



ELTE | TTK
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

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

2026. JÚNIUS / JUNE 2026



TARTALOMJEGYZÉK

VÁLOGATÁS AZ ELTE KÉMIAI INTÉZET PUBLIKÁCIÓIBÓL

– 2026 TAVASZ /

SELECTIONS FROM THE INSTITUTE'S PUBLICATIONS – SPRING 2026 4

Gyógyszerkémia / Medicinal Chemistry 4

Analitika / Analytical Chemistry 6

Reakciókinetika / Reaction kinetics 9

Égéstudomány / Combustion Chemistry 9

Anyagtudomány / Materials Science 10

Elektrokémia / Electrochemistry 12

Elméleti és számítási kémia /

Theoretical and computational chemistry 13

SZABADALMAK / PATENTS 16

SIKERES PÁLYÁZATOK / FUNDED GRANTS 17

Cost Action 17

Bolyai Ösztöndíj / Bolyai Scholarship 17

KÉTNAPOS TUDOMÁNYÜNNEP / TWO-DAY CELEBRATION OF SCIENCE 18

MUNKATÁRSAINK KIEMELT ELŐADÁSAI /

DISTINGUISHED PRESENTATIONS BY OUR COLLEAGUES 20

RÖVID HÍREK / SHORT NEWS 21

VÁLOGATÁS A KÉMIAI INTÉZET PUBLIKÁCIÓIBÓL – 2026. TAVASZ / SELECTIONS FROM THE INSTITUTE'S PUBLICATIONS – SPRING 2025

Az alábbi lista témakörök szerint rendezve nyújt válogatást munkatársaink március eleje és május vége 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 March to the end of May. As this period is relatively short, it does not fully represent the diversity of research conducted at our institute.

Gyógyszerkémia / Medicinal chemistry

*Zita Makó, Dorina Jobbágy, Kristóf T. Gergely, Anna J. Kiss-Szemán, Gergő Rácz, Zsombor Gonda, Gergely L. Tolnai**

Electrophilic Activation of [1.1.1]Propellane by Silyl-Triflates

[The Journal of Organic Chemistry 2026, 91, 5015](#)

Incorporation of a bicyclo[1.1.1]pentyl framework

is a sought-after task in recent organic chemistry. Current methods mostly involve radical or nucleophilic pathways. In this study, we describe a general procedure for the synthesis of bridgehead silylbicyclo[1.1.1]pentanes by electrophilic activation. The process works with various nucleophiles, including amines, thiols, carbon, and heterocycles. Silylamines can be desilylated to offer a complementing strategy to synthesize C–H bicyclo[1.1.1]pentanes.

A hatékonyabb gyógyszermolekulák tervezése során a kutatók gyakran alkalmaznak olyan modern szerkezeti elemeket (bioizosztereket), amelyekkel a hagyományos, de sokszor hátrányos tulajdonságú kémiai csoportok kiválthatók. Bár a benzolgyűrűk helyettesítésére kiválóan alkalmas biciklopentán (BCP) vázak előállítására [1.1.1]propellán molekulából eddig szinte kizárólag gyökös vagy nukleofil reakciókkal volt lehetséges, az Eötvös Loránd Tudományegyetem kutatócsoportja egy új, elektrofil aktiváláson alapuló módszert dolgozott ki. Ez a szintetikus út jelentős újdonság, mivel a propellánok klasszikus kémiájában az elektrofil aktiválás korábban nem vezetett biciklopentánokhoz. Az új eljárással az ELTE kutatói ráadásul széles körben tudtak trimetilszililezett (TMS) biciklopentánokat előállítani, amelyek a gyógyszerkutatásban valódi újdonságnak számítanak, és ígéretes alternatívát jelenthetnek például terc-butil csoportok kiváltására. A reakció további előnye, hogy jó funkcióscsoport-toleranciával rendelkezik, így a keletkező építőelemek könnyen összekap-

csolhatók a gyógyszeriparban alapvető fontosságú egyéb komponensekkel, például aminokkal, tiolokkal vagy heterociklusokkal.

*Lúcia Torma, Anikó Gaál, Ivan Randelović, József Tóvári, Zoltán Varga, Gergely Szakács, Norbert Szoboszlai**

Development of daunorubicin-loaded bovine serum albumin nanoparticles – preparation, characterisation, optimization of production process, investigation of in vitro and in vivo toxicity and activity

[Colloids and Surfaces B: Biointerfaces 2026, 264, 115623](#)

Albumin-based nanoparticles (NPs) represent promising drug delivery systems (DDSs). By incorporating cytostatic agents into bovine serum albumin nanoparticles (BSA-NPs), their intrinsic toxicity can be reduced, while the pharmacokinetic profile of drugs can be optimised. Daunorubicin (DAU) is an anthracycline derivative with potent antitumor activity through inhibition of topoisomerase II, is widely used to treat various types of leukemia. However, its clinical application is limited by severe cardiotoxic side effects, which may be significantly reduced through nanoparticle-based delivery. In the present study, DAU-containing BSA NPs were prepared using the desolvation method. The parameters of the desolvation process were optimised, and their effects on NP characteristics were systematically investigated. The dissolution profile, cellular uptake, and stability of the nanoparticles under different temperature, storage medium, and time

conditions were evaluated. Under optimal preparation conditions, the resulting NPs exhibited an average particle size of 180–200 nm and an encapsulation efficiency of 65–70%. The cytotoxic effects of the prepared NPs were tested on four different cancer cell lines. The murine lymphoma P388 cell line demonstrated efficient uptake of both free DAU and DAU-containing BSA NPs after overnight incubation. The nanoparticles displayed sustained drug release at 37 °C and remained stable at 4 °C for 8 weeks in various storage solutions. In vivo toxicity revealed that the DAU-BSA nanoparticles exhibited reduced toxicity compared with free DAU. Based on these results, a standardized protocol was established for the preparation of daunorubicin-loaded BSA nanoparticles, enabling their use in future anticancer studies.

A szerves kémikusok számos antraciklin variánst szintetizálnak, amelyek pikomol koncentráció tartományban mutatnak hatékonyságot ráksejteken. Ezek a hatóanyagok *in vivo* túlságosan toxikusak, így irányított célba juttatásuk szükséges. Ha a bevált liposzómás enkapszulálás nem bizonyul megfelelőnek, akkor alternatívaként nanorendszerek is alkalmazhatók a hatóanyag célba juttatására. Az albumin-alapú nanorészecskék az egyik ilyen ígéretes gyógyszerbeviteli rendszereknek számítanak. A daunorubicin egy antraciklin-származék, amely erős daganatellenes hatást fejt ki, és széles körben alkalmazzák különböző típusú leukémiák kezelésére. Jelen tanulmányban daunorubicint tartalmazó nanorészecskéket állítottak elő az Integratív Környezet-Egészségtudományi Kutatólaboratórium munkatársai

és együttműködő partnereik, optimalták az egyes lépéseket és részletesen vizsgálták a képződő nanorendszereket. A kutatók távolabbi célja az, hogy a daunorubicinnél jóval hatékonyabb vegyületek esetében is alkalmazzák ezt a módszert.

