



Válogatás

Az MTA Kémiai Tudományok Osztálya által kiválasztott három publikáció közül az elsőben a szerző bemutatja, hogyan lehet az élen járó lokális korrelációs módszerrel kémiailag pontos számításokat végezni több száz atomos molekulák esetében is. A második közlemény szerzői által használt új, fémmentes katalizátorcsalád megoldást ad az észterek hatékony és sztereoselektív aldehiddé történő alakításában. A harmadik publikációban a szerzők két különböző ciklikus ionmobilitás-tömegspektrometriás módszert dolgoztak ki egy, csak izomerkeverékben létező, ciklodextrin-eredetű szennyező izomerjének elválasztására és azonosítására.

Perczel András

az MTA rendes tagja, osztályelnök

A legfejlettebb lokális korrelációs módszerekkel kémiai pontosságú kvantumkémiai számítások váltak lehetővé akár több száz atomos molekulákra is

Chemical Science, 2024

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2024/sc/d4sc04755a>

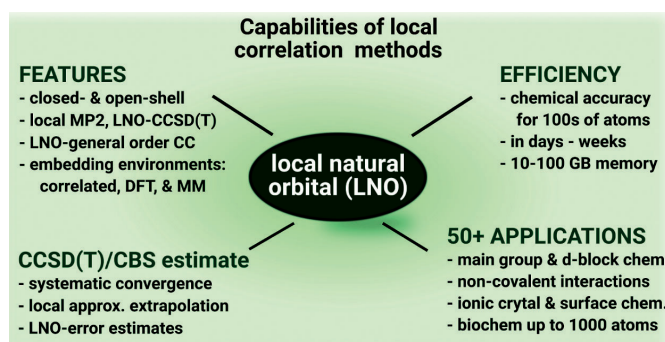
Péter R. Nagy^{1,2,3}

¹Department of Physical Chemistry and Materials Science, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Hungary

²HUN-REN-BME Quantum Chemistry Research Group, Hungary

³MTA-BME Lendület Quantum Chemistry Research Group, Budapest, Hungary

A publikáció ismerteti, hogyan lehet az élenjáró lokális korrelációs, különösen a BME-n fejlesztett LNO-CCSD(T) módszerrel kémiailag pontos számításokat végezni több száz atomos molekulákra is. A nagy pontosság (<1 kcal/mol hiba, pl. reakcióenergiákra) és a rutinszerűen elérhető számítási költség miatt lehetővé vált összetett molekuláris kölcsönhatások és reakciók megbízható modellezése a főcsoport-, átmenetifém-, bio- és felületi kémiában, amit a szerző 50+ gyakorlati példával illusztrál.



Észterek szelektív redukciója aldehidekké „Fiddler-rák jellegű” boránokkal

Journal of the American Chemical Society, 2025

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.4c14596>

Ádám Dudás^{1,2}, Ádám Gyömöre¹, Bence Balázs Mészáros^{1,2}, Stefánia Gondár¹, Renáta Adamik¹, Dániel Fegyverneki¹, Dávid Papp^{2,3}, Konrad Bernhard Otte⁴, Sergio Ayala Jr.⁴, János Daru⁵, József Répási⁶, Tibor Soós¹

¹Organocatalysis Research Group, Institute of Organic Chemistry, HUN-REN Research Centre for Natural Sciences, Budapest, Hungary

²Hevesy György PhD School of Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary

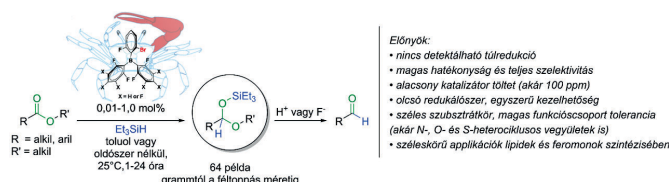
³MTA-ELTE Lendület Ion Mobility Mass Spectrometry Research Group, Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary

⁴Provivi, Inc., Santa Monica, California 90404, United States

⁵Department of Organic Chemistry, Eötvös Loránd University, Budapest, Hungary

⁶Aldexchem Ltd., Érd, Hungary

Bár az aldehidek óriási ipari jelentőségűek, szelektív és hatékony előállításuk továbbra is kihívást jelent. Erre nyújt megoldást kutatócsoportunk új, fémmentes katalizátorcsaládja, mellyel az észterek eddig nem látott hatékonysággal és szelektivitással alakíthatók át aldehidekké. Módszerünk már ipari méretben is alkalmazást nyert: a rizs fő kártevőjének feromonját állítják elő ezzel a módszerrel, megnyitva az utat fenntarthatóbb kémiai eljárások felé a gyógyszeriparban és az agrokémiaiában.



