

Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportja és a Magyar
Kémikusok Egyesülete rendezvénye

XLVIII. KÉMIAI ELŐADÓI NAPOK

Előadás összefoglalók



Szeged, 2025. október 27-29.

**Szegedi Akadémiai Bizottság Székháza
6720 Szeged, Somogyi u. 7 (110. terem)**

Organized by the Hungarian Chemical Society Group of Csongrád County
and the Hungarian Chemical Society

XLVIII. CHEMISTRY LECTURES

Book of presentations

Szeged, 27-29 October 2025

Szerkesztették

Gátszegi Gerda

Kovács Hilda

Torma Bianka

Seres László

Turcsányi Árpád

SZTE TTIK Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék

SZTE TTIK Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

Editors

Gerda Gátszegi

Hilda Kovács

Bianka Torma

László Seres

Árpád Turcsányi

*University of Szeged, Faculty of Science and Informatics, Department
of Molecular and Analytical Chemistry*

*University of Szeged, Faculty of Science and Informatics, Department
of Physical Chemistry and Materials Science*

ISBN 978-615-6018-36-6

Tartalomjegyzék

ÁTTEKINTŐ PROGRAM / SHORT PROGRAM	5
KÖZÖSSÉGI PROGRAM	7
A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE ÁLTAL NÍVÓDÍJJAL KITÜNTETETT DIPLOMADOLGOZATOK 2025.....	9
RÉSZLETES PROGRAM / DETAILED PROGRAM.....	10
ABSZTRAKTFÜZET / BOOK OF ABSTRACTS	15
Nívódíjas előadások szekciója I.....	16
Nívódíjas előadások szekciója II.	22
Szerves és Analitikai kémia I. szekció / Organic and Analytical chemistry session I	27
Fizikai kémia I. szekció / Physical chemistry session I.....	32
Szerves kémia I. szekció / Organic chemistry session I.....	38
Szerves és Analitikai kémia II. szekció / Organic and Analytical chemistry session II.....	45
Anyagtudomány szekció / Material science session	50
Környezeti kémia szekció / Environmental chemistry session.....	57
Fizikai kémia szekció II. / Physical chemistry session II	62
Szerves kémia II. szekció / Organic chemistry session II	68
A KIADVÁNYKÖTETBE BENYÚJTOTT KÖZLEMÉNYEK / SHORT COMMUNICATIONS	75
Dibenzoil-borkősav alapú rezolválás preparatív lépték alatti megvalósítása mágneses enantioszeparáció alkalmazásával	76
LiCl egylépéses átalakítása LiOH-dá trikalcium-aluminát ($\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$) segítségével	83
Phosphate Adsorption by Fe-ZIF-8 for Potential Applications in Lithium-Ion Battery Recycling ...	90
UV/szulfid és UV/VUV/szulfid eljárások alkalmazása PFOA bontásában	97
Különböző termesztési körülmények között nevelt napraforgó mikroöldségek vizsgálata Vis-NIR spektroszkópiával és sokváltozós adatelemzéssel.....	105
TÁMOGATÓINK.....	112

LABORTECHNIKA KIÁLLÍTÁS

és

ANALITIKAI ANKÉT – 2026

ELTE Gömb Aula, 2026. február 10–11.

A belépés ingyenes, de regisztrációhoz kötött.

Előadás benyújtása: 2025. december 1-ig!

Kiállítói dosszié letöltése és jelentkezés:

www.analitikaexpo.mke.org.hu



A Labortechnika Kiállítás célja, hogy lehetőséget adjon a legkorszerűbb analitikai termékek, szolgáltatások megismertetésére, kapcsolatok építésére, előadások és poszterek bemutatására.

A kiállításhoz Analitikai Ankéttal csatlakozunk, melynek keretében az analitika korszerű fejlesztési irányai és fontos alkalmazási területei kerülnek bemutatásra.

Az ankét részeként kapcsolódunk az IUPAC Global Women's Breakfast, IUPAC GWB2026 kezdeményezéshez.

Szeretettel várjuk Önöket! MKE Titkárság

ÁTTEKINTŐ PROGRAM / SHORT PROGRAM

2025. október 27. hétfő / 27 October 2025 Monday

- 09.30 – Regisztráció / Registration**
- 10.30 – 11.00 Megnyitó / Opening ceremony**
Prof. Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*
A Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportjának elnöke
Hannus István Kémia Tanári Díj átadása
Prof. Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*
A Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportjának elnöke
Dr. Szabó János, *ügyvezető igazgató*
Magyar Kémikusok Egyesülete
Nívódíjak átadása
Dr. Szabó János, *ügyvezető igazgató*
Magyar Kémikusok Egyesülete
Dr. Janáky Csaba, *egyetemi docens*
Magyar Kémikusok Egyesülete alelnök
Traxler Balázs, *globális minőségellenőrzési igazgató*
SONEAS Vegyipari Kft.
- 11.00 – 12.00 Plenáris előadás / Plenary presentation**
Nanoszerkezetek előállítás, jellemzése és alkalmazásai
Előadó: Prof. Dr. Kónya Zoltán, MTA levelező tagja, tudományos és innovációs rektorhelyettes egyetemi tanár
- 12.00 – 12.05 Csoportkép készítése**
- 12.05 – 13.15 Ebédszünet (Díszterem előtti folyosó) / Lunch break (in the corridor)**
- 13.15 – 14.30 Nívódíjas előadások szekciója I.**
Elnök: Dr. Varga Gábor, egyetemi adjunktus
- 14.30 – 14.45 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó) / Coffee break (in the corridor)**
- 14.45 – 15.45 Nívódíjas előadások szekciója II.**
Elnök: Dr. Endrődi Balázs, egyetemi adjunktus
- 15.45 – 16.00 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó) / Coffee break (in the corridor)**
- 16.00 – 17.00 Szerves és Analitikai kémia I. szekció / Organic and Analytical chemistry session I**
Elnök: Dr. Szabados Márton, tudományos munkatárs
- 17.00 – 17.10 Fiatal Kutatók Akadémiája bemutatása**
Előadó: Dr. Dömötör Orsolya, FKA alumni tag
- 17.10 – 17.15 Fiatal Kémikusok Fórumának bemutatása**
Előadó: Helyi Rudolf
- 18.00 – 21.00 Konferenciavacsora / Conference dinner**
(Szálka Halászcsernye és Rendezvényház; 6726, Szeged, Közép Kikötő sor 9/A))

2025. október 28. kedd / 28 October 2025 Tuesday

08.30 – Regisztráció / Registration

09.00 – 10.15 Fizikai kémia I. szekció / Physical chemistry session I
Elnök: Dr. Schusztar Gábor, egyetemi adjunktus

10.15 – 10.30 Kávészünet / Coffee break

10.30 – 12.00 Szerves kémia I. szekció / Organic chemistry session I
Elnök: Dr. Simon Péter, egyetemi tanársegéd

12.00 – 13.00 Ebédszünet / Lunch break

13.00 – 14.00 Szerves és Analitikai kémia II. szekció / Organic and Analytical chemistry session II
Elnök: Dr. Dömötör Orsolya, egyetemi adjunktus

14.00 – 14.30 Kávészünet / Coffee break

14.30 – 16.00 Anyagtudomány szekció / Material science session
Elnök: Dr. Halmágyi Tibor, anyagfejlesztő, ContiTech Rubber Industrial Kft.

16.15 – 17.15 Toronylátogatás a Szegedi Dómban (Szegedi Dóm Látogatóközpont, 6720 Szeged, Dóm tér 16.) / Visit of the tower of the Szegedi Dóm (Szegedi Dóm Visitor Center, 6720 Szeged, Dóm Square 16)

2025. október 29. szerda / 29 October 2025 Wednesday

08.30 – Regisztráció / Registration

09.00 – 10.00 Környezeti kémia szekció / Environmental chemistry session
Elnök: Dr. Kutus Bence, tudományos munkatárs

10.00 – 10.30 Kávészünet / Coffee break

10.30 – 11.45 Fizikai kémia szekció II. / Physical chemistry session II
Elnök: Dr. Samu Gergely Ferenc, egyetemi adjunktus

11.45 – 13.00 Ebédszünet / Lunch break

13.00 – 14.40 Szerves kémia II. szekció / Organic chemistry session II
Elnök: Dr. Lőrinczi Bálint, egyetemi adjunktus

KÖZÖSSÉGI PROGRAM



Konferenciavacsora

2025. október 27. 18:00-21:00

Szálka Halászcserda és Rendezvényház,
6726 Szeged, Közép Kikötő sor 9/A.



Toronylátogatás a Szegedi Dómban

2025. október 28. 16:15-17:15

(Szegedi Dóm Látogatóközpont, Szeged, Dóm tér 16.)
közös indulás a konferencia helyszínéről

SOCIAL PROGRAM



Conference dinner

27 October 2025 18:00-21:00

Szálka Halászcserda és Rendezvényház,
6726 Szeged, Közép Kikötő sor 9/A.



Visit of the tower of the Szegedi Dóm

28 October 2025 16:15-17:15

(Szegedi Dóm Visitor Center, 6720 Szeged, Dóm Square 16)
Organized departure from the conference venue

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE ÁLTAL NÍVÓDÍJJAL KITÜNTETETT DIPLOMADOLGOZATOK 2025

BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM

Horváth Anna Virág:

Szénhidrátalapú makrociklusok szintézise és alkalmazása

Schmidt Máté:

Grafén-oxiddal módosított szeparátor előállítás és hatása a lítium-kén akkumulátorokban zajló poliszulfid vándorlás jelenségére és az akkumulátorok ciklusélettartamára

DEBRECENI EGYETEM

Pogonyi-Szaniszló Zsófia:

A bpdma ligandum Gd(III)-komplexének koordinációs kémiai vizsgálata

Sidó Evelin:

Platina(II)- és palládium(II)-ionok szorpciója szilika-kazein hibrid aerogéleken

Tóth Klaudia:

A xantin xantin-oxidáz reakció vizsgálata

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

Budai Eszter:

Újszerű, poli(dimetilsziloxán) alapú nanoszerkezetű amfil fil kotérhálók

Ecseri Gábor:

Quantum mechanical calculation of Reaction rate coefficients

Herczegh Attila Richárd:

Katalitikus átalakítások vizsgálata biotenzid oldatokban

Kapdos Ádám:

Rézkatalizált elektrokémiai borilezés

Németh Dávid Dorián:

Tuning the conformational properties of Dithienylbenzene photoswitches for Solid-state applications

PANNON EGYETEM

Cziráki Bálint:

3D nyomtatásra alkalmas berendezés és anyagrendszerek fejlesztése

PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM

Koch Marcell:

Monofoszforilált lipid a izomerek tömegspektrometrián alapuló kvantitálási módszerei

SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM

Gátszegi Gerda Tímea:

2-formilpiridin-guanilhidrazon származékok és fémkomplexeik oldategyensúlyi és redoxi tulajdonságai: a morfolin és piperazin szubsztitúció hatása

Terjéki Gergő:

Agyagásvány alapú adszorbensek fejlesztése nanoműanyagok kivonására

RÉSZLETES PROGRAM / DETAILED PROGRAM

2025. október 27. hétfő / 27 October 2025 Monday

- 09.30 – Regisztráció / Registration**
- 10.30 – 11.00 Megnyitó / Opening ceremony**
Prof. Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*
A Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportjának elnöke
Hannus István Kémia Tanári Díj átadása
Prof. Dr. Sipos Pál, *egyetemi tanár*
A Magyar Kémikusok Egyesülete Csongrád Megyei Csoportjának elnöke
Dr. Szabó János, *ügyvezető igazgató*
Magyar Kémikusok Egyesülete
Nívódíjak átadása
Dr. Szabó János, *ügyvezető igazgató*
Magyar Kémikusok Egyesülete
Dr. Janáky Csaba, *egyetemi docens*
Magyar Kémikusok Egyesülete alelnök
Traxler Balázs, *globális minőségellenőrzési igazgató*
SONEAS Vegyipari Kft.
- 11.00 – 12.00 Plenáris előadás / Plenary presentation**
Nanoszerkezetek előállítása, jellemzése és alkalmazásai
Előadó: Prof. Dr. Kónya Zoltán, MTA levelező tagja, tudományos és innovációs rektorhelyettes egyetemi tanár
- 12.00 – 12.05 Csoportkép készítése**
- 12.05 – 13.15 Ebédszünet (Díszterem előtti folyosó) / Lunch break (in the corridor)**
- 13.15 – 14.30 Nívódíjas előadások szekciója I.**
Elnök: Dr. Varga Gábor, egyetemi adjunktus
- 13.15 – 13.30** Újszerű, poli(dimetilsziloxán) alapú nanoszerkezetű amfifil kotérhálók
Előadó: Budai Eszter, végzett MSc hallgató
- 13.30 – 13.45** 3D nyomtatásra alkalmas berendezés és anyagrendszerek fejlesztése
Előadó: Cziráki Bálint, PhD hallgató
- 13.45 – 14.00** Katalitikus átalakítások vizsgálata biotenzid oldatokban
Előadó: Herczegh Attila Richárd, PhD hallgató
- 14.00 – 14.15** Rézkatalizált elektrokémiai borilezés
Előadó: Kapdos Ádám, PhD hallgató
- 14.15 – 14.30** Tuning the conformational properties of dithienylbenzene photoswitches for solid-state applications
Előadó: Németh Dávid Dorián, végzett MSc hallgató
- 14.30 – 14.45 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó) / Coffee break (in the corridor)**
- 14.45 – 15.45 Nívódíjas előadások szekciója II.**
Elnök: Dr. Endrődi Balázs, egyetemi adjunktus

- 14.45 – 15.00 2-formilpiridin-guanilhidrazon származékok és fémkomplexeik oldategyensúlyi és redoxi tulajdonságai: a morfolin és piperazin szubsztitúció hatása
Előadó: Gátszegi Gerda Tímea, PhD hallgató
- 15.00 – 15.15 Grafén-oxiddal módosított szeparátor előállítása és hatása a lítium-kén akkumulátorokban zajló poliszulfid vándorlás jelenségére és az akkumulátorok ciklusélettartamára
Előadó: Schmidt Máté, végzett MSc hallgató
- 15.15 – 15.30 Agyagásvány alapú adszorbensek fejlesztése nanoműanyagok kivonására
Előadó: Terjéki Gergő, PhD hallgató
- 15.30 – 15.45 A xantin xantin-oxidáz reakció vizsgálata
Előadó: Tóth Klaudia, végzett MSc hallgató
- 15.45 – 16.00 Kávészünet (Díszterem előtti folyosó) / Coffee break (in the corridor)
- 16.00 – 17.00 **Szerves és Analitikai kémia I. szekció / Organic and Analytical chemistry session I**
Elnök: Dr. Szabados Márton, tudományos munkatárs
- 16.00 – 16.15 Homok, mint heterogén katalizátor a poli(etilén-tereftalát) gazdaságos depolimerizációjában
Előadó: Ráduly Amália, MSc hallgató
- 16.15 – 16.30 Digitális ikerpár a gyógyszeripari fluid granulálásban: tudomány- és mesterséges intelligencia-alapú modellezési módszerek összehasonlítása
Előadó: Takács Orsolya, MSc hallgató
- 16.30 – 16.45 Planáris felületre immobilizált ligandumok felületi borítottságának nagy áteresztőképességű meghatározása egy lépéses, jelölésmentes SPRi módszerrel
Előadó: Katona Henrietta, MSc hallgató
- 16.45 – 17.00 LiCl átalakítása LiOH-dá
Előadó: Török Péter, MSc hallgató
- 17.00 – 17.10 **Fiatal Kutatók Akadémiája bemutatása**
Előadó: Dr. Dömötör Orsolya, FKA alumni tag
- 17.10 – 17.15 **Fiatal Kémikusok Fórumának bemutatása**
Előadó: Helyi Rudolf
- 18.00 – 21.00 Konferenciavacsora / Conference dinner
(Szálka Halászcsernye és Rendezvényház; 6726, Szeged, Közép Kikötő sor 9/A))

2025. október 28. kedd / 28 October 2025 Tuesday

- 08.30 – **Regisztráció / Registration**
- 09.00 – 10.15 **Fizikai kémia I. szekció / Physical chemistry session I**
Elnök: Dr. Schusztér Gábor, egyetemi adjunktus
- 09.00 – 09.15 Egy- és kétértékű ionok arányának hatása kőolajiparban alkalmazott polimerek fizikai kémiai jellemzőire
Előadó: Garas Lilla, BSc hallgató
- 09.15 – 09.30 Háromdimenziós tiolmintázat képződésének modellezése kétszatos gélreaktorban
Előadó: Vigh Péter Ferenc, BSc hallgató

- 09.30 – 09.45 Lyuktranszport tulajdonságok és töltéshordozó dinamika karbazol alapú molekulák és CsPbBr₃ nanokristályok között
Előadó: Hajdu Cintia, PhD hallgató
- 09.45 – 10.00 Oxigén Disszociáció Ruténium(0001) Felületen
Előadó: Drágity Deján, MSc hallgató
- 10.00 – 10.15 Kísérleti elrendezések mágneses elektrokatalitikus mérésekhez
Előadó: Klonka Áron, BSc hallgató
- 10.15 – 10.30 Kávészünet / Coffee break
- 10.30 – 12.00 **Szerves kémia I. szekció / Organic chemistry session I**
Elnök: Dr. Simon Péter, egyetemi tanársegéd
- 10.30 – 10.45 Egy váratlan meta-szubsztitúciós termék az ősztron sorban
Előadó: Ignác Rebeka, MSc hallgató
- 10.45 – 11.00 Antibakteriális szerek előállítása természetes vegyületekből
Előadó: Réz András, Hallgató
- 11.00 – 11.15 Development of BODIPY Derivatives for Fluorescence Applications
Presenter: Erzsébet Antal, Student
- 11.15 – 11.30 Fluorozott nukleozidszármazékok
Előadó: Lovas Miklós, Hallgató
- 11.30 – 11.45 Electrosynthesis of 2,3,4,5-tetrahydro-1,3,5-triazin-1-iums
Presenter: Lam Thi Da Thao, MSc student
- 11.45 – 12.00 Synthetic Approaches to Functionalized Xanthene Fluorophores
Presenter: Renátó Szekeres, Student
- 12.00 – 13.00 Ebédészünet / Lunch break
- 13.00 – 14.00 **Szerves és Analitikai kémia II. szekció / Organic and Analytical chemistry session II**
Elnök: Dr. Dömötör Orsolya, egyetemi adjunktus
- 13.00 – 13.15 Development of Novel 8-Hydroxyquinoline–Phthalimide Hybrids: Synthesis, Structural Optimization, and Anticancer Evaluation
Presenter: Moamen Awad Hassanin Mohamed, PhD student
- 13.15 – 13.30 Examination of sunflower microgreens cultivated under different conditions using Vis–NIR spectroscopy and multivariate data analysis
Presenter: Ágnes Madács, PhD student
- 13.30 – 13.45 GFP komofórok fotofizikai tulajdonságainak előrejelzése gépi tanulással
Előadó: Györök Ákos, Bsc hallgató
- 13.45 – 14.00 Dibenzoil-borkősav alapú rezolválás preparatív lépték alatti megvalósítása mágneses enantioszeparáció alkalmazásával
Előadó: Jávor Bálint Ferenc, PhD hallgató
- 14.00 – 14.30 Kávészünet / Coffee break
- 14.30 – 16.00 **Anyagtudomány szekció / Material science session**
Elnök: Dr. Halmágyi Tibor, anyagfejlesztő, ContiTech Rubber Industrial Kft.
- 14.30 – 14.45 Réteges kettős hidroxid alapú kompozit kolloid és antioxidáns tulajdonságai
Előadó: Mader Anna Márta, Hallgató

- 14.45 – 15.00 A (Gua)₃Cu₂I₅ vékonyrétegek fényemissziós sajátosságainak vizsgálata
Előadó: Cseh Kitty, MSc hallgató
- 15.00 – 15.15 Alginát alapú aero- és xerogélek előállítása és felhasználása gyógyszerhordozóként
Előadó: Tátrai Marcell, BSc hallgató
- 15.15 – 15.30 Szilika aerogél hexanal általi szolvatációja
Előadó: Ecsédi I. Bertold, MSc hallgató
- 15.30 – 15.45 Catalyst-free polyester particles for improved drug delivery
Presenter: Keristina Wagdi Kamil Amin, PhD student
- 15.45 – 16.00 A metamizol anion interkalálhatóságának vizsgálata magnézium és kalcium alapú réteges kettős hidroxidokba
Előadó: Serfőző Ákos, PhD hallgató
- 16.15 – 17.15 Toronylátogatás a Szegedi Dómban (Szegedi Dóm Látogatóközpont, 6720 Szeged, Dóm tér 16.)
/ Visit of the tower of the Szegedi Dóm (Szegedi Dóm Visitor Center, 6720 Szeged, Dóm Square 16)

2025. október 29. szerda / 29 October 2025 Wednesday

08.30 – Regisztráció / Registration

09.00 – 10.00 Környezeti kémia szekció / Environmental chemistry session

Elnök: Dr. Kutus Bence, tudományos munkatárs

09.00 – 09.15 Gombaölöszer lebontásának vizsgálata környezetkímélő eljárásokkal

Előadó: Székely Ákos, MSc hallgató

09.15 – 09.30 UV/szulfid és UV/VUV/szulfid eljárások alkalmazása PFOA bontására

Előadó: Erdős Kornél, Egyetemi hallgató

09.30 – 09.45 Aerogél alapú szorbensek fejlesztése nemesfém-vegyületek szelektív megkötésére

Előadó: Pércsi Dániel, PhD hallgató

09.45 – 10.00 Phosphate Adsorptions by Fe-ZIF-8 for Potential Application in Lithium-ion Battery Recycling

Presenter: Nguyen Thi Kim Phung, PhD student

10.00 – 10.30 Kávészünet / Coffee break

10.30 – 11.45 Fizikai kémia szekció II. / Physical chemistry session II

Elnök: Dr. Samu Gergely Ferenc, egyetemi adjunktus

10.30 – 10.45 Elektrokémiai oxigénredukció szénalapú katalizátorokon: H₂O₂ szelektív előállítása nagy áramsűrűségeken

Előadó: Faragó Zsombor, Kutató

10.45 – 11.00 Elektrokémiai metánoxidáció nemesfém katalizátoron

Előadó: Galbicsek Noémi, MSc hallgató

11.00 – 11.15 Csillagközi kénvegyületek vizsgálata

Előadó: Vámi Ármin, Középiskolás diák

11.15 – 11.30 Nyomás alatt születik a teljesítmény - a cellakompresszió és a rendszerelemek szerepe a széndioxid elektrolízisben

Előadó: Józó Viktor, Tanárszakos hallgató

- 11.30 – 11.45 Reakciósebességi együtthatók kvantummechanikai számítása
Előadó: Ecseri Gábor, PhD hallgató
- 11.45 – 13.00 Ebédszünet / Lunch break
- 13.00 – 14.40 **Szerves kémia II. szekció / Organic chemistry session II**
Elnök: Dr. Lőrinczi Bálint, egyetemi adjunktus
- 13.00 – 13.15 3D-nyomtatott fotoreaktorban végzett C-alkilezési reakció kísérlettervezésen alapuló optimalizálása
Előadó: Gémes Gergő, MSc hallgató
- 13.15 – 13.30 Szantonin vázas aminoalkoholok sztereoszelektív szintézise és vizsgálata
Előadó: Dr. Boncz Mária Fanni, PhD hallgató
- 13.30 – 13.45 Kísérletek pegaharin E előállítására
Előadó: John Tamás Miklós, PhD hallgató
- 13.45 – 14.00 Synthesis and fluorescent labeling of anticancer flavonoids
Presenter: Benjamin Kovács, Student
- 14.00 – 14.25 Biomolekulák zöld- vagy vörös-emittáló fluorofórral való jelölése
Előadó: Hlogyik Tamás, PhD hallgató
- 14.25 – 14.40 Kísérletek CARDIPY fluorofór egységet tartalmazó vegyületek szintézisére
Előadó: Palotai Gitta Dóra, BSc hallgató

ABSZTRAKTFÜZET / BOOK OF ABSTRACTS

Nívódíjas előadások szekciója I.

Újszerű, poli(dimetilsziloxán) alapú nanoszerkezetű amfifil kotérhálók

Budai Eszter Anna^a, Dr. Iván Béla^b, Dr. Szanka István^c, Petróczy Anna^d

^a ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék és HUN-REN TTK AKI Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport

^b ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék és HUN-REN TTK AKI Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport

^c HUN-REN TTK AKI Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport

^d HUN-REN TTK AKI Polimer Kémiai és Fizikai Kutatócsoport

Munkám során két különböző típusú, poli(dimetilsziloxán) (PDMS) alapú amfifil polimer kotérhálót állítottam elő sikeresen. Céljaim között szerepelt a kotérhálók szisztematikus vizsgálata, az előállítási körülmények, összetétel, szerkezet és a kapott kotérhálók alapvető tulajdonságai közötti kapcsolatok feltárása.

A kotérhálók szintézisét makromonomer módszerrel hajtottam végre, melyet a PHEMA-*l*-PDMS kotérhálók esetében oldatban és tömbfázisban, míg a PNIPAAm-*l*-PDMS kotérhálók esetében oldatban, két különböző oldószer használatával valósítottam meg.

A szintézist követően az extrakcióval tisztított kotérhálóknak meghatároztam a gélhányadát, amely minden esetben magas értékeket mutat. Ez a szintézis sikerességét igazolta. A kotérhálók összetételének vizsgálata során tervezett összetételek kiváló egyezést mutatnak a kapott összetétel értékekkel.

A kotérhálók szerkezetét különféle eljárásokkal vizsgáltam. A SAXS és az AFM vizsgálatok alapján a PHEMA-*l*-PDMS és PNIPAAm-*l*-PDMS polimer kotérhálók kofolytonos nanofázis-szeparált szerkezettel rendelkeznek. SAXS mérések alapján megállapított átlagos domén távolság értékek 9-18 nm között találhatók. A duzzadás mérések alapján a két polimer fázis szelektíven duzzasztható apoláris és poláris oldószerben, ami egyértelműen igazolja az előállított kotérhálók amfifil tulajdonságát. Továbbá a hőmérséklet szerinti duzzadás mérés alapján a PNIPAAm-*l*-PDMS kotérhálók növekvő PDMS tartalommal csökkenő zsugorodást mutatnak a hőmérséklet emelésének hatására. A DSC mérések alapján a kotérhálókon belül a PHEMA és PNIPAAm polimerek T_g értékei az olló effektus jelenlétét mutatják. Vizsgáltam továbbá a PNIPAAm-*l*-PDMS kotérhálók T_{cp} értékeit, melyek a PDMS tartalom növekedésével növekednek.

Továbbá sikeresen előállítottam ezüst és arany nanorészecskéket tartalmazó PHEMA-*l*-PDMS kotérhálókat, amelyeket katalizátorként felhasználtam 4-nitrofenol NaBH_4 -gyel történő redukálásában. A reakció mind az AgNR-et mind az AuNR-et tartalmazó kotérhálók esetében egy óra alatt elérte a 100%-os konverziót. Ezáltal kísérletileg igazoltam a fém tartalmú PHEMA-*l*-PDMS minták katalitikus aktivitását.

Összességében, az irodalomban eddig nem közölt, különleges nanoszerkezetű és tulajdonságú, nanokatalizátor hordozónak alkalmas PHEMA-*l*-PDMS és termoreszponzív PNIPAAm-*l*-PDMS amfifil polimer kotérhálók szintézisét és szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek a feltárását valósítottam meg.

Szeretném megköszönni Dr. Iván Bélának, Petróczy Annának, Dr. Szanka Istvánnak, Dr. Wacha Andrásnak és Dr. Varga Zoltánnak, Dr. Yi Thomann-nak és Dr. Ralf Thomann-nak és Nagyné Bereczki Laurának a munkámhoz nyújtott segítségét.

3D nyomtatásra alkalmas berendezés és anyagrendszerek fejlesztése

**Cziráki Bálint^a, Egedy Attila^a, Korim Tamás^b,
Kámán András^a, Fitosné Boros Adrienn^b**

^a*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

^b*Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Anyagmérnöki Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem utca 10.*

Az alkáli aktivált cementek (AAC), közismert nevükön geopolimerek kutatása mára olyan szintre fejlődött, hogy annak gyakorlati felhasználási lehetőségeinek vizsgálata is szükségszerűvé vált. Ennek kapcsán kerül előtérbe az AAC massa alakadásának problémája, egy adott termék végső formájának kialakítása. Erre az egyik legkorszerűbb módszer, a 3D nyomtatás kínál lehetőséget.

Egy olyan 3D nyomtatót terveztem és építettem, amely alkalmas geopolimerek alakadására. A geopolimer 3D nyomtató vázának és hajtásainak elvi működése megegyezik a hagyományos műanyag FDM nyomtatókéval, azonban adagolórendszere egy teljesen új fejlesztési és kutatási terület. A dolgozat egyik fő célja olyan adagolórendszerek fejlesztése, megépítése és tesztelése, amelyek alkalmasak AAC masszák anyagtovábbítására 3D nyomtatási célokra, biztosítva ezzel a rétegenkénti anyaglerakást és a nyomtatási folyamat stabilitását.

További feladat volt olyan AAC összetételek kidolgozása, amelyek kielégítik az alapvető nyomtathatósági feltételeket (kötésidő, folyósság, extrudálhatóság, alakmegtartó képesség). A kísérletek során 5 és 10 mm átmérőjű fúvókákkal dolgoztam, amely egy fontos kritérium ezen anyagok 3D nyomtatásánál, különösen a diszperz fázist (homok, üvegpor) tartalmazó összetételek esetén ütközhetünk korlátokba.

Nyomtatási kísérletek és az ott kapott tapasztalatok alapján, elvégezve a szükséges visszacsatolásokat az alapvető fejlesztési irány a megfelelő anyag-adagolórendszer páros megtalálására fókuszálódott. Többféle adagolórendszert terveztem, ezek közül a vízszintes extrudálás bizonyult a legmegfelelőbbnek, amelyet speciális kevertető-vibráltató rendszerrel láttam el az anyag megfelelő továbbíthatósága érdekében. A jól nyomtatható összetételekből készült próbatesteket szilárdságvizsgálatokkal elemeztem, majd a mikroszerkezet jellemzése céljából pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálatot, továbbá porozitás- és vízfelvételi méréseket végeztem.

Az adagolórendszer evolúciója és az anyagfejlesztés egy párhuzamos folyamat, a munka végső célja egy optimálisan működő, speciálisan AAC-ek alakadására kialakított 3D nyomtató építése, és megfelelő anyagi összetételek meghatározása.

Kulcsszavak: 3D nyomtatás, geopolimer, alkáli aktivált cement, AAC

Katalitikus átalakítások vizsgálata biotenzid oldatokban

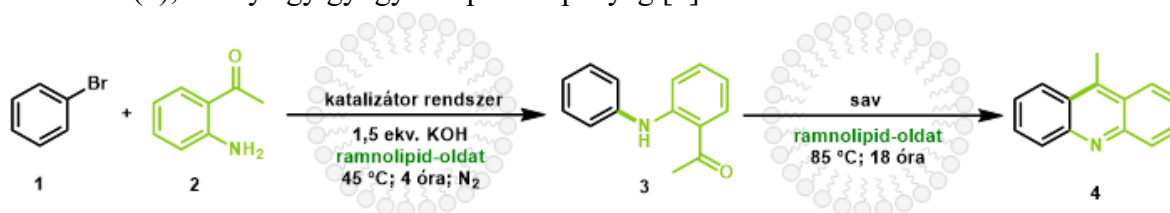
Herczegh Attila Richárd^a, Dr. Novák Zoltán^a

^aEötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar, Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék, 1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A

A legtöbb kémiai reakcióban fontos szerepet tölt be az oldószer, mert biztosítja az átalakulás lejátszódásához szükséges közeget. A nagyméretű, vegyipari átalakítások során gyakran alkalmaznak olyan szerves oldószert, amely a környezetre és az egészségre is ártalmas. Manapság már a vegyipar számára többféle alternatív megoldás is rendelkezésre áll a káros oldószerek kiváltására. Egy ideális választás lehet a tenzidoldatok használata, mert bennük a kritikus micellaképződési koncentráció felett micellák alakulnak ki, amelyek képesek megfelelő közeget biztosítani a reaktánsoknak a reakció lejátszódásához.

A felületaktív anyagok egy csoportját a biotenzidek alkotják, melyek képviselői a kutatás során használt ramnolipidek. Szerkezetüket tekintve a mono- és di- forma szerint, egy vagy két L- α -ramnopiranozil részlet adja a tenzid hidrofíl részét, a β -hidroxidekanoil- β -hidroxidekánsav pedig a molekula hidrofób részét képezi. A biotenzidek mikroorganizmusokkal biokémiai úton állíthatók elő, a ramnolipidek például *Pseudomonas Aeruginosa* baktériumcsalád segítségével szintetizálhatók [1].

Korábbi munkánk során sikeresen végeztünk Suzuki-, Sonogashira- és Buchwald-Hartwig keresztkapcsolási reakciókat. Előállítottunk többféle szerkezetű egyszerű terméket és gyógyszerhatóanyagokat, valamint hatóanyag intermediereket [2]. Kutatómunkám során a ramnolipidek vizes oldatának alkalmazhatóságát vizsgáltam részletesen. A micelláris hatások vizsgálatához egy olyan Buchwald-Hartwig kapcsolási reakciót választottam, amelyet már sikeresen elvégeztek tenzidoldatban [3]. A kísérletek során összehasonlítottam a ramnolipid-oldatban végzett kapcsolási reakciók hatékonyságát különböző tenzidoldatokban és szerves oldószerekben végzett reakciókéval. Ezen kívül vizsgáltam a tenzidoldat töménységének, illetve különböző katalizátoroknak és ligandumoknak a reakcióra gyakorolt hatását is. Végül a leghatékonyabb katalizátor rendszerből törzsoldatot készítettem és vizsgáltam annak eltarthatóságát is. A Buchwald-Hartwig reakcióban 21 különböző szerkezetű diarilamin származékot állítottam elő, továbbá vizsgáltam a termékek gyűrűzárási reakcióját 9-metilakridin előállítására (4), amely egy gyógyszeripari alapanyag [4].



A 9-metilakridin (4) szintézisének egyenlete.

- [1] J. V. Sunita, N. U. Vivek, *Bioresour. Technol.*, **2017** (232), 389-397.
[2] R. Adamik, A. R. Herczegh, I. Varga, Z. May, Z. Novák, *Green Chem.*, **2023** (25), 3462-3468.
[3] J. R. A. Kincaid, B. H. Lipshutz et al., *J. Am. Chem. Soc.*, **2022** (145), 4266-4278.
[4] M. Gensicka-Kowalewska, G. Cholewiński, K. Dzierzbicka, *RSC Adv.*, **2017** (7), 15776-15804.

Köszönöm témavezetőmnek, Dr. Novák Zoltánnak és a kutatócsoport összes tagjának a folyamatos támogatást!

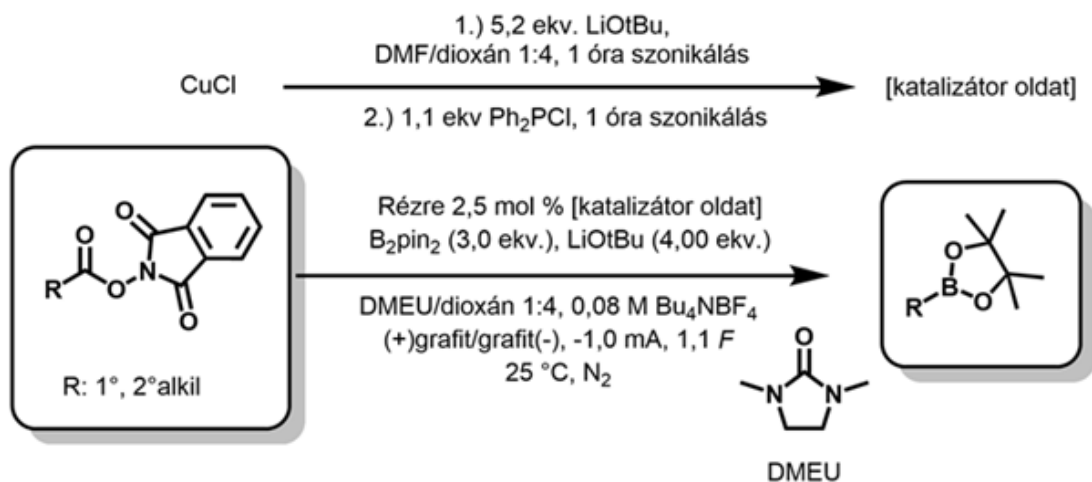
Réz katalizált elektrokémiai borilezés

Kapdos Ádám, Dr. Novák Zoltán

ELTE Hevesy György Kémia Doktori Iskola

A kutatás során sikerült egy olyan reakciót megtervezni és optimalizálni, amellyel primer és szekunder karbonsavak aktív észtereinek dekarboxilezatív borilezése elvégezhető. A kifejlesztett reakció egyenlete az ábrán látható. Az újonnan kifejlesztett szintézisek különlegessége az, hogy a borilezéshez a B_2pin_2 reagenst alkalmazza, így közvetlenül alkil-bórpinakolátok keletkeznek a reakcióban. Ennek köszönhetően nincs szükség drága diborán reagensekre, például B_2cat_2 -re, illetve nincs szükség a reakció után egy külön átészteresítési lépésre.

A funkciós csoportok közül a karbonsavak átalakítására a közelmúltig az irodalomban meglehetősen kevés módszert írtak le. A napjainkban leggyakrabban használt és legmegbízhatóbb aktív észterek az N-hidroxiftálimid, vagy röviden NHPI észterei. Az NHPI észterek kémiai szerkezete az ábrán látható, mint kiindulási anyag. Az NHPI észtereket egy elektronos redukción keresztül lehet reakcióba vinni. Ekkor az észter ftálimidre, szén-dioxidra és alkil-gyökre bomlik el. Az alkilgyökök bórpinakolát észterekké alakítására egy réz-alkoxidból előállított difenilf-foszfinoxid komplexet alkalmaztam katalizátorként. A kutatás során az átalakulás mechanizmusát is megvizsgáltam. A difenilf-foszfinoxid komplex a diborán reagens hozzáadása során előbb rézzé, majd nyomnyi oxigén és más oxidálószer hatására réz(I)-oxid nanorészecskékké alakul. A bórpinakolátok a mechanizmusvizsgálat alapján valószínűleg a réz(I)-oxidra adszorbeált boril specieszeken és alkil gyökökön keresztül keletkeznek. Az előadás során bemutatom a kutatás legalapvetőbb mérőföldköveit, a kifejlesztett reakciót és a reakció mechanizmusával kapcsolatos vizsgálatokat, eredményeket.



Tuning the Conformational Properties of Dithienylbenzene Photoswitches for Solid-State Applications

Németh Dávid Dorián^a, London Gábor^b

^a*Servier Kutatóintézet Zrt., 1031 Budapest Záhony utca 7.*

^b*HUN-REN TTK, 1117 Budapest Magyar Tudósok Körútja 2.*

Dithienylbenzenes are promising candidates for molecular electronic uses, however they often crystallize in a photoinactive conformation, which prohibits their successful application.

Because of this, I started my research with a virtual screening, where I calculated the three main conformers of 21 differently substituted dithienylbenzenes. However I found that the energy differences and barriers between the photoactive and photoinactive conformers are usually really small, which suggests that the solid state structure will mostly depend on the crystallization process.