Analitika / Analytical chemistry

Péter Lénárt, Viktor Háda, Kinga Komka, Gergely Tóth, Gitta Schlosser**

Deterministic Acceptance Limits for Statistical Equivalence Testing in Hydrogen/Deuterium Exchange Mass Spectrometry

[Journal of the American Society for Mass Spectrometry 2026, 37, 1245](#)

Hydrogen/Deuterium Exchange Mass Spectrometry (HDX-MS) is a unique, rapidly evolving technique that has been widely adopted for the characterization of the higher-order structure of proteins. Numerous statistical tools are available in the literature that can be used to identify statistically significant differences in the deuterium uptake values. Biopharmaceutical comparability studies, however, require evidence that two protein samples are highly similar and therefore necessitate a different statistical approach. Hageman et al. recently introduced an innovative HDX-MS equivalence testing method utilizing univariate two one-sided tests (TOST). The acceptance limits were established by the randomized resampling of eight replicate measurements of a reference protein. However, this approach can introduce a non-negligible level of variability in the acceptance limits when the same data set

is reanalyzed. In the present study, we enhance this method by replacing the randomized resampling process with the systematic enumeration of all possible combinations of the reference data set, thus eliminating the resampling-induced variation. Because this approach incorporates all measurements, including replicate combinations with markedly elevated variability, it leads to higher acceptance limits. Therefore, we evaluated three strategies: robust outlier detection, a percentile-based method, and a partitioning approach to establish more stringent criteria and reduce patient risk. By applying the enhanced methods to data sets of three approved infliximab biosimilars and a partially deglycosylated NIST mAb used as a mock candidate biosimilar, we demonstrated correct classification of equivalent and nonequivalent samples, making the enhanced evaluation strategy well suited for regulatory comparability assessment.

Egy fehérjealapú gyógyszerhatóanyag hatását és biztonságosságát alapvető módon határozza meg annak térbeli, háromdimenziós szerkezete. Ezzel összhangban hatósági elvárás, hogy a gyógyszergyárak a hatóanyagok térszerkezetét nagyműszeres módszerek segítségével vizsgálják és jellemezzék. Egy erre alkalmas módszer a hidrogén-deutérium csere tömegspektrometria (HDX-MS). Ezzel a technikával bár a térszerkezet nagy felbontás és érzékenység mellett vizsgálható, ugyanakkor igen nagyméretű és összetett adathalmazokat szolgáltatók. Gyógyszerbiztonság szempontjából igen fontos kérdés, hogy ilyen komplex HDX-MS adathalmazokat felhasználva hogyan bizonyítható, hogy két különböző gyártó által

forgalomba hozott gyógyszer megfelelő mértékben hasonló? Az irodalomban korábban mindössze egyetlen olyan közlemény volt található, amely erre a kérdésre megfelelő statisztikai megközelítéssel próbált választ adni. Azonban ez az irodalmi módszer egy olyan randomizált számításon alapult, amely miatt ugyanazt az adathalmazt többször is megvizsgálva a kapott eredményekben nagy eltéréseket lehetett tapasztalni. Az ELTE Kémiai Intézet munkatársai emiatt egy olyan, új alapokon nyugvó adatértékelési eljárást dolgoztak ki, amely randomizált értékelést nem tartalmaz. Az új módszer segítségével egy összetett HDX-MS adathalmaz bármennyi-szer újra értékelhető, mindig ugyanazokat az eredményeket fogja szolgáltatni. Ez az új metódus emiatt a gyógyszerhatósági elvárások szempontjából egy sokkal ideálisabb megközelítést jelent. Közleményünkben ezzel egyidőben kidolgoztunk két olyan módszert, amelyek segítségével szigorúbb gyógyszerengedélyeztetési kritériumok állíthatók fel. Ennek révén csökkenthető a későbbiekben kezelt páciensek által viselt gyógyszerbiztonsági kockázat.

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

Advantages of Alkali Metal Adduct Formation in Cyclic Ion Mobility-Mass Spectrometry of O-Methylated Cyclodextrin Isomers—Separation and Crossring Fragmentation

[Chemistry Europe – Methods 2026, 6:e70126](#)

The expanding use of O-methylated cyclodextrins (MeCDs) demands analytical strategies capable of rapidly and reliably distinguishing regioisomeric species, which remain challenging to characterize using conventional mass spectrometry. Here, we demonstrate that cyclic ion mobility–tandem mass spectrometry (cIM-MS/MS) provides a powerful and structurally selective approach for detailed analysis of isomeric MeCD mixtures. Using heptakis(2,3-di-O-methyl)- β -cyclodextrin (2,3-DIMEB) and heptakis(2,6-di-O-methyl)- β -cyclodextrin (2,6-DIMEB), we comparatively evaluate the suitability of different adduct ions and show that cIM enables clear separation of these regioisomers. We reveal that they can be unambiguously identified by postseparation tandem mass spectrometry (MS/MS) through characteristic crossring fragmentation of their di-O-methylglucoside subunits by selecting their $[M + Li/Na]^+$ ions in positive ionization mode and the $[M - H]^-$ ions in negative ionization mode. These diagnostic fragments allow confident assignment of methyl substitution positions. Moreover, analysis of crystalline methylated- β -cyclodextrin (CRYSMEB) and random-O-methyl- β -cyclodextrin (RAMEB) demonstrates that both substitution degree and pattern markedly influence fragmentation behavior. Overall, this study establishes cIM-MS/MS as an effective and highly discriminative platform for regioisomeric MeCD characterization, offering new mechanistic insight and practical guidance for future analytical applications.

Az MTA-ELTE Lendület Ionmobilitás-tömegspektrometria Kutatócsoport és a CycloLab Kft. munkatársai egy fejlett analitikai megközelítést mutatnak be, amely lehetővé teszi egymáshoz rendkívül hasonló ciklodextrin (CD) izomerek megbízható megkülönböztetését. A ciklodextrinek képesek magukba

zární a vízben nem, vagy csak nehezen oldódó vendégmolekulákat. A CD-k finom szerkezeti eltérései jelentős hatással lehetnek komplexképző tulajdonságaikra, ezért pontos karakterizálásuk alapvető fontosságú. A kutatók ciklikus ionmobilitás-tömegspektrometriás módszert használva alkálifém-adduktok képzésével jelentősen javították az izomerek szétválasztását, és ütközésindukált fragmentációval az izomerekre jellemző szerkezeti információkat nyertek. Az eredmények hozzájárulnak a komplex szénhidráralapú rendszerek mélyebb megértéséhez, és új lehetőségeket nyitnak fejlett analitikai módszerek alkalmazására a ciklodextrin-analitikában.

Dóra V. Ujj, Petr Kasal, Ida Fejős, Szabolcs Béni, József Kardos, Gábor Benkovics, Erika Bálint, Béla Mátravölgyi**

Complexation of Citalopram with β -Cyclodextrin, Mono-subetadex, and Subetadex: Phase Solubility, Hummel–Dreyer, Affinity Capillary Electrophoresis, ITC, and NMR Studies

[ACS Omega 2026, 11, 24323](#)

Cyclodextrins (CDs) have a number of important properties, such as chiral separation or the enhancing of water solubility of various substances. In the present study the complexation properties of sugammadex analog CDs, such as subetadex (SBX) and mono-subetadex (monoSBX) were investigated and compared with the native β -CD. The complexation features were investigated at pH 7.4 using citalopram, a selective serotonin reuptake inhibitor antidepressant, as a model

compound. The stability constants were investigated by phase-solubility test, the Hummel–Dreyer (HD) method, affinity capillary electrophoresis, and ITC and the different analytical techniques were comprehensively evaluated and compared. The NMR studies supported the results from the investigated techniques and the complex structure was characterized by ROESY NMR studies. The phase-solubility study yielded results that deviated from the other three techniques, with monoSBX showing the highest stability constant. In the case of the HD method, the value of stability constants significantly differed from ACE and ITC, but the trend of CD stability followed the same order (β -CD < monoSBX < SBX). The ACE and ITC methods gave very similar results for β -CD and monoSBX, with some deviations for SBX, although still within the same order of magnitude. Based on the results ACE and ITC appear to be the most reliable techniques for determining CD-guest stability constants.

