

54. **Műszaki Kémiai Napok** Chemical Engineering Days

**KONFERENCIA KIADVÁNY
CONFERENCE PROCEEDING**



**Absztrakt kötet
Book of abstracts**

2026. április 21–22.

54. Műszaki Kémiai Napok

**Konferencia
Absztrakt kötet
2026. április 21–22.**

Szerkesztette
Bélafiné Dr. Bakó Katalin
Klein Mónika

Megnyitó:
Április 21-én, kedden, 10:00 órakor
B épület, II. emeleti Konferencia-központ

Plenáris előadókink:

Volk Balázs
EGIS Gyógyszergyár Zrt.

Sebestyén Viktor
Pannon Egyetem MK

54. Műszaki Kémiai Napok

Konferencia
Absztrakt kötet
2026

Szerkesztette

Bélafiné Dr. Bakó Katalin
Klein Mónika

Kiadja a Pannon Egyetemi Kiadó

8200 Veszprém, Egyetem u. 10.



ISBN 978-963-396-320-3

© Pannon Egyetemi Kiadó, Veszprém, 2026

Anyanyelvi lektor: Bélafi-Zihár Dóra

Borítóterv és kiadványszerkesztés: Vipler Nikolett

A kiadásért felelős a Pannon Egyetem rektora



Pannon Egyetem
University of Pannonia



Pannon Egyetem
Mérnöki Kar

Tudományos Bizottság

Elnök:

Bélafiné Bakó Katalin

Tagok:

Abonyi János

Chován Tibor

Guttman András

Gyenis János

Hanák László

Hancsók Jenő

Hodur Cecília

Horváth Krisztián

Járvás Gábor

Mika T. László

Modla Gábor

Németh Áron

Németh Sándor

Pethő Dóra

Ruppert Tamás

Szalai István

Szépölgyi János

Varga Csilla

Vonderviszt Ferenc

Titkár:

Klein Mónika

Tartalomjegyzék

Cd_{0.5}Zn_{0.5}S fotokatalizátorok előállítási körülményeinek vizsgálata Na₂S₂O₃ termikus bontása során	9
Investigation of the conditions for the preparation of Cd _{0.5} Zn _{0.5} S photocatalysts by thermal decomposition of Na ₂ S ₂ O ₃	
<i>Asmae Ghoumit, Orosz Nándor, Horváth Ottó, Fodor Lajos</i>	
Label-free Optical Biosensor-Based Detection of Motile Bacteria	10
Motilis baktériumok detektálása jelölésmentes optikai bioszenzorral	
<i>Enikő Farkas, Dóra Anett Balogh, Zoltán Dicső, Sándor Kurunczi, Balint Beres, Balazs Stercz, Judit Domokos, Dóra Szabó, Beatrix Péter, Inna Székács, Robert Horváth</i>	
Populációs mérlegegyenletek megoldómódszereinek összehasonlító vizsgálata: teljesítmény, pontosság és robusztusság	12
Comparative Study of Solution Methods for Population Balance Equations: Performance, Accuracy, and Robustness	
<i>Balogh László, Ulbert Zsolt, Egedy Attila, Bárkányi Ágnes</i>	
Label-free biophysical characterisation of plant peptide–protein interactions and their effects on cell adhesion	13
Növényi peptidek fehérje-kölcsönhatásainak és sejtadhézióra gyakorolt hatásának vizsgálata jelölésmentes biofizikai módszerekkel	
<i>Krisztina Borbely, Dóra Anett Balogh, Sándor Kurunczi, Enikő Farkas, Beatrix Peter, Inna Szekacs, Gabriella Endre, Eva Kondorosi and Robert Horvath</i>	
Structure–Property Relationships for Mucoadhesive Polymer Films Interacting with Mucosa-Mimetic Hydrogels	15
<i>Emanuela Cullhaj, András Szilagyi, Benjámin Gyarmati</i>	
Kis méretű kötőanyag-nyomtatáshoz fejlesztett adagolórendszerek vizsgálata numerikus modellezéssel	16
Investigation of feeding systems developed for small-scale binder 3D printing using numerical modeling	
<i>Cziráki Bálint, Kámán András, Egedy Attila</i>	
Li-ion akkumulátorok értéknövelt újrahasznosítása	17
Value added recycling of Li-ion batteries	
<i>Császár Kiara Atina, Kis-Iván Alex, Miskolczi Norbert, Zsinka Viktória</i>	
Huminsav–réz(II) komplexképződés vizsgálata	18
Investigation of humic acid-copper(II) complex formation	
<i>Csicsor-Kulcsár Petra, Szabóné dr. Bárdos Erzsébet, Dr. Horváth Ottó</i>	
A tejsavó diaszűrésének intenzifikálása modulba integrált 3D-nyomtatott turbulencianövelő elemekkel	19
Process Intensification of Sweet Whey Diafiltration by Module-Integrated 3D Printed Turbulence Promoters	
<i>Dobozi Réka, Urr Tímea Lilla, Jákói Zoltán Péter, Beszédes Sándor, Szabó P. Balázs, Kertész Szabolcs</i>	
Elektrosztatikus szálképzéssel előállított amorf szilárd diszperziók kritikus minőségi paramétereinek vizsgálata PAT-alapú módszerekkel	21
Investigation of Critical Quality Attributes of electrospun amorphous solid dispersion using PAT-based methods	
<i>Fazekas Bettina, Galata Dorián László, Nagy Zsombor Kristóf, Hirsch Edit</i>	

