



ELTE | TTK  
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

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

**2024. DECEMBER / DECEMBER 2024**



## TARTALOMJEGYZÉK

<b>VÁLOGATÁS AZ ELTE KÉMIAI INTÉZET PUBLIKÁCIÓIBÓL – 2024. ŐSZ / SELECTIONS FROM THE INSTITUTE'S PUBLICATIONS – FALL 2024</b>	<b>4</b>
<b>Gyógyszerkémia / Medicinal Chemistry</b>	<b>4</b>
<b>Anyagtudomány és elektrokémia / Material science and electrochemistry</b>	<b>9</b>
<b>Analitikai és környezetkémia / Analytical and environmental chemistry</b>	<b>11</b>
<b>Reakciódinamika / Reaction dynamics</b>	<b>13</b>
<b>Asztrokémia / Astrochemistry</b>	<b>14</b>
<b>Szerkezeti kémia / Structural Chemistry</b>	<b>16</b>
<b>Elméleti és számításkémia / Theoretical and computational chemistry</b>	<b>19</b>
<b>Oktatásmódszertan / Educational chemistry</b>	<b>21</b>
<b>A KARI TUDOMÁNYOS DIÁKKÖRI KONFERENCIA KÉMIAI PROGRAMJA / SCIENTIFIC STUDENTS' ASSOCIATIONS CONFERENCE OF THE FACULTY, CHEMISTRY PROGRAM</b>	<b>22</b>
<b>SIKERES PÁLYÁZATOK / SUCCESSFUL PROPOSALS</b>	<b>25</b>
<b>Horizon Europe Twinning program</b>	<b>25</b>
<b>Egyetemi Kiválósági Alap / Excellence Fund of ELTE</b>	<b>26</b>
<b>Richter Témapályázat / Richter Gedeon Plc. Thematic Call</b>	<b>27</b>
<b>KIVÁLÓ KUTATÁSI INFRASTRUKTÚRÁK A KÉMIAI INTÉZETBEN / TOP HUNGARIAN SCIENTIFIC INFRASTRUCTURES IN OUR INSTITUTE</b>	<b>28</b>
<b>MUNKATÁRSAINK KIEMELT ELŐADÁSAI / DISTINGUISHED PRESENTATIONS BY OUR COLLEAGUES</b>	<b>30</b>
<b>RÖVID HÍREK / SHORT NEWS</b>	<b>31</b>

## VÁLOGATÁS A KÉMIAI INTÉZET PUBLIKÁCIÓIBÓL – 2024. ŐSZ / SELECTIONS FROM THE INSTITUTE'S PUBLICATIONS – FALL 2024

Az alábbi lista témakörök szerint rendezve nyújt válogatást munkatársaink szeptember eleje és november 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 September to the end of November. As this period is relatively short, it does not fully represent the diversity of research conducted at our institute.

### Gyógyszerkémia / Medicinal chemistry

Eszter Kalydi, [Fanni Sebák](#), Béla Fiser, Babak Minofar, Éva Moussong, Milo Malanga, [Andrea Bodor](#), József Kardos,\* [Szabolcs Béni\\*](#)

**Exceptional stability of the sugammadex-solasodine complex: Insights from experimental and theoretical studies**

[Carbohydrate Polymers, 348, 2025, 122819](#)

Sugammadex (SGM) is the first cyclodextrin (CD)-based selective relaxant binding agent. We investigated its ability to capture natural aminosteroid phytotoxins, and assessed its potential as an antidote for intoxication. Solasodine (SS), a toxic alkaloid from the Solanaceae family, was

chosen as the model compound. Complexation was studied using nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, molecular modelling, and isothermal titration calorimetry (ITC). NMR in various D<sub>2</sub>O/DMSO-d<sub>6</sub> media revealed a particularly stable inclusion-type complex, identifying a slow exchange process between the CD and the aminosteroid along with a less significant fast exchange between DMSO and SGM. Using various NMR techniques, the structure and kinetic/thermodynamic parameters of the inclusion complex were explored. Theoretical calculations showed the secondary amino head of SS near the carboxylate ends of the SGM sidechains, facilitating intermolecular ionic interactions. ITC experiments in an aqueous environment provided  $K_a$  stability constants of  $7.03 \times 10^6 \text{ M}^{-1}$  and  $4.17 \times 10^6 \text{ M}^{-1}$  at 25 °C and 37 °C, respectively, similar to previously reported SGM complexes with aminosteroid neuromuscular blockers. Finally, SGM significantly increased cell survival and reduced SS toxicity in mHippoE-14 mouse hippocampal embryonic cells, supporting the hypothesis that SGM could act as an antidote to SS's toxic effects.

**A sugammadex az első olyan ciklodextrin-származék, amelyet izomrelaxáns szerek szelektív megkötésére fejlesztettek ki, ezáltal az orvosi gyakorlatban, mint az izomrelaxáns hatást felfüggesztő hatóanyag (antidótum) használnak. Vizsgálataink során arra kerestük a választ, hogy a sugammadex képes-e megkötni a növényekben található aminoszteroid szerkezetű fitotoxinokat, és így felhasználni-e mérgezők ellenzereként. Az ELTE munkatársai a szolaszodint, egy toxikus alkaloidot választottak modellyagnaként. Mágneses magrezonancia**

**spektroszkópia (NMR), izoterm titrációs kalorimetria (ITC) és molekulamodellelés segítségével megállapították, hogy a sugammadex rendkívül stabil komplexet képez a szolaszodinnal, és *in vitro* sejtkultúrában csökkent a fitotoxin káros hatásait. Ez alapján a sugammadex ígéretes lehet az ilyen típusú vegyületek okozta mérgezések kezelésében.**

[Zsolt Fazekas](#), [Dóra Nagy-Fazekas](#), [Boglárka Mária Shilling-Tóth](#), [Péter Ecsédi](#), [Pál Stráner](#), [László Nyitray](#), [András Perczel\\*](#)

**Evaluation of an Affinity-Enhanced Anti-SARS-CoV2 Nanobody Design Workflow Using Machine Learning and Molecular Dynamics**

[Journal of Chemical Information and Modeling, 64, 2024, 7626](#)

*In silico* optimization of protein binding has received a great deal of attention in the recent years. Since *in silico* prefiltering of strong binders is fast and cheap compared to *in vitro* library screening methods, the advent of powerful hardware and advanced machine learning algorithms has made this strategy more accessible and preferred. These advances have already impacted the global response to pandemic threats. In this study, we proposed and tested a workflow for designing nanobodies targeting the SARS-CoV-2 spike protein receptor binding domain (S-RBD) using machine learning techniques complemented by molecular dynamics simulations. We evaluated the feasibility of this workflow using a test set of 3 different nanobodies and 2 different S-RBD variants, from *in silico* design and bacterial expression to binding assays of the designed nanobody mutants. We successfully designed

nanobodies that were subsequently tested against both the wild-type (Wuhan type) and the delta variant S-RBD and found 2 of them to be stronger binders compared to the wild-type nanobody. We use this case study to describe both the strengths and weaknesses of this *in silico* assisted nanobody design strategy.

**A SARS-CoV-2 vírus megjelenése 2020 egyik legjelentősebb egészségügyi eseménye volt. Ez gyors kutatói együttműködést váltott ki, amelynek eredményeként számos kisméretű molekulákra és fehérjékre épülő vírusellenes gyógyszer (antivirális terapeutikum) született. Ezek közül néhány az úgynevezett nanotestek kategóriájába tartozik, amelyek egy szerkezeti egységből álló (ú.n. egyszemű) fehérjék, és az antitestekhez hasonlóan képesek a vírusfehérjéket (antigéneket) megkötni. A HUN-REN-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoportjának munkatársai ilyen nanotestek kötődési képességének javításán dolgoztak mesterséges intelligencia alapú algoritmusok segítségével. Az algoritmusok a természetben előforduló (vad típusú) nanotestek és antigének szerkezete alapján mutációkat javasoltak, hogy ezekkel erősebben kötődjenek. A javasolt mutációk hatását a molekulák dinamikus viselkedését szimuláló számításokkal vizsgálták. A számítógépes jóslatok alapján a legjobban teljesítő mutáns nanotesteket laboratóriumban előállították, majd ténylegesen megmérték, hogy mennyire kötődnek a vírusfehérjéhez. Két olyan mutáns nanotestet találtak, amelyek a vad típusúhoz képest két**

**különböző vírusváltozat (variáns) tüskefehérjéjéhez is erősebben kapcsolódnak. A mesterséges intelligencia és a fehérje-, illetve gyógyszerkutatás összefonódása hatékony új utakat nyit a betegségek elleni küzdelemben. Ezt példázza az idei kémiai Nobel-díjasok munkássága és az ELTE kutatóinak friss eredménye is, amely megmutatja, hogy a mesterséges intelligencia és az emberi kreativitás együttműködése forradalmasíthatja a gyógyszerkutatást, és új perspektívákat hoz a célzott vírusellenes terápiák fejlesztésében.**

*Máté Sulyok-Eiler, Veronika Harmat, and András Perczel\**

### **Unravelling the Complexity of Amyloid Peptide Core Interfaces**

[Journal of Chemical Information and Modeling 64, 2024, 8628](#)

Amyloids, large intermolecular sandwiched  $\beta$ -sheet structures, underlie several protein misfolding diseases but have also been shown to have functional roles and can be a basis for designing smart and responsive nanomaterials. Short segments of proteins, called aggregation-prone regions (APRs), have been identified that nucleate amyloid formation. Here we present the database of 173 APR crystal structures currently available in the PDB, and a tool, ACW, for analyzing their topologies and the 267 inter- $\beta$ -sheet interfaces of zipper regions assigned in these structures. We defined a new descriptor of zipper interfaces, the surface detail index (SDi), which quantifies the intertwining between the side chains of both  $\beta$ -sheets of the zipper, an important factor for the molecular recognition and

self-assembly of these mesostructures. This allowed a comparative analysis of the zipper interfaces and identification of 6 clusters with different intertwining, steric fit, and size characteristics using three complementary descriptors, SDi, shape complementarity, and buried surface area. 60% of the APR structures are formed by parallel  $\beta$ -sheets, of which 52% belong to the topological class 1. This could be explained by the better fit and a deeper entanglement of the zipper regions of the parallel structures than of the antiparallel structures, as the analysis showed that both their shape complementarity (0.79 vs 0.70) and SDi (1.53 vs 1.32) were higher. The higher abundance of certain residues (Asn and Gln in parallel and Leu and Ala in antiparallel  $\beta$ -sheets) can be explained by their ability to form different ladder-like secondary interaction patterns within  $\beta$ -sheets. Analogous to the hierarchy of protein structure, we interpreted the primary, secondary, tertiary, and quaternary structure levels of APRs revealing different characteristics of the zipper regions for both parallel and antiparallel  $\beta$ -sheet structures, which may provide clues to the structural conditions of amyloid core formation and the rational design of amyloid polymorphs.