A ciklodextrinek a gyógyszerhatóanyagok oldhatóságának és bio-hozzáférhetőségének javítására is használhatók. A közleményben a citalopram nevű antidepresszáns három különböző ciklodextrinnel kialakított komplexét vizsgálták négy különböző analitikai módszer segítségével és jellemezték a gazda-vendég típusú kölcsönhatás erősségét. Megállapították, hogy a legtöbb módszer szerint az eddig gyógyszerformulálásra nem használt subetadex alakította ki a legerősebb komplexet a citaloprammal, míg a natív β -ciklodextrin a leggyengébbet. NMR-vizsgálattal azt is igazolták, hogy a gyógyszer-molekula valóban beilleszkedik a

subetadex üregébe, így sikerült a komplex szerkezetét jellemezni.

Rekációkinetika / Reaction kinetics

*Fatima Shoeb, István Szalai**

Flow-enhanced spatiotemporal pH oscillations.

[Physical Chemistry Chemical Physics 2026, 28, 13370](#)

The interplay between nonlinear kinetics and transport can govern pattern formation in chemical and biological systems, yet the role of flow in feed-driven oscillatory systems remains incompletely understood. Sustained patterns require a continuous supply of fresh reactants, and periodic behavior typically emerges only within a specific range of feeding conditions. Here, we combine experiments and numerical modeling to investigate reaction–diffusion–advection dynamics in pH oscillators, a prototypical class of feed-driven systems. Using the bromate–sulfite and bromate–sulfite–ferrocyanide reactions in a laminar tubular reactor, we observe robust spatiotemporal oscillations that emerge at a finite distance from the inlet and are sustained by counterpropagating reaction fronts. The dynamics is driven by the competition between intrinsic kinetic delays and advective residence time. Simulations based on an extended Rábai model reveal that flow reshapes the nonequilibrium stability landscape, significantly enlarging the oscillatory domain compared to the reaction–diffusion case. Oscillations arise in an intermediate regime where the advective timescale becomes comparable to inhibitory delays, enabling a separation of activation and recovery processes.

Simulations indicate that the faster diffusion of hydrogen ions stabilizes the oscillatory behavior. These results demonstrate that externally imposed flow can increase the robustness of oscillatory dynamics of feed-driven chemical networks.

A közleményben Fatima Shoeb és Szalai István azt vizsgálták, hogyan befolyásolja az áramlás az önszerveződő kémiai rendszerek viselkedését. A kutatás középpontjában pH-oszcillátorok álltak: olyan reakciók, amelyekben a közeg savassága időben és térben periodikusan változhat. A szerzők megmutatták, hogy megfelelő áramlási sebesség mellett a reaktorban szabályos, térben terjedő pH-mintázatok jönnek létre. Ezek a mintázatok nem közvetlenül a betáplálás helyén indulnak el, hanem attól távolabb, ahol a reakció sebessége és az áramlás által meghatározott tartózkodási idő megfelelő egyensúlyba kerül. A munka távolabbi célja, hogy lágy anyagokban kialakított mesterséges, „érhálózatszerűen” táplált önszerveződő kémiai rendszereket hozzanak létre.

Égéstudomány / Combustion Chemistry

Márton Kovács, Máté Papp, Tibor Nagy, Tamás Turányi*

Advanced impact measures for selecting active parameters in the optimization of reaction kinetics models

[Combustion Theory Modeling, 2026](#)

Local sensitivity coefficients and parameter uncertainties are commonly used to guide the selection of parameters in the optimization of combustion kinetic models. In this study, we proposed two additional factors that influence parameter importance and can be utilized for active parameter selection in optimization workflows: the experimental uncertainty and the deviation between experimental and simulated results. Based on these factors, we proposed four novel impact measures for parameter ranking. These were benchmarked against two commonly used methods by constructing hierarchical optimization strategies of a methanol/NO_x mechanism involving ten parameters and a large experimental dataset. Results showed that measures which did not incorporate uncertainty information led to the steepest initial reduction in the error function. However, over the full course of optimization, methods considering uncertainty achieved better overall performance, despite following similar improvement trends. Among all evaluated strategies, one of the newly introduced measures - based on error function derivatives and uncertainty information - demonstrated the most consistent performance in reducing posterior uncertainties.

A kémiai reakciók hatását részletes reakciómechanizmusokkal lehet leírni. Ezek tartalmazzák a részfolyamatok reakciólépéseit, valamint a reakciólépések sebességi együtthatóinak hőmérséklet és nyomásfüggését. Egy égési folyamat reakciómechanizmusa jellemzően több száz reakciólépést és összesen több ezer paraméter tartalmaz. Ezeknek a paramétereknek egy része meghatározható mérési adatokra il-

lesztéssel. Kovács Márton és munkatársai olyan mérőszámokat dolgoztak ki, amelyek segítségével kiválaszthatók azok a paraméterek, amelyek jól meghatározhatók egy mérési adatkészlet alapján. A módszert a metanol nitrogénoxidokkal katalizált égésével kapcsolatos mérési adatok és reakciómechanizmusok példáján mutatták be.

Anyagtudomány/ Materials science

Seyed Hesamedin Hosseini, Katalin Sinkó, Imre Varga, Amirhossein Moghanian**

Molecular dynamic simulation and experimental insights on structure-property relationships in antibacterial Cu-doped silicate-based bioactive glasses

[Journal of Non-Crystalline Solids 2026, 683, 124108](#)

In this study, copper-substituted silicate-based bioactive glasses (Cu-BGs) were synthesized using the melt-quench technique and followed by molecular dynamics (MD) simulations employing the large-scale atomistic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS) atomistic simulation software. A mol % series of 60SiO₂-(40-x)CaO-xCuO (x = 0, 1, 3, 5, 8, 10, 15, and 20) were synthesized and labeled Cu0-Cu20 for simulation and experimental investigation. Afterwards, bond length, bond angle, coordination number (CN), bridging oxygen (BO), non-bridging oxygen (NBO), Qn distribution, network connectivity (NC), and ion clustering were studied

for computational evaluation. Meanwhile, inductively coupled plasma atomic emission spectroscopy (ICP-AES) and Gram-negative *Escherichia coli* (E.coli) were used to assess the ion release and antibacterial properties, respectively. Results indicated that the addition of Cu did not significantly alter the structure of BGs, resulting in an NC of 2.67 for all synthesized BGs. However, lower densities were observed, ranging from 2.71 to 2.54 g/cm³ for Cu0 to Cu20, respectively. In addition, ion clustering evaluation of Cu5 resulted in R Ca-Ca of 1.14, R Cu-Cu of 1.24, and R CaSi/Cu of 1.078, which indicated the lowest clustering behavior amongst other BGs. An antibacterial study also proved that the addition of Cu in the BGs, especially at 5 % and 8 % molar fractions, caused the BGs to exhibit a statistically significant increase in antibacterial efficiency compared to Cu0 (****p < 0.0001). Taken together, BG with 5 mol % CuO was introduced as an optimal Cu-BG in tissue engineering (TE) and biomedical applications due to its ideal solubility and enhanced antibacterial efficiency.