Granuláló folyadék hozzáadása nélküli folyamatos ikercsigás nedves granulálási technológia	23
Continuous twin-screw wet granulation technology without the addition of granulation liquid	
<i>Fekete Dániel, Tóth Richárd Ferdinánd, Nagy Zsombor Kristóf, Thorsten Cech, Lukas Ries, Szabó Edina</i>	
Szemmozgás adatok elemzése szerelési feladat során a munkautasítások javítása érdekében	25
Analysis of eye movement data during assembly tasks to improve work instructions	
<i>Gugolya Mónika, Ruppert Tamás</i>	
$\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{S}$ fotokatalizátor Co(II)- és Ni(II)-módosítási körülményeinek vizsgálata	26
Investigation of the conditions for the modification of $\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{S}$ photocatalysts with Co(II)- and Ni(II) ions	
<i>Gulyás Ferenc, Fodor Lajos</i>	
Interconnected Digital Twin Representation for Operational Decision Support	28
<i>Gergely Halász, Ruppert Tamás</i>	
Virtuális vegyületek kisléptékű párhuzamos szintézise	29
Small-scale parallel synthesis of virtual molecules	
<i>Dávid Havasi, Éva Bodrogi, Róbert Kiss, Ádám Golcs</i>	
Ipari eredetű szennyvíziszap anaerob biogázfermentációjának nyomon követése biokinetikai és dielektromos paraméterekkel	31
Monitoring the anaerobic biogas fermentation of industrial sludge using biokinetic and dielectric analysis	
<i>Dr. Jákoí Zoltán Péter, Dobozi Réka, Sütő Zsófia Réka, Dr. Illés Erzsébet, Dr. Beszédes Sándor</i>	
A katódos védelem alkalmazásának vizsgálata magas hőmérsékleten	33
Evaluation of Cathodic Protection Performance in High-Temperature Environments	
<i>Jankovics Péter, Kristóf Tamás, Lukács Zoltán</i>	
Természetes hatóanyagok szelektív rákellenes hatásának vizsgálata jelölésmentes optikai bioszenzorokkal	35
Investigation of the selective anti-cancer effect of natural active compounds using label-free optical biosensors	
<i>Beatrix Péter, Tim Ausbüttel, Nikolett Kanyo, Péter Joó, Kinga Tóth, Zoltán Sziitner, Inna Szekács, Szilvia Bosze, Gábor M. Kovács, Imre Boldizsár, Robert Horvath</i>	
SARS-CoV-2 S1 fehérje és integrinek kölcsönhatásának kinetikai vizsgálata élősejtes, jelölésmentes optikai bioszenzorral	37
Kinetic Analysis of SARS-CoV-2 S1–Integrin Binding Using Live-Cell Label-Free Optical Biosensing	
<i>Kanyó Nicolett, Borbely Krisztina, Péter Beatrix, Kovács Kinga Dóra, Balogh Anna, Magyaródi Beatrix, Kurunczi Sándor, Székács Inna, Horváth Róbert</i>	
Hidrogén előállítása Li-ion akkumulátorból származó hulladékok újrahasznosításával	39
Hydrogen production by recycling Li-ion battery waste	
<i>Kis-Iván Alex, Zsinka Viktória, Miskolczy Norbert, Ningbo Gao, Cui Quan</i>	
Precizitásorientált hibridmodell alkalmazása többcélú optimalizálásban	40
Reliability oriented hibrid model in multiobjective optimization	
<i>Kiss Bendegúz, Szilágyi Botond</i>	
A mikroalga-kutatás új horizontjai: a precíziós biotechnológiától a körforgásos gazdaságig	42
New horizons in microalgae research: from precision biotechnology to circular economy	
<i>Kiss Bernadett, Németh Áron</i>	

Elszenesítéssel előkezelt biomassa elgázosítása biochar jelenlétében a CO₂-kibocsátás csökkentése érdekében	43
Gasification of carbonized biomass in the presence of biochar to reduce CO ₂ emissions	
<i>Kollár Adél, Zsinka Viktória, Miskolczi Norbert</i>	
Röntgentomográfiás eljárás mint komplex technológiai fejlesztési eszköz	44
X-ray Tomography as a Complex Technological Development Tool	
<i>Dr. Kovács András</i>	
Szelektív fényáteresztést és víztaszító felületi tulajdonságot mutató nanoszerkezetű bevonatok fejlesztése	45
Development of nanocoatings with selective light transmission and water-repellent surface properties	
<i>Kovács Kinga, Zámbo Dániel, Hórvölgyi Zoltán, Albert Emőke</i>	
Immunszorbens vizsgálatok fehérjekomponenseinek fejlesztése	46
Development of protein components for immunosorbent assays	
<i>Kovács Noémi, Jankovics Hajnalka</i>	
A mechanokémiaailag aktivált kaolinit mikroszerkezeti és morfológiai tulajdonságai a puccolános reaktivitás tükrében	48
Microstructural and morphological properties of mechanochemically activated kaolinite in the light of pozzolanic reactivity	
<i>Kristófné Makó Éva, Őze Csilla, Kovács Margit, Pekker Péter</i>	
Laboratóriumi méretű PGSS-berendezés fejlesztése polietilén-glikol – ibuprofen modellrendszer segítségével	50
Development of a laboratory-scale PGSS apparatus using a polyethylene glycol–ibuprofen model system	
<i>Luterán Gergő, Arany Dóra, Kőrösi Márton</i>	
Gépi látó platform fejlesztése tabletták minőségének vizsgálatára	52
Development of a machine vision platform for the quality assessment of tablets	
<i>Madarász Lajos, Mészáros Lilla Alexandra, Nagy Zsombor Kristóf</i>	
A PHSRN-szinergiapeptid sejttapadásra gyakorolt hatásának vizsgálata valós idejű jelölésmentes technológiákkal	53
Investigation of the effect of the PHSRN synergy peptide on cell adhesion using real-time label-free technologies	
<i>Beatrix Magyaródi, Kinga Dóra Kovács, Anna Balogh, Ildikó Szabó, Ferenc Vonderviszt, Inna Székács, Szilvia Bősze, Róbert Horváth</i>	
Azonos viszkozitású Group I és Group II bázisolaj-keverékek tribológiai vizsgálata nanorészecskék és nanorészecske-kombinációk felhasználásával	55
Tribological investigation of equal-viscosity Group I and Group II base oil blends using nanoparticles and combinations of nanoparticles	
<i>Marsicki Márk</i>	
Kítőzánnal borított mezopórusos szilikabevonatok színezékfelvételének és -leadásának tanulmányozása	56
Studying the dye uptake and release process of a mesoporous silica-chitosan bilayer nanocoating system	
<i>Péter Márton, Simon Titkó, András Marton, Bálint Fodor, Péter Basa, Gergely Stankovits, Benjámin Gyarmati, János Rohonczy, Tamás Szabó, Dániel Zámbo, Zoltán Hórvölgyi</i>	