**Számos öregkori betegség hátterében a fehérjék hibás feltekeredése áll:  $\beta$ -redős elemekből felépülő szálas szerkezetű aggregátumok (amiloidok) képződnek belőlük. Az ELTE Kémiai Intézet kutatói az amiloidképződés kulcselemeinek tekintett, néhány aminosavból álló  $\beta$ -redős fehérjeszakaszok (amiloidképző gócek) szerkezeti-topológiai jellemzésére dolgoztak ki programot, és hoztak létre adatbázist. Az elemzés segít megérteni az ami-**

**loidképződés kezdeti lépéseiben kialakuló struktúrák főbb jellemzőit: a szomszédos  $\beta$ -redők kapcsolódó felszínei egymásba-ágyazottságának mértéke, és alak szerinti komplementaritása a parallel  $\beta$ -redős szerkezetekben nagyobb, és gyakori a jellegzetes létraszerű szerkezeti motívumok kialakulása is.**

*Zoé S. Tóth,\* Ibolya Leveles, Kinga Nyíri, Gergely N. Nagy, Veronika Harmat, Thapakorn Jarontomeechai, Oliver Ozohanics, Rebecca L. Miller, Marina Ballesteros Álvarez, Beáta G. Vértessy,\* András Benedek\**

### **The homodimerization domain of the Stl repressor is crucial for efficient inhibition of mycobacterial dUTPase**

[Scientific Reports, 14, 2024, 27171](#)

The dUTPase is a key DNA repair enzyme in *Mycobacterium tuberculosis*, and it may serve as a novel promising anti-tuberculosis target. Stl repressor from *Staphylococcus aureus* was shown to bind to and inhibit dUTPases from various sources, and its expression in mycobacterial cells interfered with cell growth. To fine-tune and optimize Stl-induced inhibition of mycobacterial dUTPase, we aimed to decipher the molecular details of this interaction. Structural background of the complex between dUTPase and a truncated Stl lacking the repressor C-terminal homodimerization domain has been described, however, the effects of this truncation of Stl on enzyme binding and inhibition are still not known. Using several independent biophysical, structural and enzyme kinetic methods, here we show

that lack of the repressor homodimerization domain strongly perturbs both enzyme binding and inhibition. We also investigated the role of a mycobacteria-specific loop in the Stl-interaction. Our results show that removal of this loop leads to a ten-fold increase in the apparent inhibition constant of Stl. We present a high-resolution three-dimensional structure of mycobacterial dUTPase lacking the genus-specific loop for structural insight. Our present data suggest that potent inhibition of mycobacterial dUTPase by Stl requires the wild-type full-length protein context.

**A dUTPáz a DNS hibajavítás egyik kulcsenzime, ezért lehetséges gyógyszercélpont fehérje. A HUN-REN TTK és BME kutatóival folytatott együttműködés során a tuberkulózis baktérium dUTPáza és egy gátló hatású fehérjemodul komplexének szerkezetvizsgálatához járult hozzá a Kémiai intézet munkatársa. A két fehérje kölcsönhatása felhasználható lehet új hatóanyagok fejlesztésében.**

*László Imre, Péter Nánási Jr, Ibtissem Benhamza, Kata Nóra Enyedi, Gábor Mocsr, Rosevalentine Bosire, Éva Hegedüs, Erfaneh Firouzi Niaki, Ágota Csóti, Zsuzsanna Darula, Éva Csósz, Szilárd Póliska, Beáta Scholtz, Gábor Mező, Zsolt Bacsó, H T Marc Timmers, Masayuki Kusakabe, Margit Balázs, György Vámosi, Juan Ausio, Peter Cheung, Katalin Tóth, David Tremethick, Masahiko Harata, Gábor Szabó\**

### **Epigenetic modulation via the C-terminal tail of H2A.Z**

[Nature Communications, 15, 2024, 9171](#)

H2A.Z-nucleosomes are present in both euchro-

matin and heterochromatin and it has proven difficult to interpret their disparate roles in the context of their stability features. Using an in situ assay of nucleosome stability and DT40 cells expressing engineered forms of the histone variant we show that native H2A.Z, but not C-terminally truncated H2A.Z (H2A.ZΔC), is released from nucleosomes of peripheral heterochromatin at unusually high salt concentrations. H2A.Z and H3K9me3 landscapes are reorganized in H2A.ZΔC-nuclei and overall sensitivity of chromatin to nucleases is increased. These tail-dependent differences are recapitulated upon treatment of HeLa nuclei with the H2A.Z-tail-peptide (C9), with MNase sensitivity being increased genome-wide. Fluorescence correlation spectroscopy revealed C9 binding to reconstituted nucleosomes. When introduced into live cells, C9 elicited chromatin reorganization, overall nucleosome destabilization and changes in gene expression. Thus, H2A.Z-nucleosomes influence global chromatin architecture in a tail-dependent manner, what can be modulated by introducing the tail-peptide into live cells.

**A humán genom, vagyis az emberi örökítőanyag működése és szabályozása még mindig számos rejtélyt tartogat. Az viszont már ismert, hogy a gének kifejeződését, aktivitását jelentősen befolyásolják a hiszton nevű fehérjék. Ezek a fehérjék úgy működnek, mint a DNS „csévéelői”: a DNS-szál feltekeredhet rájuk, ezzel gátolva a génekhez való hozzáférést, vagy letekeredhet, hozzáférhetővé téve azokat. Ez a mechanizmus kulcsszerepet játszik a génműködés szabályozásában. A hisztonok négy alegységből állnak. Bizonyos betegségekben – például rákos**

**megbetegedésekben – ezek az alegységek nem a szokásos, „natív” formájukban vannak jelen, hanem mutáns változataik jelennek meg. Ezek a mutáns hisztonok nem képesek kellő stabilitással feltekereni a DNS-szálat, aminek következtében olyan gének is aktiválódhatnak, amelyeknek nem kellene. Például olyan gének, amelyek a magzati fejlődés során fontos szerepet játszottak, de felnőttkorban hozzájárulhatnak a tumorok áttéteinek kialakulásához. Egy friss kutatás során a hiszton alegységek egyikét, a H2A.Z nevű fehérjét, valamint annak mutáns változatait vizsgálták. Kiderült, hogy a mutáns verziók egy kritikus ponton térnek el a normál fehérjétől: hiányzik a végükről egy rövid peptidszakasz. A HUN-REN-ELTE Peptidkémiai Kutatócsoport két tagja, Mező Gábor és Enyedi Kata, előállította ezt a hiányzó peptidet, és a Debreceni Egyetem kutatóival együttműködve bizonyította, hogy ennek a peptidnek a hozzáadása a mutáns hisztonokhoz jelentősen stabilizálja azokat, és visszaadja a DNS „feltekeréséhez” szükséges képességüket. A kutatás nagy előrelépést jelent, mert nemcsak izolált sejtmagokban, hanem élő, rákos sejtekben is sikerült igazolni a peptid stabilizáló hatását. Ez a felfedezés a jövőben alapja lehet egy új terápiás megközelítésnek, amely segíthet a rákos megbetegedések kezelésében.**

*Bence Borbás, Nikolett Kállai-Szabó, Miléna Lengyel, Emese Balogh, Bálint Basa, Károly Süvegh, Romána Zelkó,\* István Antal\**

**Microfabrication of controlled re-**

**lease osmotic drug delivery systems assembled from designed elements**

[Expert Opinion on Drug Delivery 21, 2024, 1637](#)

This study investigates combining 3D printing with traditional compression methods to develop a multicomponent, controlled-release drug delivery system (DDS). The system uses osmotic tablet layers and a semipermeable membrane to control drug release, similar to modular Lego® structures. Glycerol improved the membrane's wettability, as confirmed by PALS. The system achieved zero-order drug release, unaffected by stirring rates, due to the push and pull tablets within the 3D-printed frame. The release profile was stable, demonstrating effective drug delivery control. The study successfully developed a prototype for a controlled-release osmotic DDS, achieving zero-order release kinetics for quinine hydrochloride after 2 h. This modular approach holds potential for personalized therapies in human and veterinary medicine, allowing customization at the point of care.

**Ez a tanulmány azt vizsgálja, hogyan lehet a 3D nyomtatást kombinálni a hagyományos tablettázási módokkal egy többkomponensű, szabályozott felszabadulású gyógyszeradagoló rendszer (DDS) kifejlesztése érdekében. A rendszer ozmotikus tablettarétegeket és féligáteresztő membránt használ a gyógyszerfelszabadulás szabályozására, hasonlóan a moduláris Lego® szerkezetekhez. A gyártás során alkalmazott glicerint javította a membrán tulajdonságait (nedvesíthetőségét). A rendszer**

**kedvező és egyenletes gyógyszerfelszabadulást biztosít, amit a keverési sebesség nem befolyásolt, köszönhetően a 3D-nyomtatott keretben lévő tablettáknak. A felszabadulási profil stabil maradt, ami hatékony gyógyszeradagolási szabályozást eredményezett. A bemutatott moduláris megközelítés lehetőségét biztosít a személyre szabott terápiák alkalmazására mind humán-, mind állatgyógyászatban, lehetővé téve az ellátás helyszíni testreszabását.**

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

*Aline Bornet, Pavel Moreno-García,\* Abhijit Dutta, Ying Kong, Mike Liechti, Soma Vesztergom, Matthias Arenz, Peter Broekmann\**

**Disentangling the Pitfalls of Rotating Disk Electrode-Based OER Stability Assessment: Bubble Blockage or Substrate Passivation?**

[ACS Catalysis 14, 2024, 17331](#)

Oxygen evolution reaction (OER) catalyst stability metrics derived from aqueous model systems (AMs) prove valuable only if they are transferable to technical membrane electrode assembly (MEA) settings. Currently, there is consensus that stability data derived from ubiquitous rotating disk electrode (RDE)-based investigations substantially overestimate material degradation mainly due to the nonideal inertness of catalyst-backing electrode materials as well as bubble shielding of the catalyst by evolved oxygen. Despite the independently developed understanding of these two processes, their interplay and relative impact on intrinsic and operational material stability have not

yet been established. Herein, we employ an inverted RDE-based approach coupled with online gas chromatographic quantification that exploits buoyancy and anode hydrophilicity existing under operating acidic OER conditions and excludes the influence of bubble retention on the surface of the catalyst. This approach thus allows us to dissect the degradation process occurring during the RDE-based OER stability studies. We demonstrate that the stability discrepancy between galvanostatic nanoparticle (NP)-based RDE and MEA data does not originate from the accumulation of bubbles in the catalyst layer during water oxidation but from the utilization of corrosion-prone substrate materials in the AMS. Moreover, we provide mechanistic insights into the degradation process and devise experimental measures to mitigate or circumvent RDE-related limitations when the technique is to be applied to an OER catalyst stability assessment. These findings should facilitate the transferability between AMS and MEA approaches and promote further development of the latter.