Izomer ciklodextrin-alapú Sugammadex-szennyezők jellemzése ciklikus ionmobilitás – nagy felbontású tömegspektrometriával

Journal of the American Society for Mass Spectrometry, 2025

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jasms.4c00243>

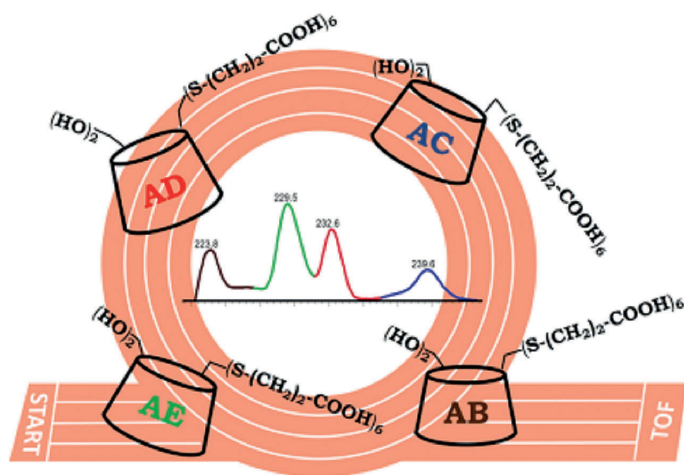
Péter S. Szakály^{1,2,3}, Dávid Papp^{1,2}, Arnold Steckel¹, Erzsébet Varga³, Gitta Schlosser¹

¹MTA-ELTE Lendület (Momentum) Ion Mobility Mass Spectrometry Research Group, ELTE Eötvös Loránd University, Institute of Chemistry, Department of Analytical Chemistry, Budapest, Hungary

²Hevesy György PhD School of Chemistry, ELTE Eötvös Loránd University, Institute of Chemistry, Budapest, Hungary

³CycloLab Cyclodextrin Research and Development Laboratory, Ltd., Budapest, Hungary

A ciklikus ionmobilitás-tömegspektrometria (cIM-MS) hatékony módszer izomerkeverékek komponenseinek elválasztására és a komponensek azonosítására. Ebben a közleményben a szerzők



két különböző cIM-módszert dolgoztak ki egy, csak izomerkeverékben létező, ciklodextrin-eredetű (CD) szennyező négy konstitúciós izomerjének cIM-elválasztására és tömegspektrometriás azonosítására. Az izomerszerkezetű, karakterisztikus fragmens-ionok ionmobilitási elválasztását is bemutatták. Kutatásukkal demonstrálták a CD-analitikában még kevésbé elterjedt cIM-MS technika alkalmazhatóságát és hatékonyságát.



Csekély növekedés az egyetemi jelentkezések számában kémiai szakokra



OKTATÁSI HIVATAL

Az Oktatási Hivatal lapzártnékor hozta nyilvánosságra a 2025-ös felsőoktatási jelentkezésekről kiadott statisztikákat. Kémia alapszakra nappali tagozaton,

első helyen összesen 126-an adták be jelentkezésüket öt intézményben (DE, ELTE, PE, PTE, SZTE). Ez alig nagyobb, mint a tavalyi 122-es létszám. Ugyanezen a szakon levelező képzésre 20 a teljes létszám két képzőhelyen (EKKE, NYE).

Vegyésszérművek alapszakra nappali tagozaton 364-en jelentkeztek öt intézményben (BME, DE, ME, PE, SZTE) a tavalyi 334-gyel szemben. A levelező jelentkezések száma itt 65 (DE, ME).

A sok szakpárosítás miatt az adatokban rendkívül szétforgácsolt kémia tanári képzéseknél nappali tagozaton összesen 24-en jelentkeztek az országban, ez is csekély növekedés a tavalyi 17 után; míg a szintén sokszínű levelező kémia tanári képzési formákra az idén 138-an tervezik a beiratkozásukat, a tavalyi szám 122 volt.

LG



European Chemical Societies Publishing

Chemistry Europe

- 16 chemical societies
- From 15 European countries
- Which co-own 20 scholarly journals
- Over 19 million downloads in 2022
- Over 120,000 articles published since 1995
- With 128 Chemistry Fellows and 8 Honorary Fellows recognized for excellence in chemistry

www.chemistry-europe.org



published in partnership with

WILEY-VCH