Hatóanyag-leadás szabályozása poliaszpartamid alapú szálás mátrixokkal	58
Controlling drug release using polyaspartamide based fibrous matrices	
<i>Mihalovics Bence, Gyarmati Benjámin, Szilágyi András</i>	
Királis ciklopropán-származékok Krapcho-dekarboxilezésének vizsgálata	60
Investigation of Krapcho decarboxilation of chiral cyclopropane derivatives	
<i>Miklós Bence, Varga Bertalan, Rapi Zsolt</i>	
A Human-Centric Approach to Degradation-Aware Scheduling in Reconfigurable Manufacturing System	63
<i>Nadaffard Ahmadreza, Ruppert Tamás</i>	
Oxigénátadási viszonyok tanulmányozása pilotléptékű probiotikum fermentációkban	64
Investigation of oxygentransfer in pilot scale probiotics fermetnation	
<i>Németh Áron</i>	
Hazai agyag- és betonhulladék-frakciók mechanokémiai aktiválásának hatása a puccolános reaktivitásra	65
Effect of mechanochemical activation of domestic clay and concrete waste fractions on pozzolanic reactivity	
<i>Őze Csilla, Kristófné Makó Éva</i>	
Digitális ikrekben alkalmazott flowsheet modellek karbantartása valós idejű adatvezérelt tanulással a vegyiparban	66
Maintenance of flowsheet models in digital twins through real-time data-driven learning in the chemical industry	
<i>Palotai Balázs, Kis Gábor, Chován Tibor, Takács-Bárkányi Ágnes</i>	
Döntéstámogató módszerek értelmezhetőségének vizsgálata vegyipari rendszerekben	67
Analysis of model interpretability approaches in decision-support frameworks in chemical industry	
<i>Somogyi Áron, Bárkányi Ágnes, Chován Tibor, Kis Gábor</i>	
Kontrollált kioldódású műtrágya fejlesztése geopolimer bázison	68
Development of a geopolymer-based controlled-release fertilizer	
<i>Balczár Ida, Takács Natasa, Kovács András, Rauch Renáta, Varga Béla</i>	
Gépi látáson alapuló UV-térképezés összevetése NIR- és Raman-alapú kémiai térképezési módszerekkel	70
Comparison of Machine Vision-Based UV Mapping with NIR and Raman Chemical Mapping Methods	
<i>Szabó Bence, Mészáros Lilla Alexandra, Farkas Attila, Pataki Hajnalka, Madarász Lajos, Galata Dorián László, Nagy Zsombor Kristóf</i>	
Aktivált felületű, 3D-nyomtatható porózus enzimhordozó rendszerek	72
Activated surface 3D printable porous enzyme support systems	
<i>Szabó Domonkos, Dótsch Anna, Szilágyi András</i>	
Ciklodextrinalapú karbamidok in situ előállítás	74
In-situ synthesis of cyclodextrin-based ureas	
<i>Szabó Emese Kinga, Varga Bertalan, Rapi Zsolt</i>	
Desztillációs oszlop megerősítéses tanulás alapú szabályozása	76
Reinforcement learning-based control of a distillation column	
<i>Szatmári Kinga, Németh Sándor, Kummer Alex</i>	

Megnövelt szívósságú nyálkahártya-analóg poli(vinil-alkohol) hidrogélek előállítása	78
Development of toughness-enhanced mucosa-mimetic poly(vinyl alcohol) hydrogels	
<i>Szayly Kata, Szilágyi András, Gyarmati Benjámín</i>	
Multidimenzionális problématerkép az adaptív ipari energiamedzsment strukturális integrációjához	80
A multidimensional problem map for the structural integration of adaptive industrial energy management	
<i>Szeles József, Pató Sándor, Ruppert Tamás</i>	
Információvezérelt folyamatfejlesztés: a Bayes-optimalizálás előnye a klasszikus kísérlettervezéssel szemben	82
Information-driven process development: Bayesian Optimization advantages over classical DOE	
<i>Gréta Tálosi, Alex Kummer, Zoltán Eller, Bálint Levente Tarcsay</i>	
Dugattyógyűrű–hengerpersely rendszer CFD-alapú modellezése és súrlódási állapotainak elemzése OpenFOAM környezetben	84
CFD-based modelling of the piston ring–cylinder liner system and analysis of frictional behaviour in OpenFOAM	
<i>Tuboly Bence</i>	
Új SPE-töltetek fejlesztése szennyvíz-monitorozáshoz kationos ciklodextrinek elektrosztatikus immobilizálásával	89
Development of novel SPE packings for wastewater monitoring via electrostatic immobilization of cationic cyclodextrins	
<i>Varga Bertalan, Ujji Dóra, Mireisz Tamás, Rapi Zsolt</i>	
S. coelicolor biomassza extracelluláris polimer tartalmának vizsgálata hasznosítás céljából	91
Characterization of the extracellular polymeric substances of S. coelicolor biomass for potential utilization	
<i>Vonyó Viktória Zoltána, Hülberné Beyer Éva Anna, Koók László</i>	
A paraméterter kondicionálása a kristályosodási kinetika megbízható, optimalizáción alapuló azonosításához populációmérleg-modellekben	93
Conditioning the parameter space for reliable optimization-based identification of crystallization kinetics in population balance models	
<i>Wiederschitz Diána, Szilágyi Botond, Kovács Edith Alice</i>	
Nanoméretű fotokatalizátorok kapszulázása kitozánbevonatokban	96
Encapsulation of photocatalytic nanoparticles in chitosan coatings	
<i>Yu Lang Richard, Demény Petra, Márton Péter, Albert Emőke, Szolnoki Beáta, Madarász János, Szabó Tamás, Hórvölgyi Zoltán</i>	
Kaolinit nanotekercsek előállításának fejlesztése	98
Development of the Synthesis of Kaolinite Nanoscrolls	
<i>Zajác Miklós, Kristófné Makó Éva</i>	

Cd_{0,5}Zn_{0,5}S fotokatalizátorok előállításí körülményeinek vizsgálata Na₂S₂O₃ termikus bontása során

Investigation of the conditions for the preparation of Cd_{0,5}Zn_{0,5}S
photocatalysts by thermal decomposition of Na₂S₂O₃

Asmae Ghoumit, Orosz Nándor, Horváth Ottó, Fodor Lajos¹

Összefoglaló

Napjainkban az alternatív energiaforrások használata és azok előállításának vizsgálata egyre inkább felértékelődik a globális éghajlatváltozást elősegítő, környezetünkre káros fosszilis anyagok használatával szemben. Egy lehetséges megoldás a szén-dioxid-kibocsátás nélkül előállított zöld hidrogén lehet. Ennek egyik lehetséges előállítási módja a heterogén fotokatalízis. Hidrogénforrásként e területen a legtöbbet kutatott áldozati reagens a kén-hidrogén, amely a földgáz tisztítása és a kőolaj-finomítás során nagy mennyiségben keletkező toxikus melléktermék. Fotokatalizátorként főként a fémszulfidok terjedtek el. Ezek közül is a CdS-ZnS kompozitok kimagaslóan a leghatékonyabbak, amelyek előállításának a legegyszerűbb és leggyakrabban alkalmazott módja a Na₂S-dal végzett csapadékképzés. Tapasztalataink szerint ennek a módszernek egy nagy hátránya, hogy az előállított katalizátor hatékonysága jelentős mértékben függ a Na₂S tisztaságától, ugyanakkor a szennyező polyszulfidok eltávolítása rendkívül nehézkes.