**Az ELTE Kémiai Intézetében Vesztergom Soma vezetésével működő MTA-ELTE Lendület Határfelületi Elektrokémia Kutatócsoport közreműködésével született publikáció szerzői az elektromos áram segítségével történő vízbontás anódkatalizátoraként szolgáló irídium-oxid nanorészecskék stabilitását vizsgálják, különös tekintettel a hordozó és a nanorészecskék közötti kapcsolat sérüléseinek, és a hordozó korróziójának nemkívánt hatásaira. A kutatás során megmutatták, hogy a különböző mérési módszerekkel végzett stabilitásvizsgálatok eredményei között tapasztalható eltéréseket – szemben az irodalomban gyakran megfogalmazott állítással – nem az oxigén buborékok katalizátor rétegbeli felhalmozódásával, hanem a katalizátor**

**hordozóanyagainak korróziós haljával lehet megmagyarázni.**

*Irfan Khan, Ahmed Ibrahim, Seigo Satake, Kende Attila Béres, Miklós Mohai, Zsolt Czigány, Katalin Sinkó, Zoltán Homonnay, Ernő Kuzmann, Stjepko Krehula, Marijan Marciuš, Luka Pavić, Ana Šantić, Shiro Kubuki\**

**<sup>57</sup>Fe-Mössbauer, XAFS and XPS studies of photo-Fenton active  $x\text{MO}\cdot 40\text{Fe}_2\text{O}_3\cdot(60-x)\text{SiO}_2$  (M: Ni, Cu, Zn) nano-composite prepared by sol-gel method**

[Ceramics International 2024](#)

This research delves into the impact of nickel (Ni), zinc (Zn), and copper (Cu) dopants on the photocatalytic efficiency of iron-silicate glass in wastewater treatment. Physicochemical characterization identified hematite ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ) and spinel configuration of Ni- and Cu-ferrites together with inverse spinel configuration of Zn-ferrite ( $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$ ) nanoparticles. <sup>57</sup>Fe Mössbauer spectroscopy, combined with Debye temperature analysis, showed a constant total absorption area of  $\text{Fe}^{3+}$ , offering insights into the dynamic behaviour of iron in the silicate matrices. XANES and EXAFS analysis provided insights into the coordination environments of dopants. It revealed that Zn doping leads to  $\text{Fe}^{3+}$  in a distorted octahedral environment, with Zn-O interactions suggesting the formation of zinc ferrite-like structures. The concordant results were obtained from the XPS spectra. Optical analysis showed a reduction in bandgap energies upon dopant inclusion, suggesting alterations in electronic structures. The photocatalytic performance was assessed through the degradation kinetics of methylene blue (MB) dye and municipal

wastewater, showing higher degradation rates in doped samples. Notably, Zn dopant displayed remarkable efficacy in MB degradation. This study underscores the promising potential of transition metal-doped iron-silicate glasses as potent photocatalysts for wastewater treatment.

**A szennyvizek, különösen az ipari szennyvizek tisztítása napjaink egyik legsürgetőbb környezeti kihívása. Az egyik ígéretes megoldás a fotokatalitikus anyagok alkalmazása, amelyek fény segítségével képesek lebontani a vízben található szerves szennyező anyagokat. A hagyományosan használt anyagok többnyire ultraibolya tartományban aktívak, azonban ezek drágák és speciális fényforrásokat igényelnek. Ezzel szemben a vas-szilikát üveg olyan anyag, amely a látható fény tartományában is hatékony lehet, ezáltal gazdaságosabb és könnyebben alkalmazható megoldást kínál. A kutatás célja a vas-szilikát üvegek fotodegradációs hatásának javítása volt átmenetifém-adalékok, például nikkel (Ni), cink (Zn) és réz (Cu) segítségével. Az így kapott anyagok különleges nanostruktúrákkal rendelkeznek, amelyek közül kiemelkedik a hematit ( $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ), a spinel konfigurációjú Ni- és Cu-ferritek, valamint az inverz spinel szerkezetű Zn-ferrit ( $\text{ZnFe}_2\text{O}_4$ ). A kutatás során <sup>57</sup>Fe Mössbauer-spektroszkópiát, röntgenspektroszkópiát (XANES és EXAFS) méréseket és optikai vizsgálatokat végeztek. Az optikai mérések kimutatták, hogy az adalékanyagok hatására a tiltottsáv-szélesség csökkent, ami a fotokatalitikus aktivitást az ultraibolya tartományból a látható fény**

**tartományába tolta el. Ez az eltolódás különösen fontos, mivel így a vas-szilikát üvegek a természetes napfény hasznosítására is alkalmassá válnak. Az eredmények rámutattak, hogy az átmenetifémmel adalékolt vas-szilikát üvegek ígéretes fotokatalizátorok lehetnek a szennyvízkezelésben. Ez a megközelítés nemcsak környezetbarát, de költséghatékony megoldást is kínál az ipari szennyeződések eltávolítására.**

**Analitikai és környezetkémia / Analytical and environmental chemistry**

*Zoltán Homonnay, Sándor Stichleitner,\* Ernő Kuzmann, Miklós Kuti, Gyöző G. Láng, Kende Attila Béres, László Trif, Dániel J. Nagy, Gyula Záray, and József Lendvai*

**Quantitative Analysis of Ferrate(VI) and Its Degradation Products in Electrochemically Produced Potassium Ferrate for Waste Water Treatment**

[Applied Sciences-Basel, 14, 2024, 9144](#)

Potassium ferrate(VI) ( $\text{K}_2\text{FeO}_4$ ) as a particularly strong oxidant represents an effective and environmentally friendly waste water treatment material. When produced by anodic oxidation in highly alkaline aqueous solution, the  $\text{K}_2\text{FeO}_4$  product is separated and sealed in inert plastic bags with the retention of some liquid phase with high pH. This method proved to be excellent for long-term storage at moderately low temperature (5 °C) for industrial applications. It is still imperative to check the ferrate(VI) content of the product whenever it is to be used. Fe-57 Mössbauer spectroscopy is

an excellent tool for checking the ratio of ferrate(VI) to the degradation product iron(III) in a sample. For this purpose, normally the spectral areas of the corresponding subspectra are considered; however, this approximation neglects the possible differences in the corresponding Mössbauer–Lamb factors. In this work, we have successfully determined the Mössbauer–Lamb factors for the ferrate(VI) and for the most common iron(III) degradation products observed. We have found superparamagnetic behavior and low-temperature phase transformation for another iron(III) degradation product that made the determination of the Mössbauer–Lamb factors impossible in that case. The identities of a total of three different iron(III) degradation products have been confirmed.

**A kálium-ferrát(VI) ( $K_2FeO_4$ ) rendkívül erős oxidálószerként hatékony és környezetbarát megoldást kínál a szennyvizek tisztítására. Az anyag azonban nem tartós: különleges reakcióképessége miatt gyorsan bomlik, ezért ipari felhasználása előtt elengedhetetlen meghatározni, mennyi ferrát(VI) maradt még a termékben. Az  $^{57}Fe$  Mössbauer-spektroszkópia az egyik legmegbízhatóbb módszer arra, hogy kimutassák és pontosan megmérjék a ferrát(VI) mennyiségét, valamint a bomlás során keletkező vas(III)-vegyületeket. Ehhez a mérések során általában a spektrumok különböző részterületeinek arányait hasonlítják össze. Azonban ez az eljárás nem veszi figyelembe, hogy a ferrát(VI) és bomlástermékei másképp nyelnek el vagy szórják vissza a sugárzást a vizsgálat során. Ez a különbség befolyásolhatja az eredmények pontosságát. Ez a különbség befolyásolhatja**

**az eredmények pontosságát. A kutatás során elsőként végeztek pontos méréseket ezekről a különbségekről, és a ferrát(VI) három bomlástermékéről is adatokat gyűjtöttek. Ezek az eredmények nemcsak a mérések pontosságát javíthatják, hanem segíthetnek optimalizálni a kálium-ferrát alkalmazását a szennyvíztisztításban, megbízhatóbbá téve az eljárást.**

*Csaba Tóbi,\* Nguyen Quoc Khánh, Zoltán Homonnay, Éva Széles*

**Applicability of atomic force microscopy for nuclear forensic examination**

[Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry – Letters 2024](#)

The applicability of the Atomic Force Microscopy (AFM) was examined for nuclear forensic purposes. The hyper-stoichiometric form of uranium-oxide was identified as novel signature which indicates the production technology of uranium fuel pellets. The AFM technique was compared with Scanning Electron Microscope (SEM) that is usually used for morphological study in nuclear forensics. AFM has some unique features comparing with SEM and as a fast and less expensive technique, it can be a good alternative solution or a supporting technique to the SEM.

**Az atomerő-mikroszkóp (AFM) alkalmazhatóságát vizsgálták nukleáris kriminalisztikai célokra. Az urán-oxid hiperstöchiometrikus formáját (amelyben az oxigén mennyisége meghaladja a szokásos kémiai arányt) új jelzővegyületként azonosították, amely az**

**urán üzemanyag-pelletek gyártási technológiáját tükrözi. Az AFM technikát a pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) hasonlították össze, amelyet a nukleáris kriminalisztikában gyakran alkalmaznak morfológiai vizsgálatokra. Az AFM több egyedi előnyt kínál a SEM-hez képest, és mint gyorsabb és olcsóbb módszer, hasznos alternatív vagy kiegészítő technikaként alkalmazható a SEM mellett.**

**Reakciódinamika /  
Reaction dynamics**

*Csenge Galanics, István Szalai\**

**Dynamics of pH Oscillators in Continuous Stirred Tanks in Series**

[ChemPhysChem 2024, e202400610](#)

Complex reaction networks with positive and negative feedback can produce diverse nonlinear phenomena in open reactors, such as multistability and oscillations. pH oscillators driven by hydrogen or hydroxide autocatalytic processes show sustained oscillations in continuously stirred tank reactors (CSTR) but only a sharp pH switch in batch. Here, we present a numerical study on the dynamics of pH oscillators in a series of CSTRs. We show a critical residence time under which bistability and above which oscillations develop. The dynamics of the CSTR cascade show the cross-shaped phase diagram of nonlinear activatory inhibitory systems. In the domain of oscillations, one reactor starts to oscillate autonomously and induces forced complex oscillations in the following tanks with damped amplitudes. These results, with their practical implications, may contribute to understanding the

recent experimental observations of nonlinear phenomena in the presence of a residence time ramp and inspire further research in this area.

