

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 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

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

- 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

LiCl egylépéses 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-t elválasztják a szennyezőktől (pl. alkáliloklidok), majd a LiCl-t 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].

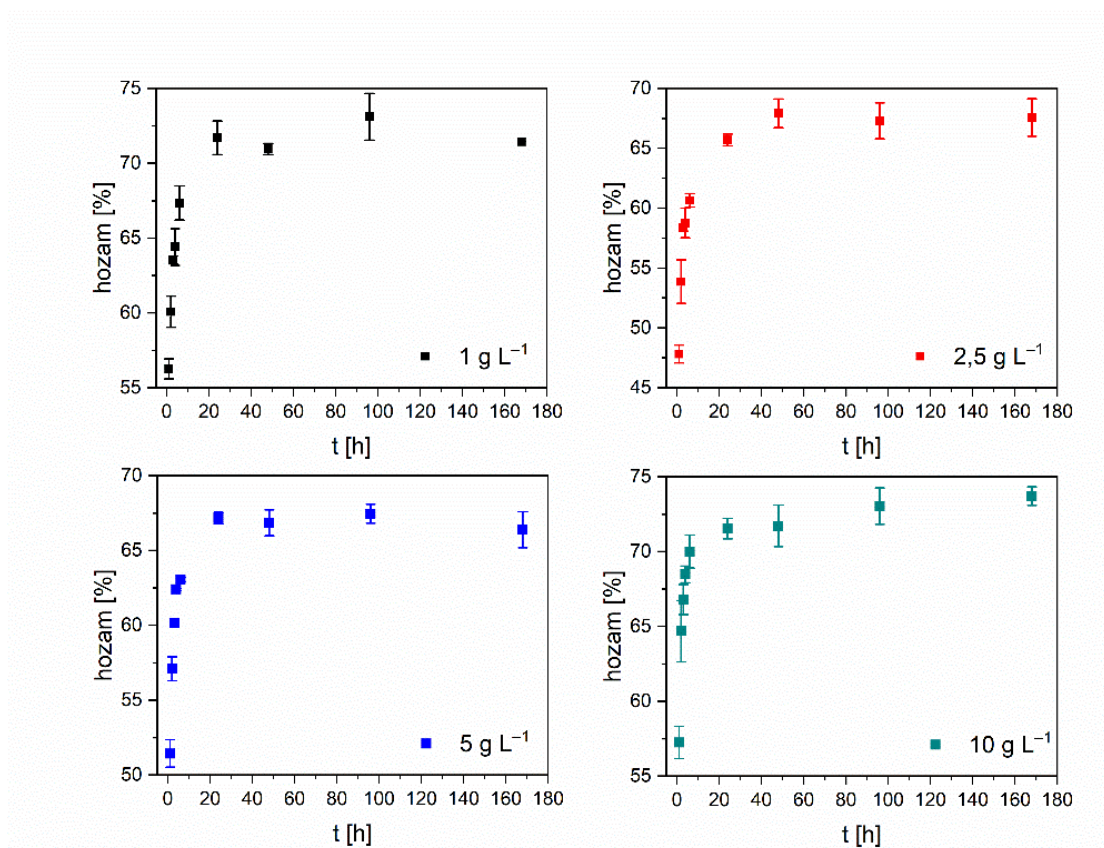
A kutatócsoportban korábbi mérések során bebizonyították, hogy a $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ összetételű trikalcium-aluminát (TCA) kvantitatívan egy kloridtartalmú réteges kettős hidroxiddá (LDH), ún. Friedel-sóvá alakul, ha HCl-dal reagál [7]. A fent tárgyalt okok és problémák miatt célul tűztük ki, hogy a LiCl-t 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.