Ebben a munkában egy alternatív előállítási módot vizsgálók, amelyben a CdS-ZnS előállítására a Na₂S₂O₃ termikus bomlása során keletkező szulfidot használom. Vizsgáltam az előállítás legfontosabb befolyásoló paramétereit, mint a hidrotermiás kezelés hőmérséklete, a tioszulfát-felesleg mértéke és annak koncentrációja. 260 °C-on hatszoros tioszulfát-felesleggel előállított katalizátorral jobb fotokatalitikus aktivitást sikerült elérni, mint azzal, amit hagyományos csapadékképzéssel kaptunk. Vizsgáltuk a katalizátor hidrogénfejlesztő hatékonyságát Ni-módosítást követően is. Mintegy 30–50%-os növekedést tapasztaltunk.

Summary

Nowadays, the utilisation of alternative energy sources and the investigation of their production are becoming increasingly important in contrast to the use of fossil fuels, which contribute to global climate change and are harmful to our environment. One possible alternative is green hydrogen, produced without carbon dioxide emissions. The heterogeneous photocatalysis is one possible method of producing it. The most researched hydrogen source in this field is hydrogen sulfide, a toxic by-product generated in large quantities during natural gas purification and petroleum refining. Metal sulfides are the most widely used photocatalysts. Among these, CdS-ZnS composites are the most effective, the simplest and most commonly used method for their production is precipitation with Na₂S. In our experience, a major disadvantage of this procedure is that the efficiency of the catalyst produced depends significantly on the purity of Na₂S, while the removal of polysulfide impurities is extremely difficult.

In this work, an alternative method of preparation was investigated, in which the sulfide generated during the thermal decomposition of Na₂S₂O₃ was used for the preparation of CdS-ZnS. The most important parameters influencing the preparation, such as the temperature of the hydrothermal treatment, the ratio of molar excess and the concentration of Na₂S₂O₃ were investigated. The catalyst produced at 260 °C with a 6-fold excess of thiosulfate showed better photocatalytic activity, which was better than that obtained by conventional precipitation. We also examined the hydrogen evolution efficiency of the catalyst after Ni modification. We observed an increase of approximately 30–50%

1 Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Label-free Optical Biosensor-Based Detection of Motile Bacteria

Motilis baktériumok detektálása jelölésmentes optikai bioszenzorral

Enikő Farkas², Dóra Anett Balogh³, Zoltán Dicső⁴, Sándor Kurunczi⁵, Balint Beres⁶, Balazs Stercz⁷, Judit Domokos⁸, Dóra Szabó⁹, Beatrix Péter¹⁰, Inna Székács¹¹, Robert Horváth¹²

Summary

Rapid detection of bacterial pathogens is essential in diagnostics and environmental monitoring [1]. Label-free optical biosensors offer a cost-effective alternative to conventional techniques, but their sensitivity is often limited when detecting motile bacteria that weakly adhere to surfaces [2, 6].

In this work, we present a high-throughput method based on label-free, surface-sensitive biosensor technology, which monitors interactions between bacteria and the sensor surface [3]. The protocol incorporates centrifugation to enhance bacterial sedimentation and a computational method to reduce background signals and environmental noise [4, 5]. This approach enables rapid, high-throughput analysis of bacteria in a microplate format, complemented by microscopy-based evaluation to validate signal assessment.

Keywords: label-free biosensor, motile bacteria, centrifugation, nanoparticle enhancement, high-throughput screening

Összefoglaló

A baktérium patogének gyors kimutatása alapvető a diagnosztikában és a környezeti monitorozásban [1]. A jelölésmentes optikai bioszenzorok költséghatékony alternatívát kínálnak a hagyományos módszerekkel szemben, azonban érzékenységük gyakran korlátozott a mozgékony baktériumok esetében, amelyek gyengén tapadnak a felületekre [2, 6].

Jelen munkában egy nagy áteresztőképességű módszert mutatunk be, amely jelölésmentes, felületérzékeny bioszenzor-technológiára építve monitorozza a baktériumok és a felület közötti kölcsönhatások változását [3]. A módszer centrifugálással segíti a baktériumok felületre történő üledítését, és számítási módszerekkel csökkenti a háttérzajt és a környezeti hatásokat [4, 5]. Az eljárás lehetővé teszi a gyors, nagy áteresztőképességű baktériumanalízist mikrolemez-formátumban, mikroszkópos vizsgálattal is kombinálva az adatok értékeléséhez.

-
- 2 HUN-REN Centre for Energy Research, Nanobiosensorics Laboratory, Institute of Technical Physics and Materials Science, 1121 Budapest
 - 3 HUN-REN EK, Nanobiosensorics Lab., ITPMS, Budapest; Doctoral School of Chemical Engineering and Material Sciences, Faculty of Engineering, University of Pannonia, Veszprém
 - 4 HUN-REN EK, Nanobiosensorics Lab., ITPMS, Budapest; Department of Physics, Eötvös Loránd University, Budapest
 - 5 HUN-REN EK, Nanobiosensorics Lab., ITPMS, Budapest
 - 6 HUN-REN EK, Nanobiosensorics Lab., ITPMS, Budapest; Department of Automation and Applied Informatics, Faculty of Electrical Engineering and Informatics, Budapest University of Technology and Economics, Budapest
 - 7 Institute of Medical Microbiology, Semmelweis University, Budapest; HUN-REN-SU Human Microbiota Research Group, Budapest
 - 8 Institute of Medical Microbiology, Semmelweis University, Budapest; HUN-REN-SU Human Microbiota Research Group, Budapest
 - 9 Institute of Medical Microbiology, Semmelweis University, Budapest; HUN-REN-SU Human Microbiota Research Group, Budapest; Department of Neurosurgery and Neurointervention, Semmelweis University, Budapest
 - 10 HUN-REN EK, Nanobiosensorics Lab., ITPMS, Budapest
 - 11 HUN-REN EK, Nanobiosensorics Lab., ITPMS, Budapest
 - 12 HUN-REN EK, Nanobiosensorics Lab., ITPMS, Budapest; Institute of Biophysics, HUN-REN Biological Research Centre, Szeged