**A kémiai rendszerek összetett visszacsatolási hálózata, ahol pozitív és negatív visszacsatolások egyaránt működnek, látványos nemlineáris jelenségeket produkálhatnak, például oszcillációkat vagy többféle stabil állapotot. A pH-oszcillátorok különösen izgalmas példák: ezek olyan reakció-hálózatok, amelyekben a pH-érték időben periodikusan változik a hidrogén-ionok ( $H^+$ ) vagy hidroxidionok ( $OH^-$ ) autokatalitikus folyamatai révén. Ezek az anyagok egyedi viselkedést mutatnak zárt és nyitott rendszerekben. Míg kevert tartályos reaktorokban (CSTR) folyamatos pH-oszcillációkat produkálnak, zárt rendszerekben csupán éles pH-ugrás figyelhető meg. Az egymás után összekapcsolt reaktorok (folyamatos kaszkádreaktor) numerikus vizsgálata során kimutatható volt, hogy a reaktor-sorozat egyes reaktorainak viselkedésében bistabilitás (kétféle stabil állapot létezése egyazon paraméterek mellett) és oszcilláció is kialakulhat. Az oszcillációs tartományban az egyik reaktor önállóan kezd oszcillálni, majd az ezt követő reaktorokban csillapított amplitúdójú, kényszerített oszcillációk jelennek meg. Az ELTE vegyészeinek ezen eredménye a kémiai dinamikai rendszerek mélyebb megértéséhez járulhat hozzá, hanem gyakorlati alkalmazásokat is inspirálhat. A pH-oszcillációk például hasznosak lehetnek szintetikus kémiában, különösen ott, ahol**

**bonyolult szupramolekuláris szerkezetek előállítására van szükség. E mellett a kémiai reakciók és a hidrodinamikai áramlások kölcsönhatása más érdekes jelenségeket is létrehozhat, például oszcilláló kémiai frontokat vagy áramlás által vezérelt kicsapódásokat. Ezen jelenségek vizsgálata hozzájárulhat ahhoz, hogy megértsük a hidrotermális kürtök szerepét az élethez szükséges szerves vegyületek kialakulásában. A kutatás tehát nemcsak ipari, hanem biokémiai és evolúciós szempontból is jelentőséggel bírhat, új irányokat nyitva a nemlineáris kémiai hálózatok és a reaktortervezés területén.**

## **Asztrokémia / Astrochemistry**

*Pavel V. Zasimov, Barbara Keresztes, Sándor Góbi, Anastasia D. Volosatova, György Tarczay\**

**A chemical link between saturated and unsaturated aldehydes and ketenes in the interstellar medium: Laboratory experiments on the H-atom reactions of propenal (CH<sub>2</sub>CHCHO) and propanal (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CHO) at low temperatures**

[Astronomy & Astrophysics 2024](#)

Propenal (CH<sub>2</sub>CHCHO) and propanal (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CHO) have been detected in various regions of the interstellar medium (ISM), from star-forming regions to a comet's dusty coma. These molecules attract considerable attention

due to their structural similarity to aldose sugars and their potential role in prebiotic astrochemistry. Their reactions with H atoms may significantly contribute to the chemical diversity in the ISM and link these molecules with each other and other isomers. In this study, we aimed to investigate the astrophysically relevant low-temperature reactions of propenal and propanal molecules with H atoms to explore possible reaction pathways between these molecules and their isomers. Propenal and propanal were isolated in solid *para*-H<sub>2</sub> at 3.1 K. This medium, with its weak interactions, provides spectroscopic data close to gas-phase values and allows for studying highly reactive short-lived species. Additionally, H atoms can be conveniently generated, diffuse, and react with the isolated molecules. The reactions were monitored using infrared (IR) spectroscopy. Quantum-chemical computations were employed to determine possible reaction paths and aid in spectral assignments. The reaction of propenal and propanal with H atoms in the first step results in the production of CH<sub>2</sub>CH•CO/•CH<sub>2</sub>CHCO, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>•CO, and CH<sub>3</sub>•CHCHO radicals. Further H-atom reactions of CH<sub>3</sub>•CHCHO and R•CO radicals lead to the formation of methylketene (CH<sub>3</sub>CHCO) as the product of both the reaction of propenal and propanal. The two-step addition of H atoms to propenal was tentatively found to produce propanal. The radicals observed in the experiments are likely produced in dark molecular clouds on icy grains, increasing interstellar chemical complexity. The experiments suggest that H-atom reactions with propanal and propenal are important channels for methylketene production. The observed reactions imply that consecutive H-atom addition and H-atom abstraction reactions of propenal and propanal can catalyze interstellar H<sub>2</sub> formation.

**Az aldehidek, mint a propénal (CH<sub>2</sub>CHCHO) és a propanal (CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CHO), az elmúlt évtizedekben jelentős figyelmet kaptak az asztrokémiában és asztrobiológiában, mivel kulcsszerepet játszhatnak az aminosavak csillagközi szintézisében, és szerkezeti hasonlóságot mutatnak az aldóz cukrokkal. Ezen aldehidek több csillagközi régióban is észlelhetők, beleértve csillagkeletkezési zónákat és üstökösök kómáját. A hidrogénatomokkal való reakciójuk különösen érdekes, mivel ezek a reakciók hozzájárulhatnak a csillagközi kémiai sokféleség növekedéséhez, ugyanis olyan gyökök és reaktív molekulák keletkezhetnek, amelyekből nagyobb, komplexebb szerves molekulák jöhetnek létre a csillagközi térben. A kutatás célja annak vizsgálata volt, hogyan reagálnak a propénal és propanal molekulák hidrogénatomokkal alacsony hőmérsékleten, és hogy ezek a reakciók hogyan befolyásolják a csillagközi környezet kémiai összetételét. Az eredmények azt mutatják, hogy a propénal és propanal hidrogénatomos reakciók során egymásba alakulhatnak. A reakciókban metilketén (CH<sub>3</sub>CHCO) és különféle gyökök keletkeznek, amelyek fontos szerepet játszhatnak nagyobb cukor-szerű molekulák szintézisében a csillagközi térben.**

*Barbara Keresztes, Sándor Góbi, Anita Schneiker, Gábor Bazsó, and György Tarczay\**

**Cosmic-ray-induced chemical processes in CH<sub>3</sub>OH, CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>, and**

**CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> ices: Conventional and novel IR spectroscopic analysis with VIZSLA**

[Astronomy & Astrophysics 2024](#)

Icy mantles on interstellar dust grains are considered key contributors to the chemical complexity of the interstellar medium (ISM). Gas-phase molecules in the ISM can adsorb onto these icy surfaces, where chemical reactions can be induced by ultraviolet (UV) or cosmic ray (CR) irradiation. The resulting molecules can subsequently desorb, thereby altering the composition of the gas phase in the ISM. Therefore, studying astrochemically relevant reactions within ices is essential for advancing our understanding of astrochemistry. We conducted experiments with pure methanol (CH<sub>3</sub>OH), pure methylamine (CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub>), and CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> ices. To simulate CR effects, ices were irradiated with 5 keV electrons. We integrated the advantages of ice experiments and noble gas matrix experiments by performing two distinct investigations on each sample. During temperature-programmed desorption (TPD), chemical changes in the ice samples were monitored using Fourier transform infrared (FTIR) spectroscopy. Simultaneously, the desorbing molecules were trapped in an Ar matrix. This TPD-matrix-isolation (TPD-MI) redeposition process enabled FTIR spectroscopic identification of the desorbed species. The results obtained from experiments with CH<sub>3</sub>OH and CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> ices are consistent with previous studies. Additionally, the TPD-MI redeposition process enabled the identification of several species previously not detected clearly and directly in pure CH<sub>3</sub>OH or CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> ices, including molecules such as HCOOH, HCN, and CH<sub>2</sub>CHNH. Our experiments with CH<sub>3</sub>OH:CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> mixtures revealed the formation





**A kutatás során egy egyedülálló vegyületet szintetizáltak, amely különleges szerkezeti jellemzőkkel rendelkezik. A vegyületben a permanganát ionok körül a ligandumok háromfajú koordinációval kapcsolódnak és egy nyolcszorosan koordinált, romboéderes szerkezetű, kloridion is jelen van. Ez egy polimerekből felépülő struktúrát alkot, amelyet stabilizálnak az N-H...Cl és N-H...O hidrogénkötések, amelyek egyszerű és elágazó módon is jelen vannak. A hőkezelési folyamatok során a vegyületből tetragonális nano-CoMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub> spinell keletkezett, 19-25 nm-es kristálymérettel. Az eredmények arra utalnak, hogy a vegyület a jövőben hatékony katalizátorként alkalmazható, különösen szerves vegyületek oxidációjában.**

*Kende Attila Béres, László Kótai, Ernő Kuzmann, Libor Machala, Petr Novák, Mátyas Pápai, Shiro Kubuki, and Zoltán Homonnay\**

**Unusual relaxation phenomena in the <sup>57</sup>Fe Mössbauer spectra of FeX<sub>3</sub> (X = Cl, NO<sub>3</sub>, ClO<sub>4</sub>, MnO<sub>4</sub>, 1/2(S<sub>2</sub>O<sub>8</sub>)) complex salts containing urea, methylated urea, chlorido or aquo ligands: studies on the influence of the ligand sphere and deuteration**

[Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry 2024](#)

Mössbauer spectra of Fe<sup>III</sup> complex salts with urea-related ligands show a broadened line due

to magnetic relaxation. The origin of the relaxation is not known, mostly spin–spin type is considered. A study of a large number of compounds can be helpful to show differences in the Mössbauer parameters and to see the influence of the chemical environment on the relaxation. We have evaluated the Mössbauer spectra of 13 compounds recorded at various temperatures with the Blume–Tjon two-state relaxation model and with the (unrestricted) Afanasev–Gorobchenko model. The latter showed significant differences between some salts, and proved the presence of spin–lattice relaxation.