A cikk bioaktív üvegek (Cu-BGs) olvasztásos technológiával történő szintetizálásával és a kapott szerkezet molekuladinamikai szimulációval foglalkozik. A bioüveg összetétele: 60% SiO₂, 20-40 % CaO, 0-20 % CuO. A molekuladinamikai szimuláció szélesskálájú atomi/molekuláris paralel szimulátor (LAMMPS) szoftverrel segítségével zajlott. Kötéshosszt, kötésszöveget, koordinációs számot, oxigén kémiai kötésbeli pozícióját célozták a számítások. A molekuladinamikai szimulációk eredményei induktív csatolású plazma atom-

emissziós spektroszkópiával lettek ellenőrizve, kiegészítve. A bioaktivitás, az antibakteriális hatás Gram-negative *Escherichia coli* (E.coli) baktérium segítségével ellenőrizték. 5-8 % Cu-ionok hatására a bioaktivitás erőteljesen növekedett.

Vesselin Dekov, Akari Yamashita a, Kazutaka Yasukawa, Motoaki Morita, Germain Bayon, Ernő Kuzmann, Zoltán Homonnay, Anna V. Wegorzewski, Pierre Rochette, Natalia Shulga, Bleuenn Guéguen, François Demory, Yasuhiro Kato*

Mineralogical and geochemical constraints on the origin of the Kara Sea continental shelf Fe-Mn nodules

[Marine Geology Volume 2026, 496, 107767](#)

Mineralogy and geochemistry of three morphological types of Fe-Mn-nodules (ellipsoidal, saucer-like and plate-like) from the Kara Sea (Arctic Ocean) were investigated with the main goals to (1) understand their origin, and (2) evaluate their potential as resources for valuable elements. The studies revealed that these Fe-Mn-nodules were composed of todorokite, birnessite, ferrihydrite, quartz, feldspars and traces of fine-grained magnetite. The ternary discriminative diagrams for genetic classification of seafloor Fe-Mn-oxyhydroxide deposits did not provide unambiguous conclusion about the origin of the studied Fe-Mn-nodules when the bulk layer chemistry data (natural, as well as recalculated on quartz-free basis) were used. Using chemistry data for the pure Fe-Mn-oxyhydroxide precipitates (electron microprobe analyses) that compose the nodules in the same diagrams showed the studied Fe-Mn-nodules were mostly composed of diagenetic and partly of

diagenetic-hydrogenetic growth layers (with very few hydrogenetic growth layers). The rare earth elements geochemistry of the Kara Sea Fe-Mn-nodules confirmed this conclusion. The distributions of chemical elements across the nodules suggested that (1) their cores of growth were sediment lumps mineralized by Fe-Mn-oxyhydroxides; and (2) the fluctuations of elemental concentrations from the nodule cores upward and downward were likely results of fluctuations in the magnitude of diagenesis. The application of a previously established empirical formula that uses the concentrations of the rare earth elements and yttrium showed that the Kara Sea Fe-Mn-nodules grow faster than the deep-sea nodules. These nodules contain low concentrations of all trace elements and may not be a potential resource of valuable elements.

A cikk a Kara-tenger (a Jeges-tenger egyik peremtengere) aljáról begyűjtött, nagy vastartalmú mangángumók átfogó vizsgálatát mutatja be. A magas vastartalom lehetővé tette a Mössbauer-spektroszkópia alkalmazását, amely a vas kémiai formáinak egyik legrészletesebb meghatározási módszere. A vizsgálatok legfontosabb eredményeként a szerzők javaslatot tettek a gumók geológiai képződési folyamatára, és ezzel összefüggésben arra is rámutattak, hogy ezek a képződmények – bár sekélyebb tengeri környezetből, így kisebb költséggel gyűjthetők be – kevésbé tekinthetők értékes ritkaföldfémek (például ittrium) potenciális forrásának, mint a mélytengeri eredetű, hasonló geológiai képződmények.

Elektrokémia / Electrochemistry

Ádám Hideg, Noémi Kovács, Éva Fekete, Mária Ujvári, Zsolt Szakály, Tavo Romann, Vitali Grozovski, Liliana Gálvez-Vázquez, Aline Bornet, Pavel Moreno-García, Peter Broekmann, Soma Vesztegom*

A single reaction-based model describes the stepped polarization curves of oxygen evolution recorded on rotating disk electrodes from mildly alkaline solutions

[Journal of Catalysis 2026, 460, 116974](#)

Oxygen evolution reaction (OER) polarization curves recorded on rotating disk electrodes in mildly alkaline media exhibit a stepped shape: two exponentially rising segments (the first commonly assigned to OH⁻, the second to water oxidation) are separated by a limiting current plateau. We present here a robust analytical model using only three model parameters for the full polarization curve by assuming that OER proceeds according to a single two-electron charge transfer reaction, OH⁻ ⇌ 1/2 O₂ + H⁺ + 2e⁻, obeying the Erdey-Grúz-Volmer-Butler equation. The presented model can well be fitted to experimental data obtained for OER on oxidized iridium, platinum, and gold, over a broad range of pH, rotation rate, and electrode potential. The determined kinetic parameters (reaction rate and charge transfer coefficients) can be used to benchmark the catalytic activity of different electrode materials, while the obtained transport parameter (diffusion coefficient) can effectively support system optimization processes.

A közleményben az MTA-ELTE Lendület Határfelületi Elektrokémia Kutatócsoportjának munkatársai az anódos

oxigénfejlődést (a legtöbb elektrolizáló cellára jellemző anódfolyamatot), és annak pH-függését vizsgálják. Megállapítják, hogy az általánosan elterjedt, még a középiskolában is tanított leírással szemben (amely bázikus közegben hidroxidionokból, savas vagy semleges közegben vízmolekulákból kiinduló reakciót feltételez) a folyamat leírható egyetlen reakcióegyenlettel is. A szerzők a felület közelében bekövetkező kémhatásváltozás kiszámításához az autoprotolízis folyamatát is figyelembe vevő, de mégis analitikus formájú matematikai modellt dolgoztak ki. Munkájuk eredményeként nemcsak egyes katalizátorok oxigénfejlesztésre való alkalmassága lesz könnyebben jellemezhető (egyszerűen megállapítható mérőszámok segítségével), de a leírt modell lehetőséget teremt tágabb értelemben is az ún. pH-függő elektródreakciók mechanizmusának mélyebb megértésére.

Elméleti és számítási kémia / Theoretical and computational chemistry

Waed O. H. Al-Nashash, Ala'a A. A. Azzam, Sana A. E. Abzakh, Dunia Alatoom, Mohammad Taha I. Ibrahim, Jonathan Tennyson*, Tibor Furtenbacher, Attila G. Császár**

MARVEL Analysis of the High-Resolution Rovibrational Spectra of H¹²C¹⁴N

[Communications Chemistry 2026](#)

Studying the rovibrational spectra of hydrogen cyanide (HCN) has become increasingly relevant due to growing concerns about the molecule's environmental and health risks and its special role in astronomy. Empirical rovibrational energy levels are determined based on the MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) protocol for H₁₂C₁₄N, the most abundant HCN isotopologue. The spectroscopic analysis is based on 23 225 measured transitions, of which 14 728 are unique, collected from 39 literature sources. In contrast to most previous MARVEL studies, which utilized a very large number of experimental sources, for H₁₂C₁₄N 70 % of the measured transitions are contained in two literature sources. The experimental transitions used in the final MARVEL analysis form a spectroscopic network with a single principal and just a few floating components, but a large number of orphans. To ensure the reliability of the final empirical rovibrational energy level set, the final MARVEL analysis involved artificial transitions determined from accurately fitted effective Hamiltonian models. The transitions collected and validated span the spectral range of 0 – 13 018 cm⁻¹. Altogether 5564 empirical rovibrational energies, which make ca. 30% of states determined through effective Hamiltonian fits for the [H,C,N] system, with an average expanded uncertainty of 0.006 cm⁻¹, are obtained for H₁₂C₁₄N; they are associated with 174 vibrational bands. A comparison of the empirical rovibrational energy levels obtained in this study, and the transitions that can be generated from them, with those in the composite experimental/empirical/first-principles-computed HITRAN2020, ExoMol, and MOMENT-90 datasets reveals excellent overall agreement. Nevertheless, there are particularly notable exceptions in the case of HITRAN2020, for which there appear to be problems with the published labels of many lines.