Therefore I synthesized two photoswitches that can later be integrated into various solid phases. These compounds are expected to form a ring through an electrocyclization reaction if irradiated with UV light, and go back to the open form rapidly, when the irradiation stops (Figure 38).

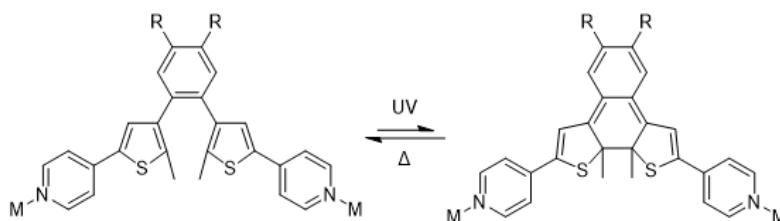


Figure 38. Predicted reactivity of the compounds to be synthesized.

For photoswitch 1 R = H, for photoswitch 2 R = OMe.

The M can be a methyl group (methylated derivative) or a metal ion (MOF (Zn), organometallic complex (Pd)).

I investigated the photoswitching properties of compound 1 and 2 in solution with UV-Vis spectroscopy. I found that for photoswitch 1, the reversible photoreaction can be measured at lower temperatures (-70 °C), but at room temperature the thermal cycloreversion is too fast to see the closed-ring form. On the other hand photoswitch 2 is capable of a reversible photoreaction even at room temperature, with a cycloreversion as fast as a few seconds.

To investigate the solid-state structure and properties, I crystallized these photoswitches and found that photoswitch 2 crystallized in the photoactive conformation, however photoswitch 1 turned out to be in a parallel, photoinactive conformation. To solve this I tried methylation, and integration into a MOF, but in both cases I got a different, but photoinactive crystal. However in the case of the methylated derivative the structure is probably directed by the anion, which I successfully exchanged, and an organometallic crystal is also on the way, so I hope I will be able to get photoactive solid materials from one of these and I can provide a method, that will help with the conformational tuning of other dithienylbenzenes as well.

Nívódíjas előadások szekciója II.

2-formilpiridin-guanilhidrazon származékok és fémkomplexeik oldategyensúlyi és redoxi tulajdonságai: a morfolin és piperazin szubsztitúció hatása

Gátszegi Gerda Tímea, Enyedy Éva Anna

Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék

Számos tioszemikarbazon-származékot és azok fémkomplexeit széles körben tanulmányozták antimikrobiális, vírusellenes és daganatellenes hatásuk miatt [1]. Mind a koordináló donorkészlet, mind a szubsztituensek erősen befolyásolják a fémkomplexek stabilitását és farmakológiai hatását [2]. Az aminoguanidinből származó guanilhidrazon-típusú Schiff-bázisokat is széles körben vizsgálják szerkezeti sokoldalúságuk miatt [3]. A háromfogú 2-formilpiridin-guanilhidrazonok az α -N-piridil tioszemikarbazonok analógjainak tekinthetők, ahol a tioamid egységet a guanidincsoport helyettesíti. A tioszemikarbazonokkal szemben, azonban ilyen (N,N,N) donorkészletet tartalmazó származékok oldategyensúlyi vizsgálata a szakirodalomban meglehetősen hiányos.

Diplomamunkám során különböző 2-formilpiridin-guanilhidrazon Schiff-bázis-származékokat, valamint réz(II)- és vas(II/III)komplexeiket vizsgáltuk. A tioamid iminocsoporttal ($C=S \rightarrow C=NH$) történő helyettesítése mellett vizsgáltuk amin, morfolin, és piperazin szubsztituensek hatását is a ligandumok proton disszociációs állandóira és a képződő komplexek stabilitási szorzataira. Oldategyensúlyi és redoxi tulajdonságaik jellemzése céljából pH-potenciometriás, UV-látható spektrofotometriás, ciklikus voltammetriás és spektroelektrokémiai méréseket végeztünk. Továbbá a réz(II)komplexek fiziológiás redukálószerekkel való közvetlen reakcióját UV-látható spektrofotometriás módszerrel követtük.

Megállapítottuk, hogy a fiziológiás pH-n semleges analóg tioszemikarbazonokkal szemben ezek a ligandumok túlnyomórészt pozitív töltésűek, és a számolt képződési állandóik alapján mind a réz(II)-, mind a vas(II/III)ionokkal kisebb stabilitású komplexeket képeznek. A kelátképző helyzetben lévő morfolin- és piperazin-nitrogénnel létrejövő négyfogú koordináció sem növelte meg számottevően a komplexek stabilitását. A vizsgált humán rákos sejtekkel szemben (Colo205, Colo320, MCF7) sem a ligandumok, sem a rézkomplexeik nem bizonyultak citotoxikusnak. Összefoglalva, a tioamid-kén iminocsoportra történő cseréje kisebb stabilitású fémkomplexeiket és gyengébb rákellenes hatású vegyületeket eredményezett.

[1] V. Singh, et al., *Polyhedron* **2023** (245), 116658.

[2] V. Pósa, et al., *J. Inorg. Biochem.* **2022** (231), 1111786.

[3] O. Dömötör; et al., *Molecules* **2022** (27), 2044.

Szeretném köszönetemet kifejezni együttműködő partnereinknek: Vladimir B. Arion (ligandumok szintézise), Spengler Gabriella (biológiai mérések) és May Nóra (ESR mérések). A kutatói munka a Kulturális és Innovációs Minisztérium Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült (EKÖP-24-2-SZTE-444).

Grafén-oxiddal módosított szeparátor előállítás és hatása a lítium-kén akkumulátorokban zajló poliszulfid vándorlás jelenségére és az akkumulátorok ciklusélettartamára

Schmidt Máté

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Az újgenerációs Li-ion akkumulátorok közül a Li-S (lítium-kén-LSB) akkumulátor ígéretes technológiának mutatkozik, mivel a pozitív elektród aktív komponenseként felhasznált elemi kén, közel tízszer magasabb fajlagos kapacitással rendelkezik, összehasonlítva a ma használatos interkalációs-típusú átmenetifém-ion alapú elektród anyagokéhoz képest. A Li-S akkumulátorok elterjedésének gátat szab az egyelőre gyengébb ciklusélettartam, mely leginkább a kén elektród elektrokémiai ciklizálása során keletkező kisütési közttermékek, azaz a lítium-poliszulfidok oldódása és azok katódtérből történő elvándorlása okozza. Ennek a jelenségnek következménye, hogy a képződő lítium-poliszulfidok koncentráció gradiens révén, diffúzióval átjutnak az anódtérbe, majd ott reagálva a fém lítium anóddal csökkentik a galvánelella hatékonyságát, végső soron a cella működésképtelenségét eredményezik.

A poliszulfid vándorlás megakadályozása kulcsfontosságú a LSB-k jövőjével kapcsolatban. Nem véletlen, hogy számos kutatás foglalkozik a jelenség visszaszorításával különböző módokon. Alapvetően 4 fő stratégia irányt különböztethetünk meg, amelyből a diplomamunkám során kutatott irány a lítium-poliszulfidok vándorlási csatornák blokkolása funkcionális szeparátorral. A diplomamunkám keretein belül LSB akkumulátorok szeparátoraként elterjedten alkalmazott Celgard 2500 típusú mikro pórusos polipropilén membrán felületét módosítottam grafén-oxid (GO) funkciós réteggel. A GO lítium-kén akkumulátorokban történő alkalmazása bizonyítottan több szempontból is előnyös; fizikai korlátot képez a LiPS számára, kémiaileg képes megkötni a poliszulfidokat Lewis féle sav-bázis elmélet alapján és jól kombinálható más funkcionális anyagokkal. A grafén-oxidon megtalálható -OH csoportokat, legyen az önálló vagy karboxil, és a hidegplazmával kezelt PP felületén a kezelés hatására kialakult oxigén tartalmú csoportokat, többek között -OH csoportokat felhasználva alakítottam ki a funkciós réteget. A kialakításhoz hexametilén-diizocianátot (HDI), és katalizátorként trietil-amint (TEA) alkalmaztam. A HDI mind a két oldalán megtalálható a -N=C=O izocianát csoport, így létrejöhet a diizocianát egyik végén a GO hidroxil csoportjával kialakított uretán csoport, másik végén pedig a PP felületén kialakított hidroxil csoportjával a másik uretán csoport, így biztosított a kötés a szeparátor és a funkciós réteg között.

Diplomamunkám során sikerült a Celgard 2500 típusú polipropilén felületére úgy funkciós (GO) réteget létrehozni, hogy nem alkalmaztam fém vagy fémkomplex tartalmú plusz funkciós anyagot, többlépéses szintézist vagy PVDF-et „ragasztóként”. A membrán plazmakezelése után HDI, TEA (katalizátorként) segítségével a felületre kötött GO réteg fontos szerepet játszik. A mérések alapján a Li-S akkumulátorok ciklikus stabilitása javult, valamint a funkciós rétegnek köszönhetően lassult a kapacitásvesztés a poliszulfid vándorláseffektus mérséklése által.

Szeretnék köszönetet nyilvánítani témavezetőmnek, Dr. Kun Róbertnek, a HUN-REN Magyar Kutatási Hálózat Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet, Megújuló Energia Kutatócsoport főmunkatársának, hogy szakértelmével és útmutatásával segítette kutatásomat a diplomamunkám megírása folyamán. Valamint szeretnék köszönetet nyilvánítani a HUN-REN TTK munkatársainak, akik közreműködtek a kutatásom során.

Agyagásvány alapú adszorbensek fejlesztése nanoműanyagok kivonására

Terjéki Gergő

SZTE TTIK, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék

A műanyagok nagyüzemi termelése és az ebből származó hulladékok lebomlása miatt rövid idő alatt, nagy mennyiségű, nanoméretű műanyagrészeszecske keletkezett. A nanoműanyagok manapság már mindenhol megtalálhatók a világon. Kis méretüknél fogva ezek a részecskék gyorsan terjednek, és eloszlanak a természetes rendszerekben. Így például az élővizekbe, talajba, sőt még az élő szervezetekbe is bekerülnek a tápláléklánc és a szennyezett környezet révén. Mivel a szennyezés mértéke az idővel nagymértékben növekszik, eltávolításuk az ökoszisztémából kulcsfontosságúvá vált.

Ebben a kutatásban szulfátcsoportokkal módosított felületű, polisztirol nanorészecskéket (SL) használtunk vizes rendszerek kármentesítésének modellezésére. Az alapkoncepció az volt, hogy ezen részecskéket réteges kettős hidroxidok (LDH) segítségével vonjuk ki a vizekből. A különböző LDH-k számos, kedvező, fizikai-kémiai tulajdonsággal rendelkeznek, melyek közül a legfontosabbak a nagy fajlagos felület és a könnyű előállíthatóság. A kísérletekben az LDH-kat Mg(II)- és Al(III)-sókból állítottuk elő, koprecipitációs módszert alkalmazva. Pozitív felületi töltésük lehetőséget biztosított a negatív töltésű SL részecskék megkötésére elektrosztatikus kölcsönhatásokkal. A vizes minták kármentesítését in situ koprecipitációval, illetve az LDH-kon történő adszorpcióval végeztük el. Az így kapott rendszereket fényszórásos technikával jellemeztük kolloid tulajdonságaik, azaz hidrodinamikai méretük és felületi töltésük tekintetében. A szerkezeti és morfológiai vizsgálatokhoz transzmissziós elektronmikroszkópiát (TEM), röntgendiffraktometriát (XRD) és Raman spektroszkópiát használtunk.

Az SL részecskék LDH-kon történő megkötődését dinamikus fényszórás mérésekkel kvantitatív módon jellemeztük. Az eredmények megerősítették, hogy a polisztirol részecskék sikeresen eltávolíthatók a vizes közegből mindkettő módszer esetében. A kolloid rendszerekben végzett felületi töltésvizsgálat kimutatta, hogy az SL részecskék adszorpciója az LDH-k töltésemlegesítéséhez, majd áttöltéséhez vezet, ami jelentős affinitást jelez ezen agyagásványokhoz. A szerkezeti vizsgálatok kimutatták mind az SL, mind az LDH-k jelenlétét a kialakult kompozitokban. Összességében tehát megállapítható, hogy az LDH-k potenciális megoldást kínálnak a nanoműanyagok eltávolítására vizes közegű, természetes rendszerekből.

Köszönetemet fejezném ki Szilágyi Istvánnak, a Biokolloidok Kutatócsoport vezetőjének, aki nélkül jelen előadás nem jöhetett volna létre. Továbbá köszönetet mondanék Dr. Varga Gábornak és Varga Viktóriának is az anyagtudományi mérésekkel kapcsolatos segítségükért.

A xantin xantin-oxidáz reakció vizsgálata

Tóth Klaudia^a, Lihi Norbert^b

^{a,b}Debreceni Egyetem, TTK, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

Az aerob élőlények szervezetében a molekuláris oxigénből különböző metabolikus folyamatok során reaktív oxigén részecskék (ROS) keletkezhetnek, mint a szuperoxid gyökanion ($O_2^{\cdot-}$), amelyek oxidatív stressz kialakulásához vezethetnek.¹ Az antioxidáns védekezés kulcsszereplői a szuperoxid-dizmutáz (SOD) enzimek és azok mesterséges mimetikumai, melyek a szuperoxid gyökanion diszmutációját katalizálják. A SOD aktivitás vizsgálatának egyik elterjedt indirekt módszere a McCord–Fridovich-féle xantin/xantin-oxidáz/NBT rendszer, amelyben a keletkező szuperoxid mennyisége nitrokék-tetrazólium (NBT) redukciójával követhető.² Mivel a reakció sebessége és a szuperoxid-képződés mértéke jelentősen függ az oldott oxigén koncentrációjától, célkitűzésem a xantin/xantin-oxidáz rendszer oxigénkoncentráció-függő kinetikájának vizsgálata volt. A kísérletek során a Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének Redoxi Reakciómechanizmusok Kutatócsoportjában újonnan bevezetett Unisense mikroszenzort alkalmaztam az oldott oxigén koncentrációjának direkt mérésére. A mérési eredmények hozzájárulnak a xantin/xantin-oxidáz rendszer reakciómechanizmusának pontosabb megértéséhez, valamint alapot szolgáltatnak a SOD mimetikumok aktivitásának megbízhatóbb értékeléséhez oxigénkoncentráció-függő körülmények között.

[1] M. Kikusato, M. Toyomizu, *J. Physiol. Sci.*, **2015** (65), 555–559.

[2] D. Bonczidai-Kelemen, K. Tóth, I. Fábián, N. Lihi, *Dalton Trans.*, **2024** (53), 1648–1656.

Köszönöm témavezetőmnek, Dr. Lihi Norbertnek, valamint a Debreceni Egyetem Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszékének Redoxi Reakciómechanizmusok Kutatócsoportja tagjainak a szakmai támogatást, az útmutatást és a segítséget a kutatómunka során.

Szerves és Analitikai kémia I. szekció /
Organic and Analytical chemistry session I

Homok, mint heterogén katalizátor a poli(etilén-tereftalát) gazdaságos depolimerizációjában

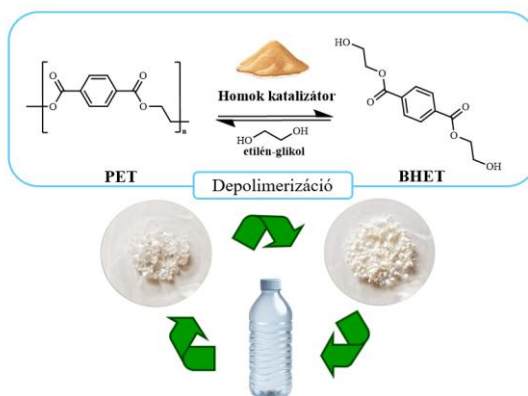
Ráduly Amália^a, Kupai József^a

^aBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A poli(etilén-tereftalát) (PET) a legelterjedtebb biológiailag nem lebomló műanyag, amely jelentős mértékben halmozódik fel hulladékként a környezetben. Ezért rendkívül fontos a PET hulladék újrahasznosítása, amellyel csökkenthetjük a környezetre gyakorolt káros hatásokat, és megőrizzük a nem megújuló energiaforrásokat. A kutatási munkám során hulladék PET-palack őrlemény bisz(2-hidroxietil)-tereftalát (BHET) monomerré történő depolimerizációját valósítottam meg (1. ábra).

A PET glikolízisben alkalmazott, irodalomban ismert katalizátorok sok esetben drágák, bomlékonyak, valamint környezetszennyezőek. Céлом egy olcsó, stabil és környezetbarát katalizátor alkalmazása volt a PET lebontására. Egy természetes alapú, heterogén katalizátort, a homokot felhasználva vittem véghez a reakciót. A világ 14 különböző pontjáról származó homokmintát vizsgáltam, és hasonlítottam össze katalitikus aktivitásuk alapján. Tanulmányoztam milyen hatást gyakorol a katalizátor kémiai összetétele, szemcsemérete illetve szemcse alakja a reakció hatékonyságára. Több szempont figyelembevételével választottam ki a legalkalmasabb katalizátort, mérlegelve a BHET termelés mértékét, a homok rendelkezésre állását, valamint kémiai és fizikai tulajdonságait.

A kiválasztott legjobb homokot 3 ciklusban visszaforgattam, átlagosan 91%-os termelést elérve. Kémiai úton előállítottam PET port a hulladékörleményből, amellyel a depolimerizáció reakcióidejét sikerült a felére csökkenteni, így két óra elegendőnek bizonyult a teljes mennyiség lebontásához.



1. ábra: A PET kémiai lebontása homok katalizátorral

Köszönjük az OTKA (FK138037), a Nemzeti Labor Program (PharmaLab, RRF-2.3.1-21-2022-00015) és a Varga József Alapítvány posztdoktori ösztöndíj pályázatának anyagi támogatását.

Digitális ikerpár a gyógyszeripari fluid granulálásban: tudomány- és mesterséges intelligencia-alapú modellezési módszerek összehasonlítása

Takács Orsolya^a, Dr. Nagy Brigitta^a

^a*Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.*

Az Ipar 4.0-hoz kapcsolódó digitalizációs törekvések a gyógyszeriparban egyre jelentősebb szerepet töltenek be. Ezek kiegészítik és támogatják a Tervezett minőség (QbD) elvét, amely szerint a termékminőséget a fejlesztési és gyártási fázisok során szükséges integrálni a folyamatokba. A fluid granulálás a szilárd gyógyszerformák gyártásának egyik kulcslépése, amely alapvetően befolyásolja a tabletták stabilitását és a hatóanyagtartalom egységességét. A folyamat monitorozására a modellezés ígéretes módszer lehet, amely megvalósítható empirikus és mechanisztikus megközelítéssel is. Ez alapot teremt soft szenzorok fejlesztéséhez, amelyek könnyen mérhető jellemzőkből tudnak becslést adni kritikus, ám nehezen mérhető folyamatparaméterekre, továbbá támogatja a digitális ikerpárok létrehozását is. Ezáltal a modellezés elősegíti a kritikus folyamatparaméterek azonosítását, valamint a folyamat optimalizálását és szabályozását [1].

Munkám célja a fluid granulálás modellezése során a két különböző modellezési megközelítés összehasonlítása, valamint digitális ikerpárként való alkalmazhatóságuk vizsgálata. A modellek építéséhez ipari méretű fluid granulálás gyártási tételeinek szenzoradatait használtam. Empirikus megközelítésként mesterséges neurális hálózatot (ANN) fejlesztettem a granulátum nedvességtartalmának követésére, amely kiegészíthet, vagy helyettesíthet drága analitikai módszereket, például a közeli infravörös spektroszkópiát (NIR). A hő- és anyagmérlegeken alapuló mechanisztikus modell a granulátum hőmérsékletére és nedvességtartalmára, valamint a kilépő levegő ugyanezen tulajdonságaira ad becslést, amely különösen fontos hőérzékeny hatóanyagok feldolgozása során.

A becsült termékjellemzők mindkét modell esetében jól illeszkedtek a mért értékekre. A mechanisztikus modell a granulátum hőmérsékletének és nedvességtartalmának alakulását a várt dinamikával összhangban szimulálta. Az ANN alapú modell esetében a tanító és a validáló halmaz eredményei azt mutatták, hogy a modell nem csak a tanító adatokra illeszkedik jól, hanem új adatkészlettel is megbízhatóan működik. Az eredmények alátámasztják, hogy a modellezés hatékony eszközként szolgálhat a folyamatparaméterek optimalizálásában.

[1] P. Záhonyi, D. Fekete, E. Szabó, Z.K. Nagy, B. Nagy.: *Eur.J.Pharm.Sci.*, **2025** (212), 107173.

A kutatás a Kulturális és Innovációs Minisztérium EKÖP-25-4-II-BME-239 kódszámú Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Planáris felületre immobilizált ligandumok felületi borítottságának nagy áteresztőképességű meghatározása egy lépéses, jelölésmentes SPRi módszerrel

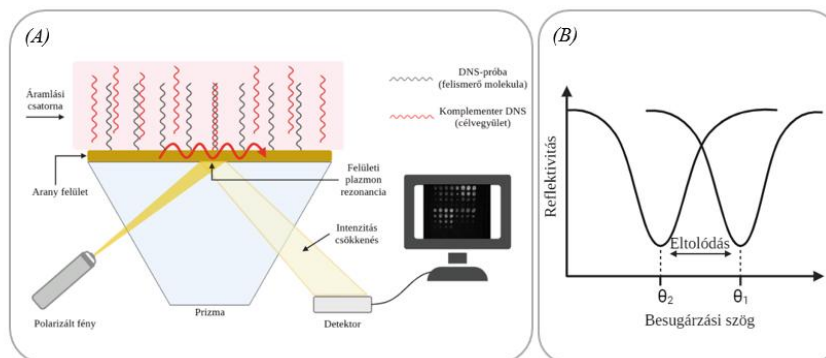
Katona Henrietta^a, Dr. Simon László Ferenc^a

^aBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 1.

Az orvosdiagnosztikai szenzorok fejlesztése napjaink egyik legdinamikusabban fejlődő kutatási területe, hiszen a betegségek korai és megbízható felismerésére egyre nagyobb társadalmi igény mutatkozik. A diagnosztikában alkalmazott célvegyületek pontos minőségi és mennyiségi meghatározása a szenzorok hatékonyságának kulcsa. A felismerő molekulák és a célvegyületek közötti biomolekuláris kölcsönhatások átfogó vizsgálata a fejlesztési fázis során azonban elengedhetetlen a kimutatási határ csökkentése és a szelektivitás növelése érdekében.

A biomolekuláris kölcsönhatásvizsgálatok egyik leghatékonyabb, jelölésmentes technikája a felületi plazmon rezonancia (SPR), amely valós időben képes detektálni az evanescens térben bekövetkező törésmutató-változásokat, de egyidejűleg csak egyféle kölcsönhatás vizsgálható vele. A képalkotó felületi plazmon rezonanciás (SPRi) módszer az SPR továbbfejlesztett, nagy áteresztőképességű (HTS) változata, amely valós idejű képet is mutat a felületről. A HTS eléréséhez szükséges offline mikrocseppentéses immobilizálási eljárás következtében azonban elvesznek a felületi borítottságra vonatkozó információk, amelyek ismerete nélkülözhetetlen a kölcsönhatások megbízható kiértékeléséhez és a kinetikai paraméterek meghatározásához. Ez a tényező hozzájárulhatott az SPRi ipari alkalmazásának háttérbe szorulásához.

Kutatómunkám célja a megfogalmazott hiányosság kiküszöbölése. Az általam bevezetett módszer lényege, hogy az SPRi mérés során, a felismerő folton rögzített rezonanciagörbe a felületi borítottság növekedésével arányosan tolódik el a referencia felületen mért értékhez képest, így a megfelelő lineáris összefüggés ismeretében kvantitatíve határozható meg a felületi borítottság. Sikeresen fejlesztettem módszert fehérjék felületi borítottságának meghatározására, amelyhez egy arányossági tényezőt vezettem be. Jelenleg a módszer nukleinsavakra történő adaptálásán dolgozom, amely több szakmai kihívást is rejt. Nukleinsavak felületi borítottságának meghatározására már létező módszer segítségével szeretném validálni a módszeremet [1]. A jövőben ezen ismereteimet szeretném hasznosítani sejtek planáris felületre történő immobilizálásának optimalizálásához, ami a betegségek patobiokémiai megértésében és az orvosdiagnosztika fejlődésében egyaránt új perspektívákat nyithat.



1. ábra. (A) – A képalkotó felületi plazmon rezonanciás módszer működési elve. (B) – Rezonanciaszög eltolódása molekuláris kölcsönhatás kialakulása során.

[1] L. Simon, R. E. Gyurcsányi, *Anal Chim Acta*, **2019** (1047), 131–138.

LiCl átalakítása LiOH-dá trikalcium-alumináttal

Török Péter^a, Kutus Bence^a

^a *Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged, Dóm tér 7-8.*

Az elmúlt évtizedben a lítium-hidroxid-monohidrát ($\text{LiOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$) prekursoraként egyre nagyobb szerepet játszik a lítiumion-akkumulátorok, ezen belül az ún. NMC-katódok előállításában [1]. A LiOH előállításának egyik legfontosabb kiindulási anyaga a felszíni és felszín alatti vizekben található LiCl, ami a világ teljes lítiumkészletének kb. kétharmadát teszi ki [2]. A jelenlegi szintézismódszer a Li_2CO_3 lecsapásán és $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -dal történő hidroxiddá alakításán alapszik. Mivel az utolsó lépés tömény szuszpenziók esetén ($> 10 \text{ g L}^{-1} \text{ Li}^+$) alacsony konverzióval megy végbe, fontos kutatási iránnyá vált a LiOH Li_2CO_3 köztitermék kihagyásával történő szintézise. E célból munkánk során a LiCl, CaO és trikalcium-aluminát ($\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$) reakcióját vizsgáltuk, mely során egy lépésben LiOH képződik, kloridion-tartalmú réteges kettős hidroxid (Friedel-só) $[\text{Ca}_2(\text{Al}(\text{OH})_6)_2\text{Cl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}]$ [3] kiválása mellett.

A reakciók kivitelezése során a kiindulási Li^+ koncentráció 5 g L^{-1} és 10 g L^{-1} volt, a hőmérséklet $5\text{--}75 \text{ }^\circ\text{C}$ között változott, míg a $\text{LiCl}:\text{CaO}:\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ molaránya 2:1:1 volt. A reakcióidő 1 órától 1 hétre való növelése során megfigyeltük, hogy a konverzió 51%-ról 66%-ra (5 g L^{-1}), illetve 57%-ról 74%-ra (10 g L^{-1}) nőtt. A konverzió időbeli változása mindkét esetben telítési jelleget mutatott, ami alapján a vizsgált reakció egyensúlyi. 2 óra reakcióidő után a hőmérséklet változtatásával a konverziók alakulása az alábbi (10 g L^{-1}): 40% ($5 \text{ }^\circ\text{C}$), 65% ($25 \text{ }^\circ\text{C}$), 66% ($50 \text{ }^\circ\text{C}$) és 57% ($75 \text{ }^\circ\text{C}$). A szilárd anyagok porröntgen-diffraktometriás vizsgálata kimutatta, hogy a reakció során keletkező fő termék a Friedel-só, míg kisebb mennyiségben megjelentek az el nem reagált $\text{Ca}(\text{OH})_2$ -ra jellemző diffrakciós csúcsok is.

Összességében elmondható, hogy a töményebb LiCl-oldatok átalakíthatók LiOH-dá egy lépésben elfogadható konverzióval, szobahőmérsékleten. További terveink közé tartozik alacsonyabb, illetve magasabb kiindulási Li^+ koncentráció alkalmazása mellett a Mg^{2+} ionok hatásának vizsgálata is, ami gyakran csökkenti a leválasztásos módszerek hatékonyságát [2].

Kulcsszavak: lítium-klorid, lítium-hidroxid, Friedel-só, trikalcium-aluminát

[1] H. Liu, G. Azimi: *Resour. Conserv. Recycl.*, **2022** (179), 106115.

[2] P. Meshram, B. D. Pandey, *Hydromet.*, **2014** (150), 192–208.

[3] E. Kása, Y. Szabó, et al., *Cem. Concr. Res.*, **2024** (177), 107414.

Fizikai kémia I. szekció / Physical chemistry session I

Egy- és kétértű ionok arányának hatása kőolajiparban alkalmazott polimerek fizikai-kémiai jellemzőire

Garas Lilla^a, Vargáné Árok Zsófia^a, Szilágyi István^a

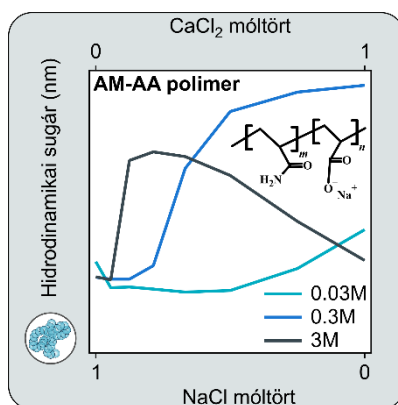
^aMTA-SZTE Lendület Biokolloidok Kutatócsoport, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Szeged, Rerrich B. tér.1.

A szintetikus polimerek fontos szerepet töltenek be a kőolaj-kitermelés és számos egyéb ipari területen. A hagyományos művelési technikák alkalmazását követően, a kőzetrétegek pórusaiban rekedt kőolaj kinyerésére a növelt hatékonyságú kőolaj kinyerési technikák (EOR) alkalmasak. Széles körben alkalmazott ezek közül a polimeres elárasztás („polymer flooding”). A vízdoldható poliakrilamid alapvázak vegyületek hozzáadása növeli az árasztóvíz viszkozitását, így segíti az olajkitermelést [1]. Az ilyen makromolekulák oldatbeli viselkedését nagymértékben befolyásolják a kőolajtárolók egyedi jellemzői, mint a kőzet minősége, a réteghőmérséklet, vagy a mezőn hozzáférhető természetes rétegvizek sótartalma, és az oldott elektrolitok kémiai minősége [2].

Kutatásunk célja a különböző szerkezetű akrilamid-alapú polimerek — AM-AA, AM-AMPS, valamint AM-AA-AMPS kopolimerek — fizikai-kémiai tulajdonságainak vizsgálata eltérő ionösszetételű elektrolitoldatokban. A makromolekulákat NaCl-CaCl₂ oldatban vizsgáltuk három különböző ionerősségen (3M, 0.3M, 0.03M), ezen belül a mintasorozatokban az egyes ionok molarányát változtattuk. További mérések készültek NaCl-KCl és CaCl₂-MgCl₂ rendszerekben a kationok specifikus hatásának vizsgálata érdekében.

A kísérletek során zéta potenciált, hidrodinamikai sugarat és dinamikai viszkozitást határoztunk meg. A növekvő ionerősség és a kétértékű kationok jelenléte csökkentette a ζ-potenciál abszolút értékét. Ezzel párhuzamosan az oldatokban viszkozitáscsökkenés történt, különösen a Ca²⁺- és Mg²⁺-tartalmú rendszerekben. Az egyértékű ionok esetében a viszkozitás nem változik jelentősen, azaz nem függ az egyértékű sók koncentrációjától.

Az eredmények alapján az egy- és kétértékű ionok arányának módosítása az ionerősségtől függően eltérő hatást gyakorol a polimer fizikai-kémiai tulajdonságaira, és ezek a változások szoros összefüggésben állnak a polimer szerkezetével.



[1] E. David, S. R. McDougall, E.J. Mackay, P. Ogbeiwi: *Journal of Applied Polymer Science* **2025** 57189-57206

[2] Zs. Árok, Sz. Sáringer, G. Papp, Á. Juhász, S. Puskás, I. Szilágyi: *ASC Publications*, **2024** 6798–6805

A kutatás az NKFIH GINOP-2.3.4-15-2020-00006, valamint SNN142258 azonosítószámú projekteinek támogatásával valósult meg.

Háromdimenziós tiolmintázat képződésének modellezése kétcSATORNÁS gélreaktorban

Vigh Péter Ferenc^a, Tóth Ágota^a, Horváth Dezső^b

^aSZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^bSZTE Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Az autokatalitikus reakció és transzportfolyamatok kölcsönhatásaként létrejövő kémiai hullámok jelentős szerepet játszanak az élő szervezetek szabályozott viselkedésében és fejlődésében, például a sejtműködésben vagy a szívverésekben.

Munkám során egy, a biológiai rendszerekben is releváns tiol-alapú hálózatban vizsgáltam a hullámok kialakulását és jellemeztem viselkedésüket. A hét komponensből és nyolc lépésből álló reakcióhálózatban az alkalmazott tiuronium-só átalakulásakor tiolok autokatalitikusan termelődnek. A tiolok elvonásáért két inhibíciós folyamat felelős: A maleimid egy gyors reakcióban, míg az akrilamid egy három nagyságrenddel lassabb reakcióban távolítja el a pozitív visszacsatolás révén keletkező tiolokat. A reakciót jól kevert tankreaktorban végrehajtva oszcilláció léphet fel [1], míg kétcSATORNÁS gélreaktorban a csatornák közti térben tiolhullámok fellépését tapasztalták [2].

Ezen jelenségek megértése érdekében modelleztem a mintázatképződést a kísérleteknek megfelelő kétcSATORNÁS gélreaktorban. E projekt keretében a már rendelkezésre álló forráskódot bővítettem ki a három térbeli modellezésre, melynek fő célja a betáplálási csatorna körüli görbület hatásának vizsgálata volt. A kémiai összetétel, a betáplálási sebesség és a csatorna, valamint a reaktor geometria változtatásával térképeztük fel az előálló mintázatokat.

A korábbi két térbeli dimenzióban történt futtatásoknak megfelelő paraméterekkel végezve a számításokat jelentős eltéréseket tapasztaltam. A görbület figyelembe vétele jelentősebb diffúziót eredményezett, melynek következtében a reaktoron végighaladó hullám helyett térben stacionárius állapot alakult ki. Az injektálási sebesség változtatása nem befolyásolta a mintázatokat. Az inhibítorok mennyiségének változtatásával sikerült nemcsak periodikusan pulzáló hullámokat, hanem különleges viselkedést mutató mintázatot is létrehozni. A gyors inhibitor jelentős emelése során azt tapasztaltuk, hogy minden hetedik hullám a reaktor végéhez érve visszafordult és kioltotta az utána következőt.

Eredményeink jól szemléltetik a reaktánsok koncentrációjának és az injektálási sebességnek a mintázatképződésre gyakorolt hatását, ami tovább segíti a komplex dinamikus rendszerek megértését és újabbak tervezését.

[1] A. I. Novichkov, A. I. Hanopolskyi, X. Miao, L. J. W. Shimon, Y. Diskin-Posner, S. N. Semenov: Nat. Commun., **2021** (12), 2994.

[2] A. Paikar, X. Li, L. Avram, B. Smith, I. Sütő, D. Horváth, E. Rennert, Y. Qiu, Á. Tóth, S. Vaikuntanathan, S. N. Semenov: Science, **2025** (16), 659-669.

Lyuktranszport tulajdonságok és töltéshordozó dinamika karbazol alapú molekulák és CsPbBr₃ nanokristályok között

**Hajdu Cintia^a, Manish Mukherjee^b, Szabó Gábor^b, Janáky Csaba^a, Gergely F. Samu^c
Prashant V. Kamat^b**

^aSzegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1..

^bUniversity of Notre Dame, Radiation Laboratory, 102 Radiation Research Building, Notre Dame, Indiana 46556

^cSzegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Dóm tér 7-8.

Az ABX₃ típusú fém-halogenid perovszkit napelemekkel kapcsolatos kutatások kiemelt érdeklődésre tettek szert a 2010-es évek óta. A kutatások kezdetben a perovszkit kristályszerkezetű vegyületek előállítását és a környezeti stabilitásuk javítását helyezte előtérbe, így növelve a napelemek teljesítményét. Jelenleg ezen eszközök stabilitását azonban a töltéshordozók (elektronok, lyukak) határfelületi felhalmozódása nagyban befolyásolja. A megfelelő elektron- és lyukvezető rétegek nélkül ezen optoelektronikai eszközök fényelnyelő rétege gyorsan degradálódik, ezáltal korlátozva a technológia elterjedését [1].

Az elmúlt időszakban a figyelem önszerveződő monoréteg képzésére alkalmas karbazol-származékokkal kialakított napelemekre irányult melyek kiemelkedő hatékonysággal (~25%) és hosszú távú stabilitással rendelkeznek. A lyukvezető réteggént használt dipólus molekulákat fordított (p-i-n) perovszkit napelem elrendezésekben alkalmazzák, azonban működési mechanizmusuk továbbra is sok kérdést vet fel. Egyes esetekben lyukvezetésre alkalmas anyagként írják le őket, bizonyos publikációkban a rácshibák passziválását emelik ki, mint a hatékonyság javulásáért felelős hatás. Az eddigi sikerek hatására folyamatosan jelennek meg az újabb karbazol alapú molekulák [2].

Munkánk során két gyakran alkalmazott karbazol-származék (2PACz és MeO-2PACz) oldatfázisbeli kölcsönhatását vizsgáltuk CsPbBr₃ nanokristályokkal. Elektrokémiai differenciál pulzus voltammetria segítségével meghatároztuk az egyes anyagok energiaszintjeit, melyek elengedhetetlenek a nanokristályok és a karbazolszármazékok közötti töltésátvitel folyamatok mechanizmusának termodinamikai képének megteremtéséhez. Továbbá a CsPbBr₃ nanokristályok fényemissziós sajátságainak megváltozásából (statikus fotolumineszcencia (FL) spektrumok kioltása, időbontott FL lecsengési görbék) következtettünk a töltésátvitel kinetikájára. A lyukvezetés sebességi együtthatóját (k_{ht}) a két karbazol-származék esetén tranziens abszorpciós spektroszkópia alkalmazásával határoztuk meg. Sikeresen azonosítottuk a lyukátlépés eredményeképp képződő gyökkationt nanoszekundumos villanófény fotolízis segítségével. A két karbazol-származék hasonló molekuláris felépítése ellenére eltérő töltéshordozó dinamikai viselkedést figyelhattunk meg. A termodinamikai és kinetikai kép ismeretében az előadásom során rávilágítok azokra a valóban fontos különbségekre a származékok között, amely magyarázatul szolgál az optoelektronikai eszközök tervezésében levont konklúziók ellentmondásaira.

[1] Al-Ashouri, A. et al.: *Energy Environ. Sci.* **2019** (12) 3356–3369

[2] Wu, T. et al. *Adv. Funct. Mater.* **2024** (34), 2316500

Oxigén Disszociációja Ruténium (0001) Felületen

Drágity Deján^a, Papp Dóra^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szeged, Rerrich Béla Tér 1.

Az oxigén fém felületeken való disszociatív adszorpciója több heterogén katalitikus folyamat elemi lépése. A ruténium, kifejezetten a Ru(0001) felület az egyik legaktívabb a szén-monoxid oxidációs reakcióban nagy nyomás esetén, annak különleges oxigén-adszorpciós mechanizmusának köszönhetően, ennek ellenére pontos reakcióutak, prekursorok és potenciális energia felület (PES) az oxigén-disszociációra nézve nem ismertek. Kutatásunk során GGA-szintű DFT-számítások és egy EANN (*embedded atom neural network*) PES fejlesztő algoritmus segítségével célunk átfogó tudást nyerni erről a reakcióról.