**A karbamiddal vagy annak származékaival kapcsolódó vas(III) sók Mössbauer-spektruma egy szélesebb vonatlat mutat, ami a mágneses kölcsönhatás (mágneses relaxáció) következménye. A relaxáció pontos oka nem ismert, de leginkább a részecskék közötti kölcsönhatásra (spin-spin relaxációt) gondolták meghatározónak. Nagyszámú vegyület vizsgálata segíthet jobban megérteni, hogyan befolyásolja a kémiai környezet ezt a jelenséget. A kutatók 13 különböző vegyület spektrumát elemezték különböző hőmérsékleten, és a modellek azt mutatták, hogy egyes sók között jelentős különbségek vannak, ami igazolta, hogy egyes esetekben a kristályráccsal való kölcsönhatás (spin-rács relaxáció) is hozzájárul a spektrumvonalak kiszélesedéséhez.**

## Elméleti és számítási kémia / Theoretical and computational chemistry

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

### Knowles Partitioning at the Multi-reference Level

[Journal of Physical Chemistry A, 128, 2024, 9311](#) [ChemRxiv](#)

A multireference generalization of the partitioning introduced recently by Knowles (J. Chem. Phys. 2022 156, 011101) is presented with the aim to study electronic systems at a medium level of correlation. The multireference formalism applied is the general framework of multiconfiguration perturbation theory (MCPT).

Miközben az anyag viselkedésének modellezése molekuláris szinten már megszokott, számítógépes kiértékeléssel támogatott eszközzé vált, a terület még mindig számos kihívást rejt magában. A modellezés szintjének helyes megválasztása és a vizsgált problémához illő közelítések megtalálása sokszor még a tapasztalt szakemberek számára is időigényes és bonyolult feladat. Az ilyen folyamatokat gyorsabbá, pontosabbá és egyszerűbbé teheti a számítógépes szimuláció alapját jelentő, közelítő matematikai összefüggések továbbfejlesztése. Az ELTE Elméleti Kémiai Laboratóriumának munkatársai nemrégiben egy új, a korábbiaknál pontosabb eredményeket adó elméleti alkalmazási körének kiterjesztésén dol-

goztak. Ez az elméleti fejlesztés lehetővé teszi olyan különleges molekulák jobb leírását, amelyek elektron-szerkezete nem magyarázható az elektroneloszlásról alkotott egyszerű kép alapján. Például az úgynevezett nyílt-héjú molekulák, az átmenetifém-komplexek, valamint az elektronikusan gerjesztett állapotban lévő molekulák tartoznak a vizsgált rendszerek közé. A kutatás jelenlegi állapotát egy nemrégiben megjelent tanulmány mutatja be. Ez a közlemény a fejlesztés közbenső eredményeit dokumentálja, és illusztrációként tartalmazza az elmélet alapján végzett számítások első tapasztalatait. Az eredmények rámutattak arra, hogy az elmélet továbbfejlesztése még szükséges, de egyúttal kijelölték azokat az irányokat is, amelyek mentén a kutatások folytatódnak. Az ilyen kutatások hozzájárulnak ahhoz, hogy a kémia mélyebb megértése és a számítási módszerek további fejlődése új utakat nyisson a gyakorlati alkalmazások számára.

*Pawel Wójcik, Hanna Reisler, Péter G. Szalay, Anna I. Krylov,\* and John F. Stanton\**

### Vibronic Coupling Effects in the Photoelectron Spectrum of Ozone: A Coupled-Cluster Approach

[Journal of Physical Chemistry A 2024](#)

One of the most important areas of application for equation-of-motion coupled-cluster (EOM-CC) theory is the prediction, simulation, and analysis of various types of electronic spectra. In this work, the EOM-CC method for ionized states, known as

EOM-IP-CC, is applied to the closely lying and coupled pair of states of the ozone cation— $\tilde{X}^2A_1$  and  $\tilde{A}^2B_2$ —using highly accurate treatments including up to the full single, double, triple, and quadruple excitations (EOM-IP-CCSDTQ). Combined with a venerable and powerful method for calculating vibronic spectra from the Hamiltonian produced by EOM-IP-CC calculations, the simulations yield a spectrum that is in good agreement with the photoelectron spectrum of ozone. Importantly, the calculations suggest that the adiabatic gap separating these two electronic states is somewhat smaller than currently thought; an assignment of the simulated spectrum together with more precise band positions of the experimental measurements suggests  $T_{00} = 1,368 \pm 65 \text{ cm}^{-1}$ .

**Az ELTE TTK Kémiai Intézetének professzora, Szalay Péter társszerzőként vett részt abban a kutatásban, amely az ózonmolekula ionjának spektrumát az elérhető legmagasabb szintű számításokkal modellezte. Az ózon fontosságát széles körben ismerik, de a tudományos közösség számára az is nyilvánvaló, hogy ez az egyik legnehezebben modellezhető molekula. A kutatás során kapott eredmények új megvilágításba helyezték az ózon ionjának spektrumát, lehetőséget teremtve egy pontosabb értelmezésre. Emellett a számítások olyan új vonalakat is előre jeleztek, amelyeket a kísérletek során eddig még nem észleltek. Ezek az eredmények nemcsak megerősítik a modell megbízhatóságát, hanem további kutatásokat is inspirálnak, hogy az ózonmolekula ionjának viselkedését még jobban megértsék.**

*Tibor Furtenbacher, Roland Tóbiás,\* Jonathan Tennyson, Robert R. Gamache, and Attila G. Császár\**

### **The W2024 database of the water isotopologue H<sub>2</sub><sup>16</sup>O**

[Scientific Data, 11 2024, 1058](#)

The rovibrational spectrum of the water molecule is the crown jewel of high-resolution molecular spectroscopy. While its significance in numerous scientific and engineering applications and the challenges behind its interpretation have been well known, the extensive experimental analysis performed for this molecule, from the microwave to the ultraviolet, is admirable. To determine empirical energy levels for H<sub>2</sub><sup>16</sup>O, this study utilizes an improved version of the MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) scheme, which now takes into account multiplet constraints and first-principles energy-level splittings. This analysis delivers 19027 empirical energy values, with individual uncertainties and confidence intervals, utilizing 309 290 transition wavenumbers collected from 189 (mostly experimental) data sources. Relying on these empirical, as well as some computed, energies and first-principles intensities, an extensive composite line list, named CW2024, has been assembled. The CW2024 dataset is compared to lines in the canonical HITRAN 2020 spectroscopic database, providing guidance for future experimental investigations.

**A víz molekula rezgési-forgási szinképe a nagyfelbontású molekulaszpektroszkópia koronagyémántja. A szinképnek nem csak nagyszámú tudományos és mérnöki alkalmazás szempontjából van jelentősége, de az értelmezésével kapcsolatos jelentős kihívások is jól ismertek. Ennek megfelelően rengeteg kísérlet foglalkozott a mikrohullámtól a**

**látható tartományig a szinkép sajátosságaival megméréseivel. Ez a közlemény a H<sub>2</sub><sup>16</sup>O molekula empirikus energiaszintjeinek meghatározásával foglalkozik, melyet a csoport által fejlesztett MARVEL (Measured Active Rotational-Vibrational Energy Levels) nevű számítógépes program egy javított változatával végeztünk el, mely figyelembe veszi a vonal multipletteket, valamint a kvantumkémiai számításokból kapható energiaszint felhasadásokat. A MARVEL analízis eredményeként 19 027 empirikus energiaszint értéket határoztunk meg, melyek mindegyikét elláttunk egyedi bizonytalanság és konfidencia értékekkel. Az analízis 309 290 átmenet hullámszám értékén alapult, melyeket 189 irodalmi, többségében kísérleti mért értékeket tartalmazó forrás feldolgozásával határoztunk meg. Az empirikus energiaszintekre, melyeket kiegészítettünk nagy pontosságú kvantumkémiai eredményekkel, nagy méretű vonallistát állítottunk elő, ennek elnevezése CW2024. A CW2024 vonallistánkat összehasonlítottuk a kanonikus HITRAN2020 spektroszkópiai adatbázisban tárolt értékekkel, hozzájárulva jövőbeni kísérletek tervezéséhez.**

### **Oktatásmódszertan / Educational chemistry**

*Luca Szalay,\* Zoltán Tóth, Réka Borbás, and István Füzesi*

**Progress in developing experimental design skills among junior high school learners**

[Journal of Turkish Science Education, 21, 2024, 484](#)

This paper reports the findings of the second year of a four-year empirical research project. Its aim is to modify 'step-by-step' instructions for practical activities in a way that may enable the development of experimental design skills among junior high school learners. Each school year pupils spend six lessons doing practical activities using worksheets we provide. At the beginning of the research, the Grade 7 (12–13-year-old) pupils were divided into three groups. Group 1 (control group) followed step-by-step instructions. Group 2 followed the same instructions as Group 1, but after the experiment, they answered a series of questions on their worksheets concerned with the design of the experiment. Group 3 was required to design the experiments, guided by a similar set of questions. The impact of the intervention on pupils' experimental design skills (EDS) and disciplinary content knowledge (DCK) was measured using structured tests at the beginning of the project and at the end of both school years. 756 Grade 8 pupils completed the test at the end of the second school year (April–May 2023). Over the first two years, the intervention resulted in a medium effect size positive change in the EDS of Group 3 compared to the control group (Group 1), (Cohen's  $d$ : 0.23). By the end of the second year of the project, there was only a small difference in the change in DCK between the experimental groups and the control group (Cohen's  $d$  value for Group 2: 0.10 and for Group 3: 0.12).

**A kutatásalapú tanulás a természettudományos kutatások lépéseit modellezi, amelyek központi eleme a kísérlettervezés. Ez nem csak a mélyebb fogalmi megértést és a magasabb rendű gondolkodási műveletek fejlesztését szolgálhatja, hanem a természettudományok áltudományoktól való megkülönböztetését is megkönnyítheti. Ezért kutatócsoportunk már 10 éve**

vizsgálja a kísérlettervező képesség fejlesztésének lehetséges módjait. A Magyar Tudományos Akadémia által támogatott, jelenleg negyedik éve zajló projektünkben egy, a változók azonosításán és kontrollján alapuló séma segíti a kísérleti csoportok diákjait a kísérlettervezésben, míg a kontrollcsoport receptszerű leírás alapján végzi a kísérleteket. A diákok által írt tesztek eredményeinek statisztikai elemzése azt mutatja, hogy a séma alapján kísérletet végző diákok kísérlettervező képessége átlagosan valamivel jobban fejlődött a projekt első három évében, mint a kontrollcsoporté.