A Nature kiadó tekintélyes folyóiratában megjelent cikk a hidrogén-cianid (HCN) molekula legnagyobb gyakoriságú izotopológjának spektroszkópiájával foglalkozik. A közlemény utolsó szerzője intézetünk egyetemi tanára, Császár Attila. A hidrogén-cianid rezgési-forgási színekeinek vizsgálata egyre nagyobb jelentőségre tett szert a molekula környezeti és egészségügyi kockázataival kapcsolatos növekvő aggodalmak, valamint az asztrokémiában betöltött különleges szerepe miatt. A magyar és angol társszerzők a $\text{H}^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ -re vonatkozó empirikus rezgési-forgási energiaszinteket a magyar kutatócsoport által fejlesztett MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) protokoll alapján határozták meg. A spektroszkópiai elemzés 23225 mért átmeneten alapul, amelyek közül 14728 egyedi átmenet, azokat 39 irodalmi forrásból gyűjtötték össze a szerzők, majd elvégezték a mérési eredmények részletes analizisét. Az összegyűjtött és validált átmenetek a $0\text{--}13\ 018\ \text{cm}^{-1}$ spektrális tartományt fedik le. Végezetül összesen 5564 empirikus rezgési-forgási energiaértéket sikerült meghatározni. Ezek 174 rezgési sávhoz kapcsolódnak és átlagos kiterjesztett bizonytalanságuk mindössze $0,006\ \text{cm}^{-1}$.

Ayaki Sunaga, Albert P. Bartók, Edit Mátyus*
Vibrational infrared and Raman spectra of the methanol molecule with equivariant neural-network property surfaces

[Physical Chemistry Chemical Physics 2026](#)

Electric dipole and polarizability surfaces are developed for the methanol molecule using ab initio electronic structure data, computed at the CCSD/aug-cc-pVTZ level of theory, and equivariant neural networks. These property surfaces are used to compute vibrational infrared and Raman intensities with variational vibrational energies and wave functions. The energies and wave functions, fully accounting for the large-amplitude motion and tunneling splitting states, are from continued variational vibrational computations, based on earlier work [Sunaga et al., J. Chem. Phys., 2025, 163, 064101], up to $3700\ \text{cm}^{-1}$ beyond the zero-point vibration, now reaching the O–H stretching fundamental. All vibrational fundamentals, combination and overtone bands are in excellent agreement with available (gas-phase) experimental data, with a $2.2\ \text{cm}^{-1}$ root-mean-squared deviation of the fundamentals from experiment. These developments constitute an important step towards a quantitative and comprehensive exact quantum dynamics model of the methanol molecule, and a linelist for astrophysical applications.

A kutatás a metanol molekulájának kvantitatív színekelemzésében jelent fontos előrelépést. Sikerült kiszámítani a kvantummechanika elvei alapján, spektroszkópiai pontossággal, a metanolmolekula összes alaprezgését, az alaprezgések tartományába eső kombinációs és felhang rezgéseket, valamint ezen rezgési állapotoknak a metilcsoport belső rotációja által eredményezett alagúteffekthoz tartozó felhasadásait. A munka másik jelentősége ekvivariáns neurális hálók első alkalmazása nagyfelbontású spektroszkópiai céllal, további ilyen jellegű alkalmazások előkészítéseként.

Csaba Fábri*, Tamás Szidarovszky*

Contributions to the theoretical modeling and understanding of molecular polaritons

[Advances in Quantum Chemistry 2026](#), 94, 279

Polaritonic chemistry deals with molecules that strongly interact with quantized light fields. The strong coupling is usually realized by confining matter into a microscale Fabry-Pérot or plasmonic cavity, where the photonic modes can efficiently couple with either electronic or vibrational molecular states, depending on the cavity mode wavelengths. For strong enough light-matter coupling, i.e., those surpassing the decay rates of the cavity and matter, hybrid light-matter states, called polaritons, are formed. The multidisciplinary field of polaritonic chemistry, which merges molecular sciences with quantum optics has attracted a great deal of attention from chemists and physicists alike, as the formation of polaritons have been shown to have an impact on a vast range of material properties and dynamic processes. In this chapter, we review the Hungarian contributions to the theoretical description and understanding of polaritonic chemistry.

A közleményben a szerzők a viszonylag fiatal, polaritonkémia nevű kutatási terület magyar vonatkozásait mutatják be. A fény kvantumelmélete szerint minél kisebb a tükröző falú dobozba (üregrezonátorba) zárjuk a fényt, annál erősebbek lesznek az azt alkotó fotonok, egy foton annál nagyobb elektromos teret tud létrehozni. A manapság már létező mikrométeres, vagy akár pár száz nanométeres dobozok esetén akár egyetlen foton is

képes a környező molekulákat nagy mértékben befolyásoló elektromos teret keltetni. A kvantumfizika nyelvén ez úgy jelenik meg, hogy a foton és a molekula összeolvad, és létrehoznak egy fény-anyag keveréket, amit polaritonnak hívunk. A polaritonkémia az ilyen fény-anyag állapotoknak a molekulák tulajdonságaira, reaktivitására való hatásával foglalkozik.

Bónis Barcza, Attila Tajti, Péter G. Szalay

On the behavior of different contributions to the excitonic coupling at short intermolecular separations

[The Journal of Chemical Physics 2026](#), 164, 204107

The treatment of large molecules by high-level quantum chemical methods requires either localization schemes or multilevel methods. However, the description of multichromophore systems poses a challenge for these schemes due to the spatial separation of the excitation events. An often applied technique is based on the fragmentation of the system with the inclusion of excitonic coupling between the fragments holding the chromophores. In this paper, we discuss some aspects of this latter methodology. Three contributions to the excitonic coupling will be discussed. The Coulomb coupling is the dominating component at large distances and is often used as the sole contribution. The exchange term is sometimes also evaluated, but it seems to be important only at short distances. Finally, there is also a term arising from the overlap of the fragment wave functions, which needs to be included when diagonalizing the Hamiltonian of coupled excitons. In

this study, we investigate the distance dependence of these terms for π -stacked molecular pairs and evaluate their relative importance. We also investigate how the numerical value of these contributions depends on the level of quantum chemical calculation (CIS, CC2, or EOM-CCSD) and also show the role of diffuse basis functions.

Nagy molekulák és molekuláris aggregátumok pontos kvantumkémiai vizsgálata nagyon számításgényes, ezért van jelentősége az olyan módszereknek, amelyek a molekulák részének tanulmányozásával (ún. fragmens módszerek) vagy a legfontosabb építőköre koncentrálnak (ún. lokalizációs módszerek) igyekeznek a teljes rendszerről információt szerezni. Különösen nehéz az olyan rendszerek modellezése, ahol több fényelnyelő molekularesz (kromofór) kölcsönhatásban van egymással. Ebben a cikkben kollégáink a kromofórok közötti kölcsönhatás pontos leírásának lehetőségét vizsgálták és azt találták, hogy a három legfontosabb komponens (Coulomb, kicserélődés, átfedés) relatív súlya a kromofórok távolságától erősen függ. Ezért pontos módszert dolgoztak ki mindhárom számítására, megnyitva az utat makromolekulák, mint pl. a DNS fényel való kölcsönhatásának tanulmányozására.