Az adszorpciós helyek feltérképezése egyértelmű prefenciát mutatott fcc- és hcp- típusú üreg (*hollow*) kötőhelyek felé, egyetértésben ezt megelőző kutatásokkal [1]. Az adszorpció töltésátmenettel jár, mely vezethet peroxid prekursorhoz vagy stabil prekursor nélkül (közvetlen úton) az oxigén molekula oxid-ionokká alakulhat. Ugyan korábbi kutatások szerint a prekurnak kis ütközési energiák esetén létezni kell, kutatásunk során csak egy felületre merőleges, rendkívül sekély energiavölgyben található prekurt találtunk, mely akár kis perturbáció esetén is disszociál. Az eredményeink ez alapján gát nélküli disszociációra utalnak, szemben a kísérlettel [2]. Ennek oka az alkalmazott GGA funkcionál típusban keresendő, mely köztudottan hajlamos csökkenteni a töltésátmenettel járó reakciók gátmagasságát. A probléma megoldására különféle stratégiákat dolgoztunk ki, mellyel fizikailag releváns eredmények érhetőek el a számítási idő normalizálása mellett. A továbbiakban AIMD (*ab initio molecular dynamics*) trajektóriákat futtattunk, melyek egyszerre fedeztek fel lehetséges adszorpciós mechanizmusokat és adtak tanulási pontokat az alkalmazott PES illesztő neurális hálónak, mellyel már előzetes eredményeink is elkészültek.

A munkánk célja az elméleti módszerekkel nehezen kezelhető oxigén-disszociációs mechanizmus leírása a Ru(0001) felületen, emellett szeretnénk megvizsgálni a GGA-típusú funkcionálok teljesítőképességét töltésátmenettel járó felületi reakciók leírásában.

[1] J. A. Herron et al.: Surf. Sci., **2013** (614), 64-74

[2] N. Nilius et al.: Appl. Phys. A, **1998** (66), 519-523

Kísérleti elrendezések mágneses elektrokatalitikus mérésekhez

Áron Klonka^a, Gergő Ballai^a, Fouad Alloun^a, Ayoub Kaaouass^a, Henrik Haspel^{a,b}, Zoltán Kónya^{a,b}

^a*Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

^b*HUN-REN-SZTE Reakciókinetikai és Felületkémiai Kutatócsoport, Szeged, Rerrich Béla tér 1.*

A globális szén-dioxid kibocsátás csökkentése kiemelkedő szerepet játszik a klímaváltozás negatív hatásainak enyhítésében, emiatt kulcsfontosságú a jelentős CO₂-kibocsátással járó ipari ágazatok (vas- és acél-, ammónia-, és cementgyártás stb.) dekarbonizációja. A hidrogén a vegyipar egyik legfontosabb és legnagyobb mennyiségben használt alapanyaga, 2020-ban a világ hidrogénfelhasználásának közel 60%-a kizárólag az ammóniagyártáshoz kapcsolódott. A hidrogént jelenleg legnagyobbbrészt földgázból állítják elő a metán gőzreformálással (Steam Methane Reforming, SMR) majd vízgáz reakcióban (Water Gas Shift, WGS) folyamatoknak köszönhetően. A jövőben különösen fontos szerepe lesz a megújuló energiával előállított „zöld”, azaz karbonsemlegesen előállított hidrogénnek, ahogy ezt a Nemzeti Hidrogénstratégia is részletezi. Az időszakosan termelő megújuló energiaforrásokból (pl. szél-, nap- és vízenergia) származó többlet villamosenergia kémiai kötések, például hidrogén formájában tárolható. Ez az energia a molekulák bontásával később visszanyerhető, ami rugalmas és hatékony energiamenedzsmentet tesz lehetővé. A szakirodalomból ismert, hogy a külső mágneses tér segíti az elektrokémiai vízbontást azáltal, hogy lecsökkenti az anódon lejátszódó oxigénfejlődési reakció (OER) túlfeszültségét, így kevesebb energiabefektetéssel állítható elő ugyanazon mennyiségű hidrogén. Hasonló hatás figyelhető meg a H₂/O₂ tüzelőanyag-elemek katódján végbemenő oxigénredukciós (ORR) folyamatban. Az elektrokémiai reakciók kinetikájának mágneses térben történő tanulmányozásához egy kereskedelmi forgalomban nem kapható mágneses forgatható korongelektrodot (RDE), valamint egy áramlásos elektrokémiai cellát terveztünk és valósítottunk meg. A kifejlesztett mérési elrendezéseket nem-mágneses (Pt/C) és ismert mágnesesen aktív (CoNi@NC) elektrokatalizátorokkal teszteltük.

Köszönetnyilvánítás

H. H. köszönetét fejezi ki a Magyar Tudományos Akadémia Bolyai János Kutatási Ösztöndíjának (BO/682/22/7) a nyújtott anyagi támogatásért. Az RRF-2.3.1-21-2022-00009 (Megújuló Energia Nemzeti Laboratórium) az Európai Unió Helyreállítási és Reziliencia Eszközének támogatásával, a Széchenyi Terv Plusz Program keretében valósult meg. A projekt megvalósulását a Magyar Kutatási Hálózat támogatta.

Szerves kémia I. szekció / Organic chemistry session I

Egy váratlan *meta*-szubsztitúciós termék az ösztрон sorban

Ignác Rebeka, Dr. Mernyák Erzsébet

Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Farmakognózi Intézet, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.

A 13 α -ösztрон a természetes ösztрон epimereként kiváló alapot adhat egyéb, hormonális aktivitástól mentes, biológiai hatást hordozó vegyületek kifejlesztéséhez [1]. Kutatócsoportunk a közelmúltban számos, A-gyűrűn szubsztituált, daganatellenes hatású 13 α -ösztрон származékot állított elő [2]. Főként *orto*-helyzetű szubsztitúciókat végeztek, a fenolos hidroxilcsoport irányító hatásával összhangban, *meta*-funkcionalizálásra a szakirodalomban csak egy hivatkozás található [3]. Szakdolgozati munkámban végeztem a *meta*-arilezéseket, réz(II)-katalizált C–H aktiváláson keresztül, reagensként diariljodónium sókat alkalmazva. Egyes újonnan előállított vegyületeink daganatellenes és enzimgátló hatással rendelkeztek.

Jelen kutatás célja ruténium(II)-katalizált, irányított *meta*-alkilezés volt, szubsztituált difluormetilcsoport beépítése céljából. Az így előállított intermedier számos további származék kialakítására lehet alkalmas.

A reakciósor első lépésben egy pirimidin-alapú irányítócsoporthoz építettünk a szteroid fenolos hidroxilcsoportjára, majd etil-bróm-difluoracetát reagens és [Ru(*p*-cimén)Cl₂]₂ katalizátor alkalmazásával, 2,4,6-trimetilbenzoesav ligandum mellett, hagyományos és mikrohullámú melegítéssel is végrehajtottuk a reakciót. Az NMR-es szerkezetvizsgálat eredményeként egy nem várt termék képződött: difluoralkileződés helyett acileződést tapasztaltunk, a ligandum beépülésének megfelelően.

[1] B. Schönecker, C. Lange, M. Kötteritzsch, W. Günther, J. Weston, E. Anders, H. Görls: *J. Org. Chem.*, **2000**, (65, 18), 5487–5497.

[2] I. Bacsá: PhD értekezés, **2018**.

[3] R. Ignác, N. Bózsity, D. Unger, Z. Kele, I. Zupkó, A. Hunyadi, M. Gjorgoska, T. L. Rižner, E. Mernyák: *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.*, **2025**, (40, 1), 2530615.

Köszönjük az NKFIH SNN 139323 támogatását.

Antibakteriális szerek előállítása természetes vegyületekből

Réz András, Paizs Melinda, Dr. Hunyadi Attila, Dr. Mernyák Erzsébet

Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Farmakognóziai Intézet, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.

Az antibiotikum-rezisztencia napjaink egyik legsúlyosabb egészségügyi kihívása, amely egyben jelentős társadalmi problémát is jelent. Az új típusú antibiotikumok felfedezése – különösen a gyógyszerrezisztens kórokozók ellen – a közelmúltban fokozott tudományos érdeklődést váltott ki. A természetes eredetű vegyületek fontos szerepet játszanak a patogén baktériumok elleni hatékony terápiás szerek kifejlesztésében [1]. A természetes eredetű fenolos vegyületek csoportjába tartozó apigenin, kvercetin és magnolol, továbbá egyes származékaik jelentős antibakteriális hatást mutatnak. A multidrog-rezisztens baktériumok ellen azonban alig, vagy nem ismertek megfelelő terápiás hatóanyagok. A szakirodalom ismertet néhány olyan molekulárisstruktúrát, amelyek adott hatóanyagokra való beépítése a hatás mértékének vagy szelektivitásának fokozása szempontjából előnyös lehet. Ilyenek a szililéter vagy szubsztituált benziléter molekulárisstruktúrák [2,3].

Jelen kutatás célja a magnolol, az apigenin és a kvercetin éteresítési reakciónak végrehajtása, és az újonnan előállított vegyületek antibakteriális hatásának vizsgálata volt.

A szililéter- vagy (szubszt.)benziléter molekulárisstruktúrák kialakítását mikrohullámú reaktorban végeztük, különböző körülmények között. A reagáló partnerek arányának és a reakcióhőmérséklet változtatásával célunk volt a több hidroxilcsoportot tartalmazó természetes eredetű fenolok szelektív átalakítása, illetve több hidroxilcsoport egyidejű funkcionálizálása is. A céltermékek szerkezetét NMR-spektroszkópiával igazoltuk, majd vizsgáltuk a vegyületek antibakteriális hatását, több kiválasztott humán patogén baktérium alkalmazásával.

[1] Elmaidy AH, Shady NH, Abdeljawad KM, Elzamkan MB, Helmy HH, Tarshan EA, Adly AN, Hussien YH, Sayed NG, Zayed A, Abdelmohsen UR. Antimicrobial potentials of natural products against multidrug resistance pathogens: a comprehensive review. RSC Adv. 2022 Oct 13;12(45):29078-29102. doi: 10.1039/d2ra04884a. PMID: 36320761; PMCID: PMC9558262.

[2] Cebrián R, Li Q, Peñalver P, Belmonte-Reche E, Andrés-Bilbao M, Lucas R, de Paz MV, Kuipers OP, Morales JC. Chemically Tuning Resveratrol for the Effective Killing of Gram-Positive Pathogens. J Nat Prod. 2022 Jun 24;85(6):1459-1473. doi: 10.1021/acs.jnatprod.1c01107. Epub 2022 May 27. PMID: 35621995; PMCID: PMC9237828.

[3] Martin JK 2nd, Sheehan JP, Bratton BP, Moore GM, Mateus A, Li SH, Kim H, Rabinowitz JD, Typas A, Savitski MM, Wilson MZ, Gitai Z. A Dual-Mechanism Antibiotic Kills Gram-Negative Bacteria and Avoids Drug Resistance. Cell. 2020 Jun 25;181(7):1518-1532.e14. doi: 10.1016/j.cell.2020.05.005. Epub 2020 Jun 3. PMID: 32497502; PMCID: PMC7780349.

Köszönjük az NKFIH SNN 139323 támogatását.

Development of BODIPY Derivatives for Fluorescence Applications

Erzsébet Antal, Benjamin Kovács, Attila Hunyadi, Erzsébet Mernyák

University of Szeged, Faculty of Pharmacy, Institute of Pharmacognosy, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.

Fluorescent labeling of biomolecules or biologically active substances enables the tracking of the labeled compounds in biological systems and the investigation of their mechanism of action [1]. Derivatives of 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indacene (BODIPY) are widely used fluorescent dyes for such purposes [2]. In addition to their excellent optical properties, they exhibit high stability in biological environments, and their structure is easily modifiable. To enable covalent conjugation, the introduction of appropriate functional groups on the BODIPY scaffold is essential. In 2022, Bertozzi, Meldal, and Sharpless were jointly awarded the Nobel Prize for the development of click chemistry and its bioorthogonal applications [3]. The copper(I)-catalyzed azide-alkyne cycloaddition (CuAAC) is a regioselective reaction that links reaction partners through the formation of a 1,4-triazole ring.

The aim of the present study was to synthesize a BODIPY derivative bearing a terminal alkyne function, which can subsequently be applied for labeling biomolecules containing azide groups or other biologically active compounds via CuAAC reaction.

The first step of the four-step synthetic sequence was the propargylation of 4-hydroxybenzaldehyde. This ether formation was efficiently carried out in a microwave reactor. This was followed by the acid-catalyzed condensation of the disubstituted pyrrole with the benzaldehyde derivative. The dipyrromethane obtained in the second step was then oxidized and subsequently complexed with boron trifluoride etherate, yielding the desired green-emitting fluorescent dye. The structure of the compound was confirmed by NMR spectroscopy.

[1] Oliveira E, Bértolo E, Núñez C, Pilla V, Santos HM, Fernández-Lodeiro J, Fernández-Lodeiro A, Djafari J, Capelo JL, Lodeiro C. *ChemistryOpen*. 2017 Nov 7;7(1):9-52.

[2] Loudet A, Burgess K. *Chem Rev*. 2007 Nov;107(11):4891-932.

[3] Brown T, Nordén B. Nobel Prize 2022 to Sharpless, Meldal, Bertozzi Click Chemistry - molecular lego. *Q Rev Biophys*. 2022 Nov 7;55:e13.

This work was supported by National Research, Development, and Innovation Office-NKFIH through project SNN 139323.

Fluorozott nukleozidszármazékok

Lovas Miklós

A fluor nagyon gyakori alkotóeleme gyógyszermolekuláknak. Ennek oka, hogy a fluor beépítése biológiailag aktív molekulákba gyakran előnyösen módosítja tulajdonságaikat, könnyedén használható a molekula lipofilitásának, pKa-értékének, metabolikus stabilitásának és konformációjának modulációjára.

A nukleozidszármazékok az antivirális ágensek fontos csoportját képezik, illetve egyes képviselőik tumorellenes terápiában is használatosak. Az antivirális hatóanyagok száma alacsony, így indokolt új nukleozidszármazékok előállítása és vizsgálata. A nukleozidszármazékok közül fontosak a morfolinók, melyekben a furanózgyűrű helyett morfolingyűrűt találhatunk. Oligomerjeiket antiszensz ágensekként már használják pl. a Duchenne-féle izomsorvadás kezelésében.

Kutatásunk célja olyan nukleozidszármazékok szintézise volt, melyek morfolingyűrűt tartalmaznak, és a morfolingyűrű nitrogénjéhez különböző fluoroalkilcsoportok kapcsolódnak. A szintetikus módosításokat elsősorban adenozinon és uridinen végeztük.

A fluoros csoport bevitelére két módszert alkalmaztunk: a megfelelően védett nukleozid furanózgyűrűjének gyűrűhasadással járó oxidációja után redukzív amináláson keresztül végbemenő gyűrűzárást végeztünk allil-ammal. Az így nyert morfolinó-nukleozidok Nallil csoportjára különböző perfluoro-alkil-jodidokat (perfluorobutil, -hexil és -oktil-jodidot) addicionáltattunk gyökös mechanizmusú fotokémiai reakcióval. Az addíciók optimalizálására különböző módszereket alkalmaztunk: a besugárzást UV- vagy kék fénnel végeztük, iniciátornak: benzofenont; tributil-foszfint és réz(I)-jodidot; trifenilfoszfint és réz(I)-jodidot; vagy trietil-amint használtunk. Teszteltünk egy termoiniciációs reakciót is, iniciátornak azo-bisz-izobutironitrilt alkalmaztunk.

A megfelelő reagens hiányában N-trifluorometilezést ilyen úton nem hajthattuk végre, így alternatív úton végeztük el ezt a módosítást: a szabad nukleozid-morfolinó származékot a morfolin-nitrogénen ditiokarbamáttá alakítottuk, majd ezt a származékot fluoroztuk dietilamino-kén-trifluorid és N-bróm-szukcinimid segítségével, így kapva az N-trifluorometilezett terméket (adenozin-, citidin-, guanozin- és uridin-származékok).

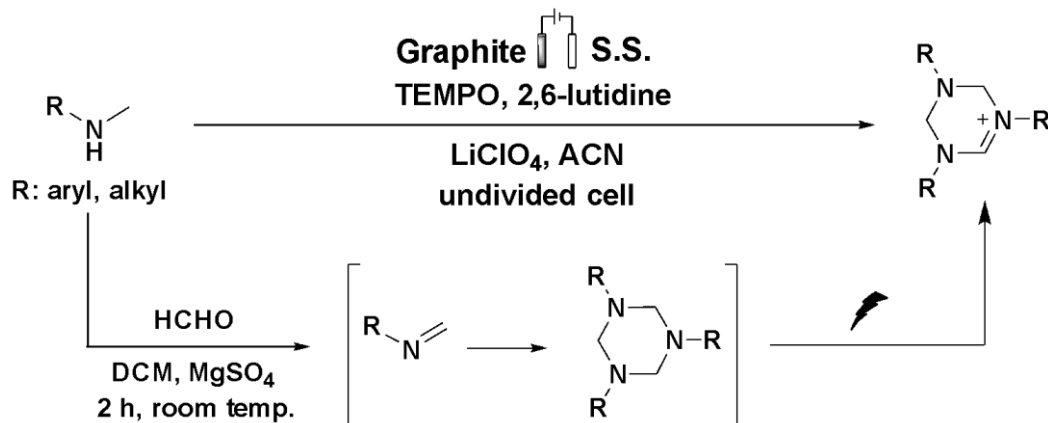
Electrosynthesis of 2,3,4,5-tetrahydro-1,3,5-triazin-1-iums

Lam Thi Da Thao^a, Xu Zhining^a, Gabor Turczel^b, Bela Ivan^a, Ervin Kovacs^a

^aHUN-REN RCNS Institute of Materials and Environmental Chemistry, 1117 Budapest, Magyar tudosok krt. 2.

^bHUN-REN RCNS NMR Research Laboratory, 1117 Budapest, Magyar tudosok korutja 2.

Bench-stable *N*-heterocyclic carbene (NHC) precursors, particularly 1,3,5-triazine-based compounds, are noteworthy not only for their facile synthesis under mild conditions but also for their broad applications carbene precursor,[1] dihydropyrimidine synthesis,[2] and applied as pesticides.[3] Building upon the 1,3,5-triazine scaffold, cationic quaternization of *N,N',N''*-trisubstituted hexahydro-1,3,5-triazinium derivatives introduces significant electronic and structural diversity, enabling new approaches in catalytic transformations and the synthesis of complex nitrogen-containing functional frameworks. In the early development of triazine-based compounds, the quaternization of 1,3,5-triazinium derivatives typically required multistep reactions, generating substantial chemical waste and limiting their practical applicability.[4] Electrochemical synthesis has recently emerged as a greener, low-energy alternative, eliminating the need for excessive oxidants by using electrons as reactants.[5] In this study, our aim to explore a one-pot oxidative synthesis of *N*-methylbenzylamine derivatives to generate triazinium salts using electrocatalytic methods. This approach offers a potentially milder, more controllable, and sustainable alternative to the traditional method. Additionally, a two-step method—first forming the triazinane intermediate and subsequently oxidizing it to the triazinium salt—will be investigated. Comparative analysis with conventional synthetic methods will provide a comprehensive understanding of the efficiency, selectivity, and practicality of these approaches in preparing triazinium-based scaffolds.



[1] M.-T. Chen, C.-C. Huang, C.-W. Chang, K.-Y. Liu, *Inorganica Chim. Acta* **2025**, 576, 22466.

[2] J. Dutta, S. Ghosh, A. Hassan, S. De Sarkar, *Org. Lett.* **2025**, 27, 2682–2686.

[3] CA2052731A1 Patent, DE2431862A1 Patent

[4] Makhoulfi, A.; Frank, W.; Ganter, C. *Organometallics* **2012**, 31 (5), 2001–2008.

[5] Z. Xu, E. Kovács, *ACS Org. Inorg. Au* **2024**, 4, 471–484.

Bolyai János Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences (BO/0085/24/7) is acknowledged.

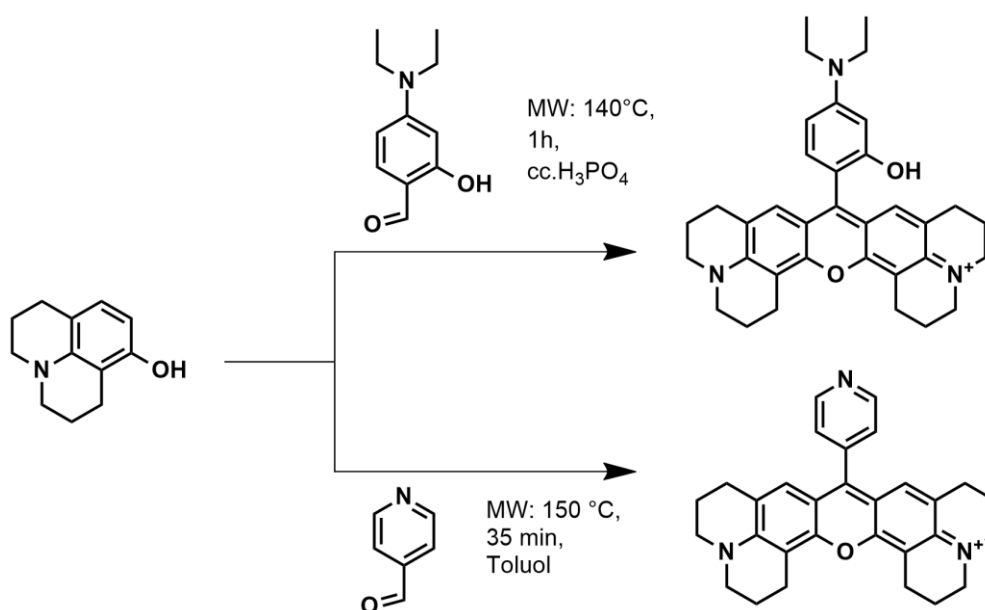
Synthetic Approaches to Functionalized Xanthene Fluorophores

Szekeres Renátó, Hlogyik Tamás, Mernyák Erzsébet

University of Szeged Faculty of Pharmacy Institute of Pharmacognosy, 6720 Szeged, Eötvös u. 6

Rosamines are a significant group of xanthene dyes.[1] Lipophilic rosamines penetrate the plasma membrane by diffusion and accumulate within the inner mitochondrial membrane of cancer cells.[2] This process is driven by the elevated negative transmembrane potential characteristic of cancer cell mitochondria compared to normal cells which can disrupt mitochondrial function, promoting the formation of reactive oxygen species (ROS) and triggering apoptosis. Such substances acting on mitochondria of cancer cells are called mitocans. Intracellular pH - especially that of cell organelles - plays a crucial role in their function. Fluorophores such as pH-sensitive rosamines can be valuable tools in fluorescent imaging having their emission tied to a switch on-switch off mechanism controlled by ambient pH levels.

We aimed to design facile, microwave-assisted methods for the synthesis of rosamine fluorophores as potential antibacterial and/or anticancer agents, under both mild and more aggressive reaction conditions (by using concentrated phosphoric acid and high temperatures in the latter case). Syntheses were carried out in a microwave reactor, starting from 8-hydroxyjulolidine and certain aromatic aldehydes.



Scheme 1. Synthesis of rosamine dyes

[1] Zeng et al. Chem. Soc. Rev., **2023**, (52), 5607-5651.

[2] Bakos, É. et al. Int. J. Mol. Sci., **2025** (26) 1482-1494.

This work was supported by National Research, Development, and Innovation Office-NKFIH through project SNN 139323.

Szerves és Analitikai kémia II. szekció /
Organic and Analytical chemistry session II

Development of Novel 8-Hydroxyquinoline–Phthalimide Hybrids: Synthesis, Structural Optimization, and Anticancer Evaluation

Moamen A. Hassanin,^a Péter Simon,^a and István Szatmári^{a,b}

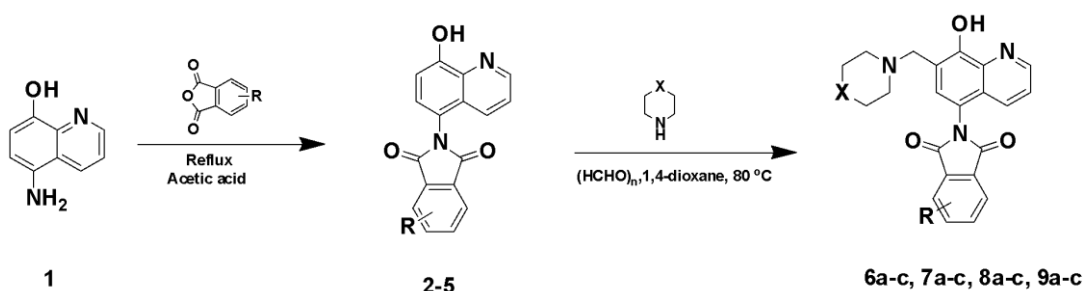
^aInstitute of Pharmaceutical Chemistry, University of Szeged, Eötvös u. 6, H-6720 Szeged, Hungary

^bHUN-REN-SZTE Stereochemistry Research Group, Hungarian Research Network, University of Szeged, Eötvös u. 6, H-6720 Szeged, Hungary

8-Hydroxyquinoline (8-HQ) is a significant heterocyclic scaffold in medicinal chemistry due to its drug-like properties, metal-chelating ability, and multitarget potential [1]. Since 8-HQ has a significant flat aromatic structure, this allows efficient modification with substituents to improve target selectivity and reduce cytotoxicity [2]. Because of these features, 8-HQ derivatives have been widely studied as anticancer agents, including their role in overcoming multidrug resistance (MDR) [1].

Additionally, phthalimide is another key pharmacophore with a wide range of biological activities, notable structural stability, bioavailability, and potent inhibitory effects on cancer-related receptors. It has shown promising cytotoxic activity by inducing apoptosis, inhibiting angiogenesis, and disrupting cancer cell proliferation. These properties make phthalimide analogues valuable scaffolds for designing novel multi-targeted anticancer agents [3].

This work aims to hybridize these two pharmacophores into hybrid molecules and incorporate Mannich bases to enhance activity and fine-tune the pharmacologic properties. Compared to their parent compounds, these hybrid molecules are designed to achieve a broader biological spectrum, improved efficacy, reduced potential toxicity, and overcome drug resistance.



The target compounds were synthesized *via* condensation of 5-amino-8-hydroxyquinoline with phthalic anhydride derivatives, followed by Mannich reactions with various amines and aldehydes. The products were characterized by spectroscopic techniques, and initial biological evaluation demonstrated promising anticancer activity, providing a basis for subsequent structure–activity relationship (SAR) studies.

In conclusion, this work focuses on designing and synthesizing new anticancer agents by hybridizing two pharmacophores, evaluating their antiproliferative activity, and conducting SAR studies.

[1] Pape, V. F. S.; Palkó, R.; Tóth, S.; Szabó, M. J.; Sessler, J.; Dormán, G.; Enyedy, É. A.; Soós, T.; Szatmári, I.; Szakács, G. *J. Med. Chem.* **2022** (65), 7729–7745.

[2] Gupta, R.; Luxami, V.; Paul, K. *Bioorg. Chem.* **2021** (108), 104633.

[3] Fernandes, G. F. S.; Lopes, J. R.; Dos Santos, J. L.; Scarim, C. B. *Drug Dev. Res.* **2023** (84), 1346–1375.

Acknowledgment: The authors thank the Hungarian Research Foundation (OTKA No. K-138871), the Ministry of Human Capacities, Hungary grant, TKP-2021-EGA-32; and Dr. Gabriella Spengler and her research group for the biological evaluations.

Examination of sunflower microgreens cultivated under different conditions using Vis-NIR spectroscopy and multivariate data analysis

Ágnes Madács^a, János Slezsák^a, András Salgó^a, Szilveszter Gergely^a

^a*Department of Applied Biotechnology and Food Science, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Műegyetem rkp. 3., H-1111 Budapest, Hungary*

Microgreens are young, edible seedlings of vegetables and herbs, which are commonly harvested 7-21 days after germination, when the cotyledons are fully developed, and the first true leaves just start to appear. At this stage, they have a higher nutritional value compared to mature plants, with increased levels of vitamins, minerals, and other health-promoting compounds [1], [2]. Among microgreens, sunflower has high protein and phenolic contents, and also a good source of calcium [3].

The samples were obtained from a vertical farm, which is a Controlled Environment Agriculture (CEA) facility, where every environmental factor is monitored and optimized. It is a space-efficient cultivation method that operates independently of seasonal changes, and usually there is no need to use pesticides thanks to the enclosed environment [4]. Due to the high operating costs (e.g., LED lights, controlled temperature) they focus on plants, with short growth cycles, low space requirements and high market values, such as leafy greens, herbs and microgreens [5].

In this research the samples were analysed using visible (Vis) and near-infrared (NIR) light. Vis-NIR spectroscopy is a fast, non-destructive analysis method, which is usually also chemical-free, so it is very sustainable. The study investigates how changes in environmental parameters (such as temperature, nutrient solution, or lighting) affect plant growth and nutritional value. We measured the samples in both fresh and dried conditions, because the strong O–H absorption bands from water can hide information in the spectra. The results of the research not only could be useful for vertical farms, but may also provide new insights for traditional open-field cultivation struggling with climate change.

- [1] B. Dereje, J. C. Jacquier, C. Elliott-Kingston, M. Harty, N. Harbourne: *ACS Food Sci. Technol.*, **2023** (3), 981-998
- [2] S. Verlinden: *Hortic. Rev.*, **2020** (47), 85-124
- [3] M. D. Ghoora, D. R. Babu, N. Srividya: *J. Food Compos. Anal.*, **2020** (91), 103495
- [4] K. Benke, B. Tomkins: *Sustainability: Sci. Pract. Policy*, **2017** (13), 13-26
- [5] C. Vatisas, D. D. Avgoustaki, T. Bartzanas: *Atmosphere*, **2022** (13), 1258

This project has received funding from the European Union’s HORIZON-CL6-2022-CLIMATE-01-04 “Achieving Ecological Resilient Dynamism for the European food system through consumer-driven policies, socio-ecological challenges, biodiversity, data-driven policy, sustainable futures” (ECO-READY) research and innovation programme under grant agreement N°101084201.

The research reported in this paper is part of project no. TKP2021-EGA-02, implemented with the support provided by the Ministry for Innovation and Technology of Hungary from the National Research, Development and Innovation Fund, financed under the TKP2021 funding scheme.

The project supported by the Doctoral Excellence Fellowship Programme (DCEP) is founded by the National Research Development and Innovation Fund of the Ministry of Culture and Innovation and the Budapest University of Technology and Economic.

GFP kromofórok fotofizikai tulajdonságainak előrejelzése gépi tanulással

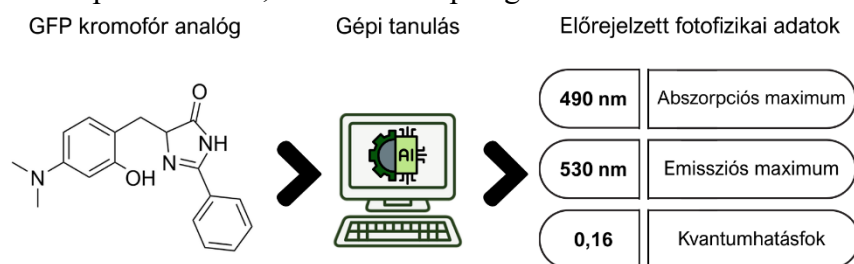
Györök Ákos^a, Kovács Ervin^a, Pavel Sidorov^b

^aBrainVisionCenter Nonprofit Kft.; 1094 Budapest, Liliom utca 43-45. 6. em. 1. ajtó

^bHokkaido University ICRDD, Japán, Hokkaidó; Szapporó, Kita kerület, Kita 21 Nishi 10, 001-0021

A fluoreszcens mikroszkópia mára elterjedt eszköz a biomolekuláris folyamatok vizsgálatában, azonban a legtöbb biomolekula nem bocsát ki fényt magában, így külső fluoreszcens jelölők alkalmazására van szükség. A zöld fluoreszcens fehérje (Green Fluorescent Protein, GFP) kromofórjának analógjaira épülő kis molekulájú fluorofórok fejlesztésében meghatározó a szerkezet és a fotofizikai tulajdonságok közötti kapcsolat feltárása.

Kutatásunk célja olyan gépi tanulási modellek fejlesztése volt, amelyek képesek a fluoreszcens kromofórok abszorpciós és emissziós maximumainak, valamint kvantumhatásfokának előrejelzésére. Egységes laboratóriumi körülmények között több mint száz GFP-kromofór analóg mérési adatait gyűjtöttük össze több, a kutatócsoportban végzett tanulmányból [1], [2]. A molekulákból különböző molekuláris leírókat generáltunk, majd Random Forest és Support Vector Machine algoritmusokat alkalmaztunk a fotofizikai jellemzők előrejelzésére. A hiperparamétereket optimalizáltuk, a modelleket pedig tízszeres keresztvalidációval értékeltük.



1. ábra: A GFP-kromofór analógok fotofizikai tulajdonságainak előrejelzése gépi tanulási modellekkel.

A legjobb regressziós modellek $R^2 \approx 0,9$ értékeket értek el, valamint a kvantumhatásfok osztályozására fejlesztett modell is jó predikciós képességet mutatott a gyenge és erősebb fluoreszcenciájú molekulák elkülönítésében. Külső validálásként három új kromofórt szintetizáltunk, valamint ezek közül egyet spektroszkópiailag karakterizáltuk. Az előrejelzések megfelelő pontosságúnak bizonyultak a modellek gyakorlati alkalmazhatósága és a fluoreszcens tulajdonságok előzetes szűrése szempontjából.

Eredményeink azt mutatják, hogy a gépi tanulási megközelítés hatékony eszköz lehet új fluoreszcens festékek előzetes szűrésére, a fluoreszcens tulajdonságok gyors és költséghatékony becslésére, valamint a kísérleti fejlesztés támogatására.

[1] Jancsó A, Kovács E, Cseri L, et al.: Spectrochim. Acta A Mol. Biomol. Spectrosc., 2019 (218), 161–170.

[2] Kovács E, Cseri L, Jancsó A, et al.: European J. Org. Chem., 2021 (41), 5649–60.

Szeretném kifejezni őszinte hálámat Dr. Kovács Ervinnek, témavezetőmnek, aki lehetőséget adott a kutatásban való részvételre és végig támogatta a munkámat. Köszönöm Dr. Pavel Sidorovnak szakmai útmutatását és a kutatócsoportjában végzett munka lehetőségét. Hálás vagyok továbbá Dr. Rózsa J. Balázsnak és a BrainVisionCenternek a kutatás megvalósításához nyújtott támogatásukért.

Dibenzoil-borkősav alapú rezolválás preparatív lépték alatti megvalósítása mágneses enantioszeparáció alkalmazásával

**Jávor Bálint ^[1], Szegedi Dorka, Ádám Bálint Árpád, Hakkel Orsolya, Illés Levente,
Fűrjes Péter, Tóth Tünde, László Szabolcs, Golcs Ádám**

^[1] Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Műegyetem rkp. 3., H-1111 Budapest, Magyarország

A nagyszámú, szerkezetileg rokon vegyületek enantiomerszeparációja a nanomoláris léptékű könyvtárszintézisekben gyakran ütközik mennyiségi és áteresztőképességi korlátokba. Munkánkban egy alternatív rezolválási stratégiát mutatunk be, amely az *O,O'*-dibenzoil-L-borkősav alapú preparatív enantiomerelválasztás nanomoláris skálára történő átültetését célozza.

Az enantiomerszeparációkhoz szilícium-dioxiddal bevont, *O,O'*-dibenzoil-L-borkősavval módosított mágneses nanorészecskéket alkalmaztunk. Különböző felületkezelési eljárásokat, amino-linkereket és immobilizációs stratégiákat vizsgáltunk, majd hatékonyságukat összehasonlítottuk mind a nanorészecskék funkcionálizálása, mind az enantiomerszeparáció szempontjából. A módszer hatékonyságát hat királis, biológiailag aktív modellvegyület (efedrin, szinefrin, mentol, feniletilamin, oktopamin, terbutalin) racém elegyének elválasztásával vizsgáltuk, az eredményeket az enantiomerdúsított minták fajlagos forgatóképességének mérésével ellenőriztük.

Az eljárás számos előnnyel rendelkezik az irodalmi alternatívákkal szemben: szélesebb vegyületkört fed le, közvetlenül alkalmazható vegyületkönyvtárak törzsoldatain (pH = 7, 5% DMSO vizes közegben) vegyületspecifikus optimalizálási igény nélkül, valamint egyaránt lehetővé teszi diasztereomer sók és koordinációs komplexek kialakítását. Ezek az előnyök a módszer példátlanul széleskörű alkalmazhatóságát vetítik előre vegyületkönyvtárak nanomoláris léptékű párhuzamos enantiomerdúsításában.

Anyagtudomány szekció / Material science session

RÉTEGES KETTŐS HIDROXID ALAPÚ KOMPOZIT KOLLOID ÉS ANTIOXIDÁNS TULAJDONSÁGAI

Mader Anna, Dr. Varga Viktória, Vörös Attila, Dr. Szilágyi István

MTA-SZTE Lendület Biokolloidok Kutatócsoport, SZTE TTIK, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1

A természetes antioxidáns enzimek kiváltására használhatunk olyan nanoméretű anyagokat (úgynevezett nanozyme), amelyek képesek működésüket utánozni anélkül, hogy azok számos hátrányos tulajdonságát (például előállítási és tárolási nehézségek) mutatnák, hátrányuk viszont az aggregációra való hajlamuk, amit polielektrolit funkcionálizálással javíthatunk. A kutatás során célunk volt réz (II)ion tartalmú réteges kettős hidroxid (CuMgAl LDH) előállítása, funkcionálizálása antikoaguláns hatású heparin polielektrolittal, valamint az így létrehozott kompozitok kolloidkémiai tulajdonságainak és enzim aktivitásának vizsgálata [1].

A CuMgAl LDH nanozyme-ot a megfelelő fémkloridok oldatai segítségével NaOH jelenlétében szintetizáltuk a koprecipitáció módszerével [2], szerkezetét röntgendiffrakcióval (XRD) és infravörös spektroszkópiával (IR), méretét és stabilitását dinamikus fényszórásméréssel (DLS) valamint alakját transzmissziós elektronmikroszkóppal (TEM) jellemeztük. Elektroforetikus mobilitás méréssel az LDH felületi töltésének változását a hozzáadott heparin mennyiségének függvényében vizsgáltuk és meghatároztuk a stabil diszperzió kialakításához szükséges heparin optimális mennyiségét (LDH/HEP). A CuMgAl LDH és az LDH/HEP nanozyme rendszer antioxidáns hatását enzim aktivitás tesztekkel vizsgáltuk, a szuperoxid dizmutáz-szerű működés jellemzéséhez használt színreakciókat spektrofotometriás méréssel követtük és kataláz tesztet is végeztünk.

Az LDH/HEP kompozit a természetes antioxidáns enzimekkel összehasonlítható aktivitással bírt. Az antioxidáns tesztek során megállapítottuk, hogy a CuMgAl LDH a funkcionálizálás után, az LDH/HEP formában is megtartotta aktivitását és kolloid kémiai stabilitása is számottevően javult. Az általunk létrehozott nanozyme-ok jövőbeli alkalmazása betegségek terápiája során, illetve antioxidáns adalékként ipari folyamatokban lehetséges.

[1] M. Pavlovic, L. Li, F. Dits, Z. Gu, M. Adok-Sipiczki, I. Szilágyi, *RSC Adv.*, **6** **2016** 16159-16167.

[2] A. Szerlauth, T. Madácsy, G.F. Samu, P. Bíró, M. Erdélyi, G. Varga, Z.P. Xu, J. Maléth, I. Szilágyi, *Chem. Commun.*, **60** **2024** 1325-1328.