*Zoltán Homonnay\**

**Lehet egy térbeli dimenzióval több? [In Hungarian; Could there be one more spatial dimension?]**

[Fizikai Szemle, 74, 2024, 348](#)

The article raises the idea of the actual existence of a fourth spatial dimension as a thought experiment, linking several physical phenomena (the electron spin, wavefunctions described by complex numbers, the description of the atomic nucleus's electric properties, and parity violation in weak interactions). This concept could make many physical phenomena easier to interpret.

**A cikk néhány fizikai jelenség összekapcsolásán keresztül (az elektron spinje, a komplex számokkal leírható hullámfüggvények, az atommag elektromos tulajdonságainak a leírása, a paritásértés a gyenge kölcsönhatás esetén) gondolat kísérletként felveti egy negyedik térbeli dimenzió tényleges létezését, ami számos fizika jelenléget könnyebben értelmezhetővé tenné.**

## **A KARI TUDOMÁNYOS DIÁK-KÖRI KONFERENCIA KÉMIAI PROGRAMJA / SCIENTIFIC STUDENTS' ASSOCIATIONS CONFERENCE OF THE FACULTY, CHEMISTRY PROGRAM**

**2024. december 7., 9:00, Eötvös terem (0.83)**

7 December 2024, 9:00, Eötvös lecture room

**Megnyitó – Szalay István az ELTE Kémiai Intézetének igazgatója**

Opening – István Szalay, director of Institute of Chemistry

**Szerves kémiai szekció, Eötvös-terem (0.83)**

Organic Chemistry Section, Eötvös lecture room

**09:15–09:30**

**Babcsányi István János: *Titantrénium-sók oxidatív aktiválása és reaktivitásuk vizsgálata***

*Oxidative Activation and Reactivity Study of Titantrénium Salts*

**Témavezető (supervisor): Varga Szilárd**

**09:30–09:45**

**Benedikti Anna: *Rodaminok új megvilágításban: kiemelkedően hatékony fotolabilis vegyületek szintézise és vizsgálata***

*Rhodamines in a New Light: Synthesis and Investigation of Highly Efficient Photolabile Compounds*

**Témavezető (supervisor): Bojtár Márton Gáspár**

**09:45–10:00**

**Budai Eszter Anna: *Újszerű, poli(dimetilsziloxán) alapú nanoszerkezetű amfil kotérhálók***

*Novel Nano-structured Amphiphilic Co-networks Based on Poly(dimethylsiloxane)*

**Témavezetők (supervisors): Iván Béla, Szanka István, Petróczy Anna**

**10:00–10:15**

**Csányi Zsombor: *Új, metionin tartalmú sejtpenetráló peptidok előállítása***

*Synthesis of New Methionine-containing Cell-penetrating Peptides*

**Témavezető (supervisor): Bánóczy Zoltán**

**10:15–10:30**

**Herczegh Attila Richárd: *Katalitikus átalakítások vizsgálata biotenzid oldatokban***

*Study of Catalytic Transformations in Biosurfactant Solutions*

**Témavezető (supervisor): Novák Zoltán**

**10:30–10:45**

**Kapdos Ádám: *Réz katalizált elektro-kémiai dekarboxilatív borilezés fejlesztése***

*Development of Copper-catalyzed Electrochemical Decarboxylative Borylation*

**Témavezető (supervisor): Novák Zoltán**

**10:45–11:00**

**Karvaly Krisztián Márk: *Szilárdfázisú extrakciós (SPE) tisztítási módszerek optimalizálása kis mennyiségű komplex biológiai minták proteomikai és foszfo proteomikai alkalmazására***

*Optimization of Solid-phase Extraction (SPE) Methods for Proteomic and Phosphoproteomic Applications of Small Complex Biological Samples*

**Témavezetők (supervisors): Bugyi Fanni, Turiák Lilla**

**11:00–11:30**

**Szünet / Break**

**11:30–11:45**

**Kertész Kata: *Hipoxia aktivált fluorogén jelzővegyületek és fotolabilis védőcsoportok szintézise***

*Synthesis of Hypoxia-activated Fluorogenic Probes and Photolabile Protecting Groups*

**Témavezető (supervisor): Cserép Balázs Gergely**

**11:45–12:00**

**Nemeskéri Dániel: *Hosszú szénláncú kontakt feromonok iteratív sztereoselektív szintézise***

*Iterative Stereoselective Synthesis of Long-chain Contact Pheromones*

**Témavezetők (supervisors): Soós Tibor, Szobota András**

**12:00–12:15**

**Németh Dávid Dorián: *Tuning the Conformational Properties of Dithienylbenzene Photoswitches for Solid-state Applications***

**Témavezetők (supervisors): London Gábor, Kunfi Attila**

**12:15–12:30**

**Rábai Károly Tamás: *HER2-pozitív emlőtumor célzására alkalmas biokonjugátumok fejlesztése***

*Development of Bioconjugates for Targeting HER2-positive Breast Tumors*

**Témavezető (supervisor): Mező Gábor**

**12:30–12:45**

**Stein Anna: *Szerkezeti paraméterekkel tervezhető termoreszponzív viselkedésű poli(N-izopropil-(met)akrilamid-kopolimer) (etilén-glikol)-(met)akrilát) kopolimer***

*Thermo-responsive Poly(N-isopropyl(meth)acrylamide-co-poly(ethylene glycol)-(meth)acrylate) Copolymers Designed with Structural Parameters*

**Témavezetők (supervisors): Sármezey Bence, Kasza György, Iván Béla**

12:45–13:00

**Tar-Pálfi Helga:** *Hazai mutáns transzferin tetramerizációjának vizsgálata in silico módszerekkel a jobb terápiás stratégiáért*

*Investigation of Mutant Trans-TTR Tetramerization Using In Silico Methods for Improved Therapeutic Strategies*

**Témavezetők** (supervisors): **Perczel András, Bódy István Levente, Fazekas Zsolt**

**Fizikai kémiai és analitika szekció,**

**Gróh-terem (062)**

Physical & Analytical Chemistry Section, Gróh lecture room (062)

09:15–09:30

**Báangi-Magyar Ignác:** *Aeroszol mozgékonyági spektrométerek összehasonlító vizsgálata és a mérési módszer optimalizálása*

*Comparative Study of Aerosol Mobility Spectrometers and Optimization of Measurement Methods*

**Témavezető** (supervisor): **Salma Imre**

09:30–09:45

**Bogya Benedek:** *Dihidropirimidin – dehidrogenáz enzim radioizotópos aktivitás mérésének fejlesztése kemoterápiában részesülő daganatos betegeknél prognosztikai célból*

*Development of Radioisotopic Activity Measurement for Dihydropyrimidine Dehydrogenase in Chemotherapy Patients for Prognostic Purposes*

**Témavezetők** (supervisors): **Ditrői Tamás, Nagy Péter**

09:45–10:00

**Ecseri Gábor András:** *Quantum Mechanical Calculation of Reaction Rate Coefficients*

**Témavezetők** (supervisors): **Fábri Csaba, Császár Attila**

10:00–10:15

**Fejes Bence:** *Izopropanol és hidrogén-atomok reakcióinak kísérleti vizsgálata csillagközi körülmények között*

*Experimental Investigation of Reactions Between Isopropanol and Hydrogen Atoms Under Interstellar Conditions*

**Témavezetők** (supervisors): **Keresztes Barbara, Tarczay György**

10:15–10:30

**Gombás András:** *Pivot-invariant Knowledge-partitioning at the Multi-reference Level*

**Témavezetők** (supervisors): **Szabados Ágnes, Surján Péter**

10:30–10:45

**Illés Tamás:** *A légköri aeroszol higroszkópos tulajdonságai Budapesten különleges események alkalmával*

*Hygroscopic Properties of Atmospheric Aerosols in Budapest During Special Events*

**Témavezetők** (supervisors): **Salma Imre, Vörösmarty Máté**

10:45–11:00

**Kígyósi Máté:** *Benchmarking Ab Initio Protocols for High Throughput Cluster Calculations*

**Témavezető** (supervisor): **Daru János**

11:00–11:30

Szünet / Break

11:30–11:45

**Lemle Ákos:** *Method Development for the Simultaneous Identification of Acidic and Basic Drugs of Abuse in Blood*

**Témavezetők** (supervisors): **Hidvégi Előd, Vasani Anikó Éva**

11:45–12:00

**Palik Dezső István:** *Symmetry-adapted (ro)vibrational Computations for H<sub>3</sub><sup>+</sup> Using Perkeris Coordinates*

**Témavezetők** (supervisors): **Mátyus Edit, Sunaga Ayaki**

12:00–12:15

**Péterfi Orsolya:** *Porkeverék kikapadása által okozott hatóanyagtartalom-ingadozás vizsgálata UV-képalkotás segítségével*

*Investigation of Active Ingredient Content Fluctuations Caused by Powder Mixture Adhesion Using UV Imaging*

**Témavezető** (supervisor): **Nagy Zsombor Kristóf**

12:15–12:30

**Sajósi Benedek:** *Propilén-oxid hidrogénatommal való reakciójának vizsgálata mátrixizolációs spektroszkópiával*

*Investigation of the Reaction of Propylene Oxide with Hydrogen Atoms Using Matrix Isolation Spectroscopy*

**Témavezetők** (supervisors): **Tarczay György, Góbi Sándor**

12:30–12:45

**Szabó András:** *Accelerating Coupled Cluster Molecular Dynamics of Condensed Phase Aqueous Systems Using Cluster-based Delta-learning Protocols*

**Témavezetők** (supervisors): **Daru János, Mészáros Bence Balázs**

12:45–13:00

**Takács Késa Róza:** *Innovatív nyomtatói módszerek kidolgozása struktúrált folyadékok előállítására*

*Development of Innovative Printing Methods for Producing Structured Fluids*

**Témavezetők** (supervisors): **Mészáros Róbert, Kardos Attila**

13:00 Eötvös-terem (0.83) Zárszó –

**Tarczay György, az ELTE Kémiai Intézetének tudományos igazgatóhelyettese.** Closing remarks – György Tarczay deputy director for science of the Institute of Chemistry.

**Az absztraktok megtalálhatók a [Kémia TDK honlapján](#).** The abstracts can be found on the [Chemistry TDK website](#).