SZABADALMAK / PATENTS

Andrea Bodor, Szilvia Erika Bősze, László Norbert Galgóczi, Gábor Tóth, Mária Deli, Szilvia Veszelka, Anikó Szeckó

Antifungal oligopeptide compounds and their use. [WO2026058013](#)

Andrea Bodor, Szilvia Erika Bősze, László Norbert Galgóczi, Gábor Tóth, Mária Deli, Szilvia Veszelka, Anikó Szeckó

Peptide conjugates comprising blood brain barrier penetrating oligopeptides for use in therapeutic and diagnostic methods. [WO2026058014](#)

The patents concern lysine-rich peptides with excellent physicochemical properties, which exhibit antifungal activity on their own and show improved blood–brain barrier permeability compared to reference compounds. As such, they may find application as potential delivery carriers. At the University Innovation Day held on 28 May, Andrea Bodor also presented these results and discussed possible routes for their utilization.

A szabadalmak tárgyát olyan kiváló fiziko-kémiai tulajdonsággal rendelkező lizin-gazdag peptidek alkotják, amelyek önmagukban is antifungális hatással bírnak, és a referencia vegyületekhez képest jobb vér-agy gát átjutást mutatnak. Így alkalmazást nyerhetnek, mint lehetséges hordozók. A május 28-án megtartott egyetemi Innovációs Nap keretében Bodor Andrea előadásban is beszámolt ezekről az eredményekről, a lehetséges hasznosítási utakról.

SIKERES PÁLYÁZATOK / FUNDED GRANTS

COST Action

A COST Action (CA25136 – Intelligent Soft Materials via Chemical Feedback Control at Materials Interfaces) supporting the development of intelligent soft materials has received European cooperation funding, with the ELTE Institute of Chemistry represented by István Szalai. The international network aims to develop design principles for next-generation “intelligent” soft materials that are capable of sensing changes in their environment through chemical feedback, responding autonomously, and even exhibiting simple decision-like behavior.

In the longer term, such materials may play an important role in applications such as wearable devices, advanced sensors, medical micro-robots, and soft robotic systems. The INFORMat network connects researchers from Europe and beyond across chemistry, physics, and materials science to establish a shared conceptual framework, research directions, and development roadmaps in the emerging field of intelligent materials. A key objective of the program is the training of early-career researchers, the strengthening of international collaborations, and the facilitation of the future practical and industrial utilization of fundamental research results.

Európai együttműködési támogatást kapott az intelligens lágy anyagok fejlesztését célzó COST Action (CA25136 – Intelligent Soft Materials via Chemical Feedback Control at Materials Interfaces), amelyben az ELTE

Kémiai Intézetét Szalai István képviseli. A nemzetközi hálózat célja olyan új generációs, „intelligens” lágy anyagok tervezési elveinek kidolgozása, amelyek kémiai visszacsatolások révén képesek érzékelni környezetük változásait, azokra önállóan reagálni, sőt egyszerű döntésszerű működést mutatni.

Az ilyen anyagok hosszabb távon fontos szerepet kaphatnak például viselhető eszközökben, fejlett szenzorokban, egészségügyi mikrorobotokban és lágy robotikai rendszerekben. Az INFORMat hálózat európai és Európán kívüli kutatókat kapcsol össze a kémia, fizika és anyagtudomány területéről, hogy közös fogalmi keretet, kutatási irányokat és fejlesztési ütemterveket alakítsanak ki az intelligens anyagok feltörekvő területén. A program kiemelt célja a fiatal kutatók képzése, a nemzetközi együttműködések erősítése, valamint az alapkutatási eredmények későbbi gyakorlati és ipari hasznosításának elősegítése.

Bolyai Ösztöndíj / Bolyai Research Scholarship

Two researchers of the Institute, Sándor Góbi and János Sarka, have been awarded the 2026 Bolyai János Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences for a period of three years. Sándor Góbi's project focuses on the laboratory astrochemical investigation of ices relevant to Pluto. János

Sarka's research aims to develop new molecular spectroscopic methods for the high-resolution study of weakly bound systems.

A Magyar Tudományos Akadémia 2026. évi Bolyai János Kutatási Ösztöndíját nyerte el hároméves időtartamra intézetünk két kutatója, Góbi Sándor és Sarka János. Góbi Sándor projektje a Plútó környezetében előforduló jegek laboratóriumi asztrokémiai vizsgálatára irányul. Sarka János pedig új molekulaszpektroszkópiai módszereket fog fejleszteni gyengén kötött rendszerek nagyfelbontású vizsgálatához a kutatási projektje soroán.

KÉTNAPOS TUDOMÁNY-ÜNNEP / TWO-DAY CELEBRATION OF SCIENCE

Május 21–22-én rendezte meg az ELTE Természettudományi Kar Kémiai Intézete hagyományos Tudományos és Beszámolónapját, Pályaorientációs Napját, valamint Alumni Találkozóját. A kétnapos programsorozat az intézet tudományos eredményeinek bemutatása mellett a közösségépítést, a tehetséggondozást és a kiemelkedő teljesítmények elismerését is szolgálta.

A rendezvény nyitónapján adták át az intézet legfontosabb szakmai elismeréseit. Az ELTE TTK Kémiai Intézet Kiváló Oktatója 2025 díjat Láng Emma, a Kiváló Kutatója 2025 díjat pedig Daru János vehette át.



A hallgatói tudományos teljesítmények elismerésére a házi Tudományos Diákköri Konferencia díjátadója is sor került; a díjazottakról hírlevelünk korábbi számában már beszámoltunk.

A rendezvényen több kategóriában publikációs díjakat adtak át az intézet kiemelkedő tudományos teljesítményt nyújtó kutatóinak. Publikációs díjban részesült Császár Attila, Salma Imre, Novák Zoltán, Csámpai Antal, Béni Szabolcs, Papp Máté, Góbi Sándor és Szakály Zsolt. A 2025-ös Perl- emlékérmét Merza Roland kapta, szakdolgozatáért.

A Richter-termi megnyitót követően doktoranduszok mutatták be kutatási eredményeiket, majd a CHARM-EU programhoz kapcsolódó nemzetközi előadások és hallgatói versenyek következtek. A kihívásalapú tanulásra épülő analitikai kémiai hallgatói verseny díjait Johan Bobacka (Åbo Akademi University), Tahmer Sharkawi (University of Montpellier), valamint Somody Bernadette (ELTE ÁJK) közreműködésével adták át. A verseny díjazottjai Illés Tamás, Karvaly Krisztián Márk, Bakosi Ferenc, Körös Kornél József, Rábai Károly Tamás, Radócz Roland, Terbák Enikő és Forgách Bence voltak. A napot poszterszekció zárta, ahol a Richter Gedeon Nyrt. és a

SemiLab különdíjakkal jutalmazta a legjobb hallgatói munkákat. (Az első nap teljes programja [itt](#) látható.)

A rendezvénysorozat második napján, a Richter Gedeon Nyrt. támogatásával megvalósult Pályaorientációs Nap mintegy 250 középiskolás diákot, tanárt és szülőt vonzott. A program három kiemelt témakörre épült: az energiatárolásra, a gyógyszerkutatásra és az űrkémiaira.