Köszönet a Szegedi Tudományegyetem Lendület Biokolloidok Kutatócsoportjának és az SZTE TTIK Kutatóiskola ösztöndíj programjának, hogy segítették a kutatási munkát.

(Gua)₃Cu₂I₅ vékonyrétegek fényemissziós sajátságainak vizsgálata

Cseh Kitti^a, Hajdu Cintia^b, Hunyadi Mátyás^c, Csige Lóránt^c, Samu Gergely Ferenc^a

^aSzegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, 6720 Szeged, Dóm tér 7-8.

^bSzegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^cDebreceni Atommagkutató Intézet, 4026 Debrecen, Bem tér 18/c.

A nulladimenziós szerkezetű, háromkomponensű, réz-halogenid szerkezeti motívumokat tartalmazó vegyületek változatos összetétellel rendelkező félvezető anyagok [1]. A pszeudo-perovszkitok anyagcsaládjába tartozó A₃Cu₂I₅ (ahol A: egyértékű szerves vagy szervetlen kation) összetételű anyagok kedvező fénykibocsátási tulajdonságaik (nagy kvantumhatásfok, elhanyagolható önabszorpció), valamint környezeti tényezőkkel szemben mutatott stabilitásuk miatt különböző optoelektronikai alkalmazásokban (fotodetektorok, fénykibocsátó diódák, töltéssel rendelkező részecske- vagy röntgenszcintillátorok) kerülnek felhasználásra [2]. A jelenlegi kutatások középpontjában a szerves-szervetlen kationt vegyesen tartalmazó vegyületek is egyre növekvő figyelmet kapnak. A hibrid vegyületek esetén a réz-halogenidek kristályrácsába megfelelő méretű, egyszeresen pozitív töltésű szerves kationok beépítésével lehetőség adódik a különböző optoelektronikai sajátságok finomhangolására.

Munkánk során guanidínium-réz-jodid ((Gua)₃Cu₂I₅) pszeudo-perovszkit vékonyrétegeket állítottunk elő oldatporlasztásos technikával [3]. A rétegek minőségéről, homogenitásáról, valamint felületi érdességéről profilometria és optikai mikroszkópos felvételekkel nyertünk információt. Az anyagtudományi karakterizáláshoz Raman spektroszkópiát és röntgendiffrakciós méréseket végeztünk. Az így előállított vékonyrétegek esetén termokromizmus jelenségét figyeltük meg, melyet az anyag két különböző kristályszerkezete közötti átmenettel lehet magyarázni. Az „alfa” (kék emitter) vagy „béta” (sárga emitter) kristályszerkezetű (Gua)₃Cu₂I₅ kialakulását a szintézis körülményeinek megfelelő megválasztásával kontrolláltuk, így mindkét módosulat esetén sikeresen állítottunk elő nagy kvantumhatásfokkal rendelkező vékonyrétegeket. A fényemissziós tulajdonságok jellemzéséhez meghatároztuk a vékonyrétegek abszolút kvantumhatásfokát, rögzítettük statikus fotolumineszcenciás spektrumaikat, megvizsgáltuk a fényemissziós folyamatok élettartamát és radiolumineszcencia mérések is kivitelezésre kerültek a debreceni Atommagkutató Intézettel együttműködésben. A két kristálymódosulat fotolumineszcencia élettartamának hullámhosszfüggését is meghatároztuk állandó hullámhosszú gerjesztő fény megvilágítása mellett, melyből az öncsapdázott exciton emissziós energiaszintek relatív tiltotsávbeli pozíciójára kaptunk információt. Kutatómunkánkban az anyagcsalád bővítése részeként a cézium beépülésének hatását vizsgáltuk a vékonyrétegek optoelektronikai sajátságaira, így vegyes Cs_x(Gua)_{3-x}Cu₂I₅ (x= 0,25-2,5) vékonyrétegeket tudunk előállítani.

[1] Y. Li *et al.*: *Mater Chem Front*, **2021** (5), 4796–4820.

[2] M. Hunyadi, G. F. Samu, L. Csige, A. Csík, C. Buga, and C. Janáky: *Adv Funct Mater*, **2022** (32).

[3] H. Peng *et al.*: *ACS Appl Mater Interfaces*, **2021** (13), 13443–13451.

Alginát alapú aero- és xerogélek előállítása és felhasználása gyógyszerhordozóként

Tátrai Marcell^a, Dr. Balogh Zoltán^{a,b}, Dr. Kalmár József^a

^aHUN-REN-DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport,

Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, Debrecen

^b Neutronspektroszkópai Laboratórium, HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Konkoly-Thege Miklós út 29-33, Budapest

Az aerogélek a világ legkisebb sűrűségű szilárd anyagai, amik nyitott és összefüggő mezopórusos szerkezettel rendelkeznek. 2022-ben az IUPAC által közzétett „Top Ten Emerging Technologies in Chemistry” listáján bekerültek a 10 legígéretesebb feltörekvő kémiai technológia közé. Ennek oka, hogy számos felhasználási területen innovatív megoldást kínál az alkalmazásuk. Ezek közé tartoznak az építőipar és az űripár számára fejlesztett nagy teljesítményű szigetelő bevonatok, továbbá a speciális orvosbiológiai alkalmazási területek [1].

Kutatómunkánk során sikeresen szintetizáltunk boroszilikát-alginát kompozit géleket, amikből különböző szárítási módszerekkel xerogéleket és aerogéleket állítottunk elő. Ezekbe a szilárd gélekbe különböző impregnálási stratégiákkal sikeresen vittünk be nikotinsav modellhatóanyagot. Vizsgáltuk a szilárd gélek kémiai összetételét infravörös spektroszkópiával (IR), a morfológiájukat pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) és N₂ adszorpciós-deszorpciós porozimetriával, továbbá XRD mérések segítségével kristályosságukról is információt szereztünk. Megállapítottuk, hogy a különböző formulálási technológiákkal más-más eredmény érhető el az aero-/xerogélek gyógyszerhordozó-rendszerekként való alkalmazásában [2].

Aerogél esetében a hatóanyag amorf formában impregnálható, ami a nagyméretű pórusokkal kiegészülve gyors és nagy hatékonyságú leadást eredményez, amely vízben rosszul oldódó hatóanyagok esetén kedvező lehet. Az acetontól szárított xerogélekből elnyújtottabb és gátoltabb a leadás. Az anyalúgból szárított xerogélben értük el a legnagyobb hatóanyagdózist, illetve a kristályos hatóanyagforma és a xerogél tömörebb szerkezete az elnyújtott leadást segíti.

A kutatásunk folytatásaként célul tűztük ki újabb biopolimer alapú aerogélek előállítását és alkalmazási lehetőségeik vizsgálatát. Ca²⁺-ionokkal keresztkötött alginát–zselatin hibrid aerogéleket szintetizáltunk, a technológiai paraméterek finomhangolásával. Azonos előállítási recept alkalmazása mellett metformin-hidrokloriddal impregnált mintákat is készítettünk a hatóanyag-beépülés vizsgálatára. A sikeres impregnálás igazolására részletes analitikai méréseket végzünk, valamint a hatóanyag-leadás kinetikájának vizsgálatát is tervezzük.

[1] Gomollón-Bel, Fernando. "IUPAC Top Ten Emerging Technologies in Chemistry 2022: Discover the innovations that will transform energy, health, and materials science, to tackle the most urgent societal challenges and catalyse sustainable development." *Chemistry International* 44.4 (2022): 4-13.

[2] Balogh, Z., Tátrai, M., Dudás, Z., Vecsei, G., Cserhádi, C., Csík, A., ... & Kalmár, J. (2025). Morphological features control drug release from nanostructured borosilicate–alginate aerogels and xerogels. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 138320.

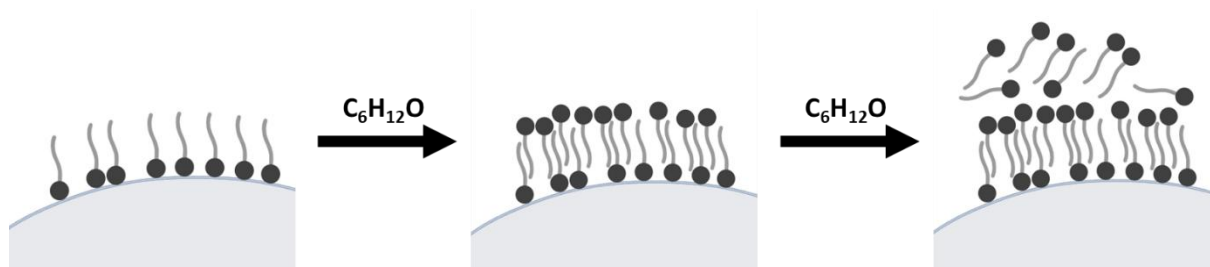
Köszönetnyilvánítás

A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) támogatta (NKKP SNN_150561). A Kulturális és Innovációs Minisztérium EKÖP-25-1-DE-63 kódszámú Egyetemi Kutatói Ösztöndíj programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Folyékony hexanal szilika aerogél pórusaiban

Ecsédi I. Bertold^a, Vranka Marcell^a, Kalmár József^a

^aDebreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék



A hexanalt édes aromája miatt előszeretettel használják az élelmiszeriparban adalékanyagként. Pórusos anyagokban való tárolása, majd a szilárd mátrixból való kontrollált felszabadulása még nem kiaknázott. A mezopórusos szilika aerogélek jó hordozói lehetnek folyadék fázisú hatóanyagoknak nagy fajlagos felületük és pórustérfogatuk miatt.

Szilika aerogélhez növekvő mennyiségben adtunk hexanalt, és tanulmányoztuk a viselkedését. Az NMR relaxometriás vizsgálatok során három relaxációs domént sikerült megfigyelnünk. Eszerint van egy hexanalréteg, ami a szilikafelülethez kötődik erős másodrendű erők segítségével. Ezután kialakul egy kevésbé rendezett hexanalréteg, gyengébb kötődéssel. Végül megjelenik a tömbfázisú folyadék hexanal a pórusokban.

NMR diffúziómetriás mérések segítségével egy diffúziós domént detektáltunk, amely a tömbfázist alkotó hexanal molekulák öndiffúziójához rendelhető.

FT-IR spektroszkópia segítségével meghatároztuk, hogy a felülethez közvetlenül kötődő, primer szolvatációs rétegben a hexanal molekulák formil csoportjai H-kötéseket alakítanak ki a felületi szilanol csoportokkal, ezáltal erős kötődést biztosítva a felülethez.

Szilárd fázisú NMR spektroszkópiás méréseket is végeztünk, melyek megerősítik az eddigi eredményeket, azaz kimutatták, hogy a felülethez kötődő hexanal molekulák valóban a felületen található szilanol csoportokkal alakítanak ki H-kötéseket. Több hexanal hozzáadására kialakul egy második, gyengébben kötődő réteg, és végül megjelenik a tömbfázisú folyadék hexanal is a pórusokban.

A későbbiek során e rendszer hexanal leadását fogom vizsgálni headspace GC-MS kapcsolt technika segítségével, ezután összetettebb struktúrával rendelkező aerogélek hexanallal történő telítését is fogom tanulmányozni

Hivatkozások:

- [1] Econdi, Stefano, et al. *Dalton Transactions* 53.23 (2024): 9995-10006.
- [2] Allen, S. G., et al. *Journal of Chemical Physics* 106.18 (1997): 7802.

Catalyst-free polyester particles for improved drug delivery

**Keristina Wagdi K. Amin^{a,b}, Ágota Deák^a, Médi Sándor^c, Diána Szabó^c, László Rovó^c,
László Janovák^a**

^a*Department of Physical Chemistry and Materials Science, University of Szeged, H-6720, Rerrich Béla tér 1, Szeged, Hungary*

^b*Department of Chemistry, Faculty of Science, Suez Canal University, Ismailia 41522, Egypt*

^c*Department of Oto-Rhino-Laryngology and Head & Neck Surgery, University of Szeged, Tisza Lajos krt. 111, H-6724 Szeged, Hungary*

Many therapeutic agents, including methylprednisolone acetate (MPA), face limited bioavailability due to poor aqueous solubility and first-pass metabolism [1]. Thiolated polyesters have emerged as a promising solution due to their biodegradability, biocompatibility, and mucoadhesive properties, which can enhance drug bioavailability [2,3]. However, their synthesis has traditionally required catalysts [4], raising concerns regarding residual toxicity. This work introduces, for the first time, the catalyst-free synthesis of polyethylene thiomalate (PET) polyesters. By adjusting the polycondensation time, PET polyesters with relatively low molecular weights (M_W 908–1652 Da) and moderate hydrophilicity ($\bar{\epsilon}$ = 38–75°) were synthesized, ensuring compatibility with aqueous environments and hydrophobic drugs. A detailed investigation was conducted, enabling the development of an optimized MPA encapsulation technique within the synthesized PET particles. The MPA-loaded PET particles exhibited relatively small sizes, high ζ -potential, and reduced drug crystallinity, all contributing to improved aqueous dispersibility and stability of MPA compared to its unencapsulated form. Furthermore, polymer M_W tunability enabled both enhanced and sustained drug release. The NPs exhibited strong mucoadhesive properties, potentially aiding in enhancing MPA bioavailability. These findings pave the way for catalyst-free PET NPs to serve as a promising drug delivery system.

[1] J. Ali, Md.A. Alam, A. Ahuja, S. Baboota, S. Gidwani: Indian Journal of Pharmaceutical Sciences, 2009 (71), 30-34.

[2] Y. Liu, F. Yin, X. Hu, N. Zhu, K. Guo: Polymer Chemistry, 2021 (12), 1749–1757.

[3] K. Mfoafo, R. Mittal, A. Eshraghi, Y. Omid, H. Omidian: Journal of Drug Delivery Science and Technology, 2023 (85), 104596.

[4] T. Fuoco, A. Finne-Wistrand: Polymer Reviews, 2019 (60), 86–113.

The authors are thankful for the financial support from the Hungarian Scientific Research Fund (OTKA) K 132446. This paper was also supported by the János Bolyai Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences (L.J.). Project no. RRF-2.3.1-21-2022-00001 has been implemented with the support provided by the Recovery and Resilience Facility (RRF), financed under the National Recovery Fund budget estimate, RRF-2.3.1-21 funding scheme. The authors also thank the financial support from the Interdisciplinary Research Development and Innovation, Center of Excellence, University of Szeged. Á.D. is thankful for the National Research, Development and Innovation Office-NKFIH (Hungary) for support through program PD 142293. K.W.K.A. is funded by a scholarship under the joint executive program between Hungary and the Arab Republic of Egypt.

A metamizol anion interkalálhatóságának vizsgálata magnézium és kalcium alapú réteges kettős hidroxidokba

Serfőző Ákos^{a,b}, Sipos Pál^{a,b}, Szabados Márton^{a,b}

^{a)} Molekuláris és Analitikai kémiai tanszék, Szegedi Tudományegyetem, Magyarország

^{b)} Anyag- és Oldatszerkezeti Kutatócsoport, Kémiai intézet, Szegedi Tudományegyetem, Magyarország

A nátrium-metamizol egy orálisan gyakran alkalmazott nem-szteroid gyulladáscsökkentő hatóanyag, mely fájdalomcsillapító, lázcsillapító, görcsoldó hatással rendelkezik. Kevésbé ismert azonban, hogy a metamizol vizes közegben nem stabil, víz és oldott oxigén jelenlétében a C-S kötés hidrolízisével (és oxidációjával) a molekuláról NaSO₃ egységek válnak le, ami jelentősen csökkenti annak vízzoldékonyságát, ezáltal annak biohasznosulását [1].

A réteges kettős hidroxidok (LDH-k) az agyagásványokhoz hasonló, anioncserélő tulajdonságú szervesetlen anyagok. Kialakulásuk során a fém-hidroxid váz módosul, az alapréteget alkotó fémionok egy része nagyobb vegyértékű fémionokra cserélődnek, a rétegeken megjelenő többlet pozitív töltést pedig a rétegek közé beépülő hidratált anionok kompezálják. Általánosan a $[M(II)_{1-x}M(III)_x(OH)_2]^{x+}[A^{m-}_{x/m} \cdot nH_2O)]^{x-}$ képlettel írhatóak le, ahol M(II) és a M(III) a két- és háromvegyértékű fémionok, $x = M(III)/[M(II)+M(III)]$, A^{m-} pedig a rétegek között levő anionokat jelöli [2]. A gyógyszerhatóanyagok LDH-kba történő beépítése (interkalálása) olyan előnyökkel járhat mint a hatóanyagok elnyújtott felszabadulása, célzott szállítása, jobb stabilitása, jobb vízzoldékonysága (ezáltal jobb biohasznosulása) de akár az irritáló anyagok tárolására is megoldást kínálhatnak.

Munkánk célja a metamizol anion interkalálása volt a biokompatibilis MgFe és CaFe LDH-kba, melyhez az együttelecsapást, direkt anioncserét, dehidratációs-rehidratációs és a mechanokémiai segített anioncserés technikákat alkalmaztuk.

Kulcsszavak: metamizol, réteges kettős hidroxidok, interkaláció, stabilizáció

Hivatkozások:

[1] X. Qian, N. Gang, W. Xian-hua, C. Gang, *Chem. Res. Chinese U.* **23**, 2007, 654–658.

[2] E. L. Crepaldi, J. B. Valim, *Quimica Nova* **21**, 1998, 300–311.

Környezeti kémia szekció / Environmental chemistry session

Gombaölőszer lebontásának vizsgálata környezetkímélő eljárásokkal

Székely Ákos

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Környezeti és Szervetlen Fotokémiai Kutatócsoport

*Témavezetők: Dr. Zsirkáné Dr. Fónagy Orsolya, Tudományos munkatárs, PE MK
Szabóné Dr. Bárdos Erzsébet, Egyetemi docens, PE MK*

Napjainkban egyre több és változatos permetszer kerül kereskedelmi forgalomba, amelyek közül számos rossz biodegradációs tulajdonsággal rendelkezik. Ezek a vegyszerek bejutva az élővizekbe, komoly problémákat okozhatnak, és hagyományos víztisztítási eljárásokkal az eltávolításuk nehézkesnek bizonyulhat. Erre alternatív megoldást nyújthatnak a nagyhatékonyságú oxidációs eljárások, amelyek közül részletesebben heterogén fotokatalízissel vizsgáltam a penkonazol lebontását aerob és anaerob körülmények között. A lejátszódó folyamatok nyomon követése céljából a bevilágított minták fényelnyelését spektrofotométerrel rögzítettem, mértem az oldatok pH-ját, meghatároztam a szervetlen köztitermékek mennyiségének időbeli változását, valamint a modellvegyület koncentrációjának folyadékkromatográfiás meghatározására is sor került. *Vibrio fischeri* mélytengeri baktériumokkal követtem nyomon a kezelt minták toxicitásának változását.

A mineralizáció hatékonyságának növelése céljából a fotokémiai eljárást ózonizációval kombináltam.

A kereskedelmi forgalomban kapható készítmény (TOPAS 100 EC) fotokémiai bomlását is részletesen tanulmányoztam.

Kulcsszavak: penkonazol, TiO₂, heterogén fotokatalízis, fotolízis, nagyhatékonyságú oxidációs eljárások

UV/szulfít és UV/VUV/szulfít eljárások alkalmazása PFOA bontásában

Erdős Kornél, Veres Bence, Alapi Tünde

Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Szeged, Dóm tér7.

A nagyhatékonyságú oxidációs eljárások (AOPs) olyan kémiai vízkezelési módszerek csoportja, melyek elsősorban gyökgeneráláson alapulnak és a biológiailag nehezen lebomló, perzisztens vegyületek hatékonyan eltávolítását célozzák. Ahogyan a nevük is tükrözi, a célvegyületek eltávolítása alkalmazásuk során oxidációhoz köthető. Azonban, vannak olyan szennyezők, amelyek oxidációs eljárásokkal nehezen, vagy egyáltalán nem bonthatók el. A környezeti szennyezők ezen csoportjába tartoznak a per- és polifluorozott vegyületek, mint a perfluoroktánsav (perfluorooctanoic acid, PFOA), mely 2019-ben felkerült a WHO, emberre is bizonyítottan rákkeltő hatással bíró vegyületeit tartalmazó listájára [1]. A perfluorozott vegyületek eltávolításában az AOPs eljárások helyett inkább a nagyhatékonyságú redukációs eljárások (ARP) bizonyultak hatékonyak, melyek során elsősorban hidratált elektron (e_{aq}^-) képződik és reagál a célvegyülettel.

A fotokémiai AOP és ARP eljárások során gyakran kisnyomású higanygőzlámpákat (LPM) alkalmaznak, melyek 254 nm-es UV-fényt, illetve 254/185 nm-es UV/VUV-fényt bocsátanak ki [2]. A besugárzott oldatban lejátszódó folyamatokat, illetve a fotokémiai eljárások hatékonyságát meghatározza a besugárzó fény hullámhossza és intenzitása, valamint a hozzáadott anyagok moláris abszorbanciája. Az UV-fényt általában a gyökforrásként funkcionáló oxidáló- vagy redukálószer nyeli el, míg a VUV-fényt a közeg, azaz a víz. A 185 nm hullámhosszúságú VUV foton képes a víz fotolízisére, ami $\bullet OH$, $\bullet H$ és kisebb hatékonysággal e_{aq}^- képződését eredményezi. Azonban a célvegyület, illetve az oxidáló- vagy redukálószer közvetlen VUV-fotolízise sem zárható ki.

Munkám során az UV/szulfít és UV/VUV/szulfít ARP eljárások hatékonyságát tanulmányoztam a PFOA, mint nehezen oxidálható környezeti szennyező bontásában. Vizsgáltam a szulfition koncentráció, a pH, az oldott oxigén és a biológiailag kezelt kommunális szennyvíz, mint mátrix hatását. A kis intenzitású VUV fény jelentősen növelte az átalakulás hatékonyságát, ami feltehetően több folyamat eredménye. A közegként szolgáló víz és a szulfition oxidációja során képződő szulfátion VUV fotolízise is e_{aq}^- képződésével jár, mely hatékonyan bontja a PFOA-t.

Az e_{aq}^- domináns szerepét a PFOA bontásában a reakció körülmények hatása is alátámasztotta.

Az átalakulás sebessége érzékeny volt a pH-ra és az oldott oxigén jelenlétére is, a pH csökkentése és az oxigén jelentősen lassította a bontást. E mellett igazoltuk, hogy a PFOA közvetlen VUV fotolízise is lejátszódik. A biológiailag kezelt kommunális szennyvíz, mint mátrix jelentősen csökkentette az átalakulás hatékonyságát, ami elsősorban annak HCO_3^- tartalmához volt köthető.

Összességében elmondható, hogy az UV/szulfít és UV/VUV/szulfít eljárások hatékonyan alkalmazhatók PFOA bontásában, azonban az hatékonyság jelentősen függ a reakció körülményektől. Az az átalakuláshoz hozzájáruló egyes folyamatok szerepének tisztázása további vizsgálatokat igényel.

[1] S. Zahm, J. P. Bonde, W. A. Chiu, J. Hoppin, J. Kanno et al.: The Lancet Oncology, **2024** (vol. 25), pp. 16-17

[2] M. Gar Alalm, D.C. Boffito, Chemical Engineering Journal **2022** 450 138352.

[3] Y. Cao, W. Qiu, J. Li, J. Jiang, S. Pang, Science of The Total Environment **2021** 765 142762

Aerogél alapú szorbensek fejlesztése nemesfém-vegyületek szelektív megkötésére

Pércsi Dániel^{a,b,c*}, Herman Petra^a, Kalmár József^a

^a HUN-REN–DE Összetett Homogén és Heterogén Fázisú Kémiai Reakciók Mechanizmusa Kutatócsoport, Debreceni Egyetem, Szervetlen és Analitikai Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^b Debreceni Egyetem, Kémia tudományok doktori iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

^c Neutron spektroszkópiai laboratórium, HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, 1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós út 29-33.

* percsi.daniel@science.unideb.hu

Napjainkban a nemesfémek ipari alkalmazása egyre nagyobb jelentőséggel bír. A korlátozott természetes források és a növekvő kereslet miatt világszerte egyre nagyobb figyelmet fordítanak a nemesfémek hatékony visszanyerésére. Az elektronikai hulladékokból történő kinyerésükre hagyományosan hidrometallurgiai eljárásokat alkalmaznak, amelyek során az értékes fémvegyületeket savas közegben kioldják, majd az így kapott oldatból oldószeres extrakcióval, szorpciós vagy ioncserés módszerekkel választják el és finomítják tovább. Ezen technikák közül a szorpciós eljárások különösen ígéretesek, mivel költséghatékonyak, jól hangolhatók és nagy hatékonyságúak [1].

A különböző szorpciós módszerek alapja egy megfelelően funkcionálizált, hatékony, szelektív szorbens előállítása. Az aerogélek ezen a területen kiemelkedő lehetőségeket kínálnak, mivel nyitott mezopórusos szerkezetük, nagy fajlagos felületük és könnyű funkcionálizálhatóságuknak köszönhetően alkalmasak lehetnek hidratált fémionok szelektív megkötésére. [2].

Munkánk során szol–gél eljárással különböző kiindulási anyagokból pórusos szerkezetű aerogéleket és xerogéleket állítottunk elő [3]. A kapott szorbenseket kisfeszültségű pásztázó elektronmikroszkópiával (LV-SEM), N₂-szorpciós porozimetriával, energiadiszperzív röntgenspektroszkópiával (EDS) és röntgen-fotoelektron spektroszkópiával (XPS) jellemeztük. A szorpciós tulajdonságokat egyensúlyi és kinetikai mérések formájában vizsgáltuk kevert reaktoros rendszerben. A fémionok koncentrációját ICP-analízissel határoztuk meg. Az általunk előállított szorbensek nagyfokú szelektivitást mutattak Ag(I), illetve Pd(II) ionok megkötésére, emellett a szorpciós egyensúly rövid idő alatt beállt. A szorbensek felületén megkötött fémionok nátrium-tioszulfát és metionin-oldattal kvantitatívan visszanyerhetők.

[1] Nakhjiri, A. T., Sanaeepur, H., Amooghin, A. E., & Shirazi, M. M. A. Recovery of precious metals from industrial wastewater towards resource recovery and environmental sustainability: A critical review. (2022). *Desalination*, 527, 115510.

[2] Herman, P., Pércsi, D., Fodor, T., Juhász, L., Dudás, Z., Horváth, Z. E., Ryukhtin, V., M. A., Putz., Kalmár, J., & Almásy, L.: Selective and high capacity recovery of aqueous Ag (I) by thiol functionalized mesoporous silica sorbent. *Journal of Molecular Liquids*, **2023**, (387), 122598.

[3] Pércsi, D., Forgács, A., Fodor, T., Fábián, I., Kalmár, J., & Herman, P.: Nanostructured Gelatin Aerogel for Selective Recovery of Aqueous Pd (II) Based on Coordination to the Peptide Backbone. *ACS Applied Nano Materials*, **2024**, 7 (12), 14629-14640.

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatta (OTKA-124571 és OTKA-139140).

A Kulturális és Innovációs Minisztérium EKÖP-25-3-II-DE-150 kódszámú Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Phosphate Adsorption by Fe–ZIF-8 for Potential Applications in Lithium-Ion Battery Recycling

Nguyen Thi Kim Phung^a, Anastasiia Efremova^a, Ákos Kukovecz^a

^a*Department of Applied and Environmental Chemistry, University of Szeged, Szeged, Hungary*

Adsorption is recognized as an efficient and promising method for phosphate removal from wastewater [1,2]. Its potential application could be extended to eliminating phosphate residues from lithium-ion battery leaching solutions to improve metal recovery purity. In this study, Fe-doped ZIF-8 (Fe–ZIF-8) was synthesized at different Fe:Zn molar ratios via a precipitation method in ethanol at 70 °C. Different characterization techniques, including XRD, FTIR, and BET confirmed that the ZIF-8 framework remained after Fe incorporation, with enhanced porosity observed at moderate doping levels. Batch adsorption experiments were conducted to determine the maximum phosphate adsorption capacity at pH 2. The experiments, carried out in a single-ion phosphate solution, revealed that Fe–ZIF-8 exhibited a high affinity toward phosphate ions, with the sample containing 30% Fe (0.3Fe:0.7Zn) reaching a maximum adsorption capacity of 133.4 mg/g, as evaluated by using UV-Vis analysis for efficient phosphate removal (Fig. 1).

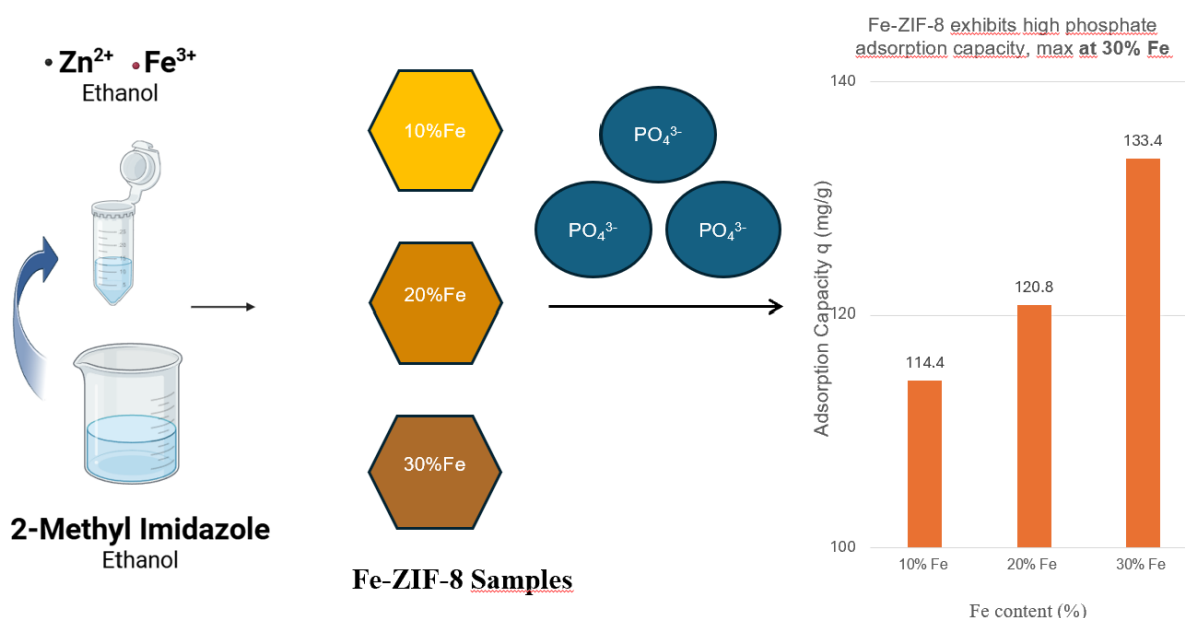


Figure 1. Phosphate adsorption using Fe–ZIF-8.

The results show the potential importance of Fe–ZIF-8 as a promising adsorbent for phosphate removal, contributing to improved precious metal purity in lithium-ion battery recycling processes.

[1] Z. Miao, X. Song, X. Wang, H. Wang, S. Li, Z. Jiao: PLoS ONE, **2024** (19), e0311239.

[2] T.C.P. Tran, T.P. Nguyen, X.C. Nguyen, X.H. Nguyen, T.A.H. Nguyen, T.T.N. Nguyen, T.Y.B. Vo, T.H.G. Nguyen, T.T.H. Nguyen, T.D.H. Vo, P.S. Kumar, M.-J. Um, D.D. Nguyen: Chemosphere, **2022** (309), 136628.

Fizikai kémia szekció II. / Physical chemistry session II

Elektrokémiai oxigénredukció szénalapú katalizátorokon: H_2O_2 szelektív előállítása nagy áramsűrűségeken

Faragó Zsombor, Dr. Janáky Csaba, Dr. Balog Ádám

Fotoelektrokémiai Kutatócsoport, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, H-6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

A hidrogén-peroxid (H_2O_2) napjaink fontos környezetbarát oxidálószere, ipari előállítása (antrakinon eljárás) azonban drága palládium katalizátort igényel, továbbá a szerves maradékok eltávolítása, azaz az előállított H_2O_2 tisztítása is magas költségekkel jár. Az elektrokémiai oxigén redukciós reakció (ORR) lehetőséget nyújt egy költséghatékonyabb és egyszerűbb előállításra, ami ráadásul környezetbarátabb is, főleg, ha az ehhez szükséges elektromos energia megújuló forrásokból származik (pl. napenergia). Az eljárás során vízből és oxigénből, elektromos áram felhasználásával állítunk elő H_2O_2 -ot.

A H_2O_2 elektrokémiai úton történő előállításához szelektív ORR katalizátorok alkalmazása szükséges, melyek közül az egyatomos fémeket tartalmazó nitrogénnel dópolt szenek (M-NC) és bórral dópolt szenek ígéretes jelöltek lehetnek. Kísérleteinket folyamatos áramlású elektrokémiai cellában valósítottuk meg, melynek anódoldalán víz- vagy glicerinoxidáció, míg katódoldalán a kutatásunk középpontjában álló oxigénredukció zajlott. Megmutattuk, hogy csupán az oldott oxigén jelenléte a katoliban nem elegendő nagy reakciósebességek elérésére, ugyanis ebben az esetben a maximális áramot limitálja a reaktáns, azaz az oxigén, gyenge oldhatósága vizes oldatokban. Ezt a problémát gázdiffúziós elektród alkalmazásával orvosoltuk, melynek katalizátorral borított mikropórusos rétege az oldatfázissal érintkezett, míg a gázfázisú oxigén reaktáns folyamatos pótlása a makropórusos réteg felől történt. Ezzel az elrendezéssel iparilag is releváns reakciósebességeket értünk el. Ezt követően célunk volt azon reakcióparaméterek meghatározása, amelyek mellett a lehető legnagyobb termékszelektivitás érhető el H_2O_2 -ra, mind kis, mind pedig nagy áramsűrűségeken. Ehhez különböző M-NC (M = Fe, Ni, FeNi) és bórral dópolt szén katalizátorokat vizsgáltunk. Megállapítottuk, hogy az M-NC katalizátorok szelektivitása nagyban változik a reakcióparaméterekkel (katolít áramlási sebesség és áramsűrűség), ráadásul nagyon széles tartományban (15–75% H_2O_2 Faraday hatékonyság (FE) között). Ezzel szemben a bórral dópolt szenek szelektivitása lényegesen jobbnak bizonyult ($\text{FE}_{\text{H}_2\text{O}_2} \geq 90\%$), valamint ez független volt a reakcióparaméterektől. Ezen ideális tulajdonsága miatt ezt a katalizátort kezdtük vizsgálni részletesebben: megvizsgáltuk a katoliban lévő kationok, illetve a réteg stabilitásához elengedhetetlen ionvezető polimer, a Nafion mennyiségének hatását. Az irodalomban általánosan alkalmazott Nafion-tartalmakat (70-80 m/m% vagy akár ennél is nagyobb) ugyanis meglepően nagynak találtuk, emiatt célul tűztük ki annak kiderítését, hogy ez valóban szükséges-e az optimális működéshez, nevezetesen a magas termékszelektivitáshoz, valamint a nagy áramsűrűségek eléréséhez.

Elektrokémiai metán-oxidáció nemesfém katalizátorokon

Galbicsek Noémi Vanda^{a,b}, Endrődi Balázs^{a,b}

^aSzegedi Tudományegyetem, Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

^bMTA-SZTE Lendület Alkalmazott Elektrokémia kutatócsoport, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

Az üvegházhatású gázok kibocsátásának csökkentése, illetve az energiatárolási technológiák fejlesztése és ehhez megújuló energiaforrások alkalmazása napjaink energetikai és környezeti stratégiáinak meghatározó elemei. Az üvegházhatású gázok közül a metán, bár kisebb koncentrációban van jelen a légkörben, mint a szén-dioxid, annál 86-szor erősebb hőviszattartó képességgel rendelkezik, így a második legjelentősebb antropogén üvegházhatású gáz, mely a globális kibocsátás 20 %-ért felelős. Felhasználása főként az elégetésén keresztül történő energiatermelésen alapul, mely nagy szén-dioxid lábnyommal rendelkező folyamat.

A célunk ezen kutatómunka során alacsony hőmérsékleten megvalósítani a metán részleges oxidációját, így értékes vegyületeket (pl. metanol, szén-monoxid) előállítva. Ezt a későbbiek során a már nagyipari méretekben is alkalmazott szén-dioxid redukciós katód-folyamatokkal[1] kapcsolva, azok energiaigényét csökkenteni lenne hivatott, a szelektíven létrehozott értékhozzáadott termék létrehozása mellett.

A reakció lejátszására két fő irányvonal nyílik: direkt, illetve indirekt mechanizmus. Ezek abban különböznek, hogy még a direkt mechanizmus során nem szükséges erélyes oxidálószer használata, utóbbi esetén az oxidálószer teszi lehetővé a rendkívül nagy kötési energiával rendelkező C-H kötés felbontását (415,5 kJ/mol). A metán oldhatósága az elektrokémiai reakciókban leggyakrabban alkalmazott vizes közegben csekély (22.7 mg/L), így a megfelelő reakciósebesség eléréséhez – hasonlóan, mint korábbi, szén-monoxid elektrolízist célzó munkám során[2] – gázdifúziós elektródokat alkalmazunk. Ezek egy porózus hordozóból állnak, melyen a katalizátorréteg helyezkedik el. A termékanalízist egy általunk a rendszerbe kapcsolt tömegspektroszkóppal végezzük, annak érdekében, hogy a nem folyamatosan képződő esetleges – főként gáz halmazállapotú - termékek is analizálhatóak legyenek. A folyadéktermék-analízist pedig NMR segítségével végezzük. Ezen anyagok reakcióban mért tulajdonságait alapul véve ezeket ko-katalizátorként tervezzük vizsgálni, illetve működési mechanizmusuk megértése által egyéb átmenetifém- katalizátor létrehozását tervezzük. Vonalként tervezzük használni a további katalizátorok feltérképezésénél, illetve létrehozásánál a későbbiekben.



A Kulturális és Innovációs Minisztérium 2025-2.1.1-EKÖP kódszámú Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

[1] R. Kortlever, J. Shen, K. J. P. Schouten, F. Calle-Vallejo, and M. T. M. Koper, “Catalysts and Reaction Pathways for the Electrochemical Reduction of Carbon Dioxide,” *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 6, no. 20, pp. 4073–4082, Oct. **2015**,

[2] N. V. Galbicsek *et al.*, “Comparative Study of Different Polymeric Binders in Electrochemical CO Reduction,” *Energy and Fuels*, **2024**

Csillagközi kénvegyületek vizsgálata

Vámi Ármin^a, Dr. Góbi Sándor^b

^a*Székesfehérvári Vasvári Pál Gimnázium, Székesfehérvár, Tolnai u. 41.*

^b*ELTE TTK Kémiai Intézet, Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A*

Kutatásom témája a csillagközi térben előforduló kénvegyületek laboratóriumi elemzése.

A vizsgálandó anyagoknál a tioacetamidra (CH_3CSNH_2) esett a választásunk. A méréseket a VIZSLA nevű berendezés segítségével végezzük [1]. Az eszköz alkalmas a vegyületek jegeinek vizsgálatára a sűrű molekulafelhőkben tapasztalható alacsony hőmérsékleten az úridőjárás modellezésével. Az azonosítás módszere a spektroszkópia.