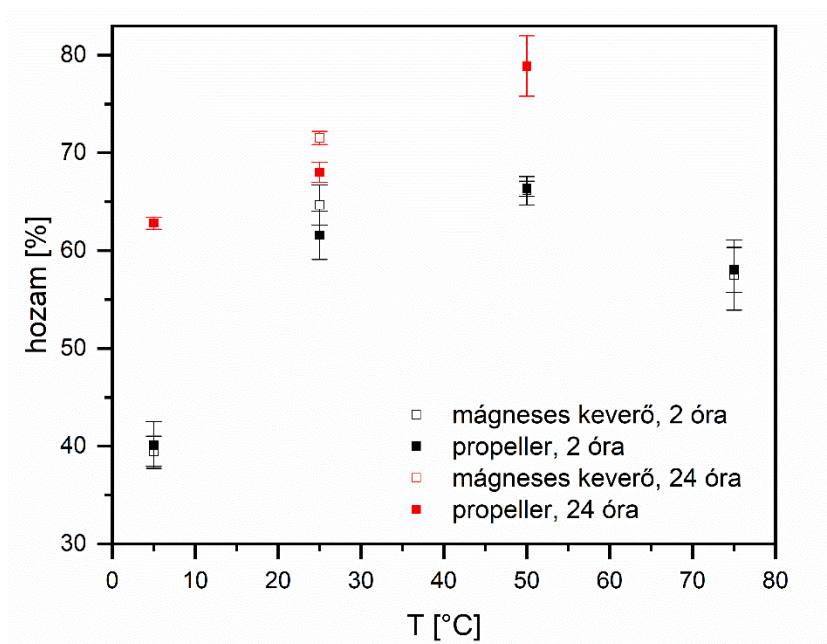


1. ábra: A LiOH hozamának koncentráció- és időfüggése ($T = 25^{\circ}\text{C}$). Az ábrákon a különböző kiindulási lítiumkoncentrációk esetén tapasztalt LiOH-hozamok láthatók.

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

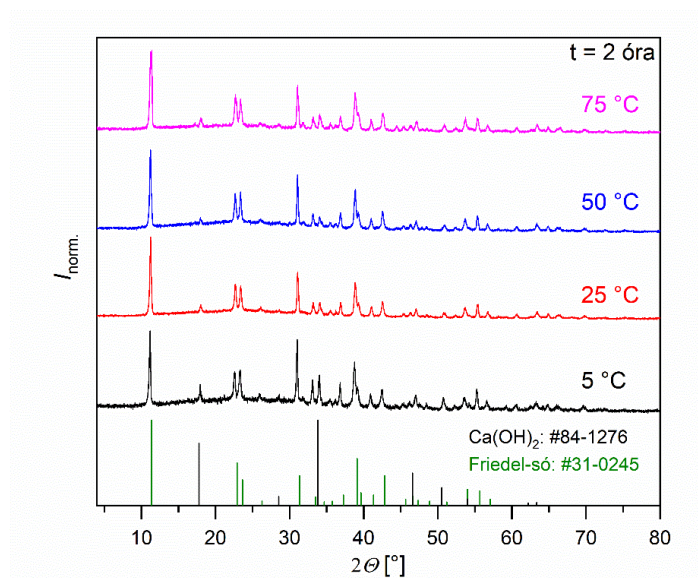
szükségesek néhány hetes reakcióidő alkalmazása mellett. Szintén jelentős hozamnövekedés tapasztalható 50 °C-on (78,9 %), 24 óra után, ami kismértékben ugyan, de meghaladja a 25 °C-on kapott értéket (71,5 %).

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

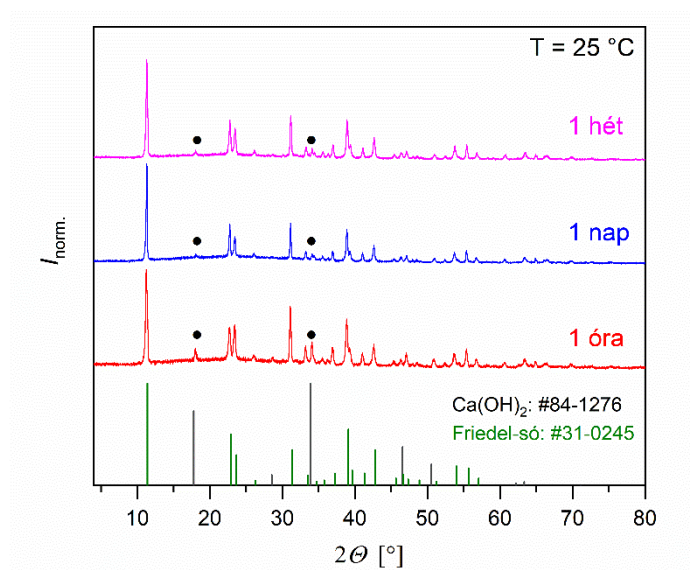
T [°C]	$[\text{OH}^-]_{\text{T}}$ [M]	$[\text{CO}_3^{2-}]_{\text{T}}$ [M]	$[\text{Cl}^-]_{\text{T}}$ [M]	$[\text{Ca}^{2+}]_{\text{T}}$ [mM]	$[\text{Al}^{3+}]_{\text{T}}$ [mM]	$[\text{Li}^+]_{\text{T,calc.}}$ [M]	$[\text{Li}^+]_{\text{T}}$ [M]	Δ [%]
5	0,701	0,009	0,817	1,289	0,071	1,533	1,518	-1,0
25	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 porróntgen-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

TÁMOGATÓINK

Magyar Kémikusok Egyesülete



Magyar Kémikusok Egyesülete
Csongrád Megyei Csoport



Magyar Tudományos Akadémia
Szegedi Akadémiai Bizottság



Szegedi Tudományegyetem
TTIK Kémiai Intézet



Soneas Vegyipari Kft.



Egis Gyógyszergyár Zrt.



Richter Gedeon Nyrt.



RICHTER GEDEON