Az energiatárolásról Vida Ádám, a Bay Zoltán Kutatási és Fejlesztési Központ kutatási és fejlesztési igazgatója tartott előadást, míg a gyógyszerkutatás lehetőségeiről Greiner István, a Richter Gedeon Nyrt. kutatási és fejlesztési igazgatója beszélt. Az űrkémia és az űrkutatási karrierutak témáját Nigel Mason, a University of Kent professzora mutatta be, a kapcsolódó beszélgetésen pedig Farkas Bertalan űrhajós is részt vett. A panelbeszélgetéseken számos ELTE-n végzett kutató is részt vett.

A program részeként középiskolai kémia tanárokat is elismertek az utánpótlásnevelésben végzett munkájukért. Díjat vehetett át Tamás Klára, Tóthné Tarsoly Zita és Győre Henriette.

A résztvevők látogatást tehettek a SuperSmartLab-ban és a Kémiai Intézet több kutatólaboratóriumában, valamint vegyipari és gyógyszeripari vállalatok standjainál is tájékozódhattak. A szakmai programokat látványos kísérleti bemutatók és zenei produkciók egészítették ki. (A teljes program [itt](#) látható.)

A kétnapos programsorozat az Alumni Találkozó zárta, amely mintegy 150 résztvevővel adott lehetőséget az egykori hallgatók, oktatók és partnerek számára a találkozásra, a szakmai kapcsolatok ápolására és új együttműködések kialakítására. (A rendezvény programja [itt](#) látható, míg egy rövid képes beszámoló [itt](#) érhető el.)
Részletesebb beszámoló a Természettudományi Kar [honlapján](#) érhető el.

Scientific and Reporting Day, Career Orientation Day, and Alumni Event held by the ELTE TTK Institute of Chemistry

On 21–22 May, the Institute of Chemistry at the Faculty of Science, Eötvös Loránd University (ELTE) held its traditional Scientific and Reporting Day, Career Orientation Day, and Alumni Meeting. In addition to presenting the institute's scientific achievements, the two-day program also aimed to strengthen community building, support talent development, and recognize outstanding performance.

On the opening day of the event, the institute's most important professional awards were presented. The ELTE TTK Institute of Chemistry Excellent Teacher Award 2025 was given to Emma Láng, while the Excellent Researcher of the Institute Award 2025 was awarded to János Daru.

Recognition of student scientific performance was also included in the program through the award ceremony of the in-house Student Scientific Conference; the awardees were already reported in a previous issue of our newsletter.

Several categories of publication awards were also presented to researchers of the institute for outstanding scientific performance. Publication awards were granted to Attila Császár, Imre Salma, Zoltán Novák, Antal Csámpai, Szabolcs Béni, Máté Papp, Sándor Góbi, and Zsolt Szakály.

The Perl Memorial Medal 2025 was awarded to Roland Merza for his thesis work.

Following the ceremonial opening in the Richter Lecture Hall, doctoral students presented their research results, followed by international lectures and student competitions linked to the CHARM-EU program. The challenge-based analytical chemistry student competition awards were presented with the contribution of Johan Bobacka (Åbo Akademi University), Tahmer Sharkawi (University of Montpellier), and Bernadette Somody (ELTE Faculty of Law). The award-winning students were Tamás Illés, Krisztián Márk Karvaly, Ferenc Bakosi, Kornél József Kőrös, Károly Tamás Rábai, Roland Radócz, Enikő Terbák, and Bence Forgách. The day concluded with a poster session, where the Richter Gedeon Plc. and SemiLab awarded special prizes for the best student presentations.

On the second day of the event series, the Career Orientation Day, supported by Richter Gedeon Plc., attracted around 250 high school students, teachers, and parents. The program was organized around three main themes: energy storage, pharmaceutical research, and astrochemistry.

Energy storage was presented by Ádám Vida, Research and Development Director of the Bay Zoltán Research Institute. Opportunities in pharmaceutical research were discussed by István Greiner, Research and Development Director of Richter Gedeon Plc. The topic of astrochemistry and career paths in space research was introduced by Professor Nigel Mason (University of Kent), and astronaut Bertalan Farkas also participated in the related panel discussion. Several ELTE alumni researchers took part in the panel discussions.

As part of the program, secondary school chemistry teachers were also recognized for their work

in talent development. Awards were presented to Klára Tamás, Zita Tóthné Tarsoly, and Henriette Győre.

Participants could visit the SuperSmartLab and several research laboratories of the Institute of Chemistry, as well as company stands from the chemical and pharmaceutical industry. The scientific program was complemented by spectacular experiments and musical performances.

The two-day event series concluded with the Alumni Meeting, which brought together around 150 participants, providing an opportunity for former students, lecturers, and partners to meet, strengthen professional connections, and initiate new collaborations.

MUNKATÁRSAINK KIEMELT ELŐADÁSAI / DISTINGUISHED PRESENTATIONS BY OUR COLLEAGUES

Munkatársaink és doktoranduszaink számos előadást tartanak hazai és nemzetközi konferenciákon. Terjedelmi korlátok miatt itt csupán a 2026. március elejétől május 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 March to end of May 2026.

In March 2026, Justus Liebig University Giessen (the only university in Germany named after a chemist) celebrated the 60th birthday of the renowned synthetic organic chemist Professor Peter R. Schreiner with an international symposium. [The symposium program](#) included Attila Császár as an invited speaker, who delivered a lecture entitled “Tunnel or Not? Nuclear Quantum Effects in the CH_5^+ System.” The symposium was also featured in a [special issue of Angewandte Chemie International Edition](#).

The COST (Cooperation in Science and Technology) [COSY program](#) held its closing meeting in Madrid in April 2026, where Attila Császár was an invited speaker. He delivered a lecture entitled “Intriguing manifestations of noncovalent interactions.”

On 18–20 May 2026, the extended second working group of the COST [COSY program](#) met in Lausanne, where Attila Császár contributed to the program with a lecture entitled “ CH_5^+ : Confined to a Quantum Graph.”

On 31 May 2026, Edit Mátyus delivered a plenary lecture at the [International Congress of Quantum Chemistry in Berkeley](#), California, on the development and applications of an ultraprecise non-adiabatic relativistic-radiative theory for small molecules. Prior to her lecture, she received the annual medal of the International Academy of Quantum Molecular Science. The Academy awards this medal each year to a quantum chemist aged forty or younger, with the official presentation taking place at the triennial congress.

RÖVID HÍREK / SHORT NEWS

Az ELTE Kémia Okoslabor – SuperSmartLab szerepelt a [Novum TV április 6-i adásában](#).

The ELTE Smart Chemistry Laboratory – SuperSmartLab was featured in the April 6 episode of Novum TV.

Vámi Ármin, a székesfehérvári Vasvári Pál Gimnázium végzős diákja az ELTE Természettudományi Kar Talentum programjának keretében végzett kutatómunkát az ELTE Kémiai Intézetben, Góbi Sándor témavezetésével. Kutatási eredményeit a 22. Hlavay József Országos Környezettudományi és Műszaki Diákkonferencián mutatta be, amelyet 2026. április 10–11. között rendeztek meg Veszprémben, a Pannon Egyetem Mérnöki Karának szervezésében. A Fenntarthatóság és természettudományok szekcióban tartott előadásával első helyezést ért el.

Ármin Vámi, a final-year student at Vasvári Pál Gymnasium in Székesfehérvár, conducted research at the ELTE Institute of Chemistry within the Talentum program of the ELTE Faculty of Science, under the supervision of Sándor Góbi. He presented his results at the 22nd József Hlavay National Conference on Environmental Sciences and Engineering, held on 10–11 April 2026 in Veszprém, organized by the Faculty of Engineering of the University of Pannonia. He achieved

first place in the “Sustainability and Natural Sciences” section.