## SIKERES PÁLYÁZATOK / SUCCESSFUL PROPOSALS

### Horizon Europe Twinning program

**A Horizont Európa kutatási és innovációs program [Twinning](#) pályázatai a mérsékeltbb innovációs teljesítményű, ún. "widening" országok kutatási szervezeteinek, egyetemeinek kapacitásépítését támogatják nemzetközileg elismert kutatási intézményekkel való hosszú távú, stratégiai partnerségek kialakítása révén. Az együttműködések keretében új, ígéretes kutatási irányokra fókuszáló közös projektek valósulnak meg, a widening intézmények kutatási kiválósága, nemzetközi láthatósága és versenyképessége szakembercserék és széleskörű tudásátadási programok révén erősödik.**

**Az IDP2Biomed program a biokémia területén erősíti a tudományos kiválóságot és az innovációs kapacitást az ELTE-n. Dosztányi Zsuzsa (Biológiai Intézet) vezetésével az ELTE kutatói három élenjáró európai kutatócsoporttal fognak szorosan együttműködni a belsőleg rendezetlen fehérjék (IDP-k) területén. A kutatás során olyan IDP-kre összpontosítanak, amelyek népegészségügyi szempontból fontos kóros folyamatokban (például neurodegeneratív és ritka betegségekben) vesznek részt. A tervek szerint az IDP-kkel kapcsolatos információk és az orvosi biológiai adatok összevetésével a kutatók megértik az IDP-k normális és beteg állapotokban betöltött funkcióját, és új**

utakat tárhatnak fel kóros viselkedésük megváltoztatására. Intézetünkben Bodor Andrea és csoportja vesz részt a programban.



As part of the Horizon Europe research and innovation framework programme, Twinning aims to support the capacity building of research institutions and universities in the so-called widening countries with a moderate innovation performance through the establishment of long-term, strategic partnerships with internationally recognised research institutions. Joint projects focusing on new, promising research directions are implemented within the framework of the collaborations. The research excellence, international visibility, and competitiveness of the widening institutions are enhanced through expert exchange and extensive knowledge transfer programmes.

The IDP2Biomed programme is meant to enhance scientific excellence and innovation capacity at ELTE in the field of biochemistry. Headed by Zsuzsa Dosztányi (Institute of Biology), ELTE researchers will closely co-operate with three leading European research teams in the field of intrinsically disordered proteins (IDPs). The research will be focusing on IDPs that are involved in pathological processes (e.g. neurodegenerative and rare diseases) that are

relevant to public health. By comparing information on IDPs with biomedical data, researchers strive to understand the function of IDPs in normal and diseased states and explore new ways to alter their pathological behaviour. From our institute Andrea Bodor and her group will be involved.

### Egyetemi Kiválósági Alap / Excellence Fund of ELTE

**Intézetünk munkatársai jelentős sikereket értek el az Egyetemi Kiválósági Alap pályázatain.**

Our institute's staff achieved outstanding success in the University Excellence Fund applications.

**Az „Innovációs célú felhasználás” kategóriában Bodor Andrea (Vér-agy gáton átjutó, antifungális hatással is rendelkező, növényi eredetű peptidok hatóanyag hordozóként történő tesztelése), Csámpai Antal (Új imipridon származékok és rákellenes aktivitásuk), Daru János (Kvantumkémiai számítások kiváltása felhő alapú AI modellekkel) és Mező Gábor (Másodgenerációs 2-pirrolino-daunomycin származékok alkalmazása célzott tumorterápiában) nyert támogatást.**

In the 'Utilization for Innovation' category, Andrea Bodor (Testing plant-derived peptides with antifungal activity and the ability to cross the blood-brain barrier as drug delivery carriers), Antal Csámpai (Novel imipridone derivatives and their anticancer activity), János Daru (Replacing quantum chemical calculations with cloud-based AI models), and Gábor Mező (Application of second-generation 2-pyrrolo-danomycin derivatives in targeted cancer therapy) received funding.

**A „Seed Funding” kategóriában Láng Győző Kiválósági Központ Létrehozása az Akkumulátorok és Környezeti Biztonság Területén pályázata került támogatásra.**

In the Seed Funding category, Győző Láng's proposal, *Establishing a Consortium for a Centre of Excellence on Batteries and Environmental Safety*, received support.

**Császár Attila (“top” kategória), Salma Imre (D1/Q1 kategória) és Turányi Tamás (D1/Q1 kategória) kiemelkedő presztízű tudományos publikációi alapján benyújtott pályázatát díjazták.**

Attila Császár (in the "top" category), Imre Salma (D1/Q1 category), and Tamás Turányi (D1/Q1 category) were recognized for their outstanding scientific publications of high prestige.

**Az Egyetemi Kiválósági Alap honorálta Mátyus Edit *Relativistic quantum electrodynamics framework for testing and developing the Fundamental theory of molecular Matter (FunMat) (Excellent Science)* című és feltételesen támogatta Mátyus Edit *New technologies for precision metrology with cold molecules (svájci-magyar együttműködés)* című, valamint a Mihucz Viktor által koordinált *TRACE – Talents for Renewable Resources and Circular Chemistry* című pályázatok benyújtását.**

The University Excellence Fund honored Edit Mátyus for submitting the proposal titled *Relativistic Quantum Electrodynamics Framework for Testing and Developing the Fundamental The-*

*ory of Molecular Matter (FunMat) (Excellent Science)* and conditionally supported her proposal *New Technologies for Precision Metrology with Cold Molecules* (Swiss-Hungarian collaboration). Additionally, the submission of the *TRACE – Talents for Renewable Resources and Circular Chemistry* project, coordinated by Viktor Mihucz, was also supported.

**A nemzetközi mesterszak képzési tervének elkészítése és a szak elindítása kategóriában Mihucz Viktor munkáját, az Ipari kémia kettős diplomát adó mesterszak az ÁAU és az ELTE között című program kidolgozását ismerték el.**

In the category of developing and launching an international master's program, Viktor Mihucz's work on the *Double Degree Master's Program in Industrial Chemistry between ÁAU and ELTE* was recognized.

### Richter Témapályázat / Richter Gedeon Plc. Thematic Call



**A Richter Gedeon Nyrt. a 2024-es Richter Témapályázat kiírásával támogatni szeretné a stratégiai irányaihoz és belső K+F+I tevékenységéhez kapcsolódó, nemzetközi színvonalú innovációkat és**

**szetné elősegíteni a kutatási eredmények gyakorlati megvalósítását. A Prof. Perczel András vezetésével a HUN-REN-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport és Szerkezeti Biológiai Laboratórium fiatal kutatói – Kiss-Szemán Anna, Horváth Dániel és Szaniszló Szabaszián – arra törekcsenek, hogy megértsék, miért maradnak a neurodegeneratív betegségekhez kapcsolódó kóros fehérjeváltozások ún. amiloid lerakódások formájában, vagyis miért halmozódnak fel kóros módon a szervezetben, amivel hozzájárulnak a betegség előrehaladásához, míg egyes – az emberi szervezetben megtalálható – hormonok esetében a funkcionális amiloid rostok kialakulása átmeneti és visszafordítható folyamat. A csoport tagjai munkájuk során azt vizsgálják, hogy ezek a hormonok hogyan képesek különböző térszerkezetet felvenni az emberi szervezet különböző pH-értékű részein, befolyásolható-e a rostok kialakulásának üteme és szabályozható-e a lebontásuk enzimek segítségével.**

Richter Gedeon Plc., through the announcement of the 2024 Richter Thematic Call for Proposals, aims to support internationally recognized innovations aligned with its strategic directions and internal R&D&I activities, while promoting the practical application of research results. Under the leadership of Prof. András Perczel, young researchers from the HUN-REN-ELTE Protein Modeling Research Group and Structural Biology Laboratory – Anna Kiss-Szemán, Dániel Horváth, and Szabaszián Szaniszló – strive to understand why pathological protein modifications associated with neurodegenerative dis-

eases accumulate in the form of so-called amyloid deposits. These deposits abnormally build up in the body and contribute to disease progression, whereas, in the case of certain hormones present in the human body, the formation of functional amyloid fibers is a transient and reversible process. The group is investigating how these hormones can adopt different spatial structures in regions of the human body with varying pH levels, whether the formation rate of the fibers can be influenced, and whether their breakdown can be regulated with the help of enzymes.

## **KIVÁLÓ KUTATÁSI INFRASTRUKTÚRÁK A KÉMIAI INTÉZETBEN / TOP HUNGARIAN SCIENTIFIC INFRASTRUCTURES IN OUR INSTITUTE**

**Lezárult a Nemzeti Kutatási Infrastruktúra 2023-2024 felmérés értékelése: "Összesen 111 minősített kutatási infrastruktúra működik Magyarországon. A Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal 2024. január 5-én azaz a céllal indította el a 'Nemzeti Kutatási Infrastruktúrák 2023-2024' című kérdőíves felmérést, hogy azonosítsa azokat a kiemelt jelentőségű hazai kutatói infrastruktúrákat (KI), amelyek nem kerültek a legkiválóbbak közé a 2021-es felmérés során."**

A total of 111 certified research infrastructures operate in Hungary. On January 5, 2024, the National Research, Development and Innovation

Office launched the 'National Research Infrastructures 2023–2024' questionnaire survey with the aim of identifying significant national research infrastructures (RIs) that were not ranked among the top ones in the 2021 evaluation.

**"Kiváló hálózat" minősítést szerzett az Űrkémiai Kutatóhálózat. Az utóbbi hálózat meghatározó tagja az ELTE TTK-n működő MTA-ELTE Lendület Laboratóriumi Asztrokémiai Kutatócsoport.**

The [Space Chemistry Research Network](#) received the "Excellent Network" certification. A key member of this network is the MTA-ELTE Momentum Laboratory Astrophysical Chemistry Research Group, operating at ELTE Faculty of Science.