References/Irodalomjegyzék

- [1] A. Ahmed, J. V. Rushworth, N.A. Hirst, P.A. Millner, *Biosensors for whole-cell bacterial detection*, Clin. Microbiol. Rev. 27 (2014) 631–646. <https://doi.org/10.1128/CMR.00120-13>.
- [2] E. Farkas, R. Tarr, A. Saftics, D. Kinga, B. Stercz, J. Domokos, B. Peter, S. Kurunczi, I. Szekacs, A. Bony, B. Anita, P. Fürjes, S. Ruszkai-szaniszl, E. Ostorh, *Development and In-Depth Characterization of Bacteria Repellent and Bacteria Adhesive Antibody-Coated Surfaces Using Optical Waveguide Biosensing*, Biosensors. 12 (2022) 1–20. <https://doi.org/10.3390/bios12020056>.
- [3] R. Horvath, K. Cottier, H.C. Pedersen, J.J. Ramsden, *Multidepth screening of living cells using optical waveguides*, Biosens. Bioelectron. 24 (2008) 805–810. <https://doi.org/10.1016/j.bios.2008.06.059>.
- [4] M. Tang, G. Wang, S.K. Kong, H.P. Ho, *A review of biomedical centrifugal microfluidic platforms*, Micromachines. 7 (2016). <https://doi.org/10.3390/mi7020026>.
- [5] J.J. Ezenarro, J. Mas, X. Muñoz-Berbel, N. Uria, *Advances in bacterial concentration methods and their integration in portable detection platforms: A review*, Anal. Chim. Acta. 1209 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.339079>.
- [6] B. Péter, E. Farkas, S. Kurunczi, Z. Szittner, S. Bószé, I. Szekacs, R. Horvath, J.J. Ramsden, *Review of Label-Free Monitoring of Bacteria: From Challenging Practical Applications to Basic Research Perspectives*, Biosensors. 12 (2022). <https://doi.org/10.3390/bios12040188>.

Acknowledgments

This work was supported by the Hungarian Academy of Sciences (Lendület (Momentum) Program); the National Research, Development and Innovation Office (NKFIH) (ERC_HU, K146071, NKFIH STARTING 150012, PD 131543 for B.P., KKP_19 and TKP2021-EGA-04 –INBIOM TKP Programs); and the Ministry for National Economy (VEKOP 2.2.1-16 (Development of Rapid Urine Bacteria Analyzer) Program). This work was also supported by 77 Elektronika Ltd. by their supplying of antibodies and reagents. We acknowledge the assistance of Fatime Gajnut and Róbert Tarr in the RWG measurements. This project was supported by the János Bolyai Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences (for B.P.).

Populációs mérlegegyenletek megoldómódszereinek összehasonlító vizsgálata: teljesítmény, pontosság és robusztusság

Comparative Study of Solution Methods for Population Balance Equations:
Performance, Accuracy, and Robustness

Balogh László, Ulbert Zsolt, Egedy Attila, Bárkányi Ágnes¹³

Összefoglaló

A populációalapú modellezési megközelítés széles körben használható szemcsékből, kristályokból, sejtekből álló vagy szinte bármely diszperz rendszer leírására. A modellek a leírt rendszertől függően, de általában nemlineáris hiperbolikus parciális integro-differenciálegyenletek. Az analitikus megoldás nem elképzelhetetlen, ugyanakkor csak korlátozott körülmények között (pl. speciális kezdeti eloszlás, specifikus törési vagy aggregációs kernel esetén) lehetséges. A numerikus közelítések esetén viszont választani kell az irodalomban fellelhető módszerek közül. A kutatásunk célja egy olyan egységes keretrendszer kialakítása, mellyel a megoldómódszerek egységesen értékelhetők, ezáltal támogatva a választást. Erre a célra a javasolt jellemzők a pontosság (analitikus megoldástól való négyzetes, maximális és momentumhiba-eltérés), a teljesítmény (teljes időskálás megoldás és az egy lépés átlagos ideje), valamint a robusztusság (rácsperturbációs vizsgálat, extrém paraméterérték-vizsgálat, időlépés-vizsgálat). Ezeket összehasonlítva képet kaphatunk arról, hogy milyen megoldómódszer alkalmas adott összetettségű modell esetén egy optimalizációs vagy identifikációs feladatra, vagy éppen egy valós idejű feladat elvégzésére.

Summary

The population-based modeling approach can be widely used to describe particles, crystals, cells, and other dispersed systems. The models (depending on the system) are non-linear hyperbolic partial integro-differential equations. The analytic solution exists only in special circumstances, for example, with a special initial distribution and/or a special breaking of the aggregation kernels. In the case of numerical solution, we need to choose one from the numerous options in literature. The aim of our study is to develop a framework for comparing solution methods, thereby supporting the method choice. The recommended properties to characterize the method are accuracy (squared, maximum, and moment errors relative to the analytical solution), performance (solution time and average time of one time step), and robustness (grid perturbations, extreme parameter values, and maximum timestep). By comparing these approaches, it is possible to assess which solution method is most suitable for optimization or identification tasks, as well as for real-time applications, for a model of a given level of complexity.

13 Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Label-free biophysical characterisation of plant peptide–protein interactions and their effects on cell adhesion

Növényi peptidek fehérje-kölcsönhatásainak és sejtadhézióra gyakorolt hatásának vizsgálata jelölésmentes biofizikai módszerekkel

Krisztina Borbely¹⁴, Dora Anett Balogh¹⁵, Sandor Kurunczi¹⁶, Eniko Farkas¹⁷, Beatrix Peter¹⁸, Inna Szekacs¹⁹, Gabriella Endre²⁰, Eva Kondorosi²¹ and Robert Horvath²²

Summary

Understanding the molecular interactions and cellular effects of bioactive peptides is essential for elucidating their biological functions. In our study, we examined the interactions of plant-derived nodule-specific cysteine-rich (NCR) peptides produced in *Rhizobium*-legume symbiosis using label-free biophysical methods. While many cationic NCR peptides play a central role in regulating the differentiation of symbiotic bacteria and also possess potent antimicrobial activity, their interactions with proteins and their effects on mammalian cells remain largely unexplored.

The kinetic characterisation of protein-peptide interactions was performed using grating-coupled interferometry (GCI), which enables real-time monitoring of binding processes and the determination of kinetic parameters describing the interactions [1], [2]. During the measurements, we employed both traditional and low-sample-requirement RAPID configurations. Based on the results, the tested NCR peptides exhibited measurable affinity for the selected protein targets.

The effects of peptides on cells were examined using a resonant waveguide grating (RWG)-based optical biosensor, which can monitor changes in cell adhesion and morphology in real time by detecting changes in the near-surface refractive index [3]. During the experiments, we analysed the effects of NCR peptides on different mammalian cell lines. The results showed that the adhesion behaviour of living cells changed in a peptide-specific manner: some peptides reduced cell adhesion, others increased it, and in certain cases, no detectable adhesion-modulating effect was observed.