Az ELTE Kémia Okoslabor – SuperSmartLab szerepelt az [Innovátor április 11-i adásában](#).

The ELTE Smart Chemistry Laboratory – SuperSmartLab was featured in the April 11 episode of Innovátor.

Vámi Ármin, a székesfehérvári Vasvári Pál Gimnázium végzős diákja az ELTE Természettudományi Kar Talentum programjának résztvevőjeként, az ELTE Kémiai Intézetben, Góbi Sándor témavezetésével végezte kutatásait. A 32. International Conference of Young Scientists nemzetközi konferencián, amelyet 2026. április 19–24. között rendeztek meg Új-Delhiben, kiemelkedő sikereket ért el: a Környezettudományok szekció poszterversenyén különdíjat nyert, míg „Szilárd halmazállapotú szénsav spektroszkópiás vizsgálata” című előadásáért ezüstérmet kapott.

Ármin Vámi, a participant of the ELTE Faculty of Science Talentum program, conducted his research at the ELTE Institute of Chemistry under the supervision of Sándor Góbi. At the 32nd International Conference of Young Scientists, held in New Delhi between 19–24 April 2026, he achieved outstanding results: he received a special prize in the poster competition of the Environmental Sciences section, and a silver medal

for his presentation entitled “Spectroscopic Investigation of Solid-State Carbonic Acid.”

Szokolai Lili, az ELTE Radnóti Miklós Gyakorló Általános Iskola és Gyakorló Gimnázium diákja, az ELTE TTK Talentum tehetséggondozó programjának résztvevőjeként végez kutatómunkát az ELTE Kémiai Intézetében Mező Gábor, az ELTE Kémiai Intézet tudományos tanácsadója, a HUN-REN-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport vezetője, valamint Dókus E. Levente, a kutatócsoport tudományos munkatársa témavezetésével. A Phoenixben megrendezett Regeneron International Science and Engineering Fair (ISEF) 2026 nemzetközi tudományos versenyen „Tumorössejteket célzó peptid hatóanyag konjugátumok készítése” című projektjével két különdíjat nyert: az egyik elismerést a Drug, Chemical & Associated Technologies Association, a másikat pedig az American Chemical Society ítélte oda számára.

Lili Szokolai, a student of the ELTE Radnóti Miklós Practice Primary and Secondary School, conducts research at the ELTE Institute of Chemistry within the ELTE TTK Talentum talent development program under the supervision of Gábor Mező, scientific advisor at the ELTE Institute of Chemistry and head of the HUN-REN-ELTE Peptide Chemistry Research Group, and E. Levente Dókus, research fellow of the group. At the Regeneron International Science and Engineering Fair (ISEF) 2026 held in Phoenix, she received two special awards for her project entitled “Preparation of Peptide Drug Conjugates

Targeting Tumor Stem Cells,” one from the Drug, Chemical & Associated Technologies Association and the other from the American Chemical Society.

Sebák Fanni munkatársunk az IDP2Biomed program keretében vendégkutató volt Göttingenben, Prof. Markus Zweckstetter laboratóriumában a DZNE (Deutsches Zentrum für Neurodegenerative Erkrankungen) és a Max Planck kutatóintézetben. Az 1 hónapos időtartamban rendezetlen fehérjék lassú és gyors mozgásainak dinamikai vizsgálatát és a folyadék-folyadék fázisszeparációban való viselkedését vizsgálta legkorszerűbb NMR spektroszkópiai megközelítésekkel.

Fanni Sebák was a visiting researcher within the IDP2Biomed program in Göttingen, in the laboratory of Prof. Markus Zweckstetter at the DZNE (German Center for Neurodegenerative Diseases) and the Max Planck Institute. During a one-month stay, she investigated the dynamics of slow and fast motions of intrinsically disordered proteins and their behavior in liquid–liquid phase separation using state-of-the-art NMR spectroscopic approaches.

Dr. Ayaki Sunaga, a Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport korábbi Marie Curie posztdoktori ösztöndíjasa, adjunktusi kinevezést kapott a Hokkaido Egyetemen (Prof. Satoshi Maeda csoportjában), Sapporóban (Japán).

Dr. Ayaki Sunaga a former Marie-Curie Postdoctoral Fellow in the Molecular Quantum Dynamics Research group was appointed to assistant professor at Hokkaido University (Prof. Satoshi Maeda's department), Sapporo, Japan.

A European Chemistry Thematic Network kémiai felsőoktatási szervezet az akkreditációkat intéző állandó bizottságának vezetőjévé választotta Tóth Gergelyt a szervezet éves közgyűlésén 2026. május 21-én Valenciában (Label Committee Chair). A szervezet többek között akkreditációs eljárásokat folytat Eurobachelor, Euromaster és Chemistry Doctorate Eurolabel címekért. Az ELTE Kémiai Intézete 2007-ben a bolognai rendszerű képzések elindításakor akkreditáltatta a kémia alapszakot és a vegyész mesterszakot az ECTN szervezetnél, illetve a Kémiai Intézet évekig használta az ECTN által kifejlesztett EChemTest rendszert.

The European Chemistry Thematic Network (ECTN), a higher education chemistry organization, elected Gergely Tóth as Chair of its permanent committee responsible for accreditation at its annual general assembly on 21 May 2026 in Valencia (Label Committee Chair). The organization oversees accreditation procedures for Eurobachelor, Euromaster, and Chemistry Doctorate Eurolabel qualifications. The ELTE Institute of Chemistry accredited its BSc and MSc chemistry programs through ECTN in 2007 at the launch of the Bologna system, and for many years the Institute also used the EChemTest system developed by ECTN.

Hudecz Ferenc MTA természettudományi alelnöki megbízatása 2026. május 31-én ért véget.

Ferenc Hudecz's mandate as Vice President for Natural Sciences of the Hungarian Academy of Sciences ended on 31 May 2026.

Június 1-i hatállyal az [MTA Doktori Tanácsa](#) társelnökké választotta Császár Attilát. A megbízás három évre szól.

As of 1 June, the Doctoral Council of the Hungarian Academy of Sciences elected Attila Császár as co-chair. The appointment is for a three-year term.

Intézetünk két új címzetes egyetemi tanárral és egy címzetes egyetemi docenssel bővült. A Kari Tanács 2026. június 10-i ünnepi ülésén Kacskovics Imre dékán adta át az elismeréseket. Címzetes egyetemi tanári címet kapott Dr. Kele Péter és Dr. Soós Tibor, míg címzetes egyetemi docensi címet Dr. Varga Szilárd. Mindhárman kiemelkedő kutatói és oktatói tevékenységükkel járulnak hozzá az ELTE TTK szakmai munkájához és nemzetközi láthatóságához. Az intézet ezúton is gratulál az elismerésekhez. Részletek [itt](#).

The Institute has been enriched with two new honorary professors and one honorary associate professor. The titles were awarded at the ceremonial meeting of the Faculty Council held on 10 June 2026 by Dean Imre Kacskovics. Péter Kele

and Tibor Soós were appointed honorary university professors, while Szilárd Varga received the title of honorary associate professor. All three have made significant contributions to research and education at ELTE TTK, strengthening its academic excellence and international visibility. The Institute warmly congratulates them on their achievements.

On the cover: Esit Mátyus's International Academy of Quantum Molecular Science medal (page 21).

**A borítón: Mátyus Edit IAQMS érme.
(21. oldal)**

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