Korábbi kutatásokban az kriogén mátrixba beágyazott tioacetamidot vizsgáltuk [2]. A leválasztás után UV sugarakkal sugároztuk be. A spektrumban az UV besugárzás hatására végbemenő bomlások termékei jelentek meg, például az izotiocíánsav (HNCS). A besugárzást követően a minta kontrollált módon történő melegítésének hatására az illékony bomlástermékek szublimációja ment végbe. A bomlási folyamatok azonosítása IR spektrumok segítségével történt.

A VIZSLA HABS eszköze segítségével a jegek felszíne hidrogénatomokkal bombázható. A kutatás során tiszta amorf tioacetamid jegekben végeztük a vizsgálatokat [3]. A spektrumban bekövetkező változások alapján valószínűsíthetően tion–tiol tautomerizáció megy végbe, amit UV besugárzás nélkül, pusztán hidrogénatomok hatására értünk el. A besugárzást nélkülöző folyamatok fontosak lehetnek a sűrű csillagközi porfelhők belsejében, mivel még ebben a környezetben is végbemehetnek reakciók a nagy számban jelenlévő hidrogénatomok miatt.

A legutóbbi mérések során a tiszta amorf jegek felszínét elektronokkal sugároztuk be. A spektrumban megjelenő bomlástermékek között felismerhető az acetonitril (CH_3CN), valamint a tiocianát anion (CSN^-) is. Emellett a vízzel kevert amorf jegek felszínét is bombáztuk elektronokkal. A korábbi bomlástermékek mellett itt még a cianát anion (CN^-) is megjelenik.

A tervek között szerepel a bomlási, illetve hidrogénezési reakciók további vizsgálata, az eddigi munka organikus folytatása. A vizsgálandó anyagok közé a tioacetamid mellett a tiokarbamid és annak *N*-metilezett származéka (az *N*-metil-tiokarbamid) is bekerülhet.

A kapott spektrális adatok hasznosak lehetnek, mivel a csillagászok is felhasználhatják a teleszkópos megfigyelések során a csillagközi jegekben található kénvegyületek azonosításához. A vizsgálatok fontos jelentőséggel bírhatnak a komplex szerves molekulák formációjának jobb megértésében, amelyek potenciálisan lehetnek élet alapkövei is.

[1] <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/5.0061762>

[2] <https://doi.org/10.1063/5.0177587>

[3] <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.4c05817>

Szeretném megköszönni mentoromnak, Dr. Góbi Sándornak a támogatását, és az ELTE Kémiai Intézetének a kutatásban való részvételi lehetőség biztosítását számomra!

Nyomás alatt születik a teljesítmény - a cellakompresszió és a rendszerelemek szerepe a szén-dioxid elektrolízisben

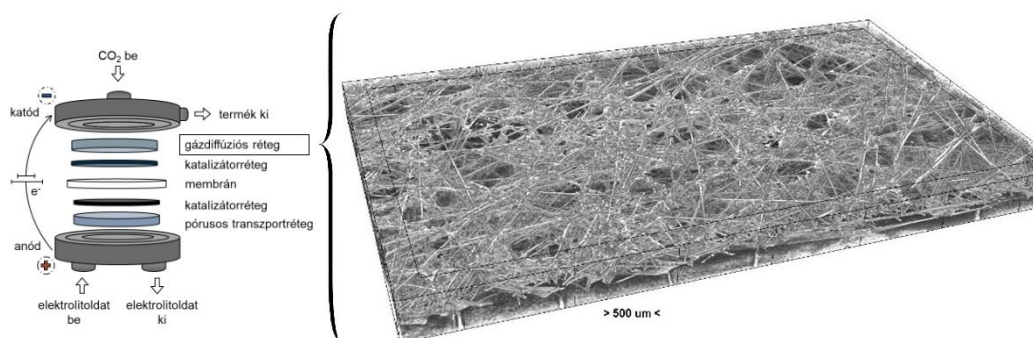
Józó Viktor^a, Dr. Endródi Balázs^a, Dr. Janáky Csaba^a

^aSZTE Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, 6720 Szeged, Rerrich Béla tér 1.

A CO₂-elektrolízis egy egyre többet kutatott területe az elektrokémiának korunk környezeti kihívásai végett. Technikai és gazdasági szempontból a szén-dioxid gáz szén-monoxiddá alakítása bizonyult a leghatékonyabbnak jelen ismereteink szerint, de ez is csak a cellák hatékony működtetésével lehetséges. Az elektrolizáló cellákban alkalmazott pórusos elektródok összenyomása meghatározhatja az elektrolizáló cella működését, [1] azonban ennek vizsgálatáról ez idáig nem született részletes tanulmány.

Munkám során a porlasztva fújásos technikával porózus szénhordozóra felvitt ezüst katalizátorrétegek viselkedését vizsgáltam elektrolízis közben. Egy adott típusú cella több működési paraméterét rögzítettem és csak a pórusos elektródok összenyomásának mértékét változtattam a távtartás egyenletes csökkentésével. Ezt a műveletet négy különböző szénhordozóra felvitt ezüst katalizátorréten végeztem el, hogy kiderítsem, hogy melyiknek melyik az üzemeltetésre alkalmas tartománya szelektivitás és energiahatékonyság szempontjából elektrolízis közben. A szénhordozók szerkezete, azaz, hogy eseti szálakban vagy rendezetlen mintában lettek-e kialakítva döntő befolyásúnak bizonyult; a cellakompresszióra más és más módon reagálnak, mint szerkezeti, úgy elektrokémiai szempontból is.

Kutatásom során együttműködtem a SZTE Pórusos Nanokompozitok Kutatócsoport kutatóival, akik a gázdifúziós réteg fizikai tulajdonságait, köztük a vezetőképességet és a porozitást vizsgálták. Méréseikkel az általunk tapasztalt kémiai változások és a használt szénhordozórétegek közötti összefüggések megértéséhez kerültünk közelebb.



[1] Lee, D. U. et al. Controlling Mass Transport in Direct Carbon Dioxide Zero-Gap Electrolyzers via Cell Compression. ACS Sustain Chem Eng **11**, 16661–16668 (2023).

Szeretném megköszönni Dr. Sebők Dánielnek és Dr. Kukovecz Ákosnak, hogy munkájukkal hozzájárultak kutatásom sikerességéhez.

Reakciósebességi együtthatók kvantummechanikai számítása

Ecseri Gábor^a

^a*ELTE Kémiai intézet, Molekulaszerkezet és Dinamika Laboratórium*

Az utóbbi évszázad során számos, a hőmérsékletfüggő reakciósebességi együttható kiszámítását célzó módszer vált ismertté az irodalomban. A legelterjedtebb módszerek részlegesen vagy teljesen elhanyagolják a kvantumhatásokat. MSc munkám során egy teljesen a kvantummechanikára épülő módszert implementáltam, melynek alapjait Miller, Schwartz és Tromp fektették le [1]. A módszer a reakciósebességi együttható közvetlen, direkt meghatározását teszi lehetővé, így nincs szükség az igen részletes, a kezdeti és a végállapotok közötti átmeneti információ drága és körülményes számítására. Az általam implementált algoritmus az alábbi öt fő lépésből áll [2]: (1) az úgynevezett termikus fluxus diagonalizálása, (2) a termikus fluxus sajátfüggvényeinek időfejlesztése, (3) az úgynevezett fluxus autokorrelációs függvény kiszámítása, (4) a fluxus autokorrelációs függvény integrálása, és végül (5) az eredmény osztása a reaktáns partíciós függvényével.

Az általam kifejlesztett kód a GENIUSH programcsomag egy jelentős funkcióval való bővítését jelenti. A GENIUSH programcsomagot eredetileg a magmozgások időfüggetlen Schrödinger-egyenletének (kvázi)variációs megoldására fejlesztette ki a kutatócsoportunk [3]. A GENIUSH által használt általános kinetikus energia reprezentáció lehetővé teszi, hogy a kutatómunka kifejlesztett kód bármely reakcióra alkalmazható legyen, amint a felhasználó megadta a potenciális energia felületet és definiálta a számolás során használandó belső koordinátákat.

Két modellrendszeren (az egydimenziós Eckart-gát, illetve a kollineáris $\text{H}_2 + \text{H} \rightarrow \text{H} + \text{H}_2$ reakció) is végeztem számításokat, hogy igazoljam a kódom helyes működését. Végül alkalmaztam a kódot a $\text{H}_2 + \text{D} \rightarrow \text{H} + \text{HD}$ reakció teljes dimenziós leírására. Az Eckart-gát esetében a számolt reakciósebességi együtthatók jó egyezést mutattak az analitikus eredményekkel. Hasonlóképpen, széles hőmérsékleti skálán kiváló egyezést kaptam az irodalmi adatokkal a másik két reakció esetében. A kódom tesztelése közben, numerikus hibák nyomán megjelenő, fizikailag nem értelmezhető termikus fluxus sajátértékeket azonosítottam, melyek megjelenését egy új, részlegesen átrendezett alaknak nevezett kinetikus energia operátor alak bevezetésével sikerült elkerülni.

[1] W. H. Miller, S. D. Schwartz, J. W. Tromp: *J. Chem Phys*, **1983** (79), 4889-4898.

[2] W. H. Thompson, W. H. Miller, *J. Chem Phys*, **1997** (107), 7194-7201.

[3] E. Mátyus, G. Czakó, A. G. Császár.: *J Chem Phys*, **2009** (130), 134112-134127.

Hálásan köszönöm témavezetőimnek Dr. Császár Attilának és Dr. Fábri Csabának a sok segítséget és támogatást!

Szerves kémia II. szekció / Organic chemistry session II

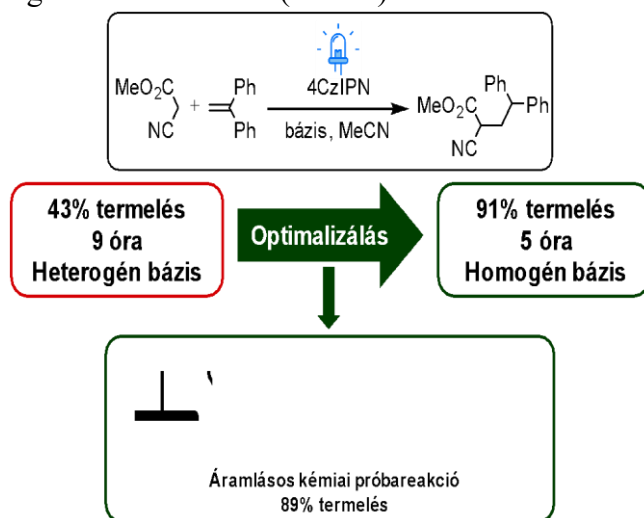
3D-nyomtatott fotoreaktorban végzett C-alkilezési reakció kísérlettervezésen alapuló optimalizálása

Gémes Gergő^a, Richter Dóra^a, Hangya Kinga Imola^a, Kisszékelyi Péter^b, Kupai József^a

^aBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

^bComenius University Bratislava, Department of Organic Chemistry, 842 15 Bratislava, Ilkovičova 6

A fotokatalízis napjainkban reneszánszát éli – a fotont nevezik a 21. század reagensének is. [1] Népszerűségét annak köszönheti, hogy segítségével kimondottan enyhe körülmények közt végezhetünk, akár közismerten nehézkes átalakításokat is. A fotokatalitikus reakciók eredményét számos tényező befolyásolhatja, ezért optimalizálásuk nem mindig egyszerű feladat. Munkám során egy korábbi kutatásaim alatt vizsgált reakció (1. ábra) optimalizálását végeztem el kísérlettervezés segítségével. Ezt megelőzően, egy pontos, reprodukálható folyamatot terveztem, majd megállapítottam a vizsgálni kívánt faktorokat, oldószer- és bázis-screening kísérleteket végeztem, és vizsgáltam a reakció időbeli lefutását a reakcióidő meghatározásához. Egy 2⁴ teljes faktoros terv alapján felállítottam egy modellt, ami a validáló mérések alapján jól leírta a reakciót. A *Box–Wilson*-optimalizálás, és az azt követő újabb validálás után a már optimalizált reakciók átlagos termelése 91% lett, ami a kiindulási körülmények között 43% volt. Emellett a KO^tBu heterogén bázist sikerült a homogén DBU-ra (1,8-diazabicyclo(5.4.0)undec-7-én) cserélni, ami a jövőben a reakció áramlásos kémiai megvalósítását is lehetővé teszi. Ennek igazolására egy próbareakciót is végeztem, amely 89% termelés mellett szolgáltatta a terméket. (1. ábra)



1. ábra Az optimalizálni kívánt reakció (felül), az optimalizálás eredménye (alul)

[1] Bonfield, H. E.; Knauber, T.; Lévesque, F.; Moschetta, E. G.; Susanne, F.; Edwards, L. J. *Nat. Commun.* **2020**, (11), 804.

A kutatást az EKÖP-25-2-BME-114 kódszámú Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Program, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (FK138037), és a Richter Gedeon Talentum Alapítvány Kiválósági PhD Ösztöndíja finanszírozta. A Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap (RRF-2.3.1-21-2022-00015) projektje az EU támogatásával valósult meg.

Szantonin vázas aminoalkoholok sztereoszelektív szintézise és vizsgálata

Boncz Mária Fanni, Szakonyi Zsolt

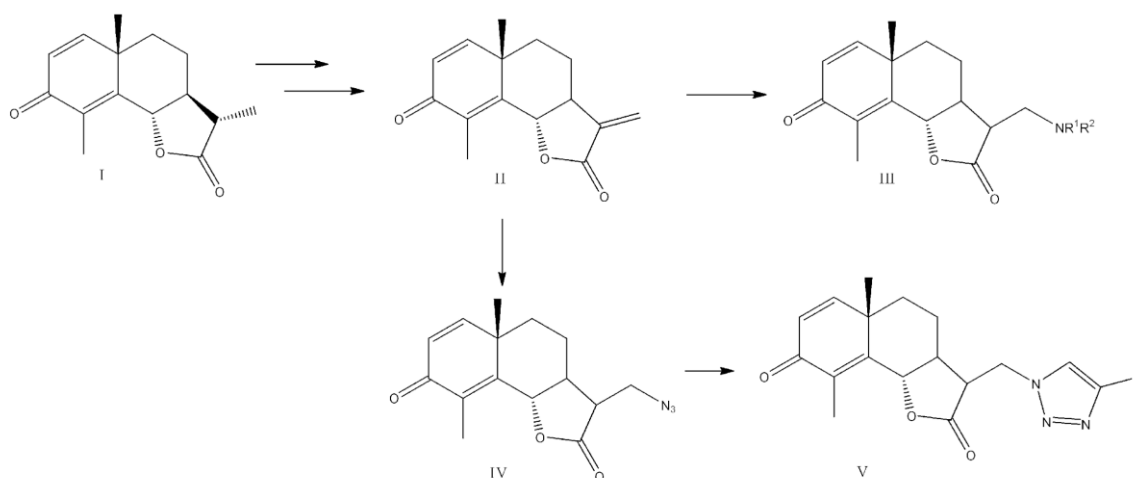
Szegedi Tudományegyetem Gyógyszerészi Kémiai Intézet, Eötvös utca 6, H-6720 Szeged, Magyarország

A szeszkviterpén laktonok változatos növényi szekunder anyagcsere termékek. Képviselőik között találhatunk antiproliferatív, gyulladáscsökkentő és antimikrobiális hatást mutató származékokat is [1].

Kísérleti munkám során a természetes forrásból származó királis, α -szantonint (**I**) választottam, mely a kereskedelmi forgalomban is beszerezhető. Ebből a molekulából az irodalom alapján két lépésben állítottam elő a kulcsintermedier 11-*exo*-metilén-szantonint (**II**), melyből különböző primer aminokkal sztereoszelektív Michael-addíció révén változatos szerkezetű aminoalkoholokhoz jutottam (**III**). [2,3]

Egy másik úton az *exo*-metilénre történő nátrium-azid addícióval kapott azidolaktont (**IV**) a megfelelő alkinnel reagáltatva úgynevezett Click-reakcióval triazol származékokat tudtam előállítani (**V**). [4]

Az előállított származékok biológiai aktivitását együttműködés keretében vizsgálták mind antiproliferatív, mind antimikrobiális vonatkozásban. A kapott vegyületek kémiai szerkezetét MS és NMR spektroszkópiás módszerekkel vizsgáltuk.



[1] J. Wang, S. Su, S. Zhang, S. Zhai, R. Sheng, W. Wu, R. Guo, *Eur. J. Med. Chem.*, **2019** (175) 215-233

[2] Chen, H.; Wu, G.; Gao, S.; Guo, R.; Zhao, Z.; Yuan, H.; Liu, S.; Wu, J.; Lu, X.; Yuan, X.; Yu, Z.; Zu, X.; Xie, N.; Yang, N.; Hu, Z.; Sun, Q.; Zhang, *J. Med. Chem.* **2017** (60), 6828–6852

[3] T. R. Valkute, E. K. Aratkatla, N. A. Gupta, S. Ganga, M. K. Santra and A. K. Bhattacharya, *RSC Adv.*, **2018** (67) 38289—38304

[4] C.Pavan Kumar, A. Devi, P.Ashok Yadav, *et al. J. Asian Nat. Prod. Res.* **2016** (18), 1063-1078

Kísérletek pegaharin E előállítására

John Tamás Miklós^{a,b}, Milen Mátyás^a

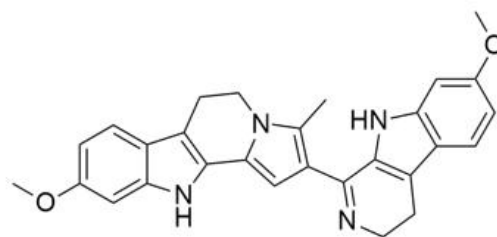
^aEGIS Gyógyszergyár Zrt., 1106 Budapest, Keresztúri út 30-38.

^bBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A *Peganum harmala* egy trópusi növény, amelyet a tradicionális kínai gyógyászatban használnak, és az évtizedek során számos alkaloidot izoláltak belőle [1]. Ezeknek a természetes anyagoknak egy jelentős része indol vagy β -karbolin vázrészt tartalmaz. Ilyen típusú alkaloidok a pegaharinok is [2], melyek közül a pegaharin E-t terveztem előállítani, és amely szintézisére a szakirodalomban eddig nem található példa. Az ehhez szükséges kiindulási anyag, a 6-metoxitriptamin meglehetősen drága anyag, ezért a szintézist először triptaminból kiindulva terveztem végrehajtani. A célvegyület és izomerjének szintézise során érdekes mellékreakciók is lejátszódtak. A kinyert intermedierek szerkezetfelderítését elvégeztük, illetve a lehetséges mechanizmust felvázoltunk.



Peganum harmala



pegaharin E

[1] M. Moloudizargari, P. Mikaili, S. Aghajanshakeri, M. Asghari, J. Shayegh: *Pharmacogn. Rev.*, **2013** 7(14), 199-212.

[2] Z. Wu, N. Chen, Q. Tang, S. Chen, Z. Zhan, Y. Zhang, G. Wang, Y. Li, W. Ye: *Org. Lett.*, **2020**, 22(18), 7310–7314.

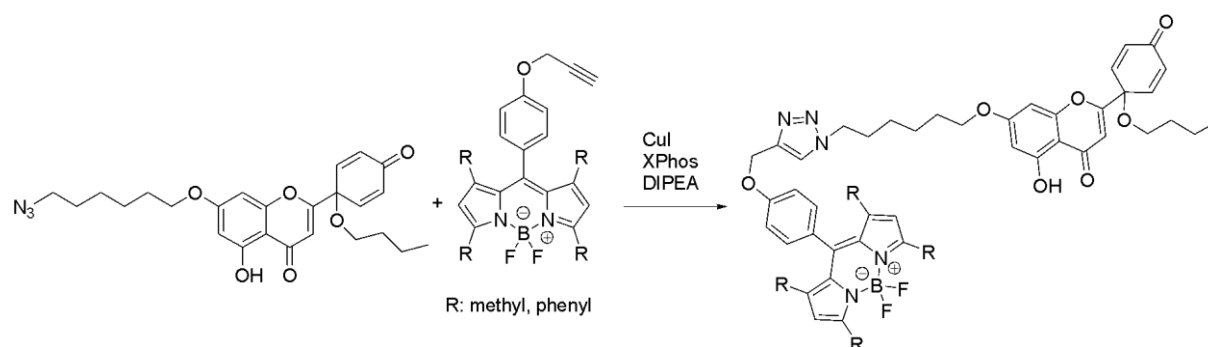
Synthesis and fluorescent labelling of anticancer flavonoids

Benjamin Kovács, Attila Hunyadi, Erzsébet Mernyák

University of Szeged, Faculty of Pharmacy, Institute of Pharmacognosy

Plants have a deep history in medicine due to their wide array of biologically active compounds. Flavonoids are one group of such compounds, that can function as antioxidants, enzyme inhibitors or even anticancer agents. A subgroup called protoflavones, isolated from Taiwanese ferns, showed propitious anticancer results, owing to their unique structure [1]. They possess a rare non-aromatic B ring, which is their main pharmacophore. Their most well-known member is the protoapigenone. Its strong cytotoxic activity inspired the synthesis of new derivatives. The protoapigenone-1'-*O*-buthylether proved to be more efficient than the original [2]. Concerning the mechanism of action, it is known that they can interfere with the ATR-mediated DNA damage response and can stop the cell cycle, but the exact mechanisms are still unknown. Nowadays, fluorescent labelling has become a popular alternative for radiolabelling, as it is a safer and environmentally friendlier method for tracking biologically active compounds. Boron-dipyrromethene dyes (BODIPYs) are a class of fluorophores, which possess unique photophysical properties and are easily functionalizable [3]. They are relatively insensitive to the polarity and pH of their environment, making them stable under physiological conditions.

We aimed to synthesize BODIPY-protoflavone conjugates in order to uncover their mechanisms of action inside cancerous cells. We introduced moieties for conjugation to both reactants and linkers to reduce the risk of interference. After the successful conjugation, we tested whether the conjugates retain their original cytotoxic activity in different cancerous cell lines with an MTT assay. With a non-interfering labelling we can start investigating the mechanisms of action.



Scheme 1. Conjugation of a modified protoapigenon-1'-*O*-buthylether with BODIPY dyes

[1] Hunyadi et al. *Phytochemistry Reviews* **2014**, 13, 69–77.

[2] Hunyadi et al. *PLoS ONE* **2011**, 6 (8), e23922.

[3] Cheng et al. *Advanced Materials* **2023**, 35 (18), 2207546.

We thank the support of NKFIH SNN 139323 and the National Academy of Scientist Education.

Biomolekulák zöld- vagy vörös-emittáló fluorofórral való jelölése

Hlogyik Tamás, Dr. Mernyák Erzsébet

*Szegedi Tudományegyetem, Gyógyszerésztudományi Kar, Farmakognóziái Intézet, 6720 Szeged, Eötvös utca 6.
hlogyik@chem.u-szeged.hu*

A biológiai rendszerekben zajló folyamatok feltérképezése és megértése alapvető fontosságú az orvosi biológia és a gyógyszerkémia számára. E határterületek jelentős mértékben támaszkodnak olyan képalkotó technikákra, amelyekkel a molekuláris szintű jelenségek közvetlenül vizsgálhatók [1]. A fluoreszcens jelölés lehetővé teszi biomolekulák és gyógyszerhatóanyagok kölcsönhatásainak, mozgásának nyomon követését a sejten belül és kívül [2], miközben fokozatosan felváltja a kevésbé környezetbarát radioizotópos nyomjelzési módszereket. Kiemelt jelentőségű a megfelelő optikai, kémiai és biológiai tulajdonságokkal rendelkező fluorofórok kiválasztása, hatékony szintézisük, valamint olyan funkciós csoportok beépítése, amelyek lehetővé teszik a biológiailag aktív molekulákhoz való kapcsolást. A jelölendő vegyületek esetében fontos olyan konjugálási hely megválasztása, amely módosítása nem befolyásolja az eredeti biológiai aktivitást.

Kutatásaink során olyan, különböző funkciós csoportokat és alapvázakat tartalmazó vegyületeket állítottunk elő, amelyek fényemissziója lefedi a látható spektrum jelentős részét, így rozamin, BODIPY (difluór-bórindacén) és *aza*-BODIPY alapvázak vegyületeket választottunk. További céljaink között szerepelt, hogy a vegyület típusától függően jól módosíthatóak legyenek, alkalmazhatóak fotodinámiás terápiában, vagy biomolekulák jelölésére.

Munkánk során főként Williamson-féle éterszintézist, Vilsmeier-Haack formilezést, aldol-kondenzációs reakciókat, Michael-addíciót, a konjugálásukhoz pedig réz(I)-katalizált azid-alkin cikloaddíciós reakciót vagy éterszintézist alkalmaztunk. Együttműködő partnerek segítségével vizsgáltuk az általunk előállított, irodalomban még nem ismert vegyületek biológiai hatásait, valamint jellemeztük azokat nagyműszeres eljárásokkal.

Legfontosabb eredményeink közé tartozik, hogy a két trietilénglikol szubsztituenst tartalmazó *aza*-BODIPY származék az A431 humán karcinóma sejtvonalon kiváló fényérzékenyítő anyagnak bizonyult fotodinámiás terápiában; a szakirodalomban publikáltakkal ellentétben az ösztradiol, a 3-as helyzetű –OH csoportján módosítva is megőrzi hormonális aktivitását; számos, nehezen megvalósítható szerves kémiai reakciót egyszerűsítettünk, környezetbarátabbá tettük a reakciókörülményeket, javítottunk a hozamokon; valamint előállítottunk új fluorofórokat, melyek közül több is, a vizsgálatok és hatásmechanizmusuk szempontjából előnyös vörös-emisszióval rendelkezik.

[1] J. V. Jun, D. M. Chenoweth, E. Petersson.: *J. Org. Biomol. Chem.*, **2020**, 18(30), 5747-5763.

[2] W. Xu, Z. Zeng, J. H. Jiang, Y. T. Chang, L. Yuan.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 55(44), 13658-13699.

Köszönjük az NKFIH SNN 139323 támogatását.

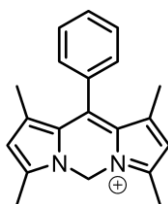
Kísérletek CARDIPY fluorofór egységet tartalmazó vegyületek szintézisére

Palotai Gitta Dóra^a, Domahidy Farkas László^a, Mucsi Zoltán^a, Kovács Ervin^{a,b}

^aBrainVisionCenter Nonprofit Kft.; 1094 Budapest, Liliom utca 43-45. 6. em. 1. ajtó

^bHUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

A bórdipirrometének (BODIPY-k) egy kiváló tulajdonságokkal rendelkező festékcsalád, de emellett nagyon lipofilek, ami limitálja a biohasznosíthatóságukat [1]. A karbon-dipirrometének (CARDIPY-k) viszont amellet, hogy rendelkeznek a BODIPY-k pozitív jellemzőivel – többek között nagy fényintenzitással – a kationos jellegük miatt jobb vízzoldhatóságot és fotostabilitást mutatnak [2].



A probléma viszont, hogy eddig csak rossz termeléssel tudjuk az alapvegyületet előállítani, ezt kívántuk kiküszöbölni. Először az irodalmi módszert végeztük el, és megpróbáltuk optimalizálni. Utána áttértünk a pirrol-2-karbaldehiddel való reakciókra, ahol az 1,1'-metilénbis(1*H*-pirrol-2-karbaldehid) intermediereken keresztül igyekeztünk gyűrűt zárni. Ezután az irodalmi módszer inverzét kíséreltük meg, vagyis először a 2,4-dimetilpirrolt trifoszgénnel reagáltattuk THF-ben, különböző körülmények között. Következőleg egy a mezo-szénatomon 2-karboxiaril-csoportot tartalmazó származékot kívántunk létrehozni, majd a gyűrűzárást kíséreltük meg. Mindezek mellett a 2,4-difenil-1*H*-pirrolból is elő kívántuk állítani CARDIPY-vegyületeket, így ezt az irodalmi módszer alapján meg is tettük. A reakcióinknál eddig részsikereket értünk el. Az eddigi tapasztalatok azt mutatják, hogy bizonyos reakcióutakat teljesen elvethetünk, de többenél még vannak felfedezetlen területek.

[1] Das S, Dey S, et.al. Biomolecules, **2023** (13), 1723.

[2] Liu J, Zhang H, Sun YQ, Liu M: J. Am. Chem. Soc., **2020** (142), 17069-17078.

A kutatómunka az MTA Bolyai János Posztdoktori Ösztöndíj támogatásával jött létre (BO/00085/24/7).

**A KIADVÁNYKÖTETBE BENYÚJTOTT
KÖZLEMÉNYEK / SHORT
COMMUNICATIONS**

Dibenzoil-borkősav alapú rezolválás preparatív lépték alatti megvalósítása mágneses enantioszeparáció alkalmazásával

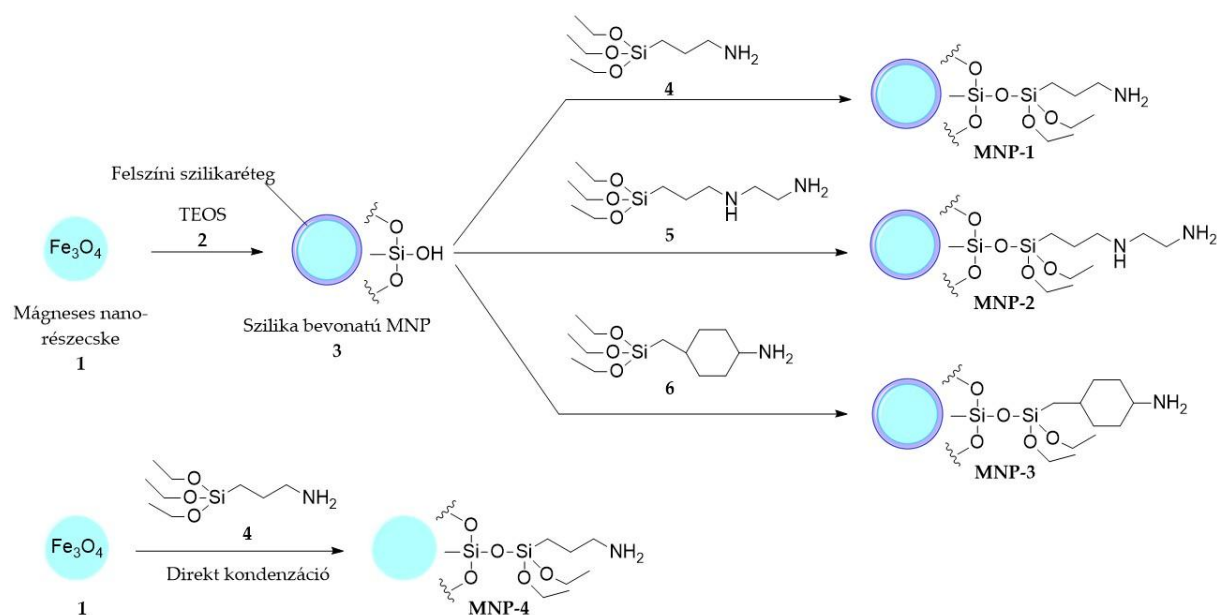
Jávor Bálint ^[1], Szegedi Dorka, Ádám Bálint Árpád, Hakkel Orsolya, Illés Levente,
Fűrjes Péter, Tóth Tünde, László Szabolcs, Golcs Ádám

^[1] Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és
Gazdaságtudományi Egyetem, Műegyetem rkp. 3., H-1111 Budapest, Magyarország

Az rezolválás kiemelt jelentőségű a szintetikus kémiában, mivel lehetővé teszi a királis molekulák tükörképi izomerjeinek, az enantiomereknek a szétválasztását. Mivel az enantiomerek biológiai hatásai, terápiás aktivitása és toxicitása jelentősen különbözhet, egyetlen enantiomer izolálása különösen fontos a gyógyszer-, agrár- és anyagtudományi kutatásokban. A rezolválási eljárások három fő típusa ismert: **klasszikus, enzimátikus és kinetikus** módszerek [1,2,3]. A klasszikus eljárás során az enantiomerek egy királis segédanyaggal diasztereomer sókat képeznek, amelyek eltérő fizikai tulajdonságaik alapján választhatók szét. Bár gazdaságos és jól finomhangolható megoldás, csak sóképzésre alkalmas vegyületeknél alkalmazható, és gyakran munkaigényes. A klasszikus megközelítések speciális változata a **diasztereomer koordinációs komplexeken alapuló rezolválás**, ahol a szétválasztás királis ligandumokkal kialakuló komplexképzésen alapul. Ez olyan esetekben is hatékony, amikor a sóképzés nem biztosítható, és a ligandum könnyen visszanyerhető [4,5]. Becslések szerint a királis gyógyszerek szintézisének **10–20%-a tartalmaz rezolválási lépést** [6]. A leggyakrabban alkalmazott segédanyagok közé tartoznak a borkősav-származékok, különösen az O,O'-dibenzil-L-borkősav (DBTA), amely aminoszármazékok és alkoholok enantiomerjeit képes szétválasztani. Ipari fontosságát számos gyógyszer például Tofisopam, Kloramfenikol, Szibutramin és Amlodipin előállítás is igazolja. Az automatizálás és a **nagy áteresztőképességű (HTS) szintézisek rohamos** fejlődésével nő az igény olyan rezolválási módszerek iránt, amelyek **mikro- és nanomoláris mennyiségben**, robotizált rendszerekben is alkalmazhatók [7]. A hagyományos kristályosításon alapuló elválasztások azonban ezen a szinten fizikai korlátokba ütköznek. A preparatív lépték alatti enantiomerelválasztás modern megközelítései közé tartoznak a kromatográfiai módszerek mellett a királis extrakciók, membránalapú szeparációk, valamint a **nanorészecske-alapú rezolválások**, amelyek nagy fajlagos felületük és újrahasznosíthatóságuk miatt különösen ígéretesek [8,9].

Munkánkban **elsőként alkalmazunk karbonsav-típusú rezolválószerrel nanorészecskén immobilizálva** kis molekulatömegű bioaktív aminok enantiomerjeinek elválasztására. Emellett a **koordinációs komplexképzésen nanorészecskén megvalósított rezolválás** egy új elválasztási eljárás, amely lehetőséget biztosíthat semleges racém keverékek hatékony enantiomerszeparációjára.

Első lépésben négy különböző típusú, kovalensen funkcionizált mágneses nanorészecskét állítottunk elő, amelyek az **1. ábrán** láthatók.

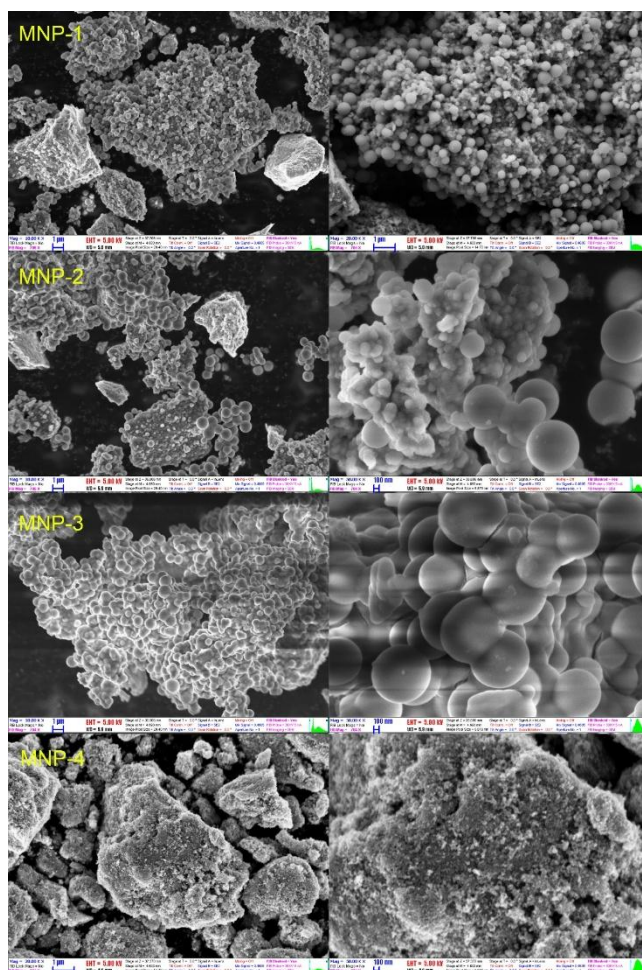


1. ábra

A különböző felületbevonattal és reaktív amin-csoporttal rendelkező linkerekkel ellátott mágneses nanorészecskék

Négy különböző módon funkcionizált mágneses nanorészecskét (MNP) állítottunk elő. Az MNP 1–3 esetében a mágneses nanomagot egységes szilícium-dioxid réteg borítja, míg az MNP-4-nél az aminfunkciós linker közvetlenül, egyrétegben kapcsolódik a mag felszínéhez. Az amincsoportot tartalmazó linkerek a szelektorok rögzítését szolgálják, melyek lánchossza valamint flexibilitásuk hatással van az enantiomerfelismerésre és az adszorpciós tulajdonságokra. A nanorészecskéket vastartalom-meghatározással (AAS), ATR-FTIR spektroszkópiával, valamint SEM–EDS mérésekkel jellemeztük. Meghatároztuk továbbá a szabadon hozzáférhető aminocsoportok mennyiségét, amely az MNP-k immobilizációs kapacitását jellemzi. A SEM-vizsgálatok aszimmetrikus részecskeméret-eloszlást mutattak, valószínűleg aggregáció következtében. A szilícium-dioxiddal bevont MNP-k (6,0–11,4 μm) lényegesen nagyobbak voltak, mint a bevonat nélküli MNP-4 (1,4 μm), ami a SiO_2 -réteg jelentős méretnövelő hatását igazolja. Az immobilizációs kapacitás 9–17 μmol amin/mg MNP között változott, és nem kizárólag a bevonat vastagságától, hanem egyéb felületi jellemzőktől is függött.

A **2. ábrán** a SEM-felvételek láthatók, amelyek a mágneses nanorészecskék alakját, méreteloszlását és látható szerkezeti homogenitását szemléltetik.