**Az Űrkémiai Kutatóhálózat célja a világűrben lejátszódó kémiai folyamatok laboratóriumi modellezése. A hálózat közös kutatási projektek keretében hozzáférhető fő berendezései az ICA, az AQUILA, a FROST (HUN-REN ATOMKI) és a VIZSLA (ELTE TTK), amelyek asztrofizikai analóg jegekben ( $T > 3\text{ K}$ ) és gázmintákban sugárzásokkal, valamint atom- és ionbombázással kiváltott fizikai és kémiai változások követését teszik lehetővé. Segítségükkel mind a világűrben természetes módon lejátszódó folyamatok, mind az űrbeli tevékenységek tervezéséhez szükséges feltételek vizsgálhatók. Nemzetközi együttműködésben – pl. a Horizon 2020 Europlanet 2024 RI projekt keretében – végzett kutatásaik átfogják a kémiai elemek keletkezésétől, a csillagközi anyagban zajló molekulaszintézisen át az élethez**

**szükséges szerves molekulákat felépítő folyamatok vizsgálatát. A gyorsan fejlődő hálózat célzott programokat indít űrügynökségek misszióinak támogatására, pl. a Jupiter jeges holdjain zajló folyamatok vizsgálatával.**

The goal of the [Space Chemistry Research Network](#) is the laboratory modelling of chemical processes occurring in outer space. The main setups that are accessible within the framework of joint research projects are ICA, AQUILA, and FROST at HUN-REN ATOMKI, and VIZSLA at ELTE TTK. They allow for physical and chemical changes induced by radiation and atom- or ion-impact in astrophysical ice analogues to be studied at  $T > 3\text{ K}$ . Through experiments, the Network can study fundamental chemical processes in outer space, as well as those relevant for the planning of space missions. Research programmes, typically carried out in international collaborations, cover a wide range of topics; from the creation of chemical elements, to molecular processes in interstellar media and the synthesis of organic molecules necessary for the emergence of life in the Universe. The Network's targeted programmes support the missions of space agencies (e.g., those dedicated to the study of Jupiter's icy moons).

**Az ELTE TTK Kémiai Intézete Digitális Kémiai Központját "Ígéretesen fejlődő kutatói infrastruktúra" elismeréssel tüntették ki. Ez magában foglalja az elméleti kémiai kutatócsoportok jelenlegi infrastruktúráját, valamint az építés alatt álló [SuperSmartLab](#) létesítményt.**

The Digital Chemistry Center of the ELTE Faculty of Science's Institute of Chemistry has been recognized as a "Promisingly Developing Research Infrastructure." This designation encompasses

the current infrastructure of the theoretical chemistry research groups as well as the [SuperSmartLab](#) facility currently under construction.

**A Digitális Kémia Központ célja az atomi-molekuláris anyag tulajdonságainak és átalakulásainak térben és időben lehető leghatékonyabb skálán történő modellezése és irányítása, ehhez szoftveres infrastruktúra fejlesztése és optimalizálása modern digitális számítástechnikai eszközök és gépi tanulási módszerek használatával. Ezáltal ismereteket szerzünk makromolekulák elektronvezetéséről, az atommagszerkezet elektronfelhőre gyakorolt hatásáról, ultragyors kémiai folyamatokról, ultrapontos mérések kvantitatív analiziséről, egyetlen molekula precíziós vizsgálatáról, véges hőmérsékletű molekulahalmazok szimulációjáról, ultrahideg reakciókról, több ezer reakciólépéses folyamatokról, kémiai folyamatok lézertűnyel, illetve digitálisan visszacsatolt vezérléssel történő irányításáról. Mivel a jelenségek digitális kémiai kezelése elengedhetetlen a jelen és jövő molekuláris alapú tudományos-technológiai fejlődéséhez, az egyetemi tananyag szerves részét képezik az ELTÉ-n, SuperSmartLab integrációval.**

The Digital Infrastructure for Chemistry Education & Research works on developing a software infrastructure to model and control the properties and transformations of atomic and molecular matter on all scales relevant to molecular science. As a result, we will gain knowledge on a broad range of atomic and molecular phenomena, relevant to the conductance of macromolecules, the finite size of the atomic nucleus on the electronic structure, ultrafast molecular processes, ultra-precise molecular measurements,

single-molecule measurements, molecular ensembles at finite temperatures, ultra-cold chemical reactions, reaction networks with thousands of reaction steps, chemical processes controlled with laser light or a digital feedback loop in a wet-lab experiment. Digital chemistry tools are essential for the present-day and near-future developments in molecular science and technology and are integrated into the SuperSmartLab Educational Project of the ELTE Institute of Chemistry.

**2021-ben már kiváló minősítést szerzett a [HUN-REN-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport, Szerkezeti kémiai és Biológiai Laboratórium](#) infrestruktúrája.**

In 2021, the Infrastructure of the [HUN-REN-ELTE Protein Modeling Research Group and Structural Chemistry and Biology Laboratory](#) had already received an "Excellent" certification.

## **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. szeptember kezepétől november 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 mid-September to end of November, 2024.

Andrea Bodor was an invited speaker at [CEUM2024 – Central European NMR Symposium & Bruker Users' Meeting](#), held from September 18 to 19 in Rijeka, Croatia.

Edit Mátyus was an invited speaker at the 14th REHE: [International Conference on Relativistic Effects in Heavy-Element Chemistry and Physics](#), held from October 7 to 11, 2024, in Amersfoort, The Netherlands.

Attila Császár, Edit Mátyus, and Ágnes Szabados were invited speakers at the [11th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics](#), held from October 13 to 18, 2024, in Qingdao, China.

András Perczel was an invited speaker at the [Vladimir Sklenar Memorial Symposium](#), held from November 14 to 15, 2024, at CEITEC in Brno, Czechia.

## **RÖVID HÍREK / SHORT NEWS**

[The International Society for Theoretical Chemical Physics \(ISTCP\)](#), which unites researchers from 34 countries, elected Péter Surján, Professor of the Institute of Chemistry and former Dean

of the Faculty, as its President at its congress held in Qingdao, China, from October 13 to 18, 2024.

**A 34 ország kutatóit tömörítő Nemzetközi Elméleti Kémiai Fizika Társaság (International Society for Theoretical Chemical Physics, ISTCP) 2024. október 13–18. között Qingdaóban, Kínában tartott kongresszusán Surján Pétert, a Kémiai Intézet professzorát és a Kar korábbi dékánját választotta elnökévé.**

The [website of the ELTE Institute](#) of Chemistry was updated in October. The content is continuously being expanded.

**Októberben megújult az [ELTE Kémiai Intézetének a honlapja](#). A honlap tartalmát folyamatosan bővítjük.**

An article summarizing and reflecting on the history of infrared spectroscopy in Hungary, authored by emeritus professor Pál Sohár of our institute, was published in the *Hungarian Chemical Journal*. In the same issue, our former student, Ákos Vértes, wrote about his university years and successful career.

**A *Magyar Kémiai Folyóiratban* megjelent Sohár Pál, intézetünk emeritus professzorának összefoglaló, visszatekintő írása infravörös spektroszkópia magyarországi térhódításáról. Ugyanitt volt diákunk, Vértes Ákos ír az egyetemi éveiről és sikeres karrierjéről.**

In the program titled Collaboration for Chemistry, aired on November 9, 2024, Thursday, at 9:04 AM on Magyar Katolikus Rádió, representatives from the Hungarian Chemical Society (MKE), the chemical industry, and the ELTE Institute of Chemistry discussed chemistry education and teacher training.



**A Kémiaért való összefogás című műsorban, ami 2024. november 9-én, csütörtökön, 9:04-kor került adásba a Magyar Katolikus Rádióban, a Magyar Kémikusok Egyesülete (MKE) által létrehozott [Kémia mindenkinek](#) honlapján beszélgettek az MKE, a vegyipar és az ELTE Kémiai Intézet képviselői a kémiatanításról és a kémiatanár-képzésről. [A műsor teljes felvétele elérhető az interneten.](#)**

Dániel Horváth, a research associate at the HUN-REN-ELTE Protein Modeling Research Group and Structural Chemistry and Biology Laboratory, was awarded the Kisfaludy Lajos Publication Excellence Prize in October. The award has been granted annually since 1994.

**Horváth Dániel, az HUN-REN-ELTE Fehérjemodellező Kutatócsoport és Szerkezeti Kémia és Biológia Laboratórium tudományos munkatársa kapta októberben az 1994-ben alapított [Kisfaludy Lajos publikációs díját](#).**

The HVG Online portal published an article titled Hungarian Researchers May Revolutionize Aviation, One of the Most Harmful Activities Today, covering the collaborative research findings of Tamás Turányi and Viktor Józsa from BME. These findings were discussed in detail in the previous newsletter.

**A HVG online [„Magyar kutatók feje te-tejére állíthatják a repülést, ami most szinte mindennél károsabb”](#) címmel ismertette Turányi Tamás és BME-s kollégája, Józsa Viktor közös kutatási eredményét. (Ezekről az eredményekről az előző hírlevélben írtunk.)**

The title Innovative Researcher of ELTE 2024 was jointly awarded to Antal Csámpai and Gábor

Mező from the ELTE Institute of Chemistry for their development of imipridone derivatives for anticancer therapies. Their groundbreaking drug molecule is several orders of magnitude more effective than existing medications, targets cancer cells specifically, has fewer side effects, and is significantly easier to produce. The identified TBP-333 imipridone derivative stands out among related molecules with its low toxicity and significant antitumor activity. The invention, co-patented with Semmelweis University, holds the promise of saving millions of lives globally. Antal Csámpai discussed these results on the *Novum* program, aired on October 14, 2024.

**Az [ELTE Innovatív Kutatója címet 2024-ben](#) az ELTE Kémiai Intézetének munkatársai, Csámpai Antal és Mező Gábor megosztva nyerték el a rákellenes terápiákban használható imipridon-származék kifejlesztéséért. Csámpai Antal csapata világszinten versenyképes rákellenes hatóanyagot fejlesztett ki, forradalmian új gyógyszermolekulájuk a meglévő gyógyszereknél több nagyságrenddel kisebb dózisban fejt ki tumorelles hatást, célzottan pusztítja el a rákos sejteket, kevesebb mellékhatása és lényegesen könnyebb előállítani is, mint más készítményeket. A kutatók által beazonosított TBP-333 imipridon-származék számos tulajdonsága alapján nagyságrendekkel kiemelkedik a rokonmolekulák közül alacsony toxicitásával és jelentős tumorellenes hatásával. A Semmelweis Egyetem munkatársaival közösen jegyzett találmányt a két intézmény a világ számos országában és régiójában szabadalmaztatja, reménybeli hasznosításával emberek millióinak élete menthető majd meg. Csámpai Antal a**

**[Novum 2024. október 14-i adásában beszélt az eredményekről.](#)**

András Perczel and his group discussed their cryoelectron microscopy research on the *Novum* program, aired on October 21, 2024.

**Perczel András és csoportja a [Novum 2024. október 21-i adásában](#) számolt be krio-elektronmikroszkópiás kutatásairól.**

Musician and influencer Márkó Linczényi visited our Institute, where István Zsély shared insights into the process of combustion, accompanied by captivating experiments.

**Linczényi Márkó zenész és influenzszer látogatott el Intézetünkbe, ahol Zsély István kollégánk izgalmas kísérletekkel kísérve mesélt neki az égés folyamatáról. [A látogatásáról készült beszámoló és videó az Index portálján nézhető meg.](#)**

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