számítási sémák kidolgozásában. Az utóbbi kijelentés nagy pontosságú elektronkorrelációs számítások mellett igen nagy rendszerek viszonylag mérsekelt pontosságú leírására is ér-

vényes. A kvantumkémia jól bevált lokalizációs eszközeit az információtechnológia területéről kölcsönzött matematikai módszerekkel tervezzük kombinálni.

NKKP STARTING

Dániel Horváth

Mapping the functional amyloid formation of GPCR agonist peptide hormones at a molecular level to develop reversible amyloid drug delivery systems

GPCR agonista peptid hormonok funkcionális amiloid képzésének molekuláris szintű feltérképezése reverzibilis amiloid gyógyszerhordozó rendszerek kifejlesztése céljából

100 000 000 HUF

Notorious proteins prone to aggregation associated with neurodegenerative diseases (e.g., Alzheimer's disease) have made the concept of amyloid formation frightening in public discourse. However, besides these truly pathological amyloid fibrils, Mother Nature utilizes this structurally ordered fibrillar amyloid form extensively from bacteria to humans, serving crucial physiological functions such as storing certain biological signaling peptides, known as hormones. During digestion, there's a sudden demand for large amounts of hormones, which can only be rapidly released if they are stored compactly - in the form of amyloid fibrils.

The aim of our research is to understand why the amyloid structure of hormone peptides can be reversed, while pathological amyloid fibrils cannot. How is it possible that these hormones adopt different 3D structures in various pH environments

within the body? How can the sudden release of stored hormones from amyloid state and the immediate restoration of their functional role as signaling molecules occur?

Our research could also have significant pharmaceutical applications, as GLP-1 hormone and its derivatives play a crucial role in the cutting-edge treatment of diabetes and obesity. Mapping molecular interactions that stabilize amyloid fibers allows us to successfully mitigate the undesired intrinsic aggregation propensity of these hormone derivatives, thereby enhancing drug safety. Moreover, understanding the nature of functional amyloids—exploiting the biocompatible approach provided by nature—could lead to the development of a new nanofiber-based drug delivery system with controlled release.

A neurodegeneratív betegségekhez (pl. Alzheimer-kór) kapcsolódó aggregációra hajlamos fehérjék a közbeszédben félelmetesé tették az amiloid-képződés fogalmát. Pedig ezen valóban kóros amiloid rostok mellett az anyatermészet a baktériumoktól kezdve az emberig használja ezt a rost-szerűen rendezett térszerkezetet kiemelkedően fontos élettani funkciók ellátására, mint például bizonyos biológiai hírvivő peptidek, ún. hormonok tárolására. Az emésztés során hirtelen nagymennyiségű hormonra van szükségünk, amelyek gyors kibocsátása csak akkor lehetséges, ha azok kompakt módon – amiloid rostok formájában – vannak raktározva. Tervezett kutatásunk célja, hogy megértsük azt, hogy a hormonpeptidek amiloid térszerkezete miért fordítható

vissza, míg a kóros amiloidrostoké nem? Miként lehetséges, hogy e hormonok a szervezet különböző pH-értékű részeiben eltérő térszerkezeteket vesznek fel? Hogyan lehetséges a raktározott hormonok amiloid állapotának hirtelen felszabadítása, és a hormon hírvivő szerepének azonnali visszaállítás?

Kutatásunk komoly gyógyszeripari alkalmazást is nyerhetnek, mivel a GLP-1 hormon és módosított származékai fontos szerepet játszanak a cukorbetegség és az elhízás korszerű kezelésében. Az amiloid rostokat stabilizáló molekuláris kölcsönhatások feltérképezése lehetővé teszi azt, hogy egyes hatóanyagok nem kívánt aggregációját sikerrel visszaszorítsuk, s ezáltal növeljük a gyógyszerbiztonságot. Másrészt, a funkcionális amiloidok természetének megértésével – másolva az anyatermészet adta biokompatibilis megoldásokat – szabályozott hosszú hatástartamú hatóanyag-leadó rendszerek és új innovatív gyógyszeradagolási lehetőségek fejlesztése születhet meg.

NKKP SNN

Gitta Schlosser (& Veronika Krajliglic)

Autologous blood preparations with extracellular particles and hybridosomes for regeneration

ARIS Lead Agency: Regeneratív

célú autológ vérkészítmények extracelluláris részecskékkel és hibridoszómakkal
36 000 000 HUF

The plasma is the yellowish liquid base of blood which has beneficial effects in treatment of the damaged tissue. Preparations of plasma are widely used to accelerate healing of tendon and bone injuries as well as of acute and chronic wounds. The largest consumer of plasma is the field of orthopaedics, however, plasma is used also in other branches of surgery, in dentistry and in cosmetics. Recently, its application has been indicated in ongoing clinical trials considering post-COVID-19 patients and severe COVID-19 patients - to treat the damaged lungs. According to financial reports, the growing global plasma market will reach about 400 Million EUR by the end of 2025. Plasma is sensitive to manipulation and even the most gentle procedure may induce gross changes in the chemical composition and affects its biological impact. Our consortium will develop innovative materials with prolonged stability, in which the healing substances of plasma are enclosed within nano-sized particles. We perform clinical studies, in which the biological effect of the plasma preparations is investigated.