Összefoglaló

A bioaktív peptidek molekuláris kölcsönhatásainak és sejtes hatásainak vizsgálata alapvető jelentőségű biológiai funkciójuk megértésében. Kutatásunk során a *Rhizobium*-hüvelyesek szimbiózisában termelődő, növényi eredetű, gümőspecifikus, ciszteinben gazdag (Nodule-Specific Cysteine-Rich; NCR) peptidek különféle fehérjékkel való kölcsönhatásait, valamint a sejtadhézióra gyakorolt hatásukat vizsgáltuk jelölésmentes biofizikai módszerek alkalmazásával. Bár számos kationos NCR peptidről ismert, hogy központi szerepet játszik a szimbióta baktériumok differenciációjának szabályozásában, és emellett erős antimikrobiális aktivitással is rendelkezik, fehérje-interakcióik és emlős sejtekre gyakorolt hatásaik nagyrészt feltáratlanok.

-
- 14 Nanobiosensorics Laboratory, Institute of Technical Physics and Materials Science, HUN-REN Centre for Energy Research, Budapest; Chemical Engineering and Material Sciences Doctoral School, Faculty of Engineering, University of Pannonia, Veszprém
 - 15 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest; Chemical Engineering and Material Sciences Doctoral School, Faculty of Engineering, University of Pannonia, Veszprém
 - 16 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest
 - 17 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest
 - 18 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest
 - 19 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest
 - 20 Institute of Plant Biology, HUN-REN Biological Research Centre, Szeged
 - 21 Institute of Plant Biology, HUN-REN Biological Research Centre, Szeged
 - 22 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest; Nanobiosensorics Group, Institute of Biophysics, HUN-REN BRC, Szeged

A fehérje-peptid kölcsönhatások kinetikai jellemzését rács-csatolt interferometriával (grating-coupled interferometry; GCI) végeztük, amely lehetővé teszi a kötődési folyamatok valós idejű nyomon követését és az interakciókat leíró kinetikai paraméterek meghatározását [1], [2]. A mérések során hagyományos, koncentrációsoron alapuló és alacsony mintagényű RAPID mérési konfigurációkat egyaránt alkalmaztunk. Az eredmények alapján a vizsgált NCR peptidek mérhető affinitást mutattak a választott fehérjecélpontokhoz. A peptidek sejtekre gyakorolt hatásait rezonáns hullámvezető rács (resonant waveguide grating; RWG) alapú optikai bioszenzor segítségével vizsgáltuk, amely a sejtek adhéziós és morfológiai változásait a felületközeleli törésmutató-változások detektálásával képes valós időben követni [3]. A kísérletek során különböző emlős-sejtvonalakon elemeztük az NCR peptidek hatását, és az eredmények azt mutatták, hogy az élő sejtek adhéziós viselkedése peptidspecifikus módon változott: egyes peptidek csökkentették, mások növelték a sejttapadást, míg bizonyos esetekben nem volt kimutatható adhéziót moduláló hatás.

References/Irodalomjegyzék

- [1] Patko, D., Cottier, K., Hamori, A., & Horvath, R. (2012). Single beam grating coupled interferometry: high resolution miniaturized label-free sensor for plate based parallel screening. *Optics express*, 20(21), 23162–23173. <https://doi.org/10.1364/OE.20.023162>
- [2] Péter, B., Majoros, B., Kurunczi, S., Ács, A. V., Szekacs, I., Bősze, S., Kovács, G. M., Boldizsár, I., & Horvath, R. (2023). Label-free biosensing of lignans for therapeutics using engineered model surfaces. *International journal of biological macromolecules*, 233, 123528. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.123528>
- [3] Orgovan, N., Peter, B., Bősze, S., Ramsden, J. J., Szabó, B., & Horvath, R. (2014). Dependence of cancer cell adhesion kinetics on integrin ligand surface density measured by a high-throughput label-free resonant waveguide grating biosensor. *Scientific reports*, 4, 4034. <https://doi.org/10.1038/srep04034>

Acknowledgements

This research was supported by the National Research, Development and Innovation Fund of Hungary through two funding schemes: the TKP2021 program (project no. TKP2021-EGA-04), financed by the Ministry of Innovation and Technology, the STARTING_24 program (project no. STARTING150012) and the Frontline research grant (KKP129924), provided by the National Research, Development and Innovation Office (NKFIH). This project was supported by the Janos Bolyai Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences (for B.P.).

Structure–Property Relationships for Mucoadhesive Polymer Films Interacting with Mucosa-Mimetic Hydrogels

Emanuela Cullhaj, András Szilágyi, Benjámin Gyarmati²³

Summary

Mucoadhesion, i.e., the adhesion of pharmaceutical formulations to mucosal surfaces, can be exploited in flexible polymeric dosage forms for buccal or ophthalmic drug delivery. This research focuses on the development and characterization of polymeric films for the better understanding of adhesion mechanisms at polymer-mucus interfaces. Mucoadhesive polymeric film coatings can simultaneously shield drug formulations from gastrointestinal degradation and prolong their residence time at the absorption site, hence improving bioavailability.

In this work, I prepared films by solvent evaporation from polymers with strongly dissimilar physicochemical properties; hydroxypropyl methylcellulose (HPMC), chitosan, and slightly cross-linked poly (acrylic acid) with the trademark name Carbopol®. These polymer films were prepared using silicon frames with 0.5 or 1 mm thickness onto glass substrates. In addition, glycerol was added as a plasticizer in films to evaluate its effect on film flexibility, mechanical behavior and adhesive properties. I utilized poly (vinyl alcohol) (PVA) hydrogels as biomimetic mucosal substrates because they provide a consistent platform that closely mimics the viscoelastic and adhesive properties of natural mucosa [1]. PVA hydrogels were prepared using freeze-thaw method with two different stiffness to determine its effect on the measured adhesion.

Chitosan films were highly rigid and brittle without plasticizer and to improve the deformability, 2% glycerol was added. Repeated adhesion experiments indicated that Carbopol® and chitosan showed higher adhesive strength than HPMC. In comparison with the reference tablets from the same polymers, this phenomenon is consistent.

The study suggests a relationship between viscoelastic and adhesive properties, but further research is needed to determine quantitative correlations adding formulation design.

References

- [1] Stankovits, G., Szayly, K., Galata, D. L., Móczó, J., Szilágyi, A., & Gyarmati, B. (2025). The adhesion mechanism of mucoadhesive tablets with dissimilar chain flexibility on viscoelastic hydrogels. *Materials Today Bio*, 30, 101416. <https://doi.org/10.1016/j.mtbio.2024.101416>

Acknowledgements

Projects no. DKÖP-26-1-BME-68, TKP-9-8/PALY-2021, NKKP ADVANCED 152811 have been implemented with the support provided by the Ministry of Culture and Innovation of Hungary from the National Research, Development and Innovation Fund.