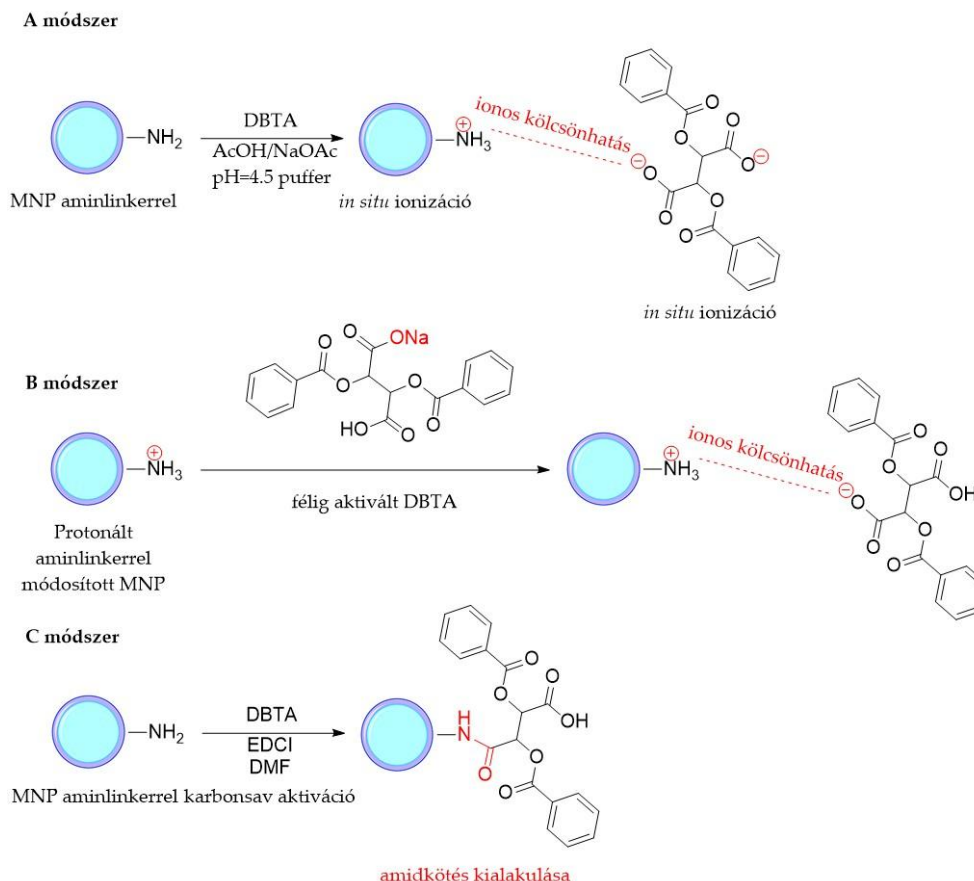


2. ábra

Különböző felbontású SEM-felvételek a funkcionizált MNP-kről

A SEM-képek alapján az MNP-1–3 mintákon a szilícium-dioxid bevonat nem összefüggő réteget alkot, hanem a felületen eloszló, gömbszerű klaszterek formájában jelenik meg. A mágneses mag felületét ezek a klaszterek nagyrészt lefedik, míg önálló szilícium-dioxid aggregátumok csak elvétve figyelhetők meg. Ezzel szemben a szilícium-dioxid héj nélküli MNP-4 egyenletesebb, filamentózus jellegű felületi struktúrát mutat, ami a közvetlen linker-funkcionalizálásra utal. Az enantiomertiszta szelektormolekulaként alkalmazott dibenzoil-borkősavat három különböző módszerrel rögzítettük a linker-funkcionizált MNP-k felületére. Az első két eljárás során ionos kötések kialakítását céloztuk meg, míg a harmadik módszernél kovalens kapcsolást alkalmaztunk az aminlinkereken keresztül.

Az alkalmazott MNP-kezelési eljárásokat a **3. ábra** mutatja be.

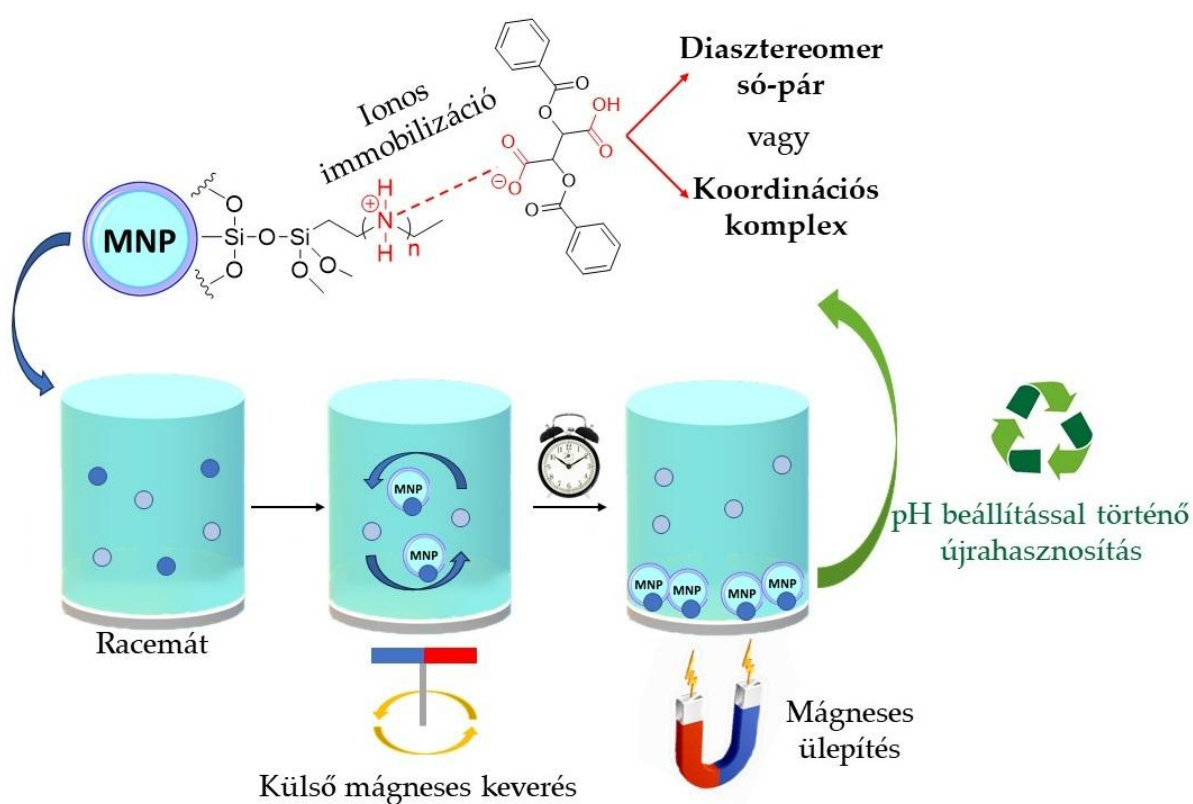


3. ábra

Az enantiomerfelismerésre alkalmas, dibenzoil-borkőssavval funkcionizált királis MNP-k előállításához alkalmazott három immobilizációs eljárás

Az első immobilizációs módszernél acetátpuffert alkalmaztunk az *in situ* deprotonálás és az aminolinkerek protonálásának elősegítésére. Bár ez a legegyszerűbb eljárás, fennáll annak a lehetősége, hogy egy szelektormolekula több kötőhelyet is elfoglaljon az MNP felületén. Ennek kiküszöbölésére egy továbbfejlesztett ionos rögzítési módszert is kib próbáltunk, amelyben a szelektort részlegesen aktivált formában, félig nátriumsóként reagáltattuk a funkcionizált MNP-ekkel. Ez csökkentette a többszörös kötődés valószínűségét, miközben növelte a dibenzoil-borkőssav rögzülésének hatékonyságát. A harmadik eljárás során a dibenzoil-borkőssavat kovalensen rögzítettük az MNP-k felületére karbodiimid-alapú kapcsolással. Bár ez a módszer összetettebb, ugyanakkor a legkedvezőbb regenerálhatóságot és többszöri felhasználhatóságot biztosítja.

Az enantiomerszeeparáció során a racemátokat az immobilizált DBTA kétszeres molarányában adagoltuk az MNP-khez, mivel ez a mennyiség biztosította a leghatékonyabb elméleti választást, és lehetővé tette az immobilizációs módszerek összehasonlítását. A vizsgálatok nem terjedtek ki a pH, a hőmérséklet vagy az oldószer hatásának vizsgálatára, mivel célunk egy semleges vizes, DMSO-t is tartalmazó, szobahőmérsékleten alkalmazható enantiomerdúsítási módszer kidolgozása volt. Hat királis modellvegyületet alkalmaztunk: mentolt (MEN), 1-feniletil-amin (PEA), efedrint (EPH), oktopamint (OCT), szinefrint (SYN) és terbutalint (TER). A mentol, az 1-feniletil-amin, az efedrin és a terbutalin esetében a borkósav-származékok hatékonyságát korábbi vizsgálatok már igazolták, míg az oktopamin és a szinefrin bevonása új lehetőséget teremtett a módszer kiterjeszthetőségének értékelésére. A **4. ábra** az ionosan immobilizált MNP-k általános szeeparációs eljárását mutatja be.



4. ábra

Ionosan funkcionizált MNP-ekkel végzett nagy áteresztőképességű enantioszeeparáció általános eljárása

Az eljárás során az enantiomertiszta DBTA ionos kötással rögzül az előzetesen funkcionizált MNP-k felületén található protonált oligoamin oldalláncokhoz. Az aktív felület telítése után a szabadon maradó karboxilcsoport diasztereomer sópárokat képez királis aminokkal, illetve koordinációs komplexeket királis hidroxilvegyületekkel.

Megfelelő inkubációs időt alkalmazva az oldatfázis a kevésbé preferált enantiomerben dúsul, amely a mágneses térben ülepedő MNP-k eltávolítása után egyszerű pipettázással vagy vákuumszűréssel izolálható. Az ionos rögzítés lehetővé teszi a szelektormolekula pH-változtatással történő reverzibilis leválasztását és visszanyerését. Az enantiomerszeparációt elsőként az MNP-3 mintán vizsgáltuk, mivel ez ionos és kovalens módon is hatékonyan funkcionálizálható. A különböző immobilizációs eljárásokkal előállított MNP-k több, mint 50%-ban kötötték meg a racemátokat, ami mérsékelt szelektivitást eredményezett. A korábban is jól elválasztható vegyületek racemátjaival végzett kísérletek (EPH, MEN, PEA, TER) nagyobb enantiomerdúsulást mutattak, míg SYN és OCT esetében is kimutatható volt az enantiomerszelektivitás, amely ismételt szeparációs lépésekkel tovább növelhető. A legnagyobb enantiomerfelesleget a terbutalin adta. A kovalensen funkcionizált MNP-vel végzett kísérletek eredményeit az **1. táblázat** foglalja össze.

1. táblázat. Az enantiomerdúsítás jellemzői ionosan DBTA-funkcionalizált (B módszer) MNP-3 alkalmazásával, a hagyományos félekvivalens módszernek megfelelő arányban, DMSO–desztillált víz (5:95 V/V%) elegyben, 25 °C-on.

Vendég- molekula	MNP-hoz kötődött arány (%)	Hozam (%)	Enantiomer többlet a felülúszóban (%)	F- paraméter	ee% két egymást követő elválasztási lépés után
EPH	66	68	45	0.31	54
MEN	70	60	38	0.23	49
SYN	83	34	13	0.04	19
OCT	79	42	21	0.09	26
PEA	68	64	37	0.24	43
TER	65	70	47	0.33	60

Összefoglalva egy, széles körben alkalmazható eljárást dolgoztunk ki királis aminok, alkoholok és aminoalkoholok enantiomerdúsítására DBTA-funkcionalizált mágneses nanorészecskék alkalmazásával. Az eljárás a hagyományos, kristályosításon alapuló rezolválással összemérhető hatékonyságot mutatott, miközben nem igényelt vegyületspecifikus optimalizálást, és közvetlenül alkalmazható 5% DMSO-t tartalmazó vizes oldatokban is. A módszer előnye, hogy olcsó, kereskedelmi forgalomban elérhető szelektormolekula felhasználásával alkalmas nagy racemátfelesleg párhuzamos, mikrtálca-alapú elválasztására, valamint lényegesen gyorsabb a klasszikus eljárásoknál. Emellett olyan racemátok enantiomerdúsítását is lehetővé teszi, amelyek enantiomerjei kristályosítással nem szétválaszthatók.

Felhasznált irodalom

- [1] Fogassy, E., Nógrádi, M., Kozma, D., Egri, G., Pálovics, E., Kiss, V. (2006). Optical resolution methods. *Organic & Biomolecular Chemistry*, 4(16), 3011-3030. DOI: 10.1039/B603058K
- [2] Faigl, F., Fogassy, E., Nógrádi, M., Pálovics, E., Schindler, J. (2008). Strategies in optical resolution: a practical guide. *Tetrahedron: Asymmetry*, 19(5), 519-536. DOI: 10.1016/j.tetasy.2008.02.004
- [3] Sistla, V. S., Langermann, J. V., Lorenz, H., Seidel-Morgenstern, A. (2011). Analysis and Comparison of Commonly Used Acidic Resolving Agents in Diastereomeric Salt Resolution—Examples for dl-Serine. *Crystal growth & design*, 11(9), 3761-3768. DOI: 10.1021/cg2001128
- [4] Bagi, P., Fekete, A., Kállay, M., Hessz, D., Kubinyi, M., Holczbauer, T., ... & Keglevich, G. (2015). A Case Study on the Resolution of the 1-i-Butyl-3-methyl-3-phospholene 1-Oxide via Diastereomeric Complex Formation Using TADDOL Derivatives and via Diastereomeric Coordination Complexes Formed from the Calcium Salts of O, O'-Diaroyl-(2R, 3R)-tartaric Acids. *Heteroatom Chemistry*, 26(1), 79-90.
- [5] Varga, B., & Bagi, P. (2020). Preparation of enantiomerically enriched P-stereogenic dialkyl-arylphosphine oxides via coordination mediated optical resolution. *Symmetry*, 12(2), 215.
- [6] Lin, G. Q., You, Q. D., & Cheng, J. F. (2011). Chiral drugs. *Chemistry and Biological Action*. Wiley, ed, 1.
- [7] Jones, M., & Goodyear, R. L. (2023). High-Throughput Purification in Drug Discovery: Scaling New Heights of Productivity. *ACS Medicinal Chemistry Letters*, 14(7), 916-919.
- [8] Cheng, Q., Ma, Q., Pei, H., He, S., Wang, R., Guo, R., ... & Mo, Z. (2023). Enantioseparation membranes: research status, challenges, and trends. *Small*, 19(20), 2300376.
- [9] Gogoi, A., Mazumder, N., Konwer, S., Ranawat, H., Chen, N. T., & Zhuo, G. Y. (2019). Enantiomeric recognition and separation by chiral nanoparticles. *Molecules*, 24(6), 1007.

LiCl egy lépéses átalakítása LiOH-dá trikalcium-aluminát ($\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$) segítségével

Török Péter^a, Kutus Bence^a

^a Szegedi Tudományegyetem, Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, Szeged, Dóm tér 7-8.

A mai világ egyik legtöbbet kutatott és vizsgált témája az elektromos mobilitás, valamint az ezt lehetővé tevő akkumulátorok gyártása és fejlesztése. Az elektromos meghajtású járművek egyik fő akkumulátor-típusa a lítiumion-akkumulátor. Ezen akkumulátorok katódjának fő alkotóeleme a lítium (általában valamilyen LiMeO_x -formában). A katódok anyagát valamilyen lítiumtartalmú előanyagból, ún. prekursorból kiindulva állítják elő. Sok éven keresztül a lítium-karbonát (Li_2CO_3) volt a piacvezető prekursor, azonban a fejlettebb (pl. a Ni-, Mn-, Co- és Li-tartalmú, ún. NMC-katódok) katódok megjelenésével a lítium-hidroxid-monohidrát ($\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$) vált előnyösebb kiindulási anyaggá. Li_2CO_3 prekursor esetén ugyanis magasabb szintézishőmérséklet ($\sim 900^\circ\text{C}$) szükséges, ami könnyen a katód kristályszerkezetének és a nikkell oxidációs állapotának megváltozásához vezethet. Ezzel szemben, $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$ esetén elegendő mindössze $650\text{--}700^\circ\text{C}$, ami jelentősen képes növelni az akkumulátorok stabilitását, ezáltal élettartamát. Ezen okokból kifolyólag a $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$ várhatóan domináns szereplővé fog válni az elkövetkezendő években [1,2].

A Földön két fő elsődleges lítiumforrás különböztethető meg: a lítiumtartalmú ércék és a sós vizek. Az ismertebb lítiumforrás az ércék (pl. a $\text{LiAlSi}_2\text{O}_6$ összetételű spodumen nevű érc), melyből a jelenlegi ipari lítium- és lítium-hidroxid előállítás nagyrésze történik. A másik, szintén releváns, de gazdasági okok miatt egyelőre kevésbé kihasznált lítiumforrás a sós vizek (pl. tengerek és óceánok vizei). Ezen vizek akár $0,2\text{ mg L}^{-1}$ lítiumion-koncentrációval is rendelkezhetnek, ami a Föld összes sósvíz-készletét figyelembe véve több, mint 230 milliárd tonna lítiumot jelent világszerte [3]. A legfontosabb lítiumforrások elsősorban Dél-Amerikában, Ázsiában és Ausztráliában találhatók [4].

A LiOH jelenlegi, sós vizekből (LiCl-ből) történő ipari előállítási módszere egy soklépéses folyamat. A sós vizet először bepárolják, aztán a LiCl-et elválasztják a szennyezőktől (pl. alkáliloklidok), majd a LiCl-et reagáltatják a Na_2CO_3 -tal, lecsapva ezzel a Li_2CO_3 közterméket. Az utolsó lépésben, a Li_2CO_3 -ot Ca(OH)_2 segítségével LiOH-dá alakítják – a probléma, hogy a Ca(OH)_2 alacsony oldhatósága ($\sim 1,6\text{ g l vízben}$ [5]) miatt alacsony lesz a LiOH hozama (mindössze 3.5 w%) [1,6].

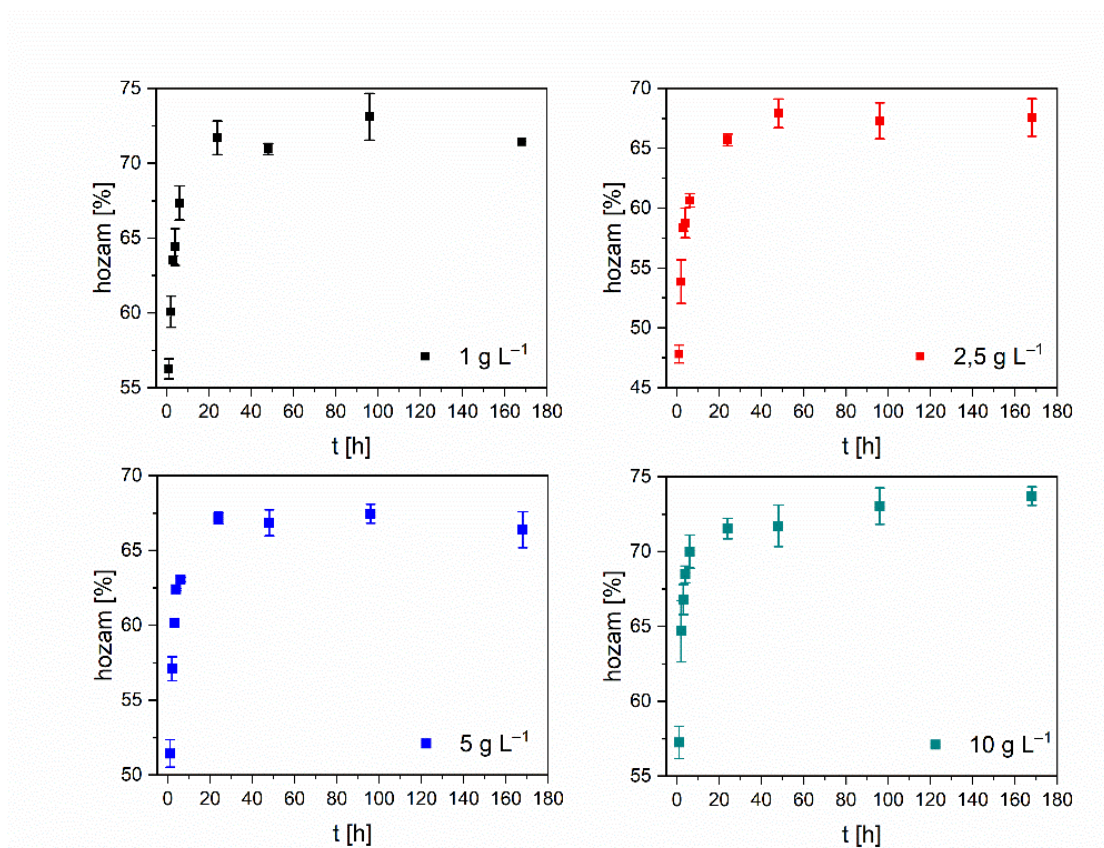
A kutatócsoportban korábbi mérések során bebizonyították, hogy a $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ összetételű trikalcium-aluminát (TCA) kvantitatívan egy kloridtartalmú réteges kettős hidroxiddá (LDH), ún. Friedel-sóvá alakul, ha HCl-dal reagál [7]. A fent tárgyalt okok és problémák miatt célul tűztük ki, hogy a LiCl-et egy lépésben alakítsuk LiOH-dá (a Li_2CO_3 köztermék kihagyásával), TCA segítségével. A feltételezett reakció egyenlete az alábbi: $2\text{ Cl}^- + \text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6 + \text{CaO} + 11\text{ H}_2\text{O} \rightarrow [\text{Ca}_2\text{Al(OH)}_6]_2\text{Cl}_2\cdot 4\text{H}_2\text{O} + 2\text{ OH}^-$.

A kísérleteink során terveztük vizsgálni a LiCl tömegkoncentráció, a reakcióidő és a hőmérséklet hatását a LiOH hozamára. Szerettünk volna ipari szempontból releváns, tömény szuszpenziókból kiindulni, valamint terveink között szerepelt a szilárd és a folyadékfázisok vizsgálata is. A reakciók során a legfontosabb mérőszám a LiOH-hozam volt, melyet kétlépcsős sav-bázis titrálással határoztunk meg, $\sim 0,3 \text{ mol L}^{-1}$ sósav mérőoldatot használva – a hidroxidionok mellett a karbonátionok mennyiségét is meghatároztuk a titrálás során. Először kiszámoltuk az adott oldatösszetételhez tartozó elméleti maximális hidroxidion-koncentrációt ($[\text{OH}^-]_{\text{T,max}}$) [8], majd a titrálás eredményeiből kiszámoltuk a hidroxidion-koncentrációt ($[\text{OH}^-]_{\text{T}}$), a kettő hányadosa adta a LiOH hozamát ($[\text{OH}^-]_{\text{T}}/[\text{OH}^-]_{\text{T,max}} \cdot 100$). Az oldatfázisban található Li, Al, Ca és Cl elemek koncentrációját ICP-MS berendezéssel (Agilent 7900) határoztuk meg, minden esetben 11 pontos kalibrációs görbe felvételével. Belső sztenderdként Sc^{3+} , ill. Y^{3+} 10 mg L^{-1} koncentrációjú oldatát (VWR Chemicals) használtuk. A szilárd termékek szerkezetvizsgálatára porröntgen-diffraktometriát alkalmaztunk (Rigaku Miniflex II). A diffraktogramokat a 4 és 100° közötti tartományban $4^\circ/\text{perc}$ sebességgel vettük fel, kobalt sugárforrást használva.

A reakciók kivitelezéséhez ioncserélt vizet, LiCl-ot (a. r., VWR Chemicals), CaO-ot (a. r., VWR Chemicals) és általunk szintetizált TCA-t használtunk. Ehhez CaO-ot és Al_2O_3 -ot őrltünk egy golyósmalomban (500 rpm , $t = 2 \text{ h}$), majd a kapott porkeveréket kalcináltuk csökemencében 1300°C -on 4 óráig ([7] alapján). Az így szintetizált TCA diffraktogramja teljesen megegyezik a JCPDS adatbázisban található referencia-diffraktogrammal [9], így kijelenthető, hogy sikeresen előállítottuk a TCA-t – így, a továbbiakban az ilyen módon szintetizált TCA-t használtuk a kísérletek során.

A méréseink során a kiindulási LiCl tömegkoncentrációját úgy állítottuk be, hogy az Li^+ -ra nézve ($c_{\text{Li}^+,0}$) 1 ; $2,5$; 5 és 10 g L^{-1} legyen. A hőmérséklet (T) 5 és 75°C , míg a reakcióidő 1 óra és 1 hét között változott. A LiCl:TCA:CaO mólarány sztöchiometrikus ($2:1:1$) volt.

A LiOH hozamának koncentráció- és időfüggését az **1. ábra** szemlélteti. Látható, hogy minden esetben telítési görbét kapunk; a hozam értéke 1 nap reakcióidő után állandónak tekinthető (figyelembe véve a kísérleti bizonytalanságot). Ebből arra lehet következtetni, hogy a reakcióidő gyakorlati szempontból releváns maximális értéke 1 nap, eddig ugyanis érdemben növelhető a hozam. Az egy hét utáni LiOH-hozamok rendre $73,7\%$; $71,3\%$; $67,6\%$, illetve $67,4\%$ 10 ; 1 ; $2,5$ és 5 g L^{-1} kiindulási lítiumion-koncentráció esetén. Mindegyik esetben még egy hét reakcióidő után is távol vagyunk a 100% -os hozamtól, ami arra enged következtetni, hogy a reakció egyensúlyra vezet.

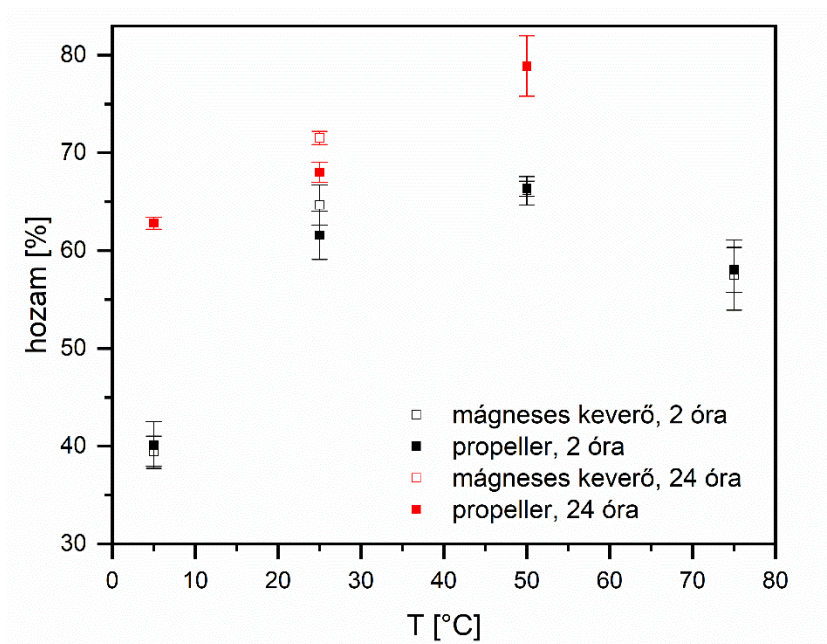


1. ábra: A LiOH hozamának koncentráció- és időfüggése ($T = 25^{\circ}\text{C}$). Az ábrákon a különböző kiindulási lítiumkoncentrációk esetén tapasztalt LiOH-hozamok láthatók.

A hozamok koncentrációfüggésének értelmezésekor két fontos szempontot kell figyelembe vennünk, melyek a termék, azaz a Friedel-só oldhatóságával állnak kapcsolatban. Látható, hogy a hozam minimumértéket mutat $c_{\text{Li}^+,0} = 2,5\text{--}5 \text{ g L}^{-1}$ esetén; és mind a koncentráció csökkentése, mind növelése magasabb hozamot eredményez. A Friedel-só oldhatósága a pH növelésével nagymértékben csökken, alacsonyabb pH-n ($\text{pH} < 12$) viszont már instabil a vegyület szerkezete, könnyen képes elbomlani [10]. Ez azt jelenti, hogy minél magasabb a kiindulási lítiumion-koncentráció, annál nagyobb a szuszpenzió pH-ja (több TCA és CaO több OH^- -t juttat oldatba), így egyre kisebb a Friedel-só oldhatósága (sajátion-hatás), ami nagyobb hozamot eredményez. A másik esetben azt kell figyelembe veyük, hogy alacsonyabb ionerősség mellett a Friedel-só oldhatósága szintén kisebb lesz (ez nem csak a Friedel-sóra, hanem számos rosszul oldódó vegyületre igaz), azaz kisebb kiindulási lítiumion-koncentráció is nagyobb hozamot eredményez – ez magyarázza az alacsony $c_{\text{Li}^+,0}$ esetén tapasztalt nagyobb hozamot. Köztes lítiumkoncentrációk esetén (2,5, ill. 5 g L^{-1}) az ionerősség-növekedés okozta hozamcsökkenés, valamint a sajátion-effektus okozta hozamnövekedés kompenzálják egymást, ebből adódik a minimumérték megjelenése.

A hozam hőmérsékletfüggésének alakulását a **2. ábra** mutatja. A reakciók kivitelezése kétfajta kevertetési módszerrel történt: mágneses keverővel és egy, az oldatba felülről belelógatható propelleres

keverővel. A $c_{\text{Li},0} = 10 \text{ g L}^{-1}$ esetén, különböző hőmérsékleteken és 2 órás reakcióidő után kapott eredmények alapján a kétféle kevertetési módszer nem befolyásolja érdemben a hozamokat. (Ugyanakkor a kevertetés szerepe megnőhet töményebb, $c_{\text{Li},0} > 10 \text{ g L}^{-1}$ szuszpenziók esetén.) A hozam alakulását főként a reaktánsok és a termék oldhatósága befolyásolja. A termék (a Friedel-só) oldhatósága a hőmérséklet növelésével nő az általunk vizsgált hőmérséklettartományban [11], míg az egyik reaktáns, a $\text{Ca}(\text{OH})_2$ („hidratált” CaO) oldhatósága csökken [12] – ennek következménye elméletileg, hogy a hozam csökken a hőmérséklet növelésével. Azonban a méréseink során nem ezt tapasztaltuk, ugyanis a hozam 50 °C-ig nő a hőmérséklet emelkedésével (**2. ábra**). Ennek pontos értelmezésére további vizsgálatokra van szükség. A 75 °C-nál tapasztalható hozamcsökkenés bár magyarázható a kiindulási anyagok és termékek oldhatóságának hőmérsékletfüggésével, ebben az esetben ugyanakkor technikai probléma is felmerült. A szuszpenzió nagy viszkozitása miatt nehezebbé vált a kevertetés, aminek következtében lecsökkent az anyagtranszfer sebessége, ami több elreagálatlan reaktánst és ezáltal kisebb hozamot eredményezett.



2. ábra: A hozam hőmérsékletfüggésének alakulása, 10 g L^{-1} kiindulási lítiumion-koncentráció esetén, 2 és 24 óra reakcióidők után, különböző kevertetési módokat alkalmazva

Látható, hogy 5 °C-on a 2 órás és 24 órás mérések között ~20 % hozambéli különbség van, ami jóval nagyobb, mint 25, ill. 50 °C-on (75 °C-on a rendkívül nehéz kevertetés miatt nem tudtuk elvégezni a reakciót 24 órás reakcióidő alkalmazása mellett.). Ebből arra következtethetünk, hogy 5 °C-on a kis hozam (~40%, 2 óra) oka az alacsony reakciósebesség. 24 órára növelve a reakcióidőt a hozam (~63%) is jobban megközelíti az egyensúlyi értéket, utóbbi pontos megállapításához azonban további mérések

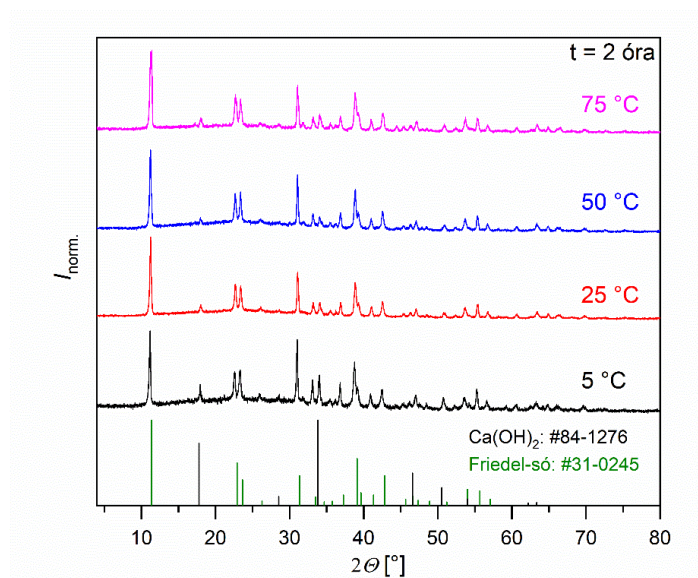
szükségesek néhány hetes reakcióidő alkalmazása mellett. Szintén jelentős hozamnövekedés tapasztalható 50 °C-on (78,9 %), 24 óra után, ami kismértékben ugyan, de meghaladja a 25 °C-on kapott értéket (71,5 %).

Az **1. táblázat** tartalmazza néhány kiválasztott szűrlet ($c_{\text{Li}^+,0} = 10 \text{ g L}^{-1}$, $t = 2 \text{ óra}$) oldatfázisában található ionok koncentrációját, amit potenciometriás titrálások és ICP-MS mérések alapján határoztunk meg. Az oldott karbonát mennyisége elhanyagolható az OH^- -ionokéhoz képest; forrása a reagensek ($\text{Ca}(\text{OH})_2$, TCA) kismértékű karbonátszennyezése. Az eredményekből jól látszik, hogy az alumíniumionok és a kalciumionok koncentrációja elhanyagolható a titrálással meghatározott hidroxidion-koncentráció mellett (nagyságrendbeli eltérés), azaz az összes, titrálással meghatározott hidroxidion-mennyiség a termékből, azaz a LiOH -ból származik és nem valamelyik reaktánsból vagy annak rosszul oldódó hidroxidjából (pl. $\text{Ca}(\text{OH})_2$ vagy $\text{Al}(\text{OH})_3$). Az is jól látható, hogy 5 °C-on a teljes lítiumion-mennyiség kisebb, mint a többi hőmérsékleten, ennek az lehet az oka, hogy a lítium egy része kiválik amorf szilárd anyag formájában (pl. lítium-aluminát, LiAlO_2), ami csökkenti az oldatban lévő lítiumionok koncentrációját.

1. táblázat: Az egyes ionok ICP-vel és titrálással meghatározott koncentrációi különböző hőmérsékleteken, 10 g L^{-1} kiindulási lítiumion-koncentráció és $t = 2 \text{ óra}$ reakcióidő esetén

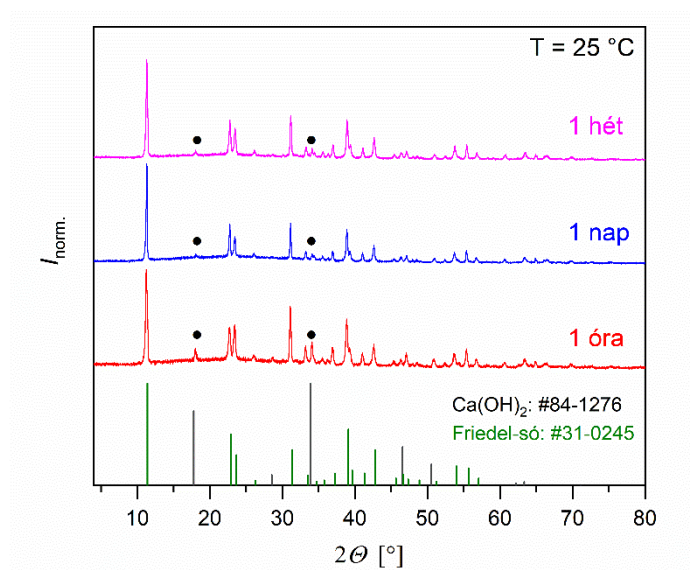
T [°C]	$[\text{OH}^-]_{\text{T}}$ [M]	$[\text{CO}_3^{2-}]_{\text{T}}$ [M]	$[\text{Cl}^-]_{\text{T}}$ [M]	$[\text{Ca}^{2+}]_{\text{T}}$ [mM]	$[\text{Al}^{3+}]_{\text{T}}$ [mM]	$[\text{Li}^+]_{\text{T,calc.}}$ [M]	$[\text{Li}^+]_{\text{T}}$ [M]	Δ [%]
5	0,701	0,009	0,817	1,289	0,071	1,533	1,518	-1,0
25	1,114	0,013	0,513	0,628	1,371	1,648	1,635	-0,8
50	1,113	0,012	0,515	0,829	3,903	1,639	1,648	0,6
75	0,944	0,012	0,751	0,799	4,692	1,704	1,745	2,4

A lítiumionok pontos mérése ICP-vel a kis tömegszáma miatt nehéz. Koncentrációjuk azonban meghatározható a töltésmérleg segítségével is, amennyiben a többi ion koncentrációja ismert: $[\text{Li}^+]_{\text{T}} + 2 [\text{Ca}^{2+}]_{\text{T}} + 3 [\text{Al}^{3+}]_{\text{T}} = [\text{OH}^-]_{\text{T}} + [\text{Cl}^-]_{\text{T}} + 2 [\text{CO}_3^{2-}]_{\text{T}}$. Az így kapott adatok és az ICP alapján mért értékek közötti különbség maximum 2–3 %-nak adódott, így kijelenthető, hogy az összes iont nagy pontossággal lehet mérni, és a lítiumion-koncentráció egyszerűen számolható.



3. ábra: A különböző hőmérsékleteken felvett diffraktogramok ($t = 2$ óra reakcióidő esetén)

A szilárd fázist porröntgen-diffrakciós módszerrel (XRD) vizsgáltuk. A diffraktogramok alapján jól látható, hogy minden reakciókörülmény esetén a fő termék a Friedel-só nevű kloridtartalmú LDH, de az el nem reagált Ca(OH)_2 diffrakciós csúcsai is láthatók – ezt szemlélteti a **3. ábra**. A **4. ábrán** láthatók az eltérő reakcióidőkhöz tartozó diffraktogramok (1 óra, 1 nap és 1 hét; 25 °C). Jól kivehető, hogy 1 óra után a Ca(OH)_2 két fő diffrakciós csúcsa (fekete pontokkal jelölve) még látható, azonban 1 nap és 1 hét reakcióidő után már szinte teljesen eltűnik, ami arra enged következtetni, hogy 1 nap reakcióidő szükséges ahhoz, hogy a Ca(OH)_2 nagy része elreagáljon, ami jó egyezést mutat a potenciometriás mérések eredményével (**1. ábra**). A másik reaktáns, tehát a TCA reflexiói nem láthatóak a diffraktogramokon.



4. ábra: A diffraktogramok alakulása különböző reakcióidők esetén ($T = 25$ °C esetén)

Összefoglalásként elmondható, hogy LiCl egy lépéses konverziója LiOH-dá megvalósítható trikálcium-aluminát és CaO alkalmazásával. A legmagasabb hozamot 1 hét reakcióidő esetén 25 °C-on 10 g L⁻¹ esetén érték el (~74 %-ot), 24 óra reakcióidőt alkalmazva pedig 50 °C-on tapasztaltuk a legmagasabb hozamot (~78 %); ami alapján kijelenthető, hogy a reakció egyensúlyra vezet. A hozam alakulását a koncentráció függvényében két oldhatósági tényezővel lehet magyarázni: az ionerősséggel és a pH-val, melyek ellenkező irányban befolyásolják a termék (Friedel-só) oldhatóságát, ezáltal a hozamot. Ennek eredményeként az átalakítás hatásfoka az alkalmazott kezdeti lítiumkoncentráció függvényében minimumgörbét eredményez. Az oldatfázisok elemösszetételének vizsgálata alapján a szűrletek elhanyagolható mennyiségű alumínium- és kalciumiont tartalmaznak. A szilárd fázisok porröntgen-diffraktogramjai pedig azt mutatják, hogy a fő termék a Friedel-só minden hőmérséklet és reakcióidő esetében. További terveink között szerepel a hőmérséklet- és időfüggés további vizsgálata, a csapadékok összetételének vizsgálata, valamint a LiOH·H₂O kikristályosítása az oldatból és tisztaságának meghatározása, ami a katódgyártás egyik meghatározó kritériuma.