A vérplazma a vér sárgás színű, folyékony összetevője, amely jótékony hatású a sérült szövetek helyreállításában. Plazmakészítményeket széles körben használnak csont- és ínsérülések gyógyítására, akut és krónikus sebek regenerációjának elősegítésére. Bár leginkább az ortopédia területén alkalmazzák, fontos felhasználója a vérplazmának a fogászat és a kozmetikai ipar is. Jelenleg is folyó klinikai kutatásokban a vérplazmával történő kezelés pozitív

hatását vizsgálják súlyos lefolyású COVID-19 betegek és poszt-COVID-19 betegek tüdőregenerációjában. Pénzügyi elemzések szerint a plazma alapú termékek kereskedelmi forgalma ugrásszerűen növekszik, amely 2025-re elérheti a 400 millió eurót is. A plazmakészítmények azonban érzékeny anyagok, amelyek kémiai összetétele és biológiai hatása könnyen megváltozik. Konzorciumunk olyan új, innovatív anyagokat állít elő plazmából, amelyek jobb stabilitással, eltarthatósággal rendelkeznek azért, hogy a plazma bioaktív komponensei nanoméretű részecskébe zárva találhatóak. Ezen anyagok biológiai hatását klinikai vizsgálatokkal is igazoljuk.

KKV FÓKUSZ 2024

Gamma Zrt & ELTE TTK

Qualification of radioactive waste using a mobile container measurement station and technology based on a detector network

Radioaktív hulladékok minősítése, mobil konténeres mérőhely és detektorhálózatra épülő technológia alkalmazásával

799 807 960HUF

Részletek/ for details see [itt/here](https://www.kkv.gov.hu/en/for-details-see-itt/here).

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. december elejétől 2025. február végéig 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 early December, 2024 to end of February, 2025.

Andrea Bodor gave an invited talk at the Max-Planck Seminar in Göttingen, Germany, on February 18, 2025.

Ágnes Szabados and Andrea Bodor was invited to the [IUPAC's Global Women Breakfast \(GWB#2025\)](#) during the Analytical Forum in Budapest on February 11, 2025.

Péter Szalay was an invited speaker at [Workshop on Theoretical Chemistry](#) 2025, Mariapfarr, Austria, February 25-28.

RÖVID HÍREK / SHORT NEWS

Two of our colleagues, Andrea Bodor and Viktor Mihucz, have been appointed as university professors.

Intézetünk két munkatársát, Bodor Andreát és Mihucz Viktort egyetemi tanárrá nevezték ki.

Ferenc Hudecz, professor of the ELTE Institute of Chemistry, was awarded the "Excellence of Confucius Institutes" recognition for his nearly two decades of support for the network's work. The former rector of ELTE and vice president of the Hungarian Academy of Sciences received the award in recognition of his long-term dedication to supporting the development of the Confucius Institute.

Hudecz Ferencet, az ELTE Kémiai Intézet professzorát, „A Konfuciusz Intézetek Kiválósága” elismeréssel díjazták a hálózat munkájának közel két évtizedes támogatásáért. Az ELTE korábbi rektora, a Magyar Tudományos Akadémia alelnöke vehette át a kitüntetést, amely elismeri hosszú évek óta tartó elkötelezett munkáját a Konfuciusz Intézet fejlődésében.

Gábor Mező, head of the ELTE-HUN-REN Peptide Chemistry Research Group, was elected to be the new president of the Kisfaludy Lajos Foundation's board with unanimous support. The foundation aims to support original drug research, recognize outstanding achievements in pharmaceutical research, and organize scientific conferences and programs in the field.

Mező Gábor, az ELTE-HUN-REN Peptid-kémiai Kutatócsoport vezetője, a Kisfaludy Lajos Alapítvány kuratóriumának új elnöke lett, akit egyhangú támogatással választottak meg. Az alapítvány célja az eredeti gyógyszerek kutatása és a gyógyszerkutatás területén elért kiemelkedő eredmények elismerése, valamint a tudományos konferenciák és programok szervezése.

Prof. Pál Sohár, Emeritus Professor of the Institute of Chemistry and a full member of the Hungarian Academy of Sciences, passed away on January 19, 2025, at the age of 89.

Prof. Sohár Pál, a Kémiai Intézet professzor emeritusa, az MTA rendes tagja, életének 89. évében, 2025. január 19-én elhunyt.

Zsolt Fazekas, a PhD student of the HUN-REN-ELTE Protein Modeling Research Group, discussed the research on protein molecules effective against Covid in the Novum broadcast on February 17, 2025.

Fazekas Zsolt, a HUN-REN-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport doktorandusza a Covid ellen hatásos fehérjemolekula kutatásáról beszélt a [Novum 2025. február 17-i adásában](#).

Anita Schneiker, a doctoral candidate at the ELTE Hevesy György PhD School of Chemistry, has been awarded the prestigious Jon T. Hough Memorial Award. The recognition covers her full travel and conference expenses, allowing her to present her research at the 78th International Symposium on Molecular Spectroscopy in the United States in June 2025.

Schneiker Anita, a Hevesy György Kémiai Doktori Iskola doktorjelöltje elnyerte a rangos Jon T. Hough-emlékdíjat. Az elismerés fedezi teljes utazási és konferencia-költségeit, lehetővé téve számára, hogy bemutassa munkáját a 78. International Symposium on Molecular Spectroscopy konferencián az Egyesült Államokban, 2025. júniusában.

To subscribe:

Feliratkozás a hírlevélre:

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

Download former issues:

Korábbi számok letöltése:

<https://chemistry.elte.hu/content/tudomanyos-hirlevel>



ELTE
TTK