23 Soft Matters Group, Department of Physical Chemistry and Materials Science, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Műegyetem rkp. 3., 1111 Budapest

Kis méretű kötőanyag-nyomtatáshoz fejlesztett adagolórendszerek vizsgálata numerikus modellezéssel

Investigation of feeding systems developed
for small-scale binder 3D printing using numerical modeling

Cziráki Bálint, Kámán András, Egedy Attila²⁴

Összefoglaló

A kötőanyagok 3D-nyomtatása, beleértve a hagyományos cementalapú rendszereket és az alkáli aktivált cementeket, egyre meghatározóbb szerepet tölt be a fenntartható építőipar fejlődésében. A technológia új lehetőségeket kínál az anyagok formálhatóságában és az építési folyamatok automatizálásában. Ezzel szemben a kis léptékű kötőanyag-nyomtatás számos technológiai kihívást vet fel, különösen az anyag folyamatos és pontos adagolása, valamint a stabil extrudálhatóság biztosítása terén.

A kutatás során speciálisan, kis méretű kötőanyag-nyomtatáshoz fejlesztett adagolórendszer tervezése és vizsgálata történt. Egy többlépcsős iteráció során különféle geometriájú adagolók kerültek kifejlesztésre, majd ezek működése numerikus modellezés és gyakorlati nyomtatási tapasztalatok alapján került értékelésre. A rendszer működésének jobb megértése érdekében diszkrét elemes (DEM) és áramlástan (CFD) szimulációk is alkalmazásra kerültek.

A különböző konstrukciók működésének összehasonlítása lehetővé tette az anyagtovábbítási folyamatok részletesebb vizsgálatát, valamint az adagolórendszer működését befolyásoló tényezők azonosítását. A szimulációs eredmények és a kísérleti tapasztalatok együttes értékelése alapján új fejlesztési irányvonalak kerültek meghatározásra. A kutatás célja egy olyan optimalizált adagolórendszer kialakítása, amely stabil anyagtovábbítást és megfelelő nyomtathatóságot biztosít kis méretű kötőanyag-nyomtatási alkalmazások esetén.

Summary

The 3D printing of binders, including conventional cement-based systems and alkali-activated cements, is playing an increasingly important role in the development of sustainable construction. The technology offers new possibilities for material formability and automation of construction processes. In contrast, laboratory-scale binder printing presents numerous technological challenges, particularly regarding continuous and precise material feeding and stable extrusion.

In this research, a feeding system specifically developed for laboratory-scale binder 3D printing was designed and investigated. Through a multi-step iterative process, various feeder geometries were developed, and their performance was evaluated using numerical modeling and practical printing observations. Discrete Element Method (DEM) and Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations were also applied to support a better understanding of the system's behavior.

Comparison of the different designs allowed a more detailed analysis of material transport processes and the identification of factors influencing the feeder's performance. Based on the combined evaluation of simulation results and experimental observations, new development directions were established. The aim of the research is to develop an optimized feeding system that ensures stable material transport and reliable printability for laboratory-scale binder 3D printing applications.

24 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Li-ion akkumulátorok értéknövelt újrahasznosítása

Value added recycling of Li-ion batteries

Császár Kiara Atina, Kis-Iván Alex, Miskolczi Norbert, Zsinka Viktória²⁵

Összefoglaló

A különböző eszközökben lévő Li-ion akkumulátorok egyre fontosabb szerepet töltenek be a mindennapi életünkben. Az életciklusuk végére ért Li-ion akkumulátorok újrahasznosítása nemcsak környezetvédelmi, hanem gazdasági szempontból is kiemelten fontos, mert a bennük felhasznált anyagok jelentős gazdasági értéket képviselnek. A Li-ion akkumulátorok elektródjaiban lévő elemek újrahasznosítására léteznek ugyan megoldások, ugyanakkor az akkumulátorok elektródjain kívüli részének további felhasználását egyelőre csak kevesen vizsgálják. A kutatómunka célja annak vizsgálata, hogy a használt Li-ion akkumulátorok különböző egységeinek újrahasznosítása hogyan oldható meg.

Köszönetnyilvánítás

A 2024-1.2.5-TÉT-2024-00025 számú projektet a Kulturális és Innovációs Minisztérium a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozta a 2024-1.2.5-TÉT program keretében.

Acknowledgements

The project No. 2024-1.2.5-TÉT-2024-00025 was financed by the Ministry of Cultural and Innovation from the National Research Development and Innovation Fund, within the 2024-1.2.5-TET program.

25 Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Bio-, Környezet- és Vegyészmérnöki Kutató-Fejlesztő Központ, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Huminsav–réz(II) komplexképződés vizsgálata

Investigation of humic acid-copper(II) complex formation

Csicsor-Kulcsár Petra, Szabóné dr. Bárdos Erzsébet, Dr. Horváth Ottó²⁶

Összefoglaló

A természetes vizekben a nyomelemek és nehézfémek speciációját döntően az oldott szerves anyag (DOM) szabályozza, mivel a DOM komplexképzéssel és kolloidstabilizálással képes átrendezni a „szabad” és a kötött fémfrakciók arányát [1]. A huminanyagok „multiligand” jellegű, szerkezetileg heterogén rendszert alkotnak, ezért a fémkötés nem egyetlen, jól definiált helyen, hanem több, eltérő affinitású kötőhelyen zajlik [2]. A komplexképződés gyakran finom funkciócsoport-átalakulásokkal és konformációs-/mátrixjellegű szerkezeti rendeződéssel társul. A folyamat kvantitatív és szerkezeti értelmezéséhez több spektroszkópiai megközelítés integrált kiértékelése indokolt.

Huminsav–réz(II) komplexképződést vizsgáltunk vizes közegben UV-Vis, szinkron fluoreszcencia és FTIR-mérésekkel, kétdimenziós korrelációs (2D-COS) kiértékeléssel. Az UV-Vis és fluoreszcencia eredmények koncentrációfüggő spektrumváltozásokat és kioltást mutattak; az FTIR-spektrum alapján a kötődéshez kapcsolódó szerkezeti átrendeződések főként a karboxilát-/fenolos tartományokhoz és a polisaccharid jellegű régióhoz köthetők. A heterospektrális korreláció azt jelzi, hogy a fluoreszcenciaváltozás több funkciócsoport bevonódásával, mátrixhatásokkal együtt zajlik.