- [1] H. Liu, G. Azimi, *Resour. Conserv. Recycl.*, **2022** 179, 106115
- [2] H. Lappalainen, M. Linne, *et al.*, *Miner. Eng.*, **2024** 209, 108632
- [3] P. Meshram, B. D. Pandey, *et al.*, *Hydrometallurgy*, **2014** 150, 192–208
- [4] C. Grosjean, P. H. Miranda, *et al.*, *Renew. Sustain. Energy Rev.*, **2012** 16 (3), 1735–1744
- [5] <https://chem.libretexts.org>
- [6] M. Grágeda, A. González, *et al.*, *Energy*, **2015** 89, 667–677
- [7] E. Kása, Y. Szabó, *et al.*, *Cem. Concr. Res.*, **2024** 177, 107414
- [8] P. J. Gierszewski, R. C. Prasad *et al.*, *Fusion Eng. Des.*, **1991** 15 (3), 279–283
- [9] S. Gates-Rector, T. Blanton, *Powder Diff.*, 2019 34, 352–360
- [10] Y. Haiyan, Q. Cuina, *et al.*, *Ferroelectrics*, **2022** 596 (1), 39–55
- [11] J. Ma, Z. Li, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **2010** 49 (19), 8949–8958
- [12] Y. Han, M. G. Ucak-Astarlioglu *et al.*, *Chem. Eng. J.*, **2015** 515, 162484

Phosphate Adsorption by Fe–ZIF-8 for Potential Applications in Lithium-Ion Battery Recycling

Nguyen Thi Kim Phung^a, Anastasiia Efremova^a, Ákos Kukovecz^a

^aDepartment of Applied and Environmental Chemistry, University of Szeged, Szeged, Hungary

1. Introduction

The rapid growth of the lithium-ion battery (LIB) market, driven by electric vehicles and large-scale energy storage systems, has increased the demand for critical metals such as cobalt, nickel, and lithium [1-3]. Recycling spent LIBs is therefore essential to ensure resource sustainability and to reduce environmental risks [4,5]. Among existing recycling routes, hydrometallurgical processing is widely applied because of its high recovery efficiency and relatively mild operating conditions [6-8]. However, this process produces highly acidic leachates ($\text{pH} \approx 1\text{-}2$) containing a complex mixture of metal ions together with phosphate, especially when LiFePO_4 -based cathodes are treated [9-11].

Although phosphate is present at relatively low concentrations, it can strongly interfere with the separation and purification of Co^{2+} and Ni^{2+} through co-precipitation and complexation [7,8]. In addition, phosphate discharge may contribute to environmental pollution, while its recovery offers opportunities for reuse, for example as FePO_4 for LiFePO_4 synthesis or as a fertilizer-related resource [9,11]. Therefore, the selective removal of phosphate from acidic multi-metal leachates is an important pre-treatment step in LIB recycling.

Conventional adsorbents often suffer from poor stability under strongly acidic conditions, limiting their application in LIB leachates [13]. Metal–organic frameworks (MOFs), particularly zeolitic imidazolate frameworks (ZIFs), have attracted attention due to their high surface area and structural tunability [13]. ZIF-8 shows good chemical stability, but its affinity toward phosphate is limited and its structure can be affected under harsh acidic conditions [19,20]. Introducing heterometal dopants has been proposed as an effective strategy to enhance both adsorption performance and acid resistance [15-17].

In this context, Fe-doped ZIF-8 has shown improved interaction with phosphate due to the presence of Fe sites, which can promote surface complexation and electrostatic attraction [14,16]. However, reported adsorption capacities remain moderate, and the application of Fe-ZIF-8 for phosphate removal from simulated LIB leachates has been explored.

In this study, Fe-ZIF-8 materials with different Fe:Zn molar ratios were synthesized using ethanol as a green solvent. The effect of Fe incorporation on structure, surface area, and phosphate adsorption performance was investigated. Phosphate removal was evaluated in single-ion systems and in simulated LIB leachates at low and high concentrations, together with regeneration and cycling stability. The results aim to provide insight into selective phosphate removal as a pre-treatment step for improving critical metal recovery in LIB recycling

2. Materials and Methods

2.1. Materials

Zinc nitrate hexahydrate, iron(III) nitrate nonahydrate, and 2-methylimidazole were used as metal precursors and organic linkers for ZIF-8 and Fe-ZIF-8 synthesis. Ethanol was employed as a green solvent throughout the synthesis. Cobalt(II) chloride, nickel(II) chloride, lithium chloride, and potassium dihydrogen phosphate were used to prepare simulated lithium-ion battery (LIB) leachates. All chemicals were used as received.

2.2. Synthesis of ZIF-8 and Fe-ZIF-8

ZIF-8 was synthesized by a direct precipitation method using ethanol as solvent, with a molar ratio of 2-methylimidazole to Zn of 4:1. The mixture was stirred and heated at 70 °C for 24 h. Fe-ZIF-8 samples were prepared under similar conditions by partially replacing Zn with Fe while maintaining a constant total metal content. Fe:Zn molar ratios of 0.05:0.95, 0.1:0.9, 0.2:0.8, and 0.3:0.7 were used, and the samples were denoted as 5%, 10%, 20%, and 30% Fe–ZIF-8, respectively. The resulting solids were collected by centrifugation, washed with ethanol, and dried at 60 °C.

2.3. Characterization of the materials

Crystal structures were analyzed by X-ray diffraction (XRD). Functional groups were identified by Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR). Morphology and elemental distribution were examined by scanning and transmission electron microscopy (SEM/TEM) coupled with EDS mapping. Textural properties were evaluated by N₂ adsorption–desorption measurements using the BET method. The Fe and Zn contents and metal concentrations in leachates were quantified by ICP analysis.

2.4. Adsorption experiment

Batch experiments were conducted using single-ion phosphate and simulated lithium-ion leaching solutions at low and high concentrations. Adsorption kinetics were measured with 5 mg of each adsorbent in 10 mL solution containing 70 mg·L⁻¹ PO₄³⁻. The pH was adjusted using 0.1 mol·L⁻¹ HCl or H₂SO₄. After adsorption, the supernatant was filtered (0.22 μm) and analyzed by UV-Vis spectrophotometry (USB4000, Ocean Optics) using the molybdenum blue method.

The removal efficiency (x , %) and adsorption capacity (q_e , mg·g⁻¹) of phosphate were calculated with Equations Eq. (1) and (2), respectively:

$$\text{Removal Efficiency } (x, \%) = \frac{(C_0 - C_e)}{C_0} * 100 \quad (1)$$

$$\text{Adsorption Capacity } (q_e, \text{mg} \cdot \text{g}^{-1}) = \frac{(C_0 - C_e)V}{m} \quad (2)$$

where C_0 and C_e (mg L⁻¹) are the initial and equilibrium phosphate concentrations, respectively; V (L) is the volume of the solution; and m (g) is the mass of the adsorbent.

The low-concentration simulated leachate had approximate initial concentrations: Co²⁺ ~ 200 mg·L⁻¹; Ni²⁺ ~ 200 mg·L⁻¹; Li⁺ ~ 70 mg·L⁻¹; PO₄³⁻ ~ 20 mg·L⁻¹. For high-concentration tests, all ions were increased 5-fold: Co²⁺ ~ 1000 mg·L⁻¹; Ni²⁺ ~ 1000 mg·L⁻¹; Li⁺ ~ 350 mg·L⁻¹; PO₄³⁻ ~ 100 mg·L⁻¹. Batch

experiments measured phosphate, cobalt, nickel, and lithium before and after adsorption. Adsorbates were desorbed by washing 3 times with a 0.1 M NaCl. Regenerated adsorbents were washed with deionized water, dried in a vacuum at 70 °C for 6 h, and reused in further cycles.

3. Preliminary Results and discussion

3.1. Characterization analysis of materials

Compared to the commonly used solvothermal method [15,21–23], we used a simple, direct preparation approach, resulting in a much higher surface area. We report its SA, compare it with that obtained using methanol, discuss the differences, and present our results.

BET analysis

The nitrogen adsorption-desorption isotherms of ZIF-8 and Fe-ZIF-8 are shown in Table 1. They have type I isotherms [22]. The BET surface specific areas of ZIF-8 and Fe-ZIF-8 were calculated and are shown in the Table, ranging from 1313 to 520 m²·g⁻¹, indicating that the prepared materials have microporous structures lower than 2 nm. Both ZIF-8 and Fe-ZIF-8 had high specific surface areas, indicating that the prepared materials had good adsorption performance due to the replacement of the green solution with ethanol instead of methanol. Compared to the reference [21], the surface areas significantly increased with roughly similar Fe content, approximately 3 times, which was fundamentally crucial for the adsorption capacity.

Table 1. Nitrogen adsorption-desorption results of ZIF-8 and Fe-ZIF-8 materials

Entry	Material	S _(BET) (m ² ·g ⁻¹)	Pore Volume (cm ³ ·g ⁻¹)	Pore size (nm)
1	5% Fe-ZIF-8	1255	1,01	1,6
2	10% Fe-ZIF-8	1170	0,72	1,24
3	20% Fe-ZIF-8	961,7	0,60	1,25
4	30% Fe-ZIF-8	520,5	0,29	1,13
5	ZIF-8	1313	1	1.5

XRD analysis

The XRD patterns in Figure 1 show clear peaks below a 2θ value between 5° and 40° of pristine ZIF-8 and Fe-ZIF-8 materials with different (Fe:Zn) molar ratios corresponding to 5–30% Fe-doping contents. The presence of the characteristic crystalline as the pristine with the corresponding diffraction peaks at 2θ = 8.4 ° (011), 11.9 ° (002), 16.8 ° (112), 18.8 ° (022), and 20.7 ° (013), 23.9 (222), 27.9 (233), 29.9 (134), and 34.5 (044). These peaks perfectly match the previous reports [15, 22]. The slight shift of the diffraction peaks compared with the references is due to the use of a Co Kα source (λ = 1.789 Å) instead of the Cu Kα source commonly used in previous reports, which results in all peaks appearing at higher 2θ values, confirming the successful Fe incorporation as well as the pristine ZIF-8 and Fe-ZIF-8 synthesis.

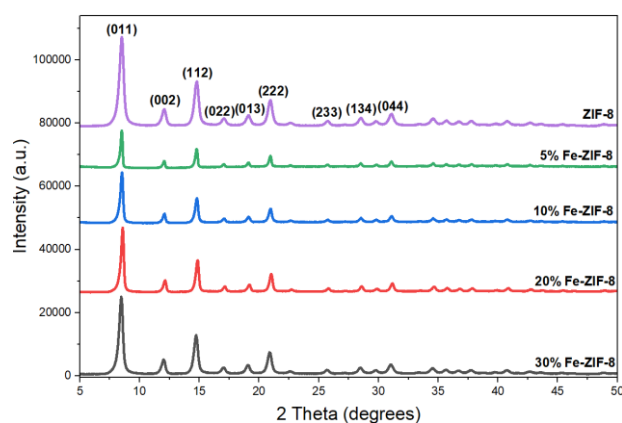


Figure 1. XRD patterns of ZIF-8 and Fe-ZIF-8

In contrast, the XRD patterns of Fe-ZIF-8 after adsorption in lithium-ion battery leaching solution after 5 cycles showed a significant decline in peak intensity (Figure 2). In particular, the highest Fe content (30% Fe) exhibited an almost complete collapse of the diffraction peaks at 2θ corresponding to the lattice planes of ZIF-8, whereas samples with lower Fe contents showed only slight changes compared with pristine ZIF-8. This confirms that new functional groups and morphological changes in Fe-ZIF-8 were generated and changed during the phosphorus removal process.

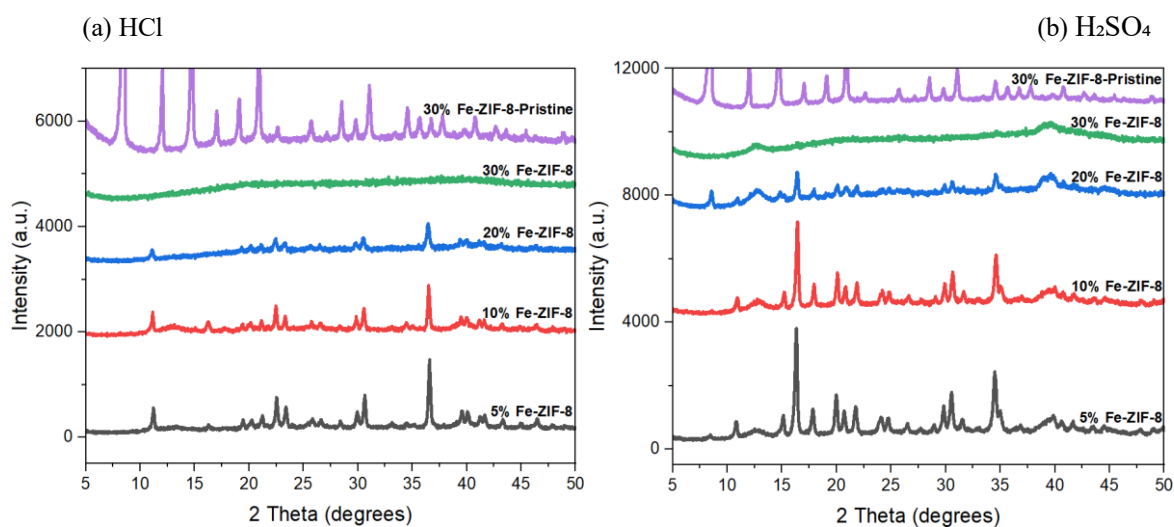


Figure 2. XRD patterns of ZIF-8 and Fe-ZIF-8 after 5 cycles (a) HCl and (b) H₂SO₄

FTIR analysis

The FTIR spectra shown in Figure 2 were employed to investigate the surface functional groups of ZIF-8 and Fe-ZIF-8. All Fe-ZIF-8 materials are highly similar to ZIF-8, with peaks at 421, 694, 995, 1145, 1584 cm⁻¹ corresponding to Zn–N bonds, C–H bending bonds, C–N bending bonds, C=C and C=N stretching, respectively. The intensity between 1350 and 1400 cm⁻¹ of the 30% Fe-ZIF-8 sample becomes intense due to the higher Fe content, contributing to the C–N and C–H bending vibrations of the

imidazolate ring. The results indicate that Fe doping on the ZIF-8 framework was successful, with a slight reduction in intensity as the Fe content decreased [22,23].

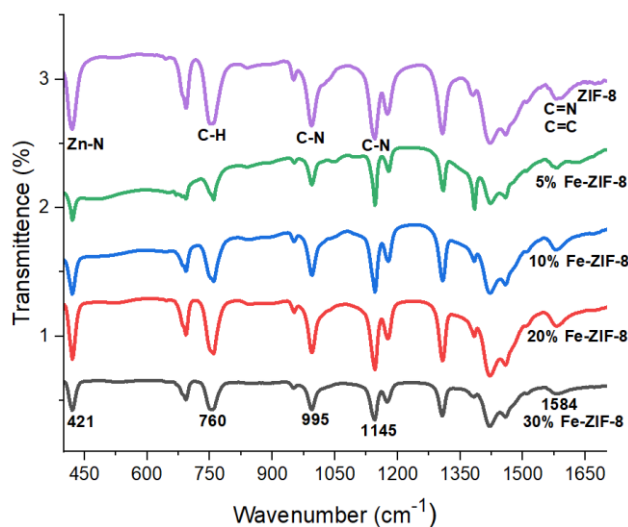


Figure 3. FTIR spectra of ZIF-8 and Fe-doped ZIF-8

3.2. Phosphate Adsorption Performance

3.2.1. Single-ion phosphate adsorption

After filtration through a 0.22 μm syringe filter, the filtrates of the materials after adsorption were used to form a complex and analyzed by UV-Vis spectrophotometry at 740 nm using the molybdenum blue method. Starting from an initial phosphate concentration of 70 $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$, the adsorption capacity and phosphate removal in the HCl environment were significantly increased, as determined from the UV-Vis absorbance and shown in Figure 4.

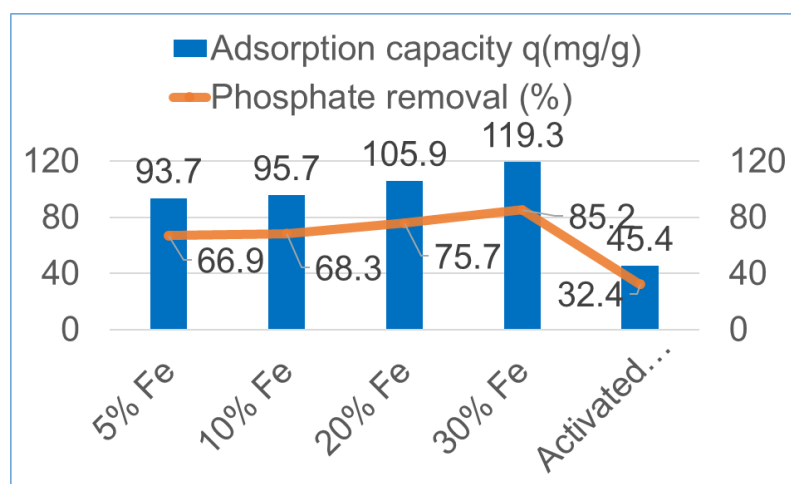


Figure 4. Adsorption capacity and phosphate removal of ZIF-8 and Fe-ZIF-8 materials in single-ion phosphate solutions.

Compared to the previous report [21], our adsorption at pH 2 with Fe-ZIF-8 materials of varied Fe contents (5%, 10%, 20%, 30%, and 30%) exhibited substantially higher adsorption capacities and phosphate removal. Notably, the 30% Fe sample achieved 119.3 mg/g, highlighting that even low Fe doping significantly enhances under strongly acidic conditions. The 30% Fe sample, synthesized following the published method, replacing ethanol instead of methanol, also maintained high performance, reinforcing the effectiveness of Fe incorporation. These findings confirm the effect of low pH on phosphate adsorption and demonstrate a marked advancement in adsorption capacity, indicating our materials as promising adsorbents for selective phosphate removal in LIB recycling processes, with potential contribution to the improvement of critical metal recovery processes.

- [1] X. Zeng, J. Li, N. Singh: *Renew. Sustain. Energy Rev.*, **2017** (72), 1282-1295.
- [2] G. Harper, R. Sommerville, E. Kendrick, L. Driscoll, P. Slater, R. Stolkin, A. Walton: *Nature*, **2019** (575), 75-86.
- [3] W. Lv, Z. Wang, H. Cao, Y. Sun, Y. Zhang, Z. Sun: *ACS Sustain. Chem. Eng.*, **2018** (6), 1504-1521.
- [4] X.-l. Li, X.-n. Zhu, G.-l. Wei, X.-t. Zhao, C.-l. Hu, W.-h. Gao, Z.-m. Wang, C.-c. Nie: *J. Energy Storage*, **2025** (140), 119150.
- [5] E. Fan, L. Li, Z. Wang, J. Lin, Y. Huang, Y. Yao, R. Chen, F. Wu: *Chem. Rev.*, **2020** (120), 7020-7063.
- [6] M. A. H. Shuva, A. S. W. Kurny: *Am. J. Mater. Eng. Technol.*, **2013** (1), 8-12.
- [7] Y. Yao, M. Zhu, Z. Zhao, B. Tong, Y. Fan, Z. Hua: *ACS Sustain. Chem. Eng.*, **2018** (6), 13611-13627.
- [8] J. Lim, Y. Jang, J. Lee, C. Lee, O. Jbari, K. Kwon, E. Chung: *Hydrometallurgy*, **2025** (236), 106516.
- [9] D. Chen, Y. Liang, H. Yang, C. Wu: *Hydrometallurgy*, **2019** (188), 172-181.
- [10] N. Singh, J. Li, X. Zeng: *J. Environ. Chem. Eng.*, **2020** (8), 103694.
- [11] S. Guo, X. Xu, X. Yang, J. Zhang, Y. Xu: *Chem. Eng. J.*, **2017** (309), 607-615.
- [12] J. Liu, H. Wang, Q. Zhou, T. Zhao, D. Chen: *Hydrometallurgy*, **2023** (217), 105220.
- [13] S. Zhang, H. Niu, Y. Cai, X. Zhao, Y. Shi: *Chem. Eng. J.*, **2018** (337), 90-97.
- [14] S. Li, D. Zhang, Y. Guo, J. Wang, Z. Chen: *Chem. Eng. J.*, **2021** (406), 126776.
- [15] Y. Han, D. Wu, Y. Guo, C. Li, J. Zhang: *J. Hazard. Mater.*, **2021** (412), 125246.
- [16] X. Zhao, H. Wang, J. Wang, J. Zhang: *J. Hazard. Mater.*, **2022** (425), 127987.
- [17] Y. Liu, X. Li, X. Zhao, Y. Xu, J. Zhang: *Microporous Mesoporous Mater.*, **2022** (330), 111563.
- [18] Q. Ma, J. Wang, S. Zhang, D. Wu, Z. Chen: *J. Colloid Interface Sci.*, **2022** (608), 1567-1578.
- [19] X. Li, C. Liu, Y. Liu, Y. Guo, J. Zhang: *Microporous Mesoporous Mater.*, **2020** (302), 110231.
- [20] Y. Chen, P. Li, J. A. Modica, R. J. Drout, O. K. Farha: *Chem. Rev.*, **2020** (120), 8012-8029.
- [21] Z. Miao, X. Song, X. Wang, H. Wang, S. Li, Z. Jiao: *PLoS One*, **2024** (19), e0311239.
- [22] X. Wu, Y. Lin, Z. Pi, X. Tan: *Sep. Purif. Technol.*, **2025** (377), 134236.
- [23] J. Li, T. Tian, Y. Jia, N. Xu, S. Yang, C. Zhang, S. Gao, W. Shen, Z. Wang: *Environ. Sci. Pollut. Res.*, **2023** (30), 4123-4136.

Acknowledgment

This work was supported by the Department of Applied and Environmental Chemistry, Faculty of Science and Informatics, University of Szeged. I sincerely thank my supervisors, Professor Dr. Ákos Kukovecz and Dr. Anastasiia Efremova, for their guidance and support. The Stipendium Hungaricum Scholarship Programme also supported this work.

UV/szulfít és UV/VUV/szulfít eljárások alkalmazása PFOA bontásában

Erdős Kornél, Veres Bence, Alapi Tünde

Molekuláris és Analitikai Kémiai Tanszék, Szegedi Tudományegyetem, 6720 Szeged, Dóm tér7.

A víz az egyik legnagyobb természeti kincsünk, a megfelelő minőségű víz hiánya ma már globális probléma, a felszíni és felszín alatti vizeink védelme mindannyiunk és a Föld védelmét szolgálja. A víz nélkülözhetetlen a földi élet számára – az emberiség ezen felül ipari vízként, hűtővízként, mezőgazdasági tevékenységre, a saját testünk és a környezetünk tisztaságának megőrzésére valamint ivóvízként is nagy mennyiségű vizet használ fel. Megfelelően hatékony vízkezelési eljárások nélkül a vízigényünk nem lenne kielégíthető.

Az ivóvízkezeléssel kapcsolatos problémák aktualitását jól tükrözi a települési szennyvíz kezelésére vonatkozó Európai Parlament irányelvének legutóbbi módosítása [1], mely szerint a nagyobb teljesítményű települési szennyvíztisztító telepeknek negyedleges kezelést kell biztosítani, az emberi egészségre kockázatot jelentő perzisztens szerves mikroszennyezők eltávolítása céljából. Az elmúlt években az ivóvíz kezelésre vonatkozó előírások egyik leggyakrabban emlegetett vegyületcsoportja a poli- és perfluoralkil vegyületek (PFAS). A PFAS vegyületek kémiaiilag rendkívül ellenállóak, perzisztensek, az egészségünkre gyakorolt negatív hatásukat pedig egyértelműen igazolták. Definíció szerint a PFAS anyagok körébe tartozik „minden olyan anyag, amely tartalmaz legalább egy teljesen fluorozott metil (-CF₃) vagy metilén (-CF₂-) csoportot anélkül, hogy valamelyik szénatomhoz hidrogén-, klór, bróm vagy jód-ion lenne csatolva”. Ide tartoznak a korábban már kereskedelmi forgalomból kivont polifluoroalkilok vagy perfluor-karbonok (PFC), azaz a globális felmelegedést gyorsító üvegházhatású gázok is [2].

A PFAS vegyületek szerkezetükből adódóan vegyületek felületaktív anyagok, mivel egy hidrofób „farokrészből” és egy hidrofil „fejből” állnak utóbbi lehet karboxil-, foszfát, vagy szulfonát csoport és jó vízoldhatóságot biztosít. Szerkezetüknek köszönhetően csökkentik a víz felületi feszültségét, és stabil rétegeket képeznek határfelületeken. Használhatók habképző anyagokban (pl. tűzoltó habok), bevonatok, folt- és víztaszító rétegek készítésére. A PFAS vegyületek legfőbb felhasználási területei víz-, olaj-, és porálló bevonatok, felületek készítése, mint a rendkívül sokoldalúan felhasználható Teflon. Mivel jó habképzők és nem gyúlékonyak, elterjedtek a tűzoltóhabok adalékaként, elsősorban az olajipar és a katonaság körében. A PFAS vegyületek és a belőlük készített polimerek számos termékben megtalálhatók, a belőlük képzett bevonatokat kiváló vízlepergető hatásuknak köszönhetően alkalmazza a textilipar, festékipar, csomagolástechnika, de még kozmetikumokban is megtalálhatók. A PFAS vegyületek így, elsősorban a különböző bevonatokon keresztül gyorsan elterjedtek az egész világon.

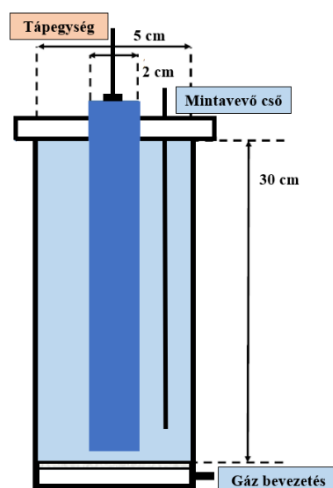
A nagyhatékonyságú oxidációs eljárások (Advanced Oxidation Processes - AOPs) olyan vízkezelési eljárások, melyek alkalmasak negyedleges kezelésként használva a biológiai vízkezeléssel el nem távolítható szerves mikroszennyezők részleges vagy teljes oxidációjára. Egyes AOP eljárást már

évek óta sikeresen alkalmaznak a vízkezelésben (pl. ózonos kezelés, Fenton eljárás, UV/H₂O₂, peroxon eljárás), míg a nagyhatékonyságú redukciós eljárások (Advanced Reduction Processes - ARPs) még viszonylag rövidebb múltra tekintenek vissza, alkalmazásuk pedig igen korlátozott [3]. A két módszer tulajdonképpen egymást kiegészíti, gyakran csak a reakció paramétereiktől függően lesz egy kémiai vízkezelési eljárás oxidációs vagy redukciós módszer, a képződő reaktív részecskéknek megfelelően.

Vannak vegyületek, amelyek AOP eljárásokkal kisebb hatékonysággal bonthatóak, ide tartoznak a PFAS vegyületek is [4]. A PFAS vegyületekben lévő C-F kötés kiemelkedő erősségű, melyet az oxidálószeres és oxidáló hatású gyökök, többek közt a $\cdot\text{OH}$ sem képes megtámadni. Viszont a PFAS vegyületek eltávolítására a nagyhatékonyságú redukciós eljárások használhatók, mivel ebben azok alapvetően a hidratált elektron (e_{aq}^-) képződésére és reakcióira épülnek. A F nagy elektronegativitása miatt az képes reakcióba lépni az e_{aq}^- -nal, mely alapvetően erős redukáló hatású, reaktív, nem szelektív reakciópartner. Az e_{aq}^- mellett egyéb redukáló hatású gyökök is képződnek, de ezek általában kevésbé reaktívak, szelektívebbek, mint az e_{aq}^- , és így a bontásban betöltött szerepük is kisebb [5].

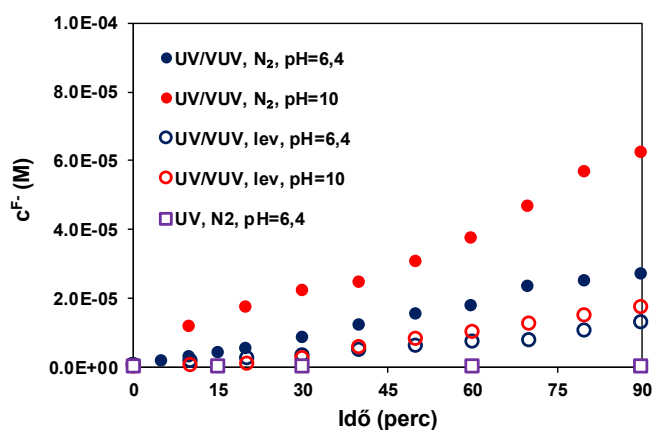
Az UV/szulfid eljárás az egyik leggyakrabban alkalmazott nagyhatékonyságú redukciós eljárás. Oxigén jelenlétében oxidációs eljárásként funkcionál, gyakran emlegetik az UV/H₂O₂ módszer alternatívájaként is. A fotolízis során keletkező szulfidgyök-ion ($\text{SO}_3^{\cdot-}$) redox-potenciálja jóval kisebb, mint az e_{aq}^- -é ($\text{ORP}_{e_{\text{aq}}^-} = -2,8 \text{ V}$, $\text{ORP}_{\text{SO}_3^{2-}} = -2,47 \text{ V}$) [5,6]. Ebből következik, hogy a szennyezőanyagok bontásában kisebb mértékben vesz részt, a körülményektől függően a további reakciók során inkább szulfát gyökkionná ($\text{SO}_4^{\cdot-}$) vagy ditionionná ($\text{S}_2\text{O}_6^{2-}$) alakul [7]. Összehasonlítva SO_3^{2-} UV és VUV fotolízise és a víz VUV fotolízise során az e_{aq}^- képződésére vonatkozó kvantumhasznosítási tényező értékeit ($\Phi(e_{\text{aq}}^-)_{254 \text{ nm}} = 0,39$, $\Phi(e_{\text{aq}}^-)_{185 \text{ nm}} = 0,85$) [7], az előbbi egy nagyságrenddel nagyobb. Figyelembe véve a 254 és 185 nm-es fény intenzitása közti nagyságrendi különbséget is, a SO_3^{2-} UV fotolízise egyértelműen hatékonyabb az e_{aq}^- képződése szempontjából, mint a víz VUV fotolízise.

A vizsgálatokat üvegreaktorban végeztem, melynek belső átmérője 50 mm volt, ennek közepébe merült a fényforrás (**1. ábra**). A fény optikai hossza így 15 mm volt. A mintavétel a mintavevő csövön keresztül történt, valamint a lámpához kapcsolódott a tápegység. A mérések során mindig 450 mL oldatot kezeltem. A mérések megkezdése előtt 30 perccel, valamint a mérés ideje alatt, levegővel vagy N₂ gázzal, illetve a kettő keverékével buborékolattam át az oldatot a reaktor alján levő porózus üvegszűrőn keresztül. A mérést minden esetben a lámpa bekapcsolásával indítottam.



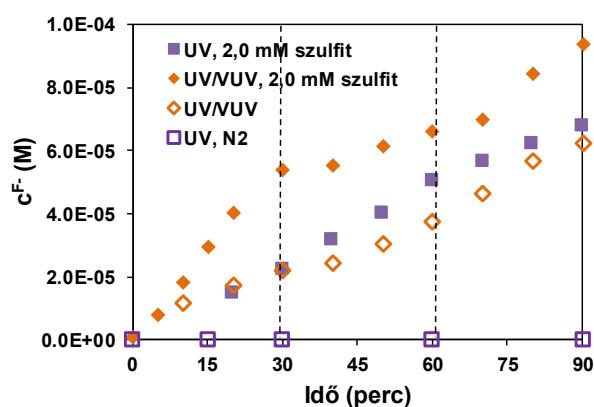
1. ábra A fotokémiai mérésekhez használt reaktor felépítése és geometriai paraméterei

A PFOA kiindulási koncentrációja minden esetben $1,0 \times 10^{-5}$ M volt. A mérések során felhasznált Na_2SO_3 törzsoldatból hetente újat készítettem, ugyanis annak a koncentrációja időben változik. A PFAS oldatok és a Na_2SO_3 oldat pH-jának beállításához NaOH -t vagy H_2SO_4 oldatot használtam. A Na_2SO_3 oldatot a kezelendő vízhez minden alkalommal a levegőztetés vagy oxigénmentesítés után adtam hozzá.



2. ábra Oldott O_2 és pH hatása a PFOA UV és UV/VUV fotolízisére

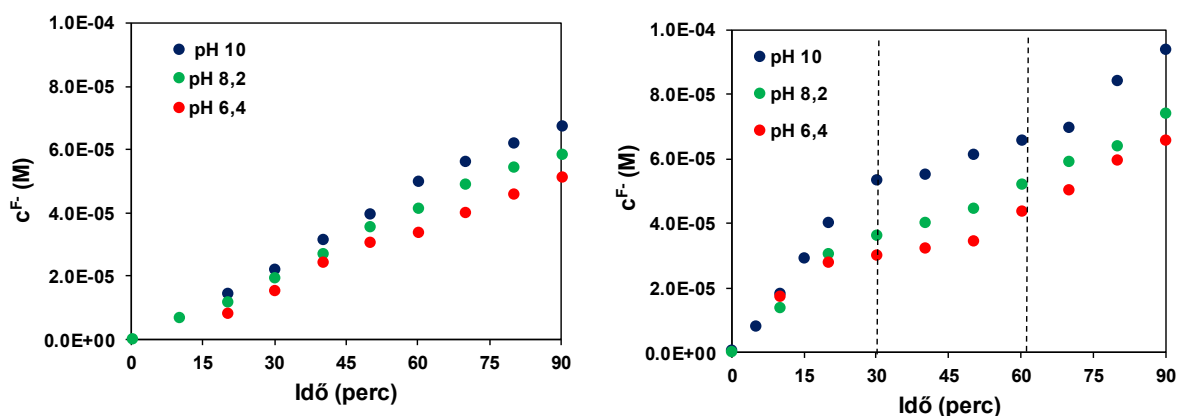
Az UV fotolízis hatása 90 perc alatt elhanyagolható $1,0 \times 10^{-5}$ M kiindulási koncentrációjú PFOA oldat kezelése során **(2. ábra)**. Azonban UV/VUV fotolízissel, pH állítás nélkül (az oldat kiindulási pH-ja ebben az esetben 6,4), oxigénmentes oldatban 90 perc után $2,7 \times 10^{-5}$ M fluoridion koncentrációt mértünk, azaz a PFOA 18%-a alakult át **(2. ábra)**. Ennek oka lehet a PFOA közvetlen VUV fotolízise, és a víz VUV fotolíziséből képződő e_{aq}^- -nal való reakció is. Amennyiben az oldaton nitrogén helyett levegőt buborékoltatunk keresztül, és így állandó 8 ppm oldott O_2 koncentrációt állítunk be, akkor megnöveljük a $\cdot OH$ képződés sebességét, viszont csökkentjük az e_{aq}^- elérhetőségét a PFOA számára, a PFOA és az O_2 közt az e_{aq}^- -nal való reakcióért kialakult versengés miatt. A PFOA és e_{aq}^- közti reakció sebességét $8,3 \times 10^7 \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ -nek állapították meg. Figyelembe véve a koncentráció viszonyokat levegővel telített oldatban az e_{aq}^- egyértelműen az oldott O_2 -nel fog reagálni és nem a PFOA-val. Az O_2 hatására a PFOA UV/VUV fotolízisének hatékonysága a felére csökkent, 90 perc alatt csak 8% alakult át **(2. ábra)**. Ez arra utal, hogy mindkét folyamat, azaz a közvetlen VUV fotolízis és az e_{aq}^- -nal való reakció is hasonló mértékben járul hozzá a PFOA átalakulásához O_2 -mentes, 6,4 pH-jú oldatban. A pH 10-re növelése O_2 -mentes oldatban a PFOA átalakulásának hatékonyságát 18%-ról 41%-ra növelte **(2. ábra)** megerősítve hogy az e_{aq}^- fontos szerepet játszik a PFOA bontásában. Levegővel telített oldatban, azonban a hatás sokkal kisebb volt, csak 2%-kal nőtt az átalakulás hatékonysága **(2. ábra)**, mivel ebben az esetben az O_2 jelenléte már önmagában elegendő a PFOA és e_{aq}^- közti reakció inhibálásához.



3. ábra A 2,0 mM Na_2SO_3 hatása a PFOA UV és UV/VUV fotolízisére oxigénmentes, pH 10 oldatokban

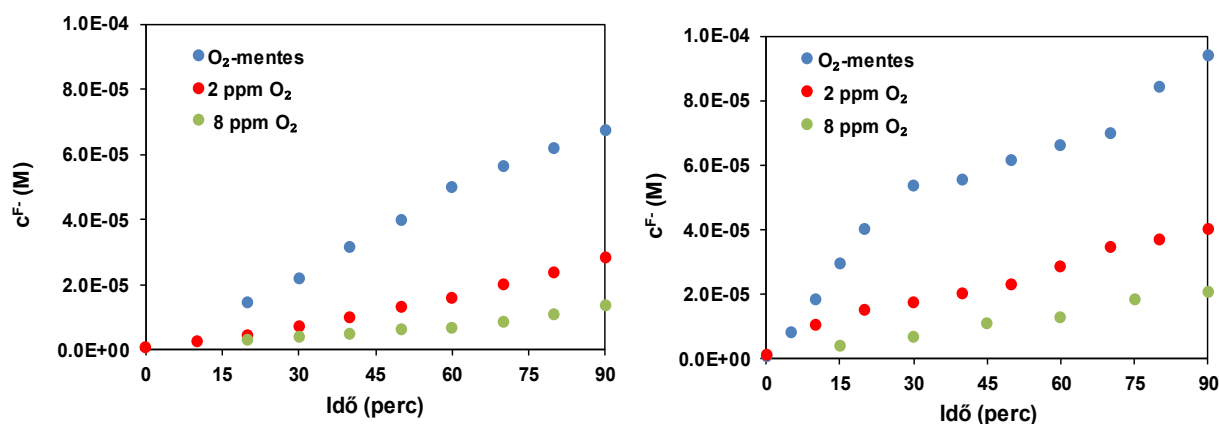
Összehasonlítva a pH 10 esetén mért eredményeket **(3. ábra)**, megállapíthatjuk, hogy az UV/szulfit eljárás is igen hatékony a PFOA bontásában, a hatékonyságot a kis intenzitású VUV fény tovább javítja. UV/szulfit esetén 90 perc alatt 45%, míg UV/VUV/szulfit esetén 63%-os bontást tudtunk elérni **(3. ábra)**. A fluoridion felhalmozódási görbék menetei azonban egészen más jellegűek. Az UV/szulfit eljárás esetén a várt, alapvetően lineáris, enyhén telítési jellegű görbe alakot kapjuk – az idő előre haladtával a szulfition koncentráció csökkenésével csökken az e_{aq}^- képződésének sebessége, így a PFOA bomlási sebessége is. Azonban az UV/VUV fotolízis esetén a koncentráció-idő görbén három szakaszt

különböztethetünk meg. Az első szakasz egy igen intenzív fluoridion képződést mutat (3. ábra). Ezt a szakaszt viszont 3 perc után egy erőteljes lassulás követi, majd 60 perc kezelés után ismét intenzíven nőni kezd a fluoridion koncentráció (3. ábra).



4. ábra A pH hatása a PFOA UV és UV/VUV fotolízisére oxigénmentes oldatokban, 2,0 mM Na_2SO_3 mellett

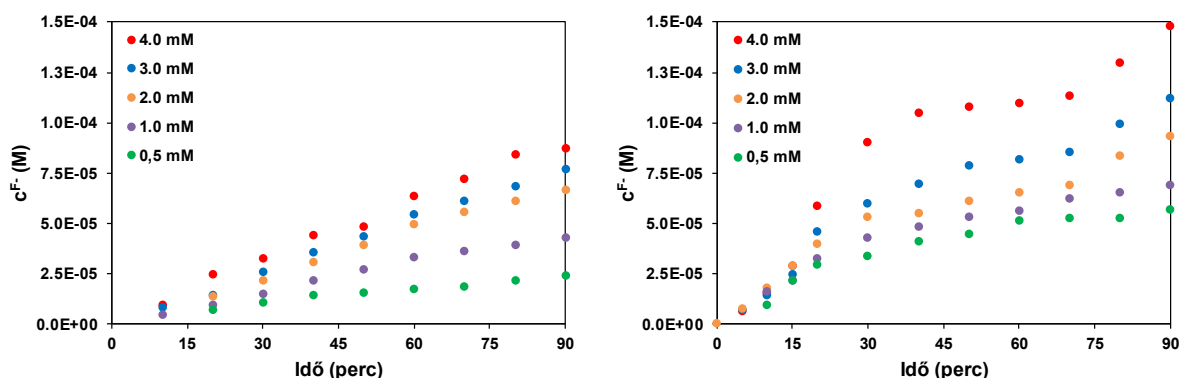
A pH csökkentése (4. ábra) UV/szulfít és UV/VUV/szulfít eljárásnál is csökkentette az átalakulás sebességét, amit a pH gyökkészletre gyakorolt hatásával értelmezhetünk. A HSO_3^- pK_s értéke 7,2. Ennek megfelelően a pH 10 esetén csak SO_3^{2-} van jelen az oldatban, melynek fotolízise eredményezi a legfontosabb reakció partnert e_{aq}^- -t. Az oldat pH-ját 8,2-re állítva, mely a biológiailag kezelt kommunális víz pH-ja, az oldatunkban már 10% HSO_3^- lesz, tovább savanyítva 6,4-re pedig már elsősorban (86%) a protonált forma, HSO_3^- van az oldatban. A HSO_3^- fotolízise viszont e_{aq}^- helyett $^{\bullet}H$ -t eredményez, ami nem alkalmas a PFOA bontására. Ennek ellenére a PFOA átalakulása savas körülmények közt is lejátszódik, köszönhetően a OH^- és $H^{\bullet}$ reakciójának, mely e_{aq}^- -t eredményez. A kezelése során az oldatok pH-ja jelentősen nem változott.



5. ábra Az oldott O_2 koncentráció hatása UV/szulfít és UV/VUV/szulfít eljárások esetén a fluoridion képződés sebességére, pH 10 oldatokban, 2,0 mM Na_2SO_3 esetén

Az oldott O_2 koncentráció hatását pH 10 esetén vizsgáltam. A 8 ppm oldott O_2 a levegővel telített vizes oldatokra vonatkozó érték, míg a 2 ppm a biológiai kezelésen átesett vizekre jellemző.

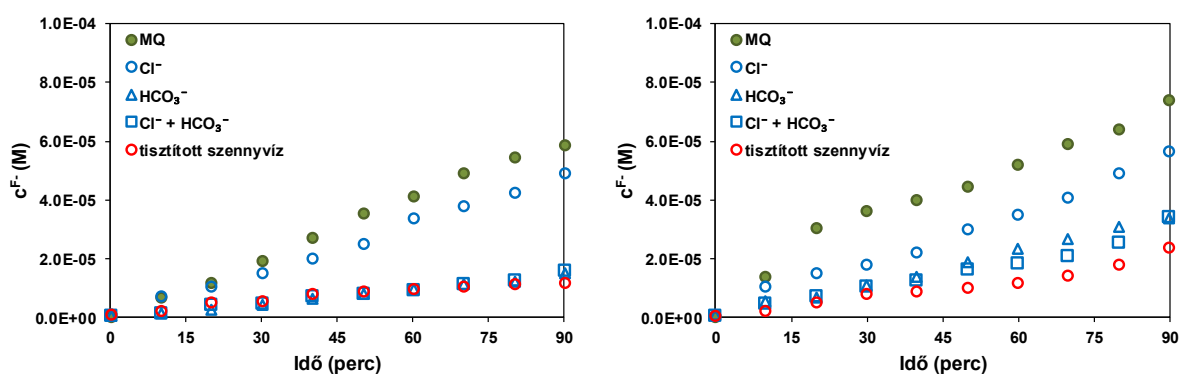
Az O_2 jelentősen befolyásolja a gyökkészletet, gyakorlatilag az UV/szulfít és UV/VUV/szulfít ARP eljárásokat AOP eljárásokká alakítja, melyekben elsősorban az oxidáló hatású $SO_4^{\bullet-}$, és kisebb mértékben a $\bullet OH$ a domináns reakciópartner a $SO_3^{\bullet-}$ átalakulása miatt. Az oldott O_2 hatása sokkal erőteljesebb volt, mint a pH hatása, gyakorlatilag 2 ppm oldott O_2 is már jelentős mértékben lassította az átalakulás sebességét (5. ábra), ami az O_2 -nek elsősorban az e_{aq}^- kisebb mértékben, VUV fotolízis esetén pedig a $H^\bullet$ koncentrációra gyakorolt hatásának tulajdonítható.



6. ábra A Na_2SO_3 koncentráció hatása a fluoridion képződésre UV/szulfít és UV/VUV/szulfít eljárások esetén, oxigénmentes, pH 10 oldatokban

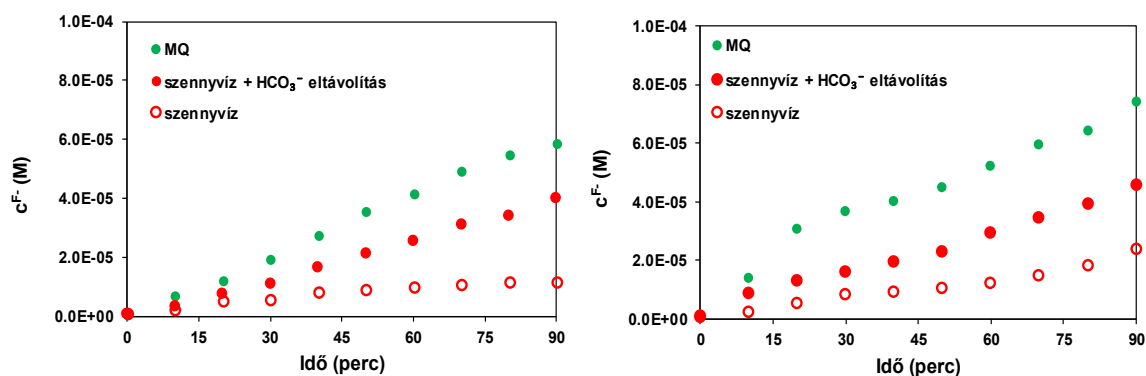
A megfelelő szulfít koncentráció beállítása gyakorlati szempontból nagyon fontos. Ha túlságosan sok vegyszert használunk, akkor a módszer drága lesz, és a környezetre gyakorolt hatása is nagyobb lesz, mivel a módszer alapját a e_{aq}^- képződése jelenti. A víz VUV-fotolízisekor keletkező e_{aq}^- koncentrációja adott, azok képződési sebességét a VUV fotonok fluxusa határozza meg. Azonban a Na_2SO_3 koncentrációjának növelésével növelhetjük annak UV és VUV fotolíziséhez köthetően a e_{aq}^- képződési sebességét. A szulfition koncentráció hatását, oxigénmentes, pH 10 oldatokban hasonlítottam össze. A növekvő SO_3^{2-} koncentrációval nő a PFOA átalakulás hatékonysága az UV/szulfít és UV/VUV/szulfít eljárás során is. UV/VUV/szulfít eljárásnál a gyors kezdeti szakaszban mindegyik koncentrációnál közel azonos sebességet tapasztaltunk. Ezt egy lassú, stagnáló szakasz követte. A kisebb koncentrációknál (0,5 és 1,0 mM) a lassú szakasz a mérés végéig fennmarad, míg 2,0, 3,0 és 4,0 mM koncentráció mellett azt egy gyors fluoridion képződés követett, melyben a koncentráció növelésével egyre intenzívebb átalakulást tapasztaltunk. Ennek az értelmezése viszont már meghaladta a szakdolgozat kereteit és az ismereteimet is. A 6. ábrán szereplő 4,0 mM szulfítkoncentráció mellett elvégzett mérés tisztítási hatékonysága 99%-os, ez volt a legnagyobb, amit a munkám során elértem.

A mátrix hatás vizsgálata gyakorlati szempontból igen fontos, mivel jelentősen befolyásolhatják a valós körülmények egy vízkezelési eljárás hatékonyságát. Munkánk során a Szegedi Vízműtől származó biológiailag kezelt kommunális vizet használtuk mátrixként. A mátrixunk a szerves ionok közül nagy koncentrációban tartalmaz HCO_3^- -t és Cl^- -t, kisebb mennyiségben NO_3^- -t, illetve szerves anyagot. Az oldatban lévő HCO_3^- határozza meg a víz pH-ját és azt 8,0-8,2 közötti értékre állítja be. Gyakorlatilag egy természetes pufferként viselkedik. Bár ez a pH nem nevezhető optimálisnak, de azért abba a tartományba esik, ahol már az UV/szulfid eljárások elég hatékonyan működnek. A továbbiakban az egyes szerves ionok hatásának vizsgálatánál az oldatok pH-ját 8,2-re állítottam be, hogy az összehasonlításnál a pH hatást ki tudjam küszöbölni.



7. ábra A biológiailag kezelt kommunális szennyvíz, mint mátrix és a benne lévő szerves ionok hatása a PFOA átalakulása során képződő fluoridion koncentrációra UV/szulfid és UV/VUV/szulfid eljárások során, 2,0 mM Na_2SO_3 mellett

Ahogy a **7. ábrán** látható, a mátrix jelentősen csökkentette az UV/szulfid és UV/VUV/szulfid eljárások hatékonyságát. A szerves ionok közül ez a hatás egyértelműen a HCO_3^- -nak tulajdonítható. A $\text{HCO}_3^-/\text{CO}_3^{2-}$, NO_3^- és a Cl^- egyaránt képes elreagálni a PFOA bontásért felelős e_{aq}^- -nal és az esetlegesen képződő gyökökkel is. A HCO_3^- hatásának kiküszöbölése és a szerves anyag tartalom hatásának pontosabb megismerése miatt elvégeztünk egy mérési sorozatot, melyben a biológiailag kezelt szennyvízhez hozzáadva a PFOA-t annak pH-ját 4,0-re állítottuk kénsav oldattal és 30 perc kevertetés után a pH 8,2-re állítása után ismételtük meg vele az UV/szulfid és UV/VUV/szulfid eljárást. Az eredményeink alapján a HCO_3^- eltávolítása jelentősen növelte a módszer hatékonyságát, és csökkentette a mátrix negatív hatását. A VUV fény additív hatása biológiailag kezelt szennyvízben és szerves ionok jelenlétében kevésbé nyilvánult meg, viszont igen nagy jelentősége lehet a mátrixban lévő egyéb szerves vegyületek hatékony eltávolításában.



8. ábra A HCO_3^- eltávolítás hatása a mátrix hatásra biológiailag kezelt kommunális szennyvíz esetén UV/szulfít és UV/VUV/szulfít eljárások során, 2,0 mM Na_2SO_3 mellett

Irodalomjegyzék

- [1] „EUR-Lex,” [Online]. Available: <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/1991/271/oj/hun>
- [2] Z. Wang, A. Buser, I. T. Cousins, S. Demattio, W. Drost, O. Johansson, K. Ohno, G. Patlewicz, A. M. Richard, G. W. Walker, G. S. White and E. Leninala, “A New OECD Definition for Per- and Polyfluoroalkyl Substances,” *Env. Sci. and Techn.*, 2021 vol. 55, pp. 15575-15578,
- [3] A. G. Capodaglio, “Critical Perspective on Advanced Treatment Processes for Water and Wastewater: AOPs, ARPs, and AORPs,” *Appl. Sci.*, 2020 vol. 10, p. 4549,
- [4] Z. Chen, X. Wang, R. Dong, Y. Zhang, X. Jin and C. Gu, “Challenging the contamination of per- and polyfluoroalkyl substances in water: advanced oxidation or reduction?,” *Env. Funct. Mat.*, 2022 vol. 1, pp. 325-337
- [5] S. Wu, L. Shen, Y. Lin, K. Yin and C. Yang, “Sulfite-based advanced oxidation and reduction processes for water treatment,” *Chem. Eng. J.*, 2021. vol. 414,
- [6] C. Wei, F. Zhang, Y. Hu, C. Feng and H. Wu, “Ozonation in water treatment: the generation, basic properties of ozone and its practical application,” *Rev. in Chem. Eng.*, 2016
- [7] E. B. Esfahani and M. Mohseni, “Fluence-based photo-reductive decomposition of PFAS using vacuum UV (VUV) irradiation: Effects of key parameters and decomposition mechanism,” *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2022 vol. 10,

Szeretnék köszönetet mondani Dr. Alapi Tünde témavezetőmnek, hogy szakmai tudásával segítette a dolgozatom létrejöttét és Veres Bence PhD hallgatónak, akihez bármikor fordulhattam segítségért.

Különböző termesztési körülmények között nevelt napraforgó mikroöldségek vizsgálata Vis-NIR spektroszkópiával és sokváltozós adatelemzéssel

Madács Ágnes^a, Slezsák János^a, Salgó András^a, Gergely Szilveszter^a

^aBudapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, NIR Spektroszkópia Csoport, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.

Összefoglalás

Mivel a klímaváltozás mindinkább érezteti hatását a mezőgazdaságban, ezért egyre nagyobb figyelmet kapnak a növénytermesztés alternatív, nem szabadföldi lehetőségei, mint például a vertikális farmok. Ezekben a zárt, jól szabályozott rendszerekben nem csak időjárástól független termelés válik lehetővé, de a környezeti paraméterek módosításával kísérletezésre is lehetőség nyílik. A vertikális farmok közkedvelt termékei a mikroöldségek, melyek növények fiatal, a csírázástól számítva 7-21 napon belül aratott palántái, amik kiemelkedő vitamin- és ásványianyag-tartalommal rendelkeznek.

Kutatásunk során vertikális farmon termesztett napraforgó mikroöldségeken vizsgáltuk a különböző hőmérséklet- és fénybeállítások hatásait közeli infravörös spektroszkópiával. Ez a gyors, roncsolás- és vegyszermentes módszer spektrumtranszformációkkal (pl. normálással, simítással kombinált második deriválttal) és sokváltozós adatelemzési módszerekkel (pl. klaszter- és főkomponens-elemzéssel) ötvözve alkalmas lehet a növények megkülönböztetésére a növekedésük közben őket ért hatások szerint. Eredményeink bemutatják a friss növények és a kíméletesen szárított, majd őrölt növényi porok spektrumai közötti különbségeket. Rámutatnak arra is, hogy egy ilyen jól szabályozott környezetben sem feltétlenül igaz, hogy két, azonos körülmények között történő termesztés ugyanazt a beltartalmi eredményt adja, mely háttérben rejtett hatások és a növények természetes variabilitása állhat.

Bevezetés

A mikroöldségek a növények fiatal, ehető palántái, melyeket a csírázás után 7-21 nappal aratnak, a sziklevelek teljes kifejlődését követően, az első valódi levelek megjelenésének kezdeti szakaszában. A növekedésük ezen stádiumában a kifejlett társaikhoz képest jelentősen nagyobb tápértékkel rendelkeznek, kiemelkedő a vitamin- és ásványianyag-tartalmuk, illetve koncentráltabban hordozzák az az egészség szempontjából kedvező hatású bioaktív vegyületek is [1-2]. Először a '80-as évek elején jelentek meg a kereskedelemben, azóta népszerűségük növekszik, és egyre ismertebbé válnak a fogyasztók körében, mint funkcionális élelmiszerek, melyek hozzájárulhatnak egészségünk megőrzéséhez és a betegségek elkerüléséhez. Ízük általában karakteres, az adott növényfajra jellemző. Leggyakrabban friss állapotukban, köretként, különböző saláták összetevőjeként vagy ételek díszítésére használják őket [1]. Mivel gyorsan romló, nagy víztartalmú (80-95%) élelmiszerekről beszélünk, így már arra is irányulnak kutatások, hogy a friss növény helyett az abból előállított szárított port használjuk,

mely a koncentráltabb tápanyagtartalom mellett eltarthatóbb is [3]. A vizsgálatok szerint a napraforgó a mikrozöldségek között kiemelkedő fehérjetartalommal rendelkezik, és jelentős mennyiségben tartalmaz fenolos vegyületeket, valamint jó kalciumforrás [4-5].

A mikrozöldségek a vertikális farmok közkedvelt termékei. Mivel nem igényelnek sok helyet, ideális körülmények között rendkívül gyorsan növeszthetőek, és piaci értékük is magas, így a befektetett energia gyorsan megtérülhet [6]. A vertikális farm megnevezés olyan kontrollált környezetű mezőgazdasági rendszerre (*controlled environment agriculture*, CEA) utal, ahol a külvilágtól elszigetelve minden környezeti paramétert szigorúan szabályoznak, és vertikálisan terjeszkedve, polcos rendszerben törekednek a maximális helykihasználásra [7]. Gyakori a hidropónia alkalmazása, ahol táptalaj helyett tápoldatot keringetnek, melyből a gyökérzet közvetlenül jut hozzá a növekedéshez szükséges tápanyagokhoz. A vertikális farmok előnye, hogy évszaktól független termelésre alkalmasak, és a zárt rendszer miatt rendkívül alacsony a fertőzések bejutásának esélye, így általában növényvédőszer alkalmazása sem szükséges. Hátrányuk azonban a magas üzemeltetési költség, melynek forrása elsősorban a LED-lámpák üzemeltetése és a hőmérséklet szigorú szabályozása [6-7].

A növények beltartalmi értékeinek mérése általában sok időt és bonyolultabb, roncsolással járó mintaelőkészítést igénylő analitikai eljárásokkal történik, melyek után a minta már nem visszanyerhető. A közeli infravörös spektroszkópia (*near-infrared spectroscopy*, NIR) egy gyors, roncsolás- és vegyszermentes alternatívát nyújthat ezen a téren. A mérés során a mintát infravörös fénnel sugározzuk be, melynek egy része elnyelődik, így a detektor által érzékelt fény a mért anyagban található kémiai kötések alapján egy jellemző abszorpciós mintázatot mutat a különböző hullámhosszokon [8].

Anyagok és módszerek

Kutatásunk mintái napraforgó mikrozöldségek voltak, melyek egy hidropóniás vertikális farmról származtak. Két környezeti paraméter, a hőmérséklet és a megvilágítás hatását vizsgáltuk két külön kísérleti elrendezésben úgy, hogy a növények növesztése során csak a vizsgált paraméter tért el, minden más körülmény megegyezett. A növények a csíráztatásuk kezdetétől számítva 7 nap után kerültek betakarításra, és egy kísérleti elrendezést háromszor ismételtünk meg, így három különböző hét azonos beállításainak hatása vethető össze. A két kísérlet mintáit az **1.** és a **2. táblázat** mutatja be.

1. táblázat: A hőmérséklet-kísérlet kezeléseinek bemutatása

Kezelés neve	Kezelés leírása
kontroll	A vertikális farm által megszokott standard beállítás
meleg	A kontrollhoz képest +5 °C-kal megnövelt nappali és éjszakai hőmérséklet
hűvös	A kontrollhoz képest –5 °C-kal csökkentett nappali és éjszakai hőmérséklet
ingadozás	A kontrollhoz képest azonos átlaghőmérséklet, de szélesebb hőmérsékleti tartomány

2. táblázat: A fénykísérlet kezeléseinek bemutatása

Kezelés neve	Kezelés leírása
kontroll	A vertikális farm által megszokott standard beállítás
erős fény	A kontrollhoz képest megnövelt fényintenzitás
gyenge fény	A kontrollhoz képest csökkentett fényintenzitás
„blurple”	A fényreceptet a kék és a piros fény együttese adja
napfény	A fényrecept dinamikusan változik a nap során a valódi napfény változásait imitálva
fehér fény	A kontrollhoz hasonló teljes spektrumú fény eltérő fényrecepttel

A farmon történő betakarítás után a növényeket a laborunkba szállítottuk, ahol még aznap, friss állapotban rögzítettük spektrumaikat, majd szárítószekrényben kíméletesen (40 °C-on, 48 órán keresztül) szárítottuk. Ezután dörzsmozsárban őröltük, és eltároltuk őket, majd később ezek spektrumait is rögzítettük. Mindkét állapotban 5-5 párhuzamos spektrumfelvétel történt egy mintából.

A mérésekhez egy *Foss NIRSystems 6500* diszperziós monokromátort használtunk RCA (*Rapid Content Analyzer*) mérőegységhez kapcsolva, mely reflexiós elrendezésben rögzíti a spektrumokat 400-2500 nm között, így lefedve a látható (*visible*, Vis) és a közeli infravörös tartományt is. Két fajta detektor végezte a méréseket, 4 db szilícium (400-1098 nm) és 4 db ólom-szulfid (1100-2498 nm). A friss növényeket Petri-csészébe helyezve mértük, míg a szárított porokat zafírablakos mintatartóban vizsgáltuk (1. ábra).

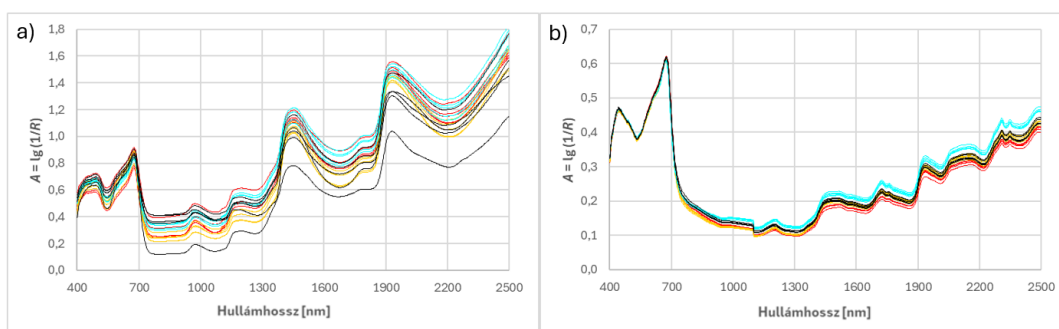


9. ábra: Friss napraforgó mikroöldség Petri-csészében, méréshez előkészítve (balra);
szárított, őrölt napraforgó mikroöldség (középen);
szárított minták zafírablakos mintatartóban a készülék detektálási területére helyezve (jobbra)

Az eredmények kiértékeléséhez használt spektrumtranszformációk a normálás (*standard normal variate*, SNV) és a simítással kombinált második deriválás voltak. Előbbi az alapvonal-eltolódások kiküszöbölésére, míg utóbbi a spektrális zajok szűrésére és a karakterisztikus abszorbancia csúcsok kiemelésére alkalmas. A sokváltozós adatelemzési módszerek közül a klaszterelemzést (*cluster analysis*, CA) és a főkomponens-elemzést (*pricipal component analysis*, PCA) alkalmaztuk, melyek nem felügyelt mintázatfelismerő eljárások, így a mintákat szabadon rendezik csoportokba anélkül, hogy előzetes információk megadásával befolyásolnánk azt, s ezáltal jól feltérképezhetővé válnak a hasonlósági viszonyok. A klaszterelemzés során Ward módszerét alkalmaztuk, míg a távolság meghatározására a Pearson-féle korrelációs együtthatót választottuk.

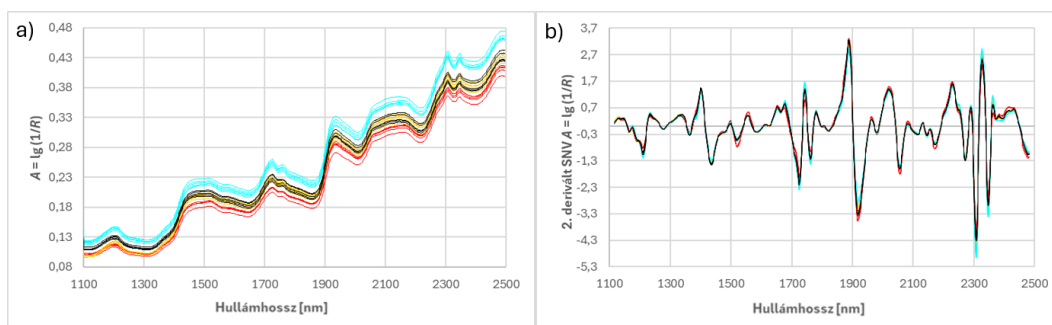
Eredmények és kiértékelésük

A **2. ábrán** a hőmérséklet-kísérlet második hetéből származó friss és szárított növények kezeletlen, teljes mérési tartományban (400-2500 nm) kapott spektrumai láthatóak. Jól szemléltethető ezzel, hogy a mintákban található 90% fölötti nedvesség-tartalom mennyire domináns, az O–H rezgés elnyeléséből fakadó csúcsokat eredményez 1450 és 1940 nm körül, melyek intenzitásukkal elnyomhatnak, vagy szélességükkel akár el is fedhetnek más hasznos információkat. Emiatt a jelenlegi kiértékelés a szárított minták mérési eredményeire koncentrál, a nedves minták spektrumainak mélyebb elemzése pedig további munka részét képezi. Ez utóbbi lehetséges egyfelől akár maguk a víz csúcsok intenzitásának és maximum pontjának vizsgálatával, mely a növényi jólétről adhat információt, másfelől ezen csúcsok spektrumból történő kivágásával, hogy a víz által el nem fedett részekben megjelenő kisebb intenzitású abszorbanciák elemezhetővé váljanak.



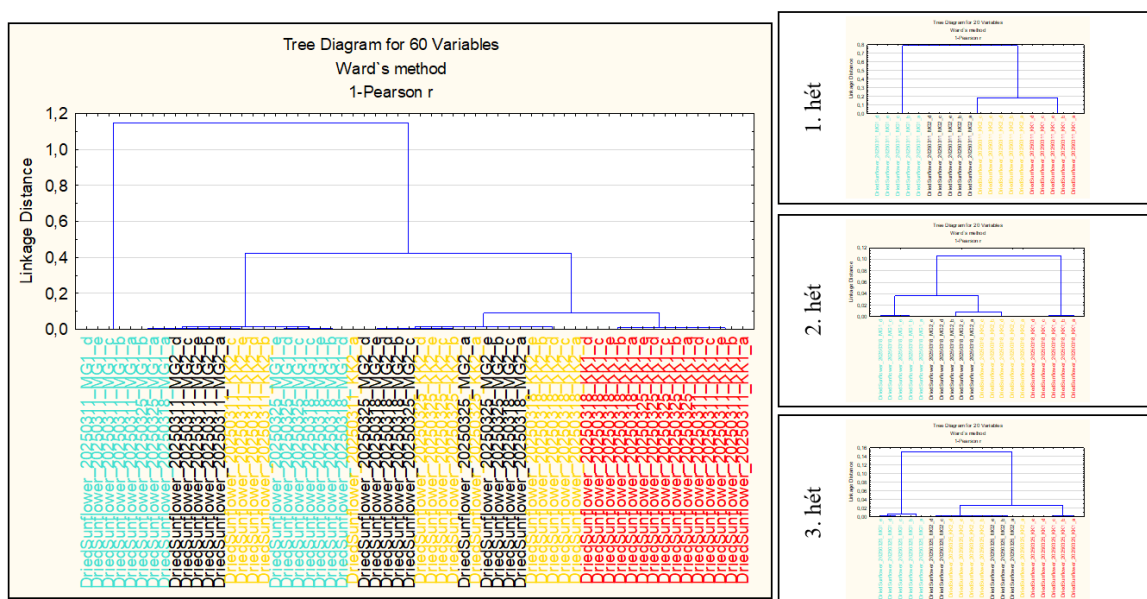
10. ábra: a) friss napraforgó mikroöldségek kezeletlen spektrumai;
b) szárított, őrölt napraforgó mikroöldségek kezeletlen spektrumai
(jelmagyarázat: kontroll, **meleg**, **hűvös**, **ingadozás**)

A **3. ábrán** a hőmérséklet-kísérlet második hetéből származó szárított növényeinek ólom-szulfid detektorral mért (1100-2500 nm) kezeletlen, majd simítással kombinált második derivált és normált spektrumai láthatóak. A kezelések hatására az abszorbanciacsúcsok kiemelődnek, a második deriválás hatására ezek lokális minimumokként ábrázolódnak. Bár minden spektrum hasonló, hiszen alapvetően minden minta napraforgó mikroöldség, de a kezelések hatására szemmel is látható kisebb különbségeket vehetünk észre a mérések között.



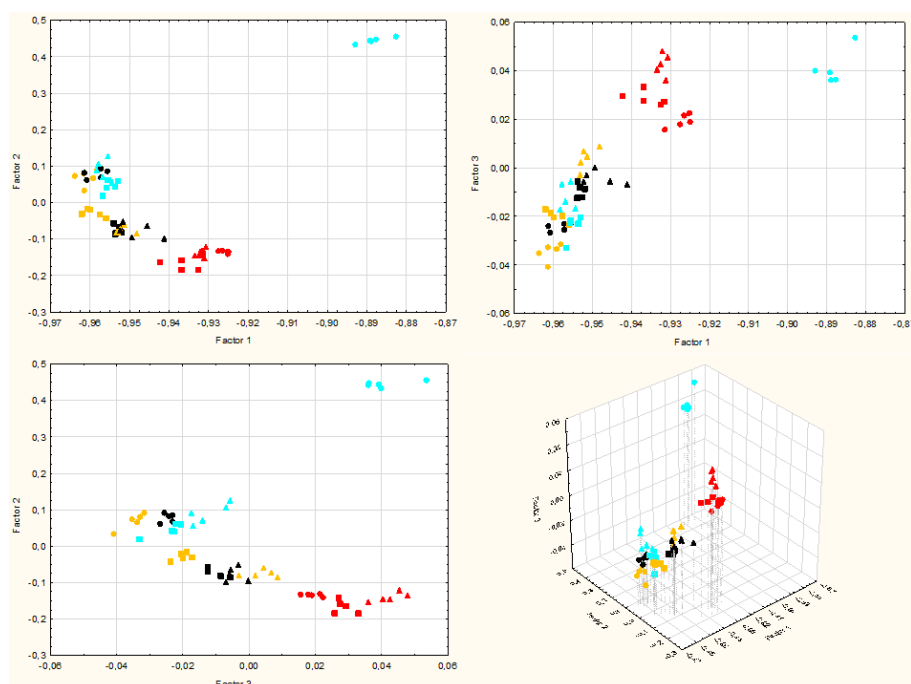
11. ábra: Szárított napraforgó mikroöldségek spektrumai (1100-2500 nm)
a) kezeletlen spektrumok; b) Simítással kombinált 2.derivált, majd SNV kezelt spektrumok
(jelmagyarázat: kontroll, **meleg**, **hűvös**, **ingadozás**)

A sokváltozós adatelemzési módszerekhez a **3. ábrán** bemutatott előkezelt spektrumokat használtuk. Az azonos termesztési körülmények három párhuzamos hetének klaszterelemzését egyben és külön-külön ábrázolva a **4. ábra** mutatja be. Látható, hogy a hetek nem teljesen hozták ugyanazt az eredményt, bár a magas (**meleg**) és az alacsony (**hűvös**) hőmérséklet mintái mindig jól elkülönülnek a többitől. Ha az összes mérés összesítését nézzük, elmondható, hogy bár a növények egy kontrollált környezetben növekedtek és a környezeti paramétereik minden héten megegyeztek, azok beltartalmi szempontból nem mutatnak egységes mintázatot. Az első hét során az alacsonyabb hőmérsékleten nevelkedett növények alulfejlettebbek lettek, mint a másik két alkalommal, így ezek dominánsan eltérő klasztert alkotnak. Emellett a magas hőmérséklet hatása emelhető még ki, mely viszont konzisztensen hasonló eredményeket hozott, és a közös ábrán is egy klaszterbe rendeződik az összes hét.



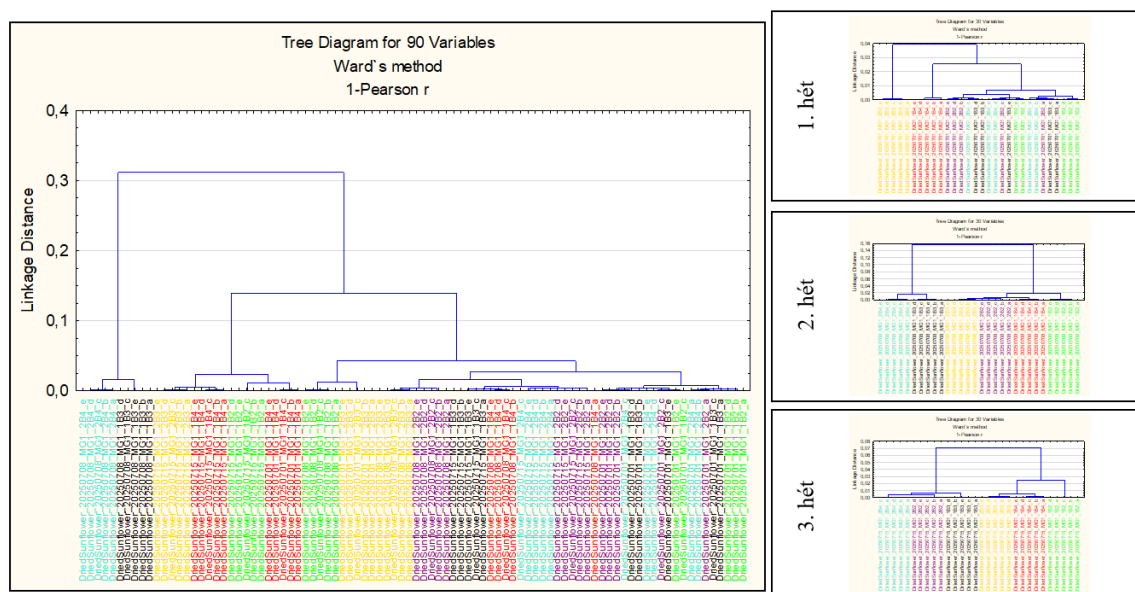
12. ábra: A hőmérséklet-kísérlethez tartozó szárított napraforgó mikroözödség minták előkezelt (2. derivált + SNV) spektrumainak klaszterelemzése az 1100-2500 nm hullámhossztartományban;
 jobbra: a három termesztési hét eredménye egyben; balra: a hetek eredményei külön elemezve
 (jelmagyarázat: kontroll, **meleg**, **hűvös**, **ingadozás**)

Az **5. ábrán** látható főkomponens-elemzés ún. *score* ábrái mindhárom hét adatait tartalmazzák, és alátámasztják a klaszterelemzésből levont következtetéseket. Jól látszanak az első hét fejletlen, alacsony hőmérsékleten (**hűvös**) nevelkedett növényei és a magas hőmérséklet (**meleg**) elkülönülő pontthalmaza is.



13. ábra: A hőmérséklet-kísérlethez tartozó szárított napraforgó mikroöldség minták előkezelt (2. derivált + SNV) spektrumainak főkomponens-elemzése az 1100-2500 nm hullámhossztartományban (jelmagyarázat: kontroll, **meleg**, **hűvös**, **ingadozás**; ● – 1. hét, ■ – 2. hét, ▲ – 3. hét)

A fénykísérlet eredményeiben még nagyobb eltérések láthatóak a hetek mintázatai között. A **6. ábrán** látható klaszterelemzés megmutatja, hogy bár a különböző kezelések az adott heteken a legtöbb esetben jól elkülönülő klasztereket képeznek, de ezek egyesítésénél megint azt láthatjuk, hogy az azonos környezeti paraméterek nem feltétlenül rendeződtek közös csoportokba.



14. ábra: A fénykísérlethez tartozó szárított napraforgó mikroöldség minták előkezelt (2. derivált + SNV) spektrumainak klaszterelemzése az 1100-2500 nm hullámhossztartományban; jobbra: a három termesztési hét eredménye egyben; balra: a hetek eredményei külön elemelve (jelmagyarázat: kontroll, **erős fény**, **gyenge fény**, „**blurple**”, **napfény**, **fehér fény**)

Következtetések, javaslatok

A bemutatott eredmények szemléltetik, hogy bár a közeli infravörös spektroszkópia a szárított növényi mintákban jól látja a különbségeket, de a friss növények mérése – ahol igazán fontos lenne egy gyors, roncsolásmentes módszer alkalmazása – komoly kihívásokat okoz a magas víztartalom miatt. Levonható az a következtetés is, hogy bár bizonyos környezeti hatások (mint például a magasabb hőmérséklet) kellően domináns, azonos irányba mutató változásokat eredményeznek, mégis úgy tűnik, hogy összességében egy ilyen zárt, kontrollált rendszer sem képes hétről hétre pontosan ugyanazt a beltartalmi minőséget előállítani. Emögött a jelenség mögött állhat a növények természetes, élő rendszerekből fakadó variabilitása, de felmerül annak a lehetősége is, hogy rejtett, általunk nem vizsgált hatások, ingadozások lehetnek a termesztési rendszerben.

A jövőben – a friss növények spektrumainak mélyebb elemzésén túl – érdemes lehet a kísérleteket akár kombinált paraméterváltoztatásokkal megismételni, illetve megvizsgálni, hogy más növényfajtáknál hasonló beltartalmi változások jelentkeznek-e az azonos környezeti hatásokra válaszul. Emellett a spektrumok abszorbanCIASÚCSAINAK elemzése pontosabb képet adhat arról, hogy mely beltartalmi értékek változhattak a környezet paramétereinek módosításával.

- [1] B. Dereje et al.: *ACS Food Sci. Technol.*, **2023** (3), 981-998.
- [2] S. Verlinden: *Hortic. Rev.*, **2020** (47), 85-124.
- [3] M. Mansouri et al.: *LWT*, **2024** (198), 116049.
- [4] M. D. Ghora et al.: *J. Food Compos. Anal.*, **2020** (91), 103495.
- [5] S. Balik et al.: *Sci. Rep.*, **2025** (15), 6213.
- [6] C. Vatis et al.: *Atmosphere*, **2022** (13), 1258.
- [7] K. Benke, B. Tomkins: *Sustainability: Sci. Pract. Policy*, **2017** (13), 13-26.
- [8] J. A. Prananto et al.: *Adv. Agron.*, **2020** (164), 1-49.

Ez a projekt az Európai Unió HORIZON-CL6-2022-CLIMATE-01-04 „Achieving Ecological Resilient Dynamism for the European food system through consumer-driven policies, socio-ecological challenges, biodiversity, data-driven policy, sustainable futures” (ECO-READY) kutatási és innovációs programjának támogatásában részesült, a N°101084201 számú támogatási megállapodás keretében.

A TKP2021-EGA-02 számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a TKP2021-EGA pályázati program finanszírozásában valósult meg.

A Doktoranduszi Kiválósági Ösztöndíj Program (DKÖP) által támogatott projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott, valamint a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem támogatása alapján valósult meg.

TÁMOGATÓINK

Magyar Kémikusok Egyesülete



Magyar Kémikusok Egyesülete
Csongrád Megyei Csoport



Magyar Tudományos Akadémia
Szegedi Akadémiai Bizottság



Szegedi Tudományegyetem
TTIK Kémiai Intézet



Soneas Vegyipari Kft.



SONEAS
Chemistry for a better life

Egis Gyógyszergyár Zrt.



Richter Gedeon Nyrt.



RICHTER GEDEON