Kulcsszavak: huminsav, Cu²⁺, komplexképződés, szinkron fluoreszcencia, FTIR, 2D-COS

Summary

In natural waters, the speciation of trace elements and heavy metals is largely regulated by dissolved organic matter (DOM), as DOM is capable of rearranging the ratio of „free” and bound metal fractions through complexation and colloid stabilization [1]. Humic substances form a structurally heterogeneous system with a „multiligand” character, therefore metal binding does not occur at a single, well-defined site but at several binding sites with different affinities [2]. Since complex formation is often associated with subtle functional group transformations and conformational/matrix-type structural rearrangements, an integrated evaluation of multiple spectroscopic approaches is warranted for a quantitative and structural interpretation of the process.

Humic acid–copper(II) complex formation in aqueous media was investigated by UV-Vis, synchronous fluorescence, and FTIR measurements, with two-dimensional correlation (2D-COS) evaluation. The UV-Vis and fluorescence results showed concentration-dependent spectral changes and quenching; the FTIR spectrum showed that the structural rearrangements associated with the binding were mainly related to the carboxylate/phenolic domains and the polysaccharide-like region. The heterospectral correlation indicates that the fluorescence change occurs with the involvement of multiple functional groups and matrix effects.

Irodalomjegyzék/References

- [1] Aiken, G.R., Hsu-Kim, H., Ryan, J.N., *Environmental Science & Technology*, 45 (8), 3196-3201 (2011)
- [2] Chen, W., Habibul, N., Liu, X.-Y., *Environmental Science & Technology*, 49 (4), 2052-2058 (2015)

26 Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Környezeti és Szervetlen Fotokémiai Kutatócsoport, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

A tejsavó diaszűrésének intenzifikálása modulba integrált 3D-nyomtatott turbulencianövelő elemekkel

Process Intensification of Sweet Whey Diafiltration
by Module-Integrated 3D Printed Turbulence Promoters

*Dobozi Réka²⁷, Urr Tímea Lilla²⁸, Jákói Zoltán Péter²⁹,
Beszédes Sándor³⁰, Szabó P. Balázs³¹, Kertész Szabolcs³²*

Összefoglaló

A tejsavó membrántechnológiával történő frakcionálása hatékony lehetőséget kínál az értékes savófehérjék dúsítására, valamint a kis molekulatömegű komponensek, elsősorban a laktóz eltávolítására. Jelen munkánkban három különböző vágási értékű poliéterszulfon (PES) membrán (10, 30 és 50 kDa) ultraszűrési (UF) és diaszűrési (DF) viselkedését hasonlítottuk össze, különös tekintettel az eltömődési hajlamra, az ellenállási viszonyokra és a célkomponensek elválasztásának hatékonyságára. Az összehasonlító vizsgálatok alapján a 30 kDa-os membrán bizonyult a legkedvezőbbnek, ezért a további kísérleteket ezzel a membránnal végeztük el. A kiválasztott membránnal az ultraszűrési lépést követően hagyományos diaszűrési kísérleteket, valamint modulba integrált, 3D-nyomtatott turbulencianövelő elemekkel intenzifikált diaszűrést is végeztünk laboratóriumi, szakaszos üzemben. A vizsgálatok során elemeztük a szűrési teljesítményt, az összes- és részellenállások alakulását, továbbá nyomon követtük a visszatartott és áthaladó frakciók fehérje- és laktóztartalmának változását. Emellett dielektromos mérésekkel értékeltük a szűrési folyamat során bekövetkező összetételbeli változásokat is. Eredményeink alapján a többlépcsős diaszűrés hatékonyan javította a fehérjefrakció tisztítását, míg a 3D-nyomtatott turbulencianövelő elemek alkalmazása kedvezőbb hidrodinamikai viszonyokat, mérsékeltelt eltömődési hajlamot és előnyösebb ellenálláslaszlozást eredményezett. A dielektromos paraméterek jól követték a komponensösszetétel változásait, ami arra utal, hogy a dielektromos mérés alkalmas lehet a membránszűrési folyamatok gyors és nem destruktív monitorozására.

Köszönetnyilvánítás

A Kulturális és Innovációs Minisztérium Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült (EKÖP-255-SZTE). Továbbá a kutatás a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal 142414 FK és 2022-1.2.6-TÉT-IPARI-TR-2022-00011 azonosító számú projektjeinek finanszírozásából valósul meg.

Summary

Membrane-based fractionation of sweet whey offers an efficient approach for the enrichment of valuable whey proteins and the removal of low-molecular-weight components, primarily lactose. In this work, the ultrafiltration (UF) and diafiltration (DF) performance of three polyethersulfone (PES) membranes with different molecular weight cut-offs (10, 30, and 50 kDa) was compared, with particular emphasis on fouling tendency, resistance behavior, and separation efficiency. Based on the comparative results, the 30 kDa membrane proved to be the most favorable and was therefore selected for further experiments. Using the selected membrane, ultrafiltration followed by conventional diafiltration and diafiltration intensified

27 Szegedi Tudományegyetem, Mérnöki Kar, Élelmiszermérnöki Intézet, 6725 Szeged, Moszkvai krt. 5–7.
e-mail cím: dobozireka@mk.u-szeged.hu

28 SZTE MK, Élelmiszermérnöki Intézet, Szeged

29 Szegedi Tudományegyetem, Mérnöki Kar, Biológiai Rendszerek Műszaki Intézete, 6725 Szeged, Moszkvai krt. 9.

30 SZTE MK, Biológiai Rendszerek Műszaki Intézete, Szeged

31 SZTE MK, Élelmiszermérnöki Intézet, Szeged

32 SZTE MK, Biológiai Rendszerek Műszaki Intézete, Szeged

by module-integrated 3D printed turbulence promoters were carried out under laboratory-scale batch conditions. The study focused on filtration performance, the development of total and partial resistance components, and changes in protein and lactose concentrations in the retained and permeating fractions. In addition, dielectric measurements were used to evaluate compositional changes occurring during the filtration process. The results showed that multi-step diafiltration effectively improved the purification of the retained protein fraction, while the incorporation of 3D printed turbulence promoting elements resulted in more favorable hydrodynamic conditions, reduced fouling tendency, and a more advantageous resistance distribution. The dielectric parameters closely reflected the changes in sample composition, indicating that dielectric measurement may serve as a rapid and non-destructive tool for monitoring membrane filtration processes.

Acknowledgements

The Authors are grateful for the support provided by the Ministry of Culture and Innovation's University Research Scholarship Program, financed by the National Research, Development and Innovation Fund (EKÖP-255-SZTE). Furthermore, this study was supported by the 142414 FK and 2022-1.2.6-TÉT-IPARI TR-2022-00011 grants from the National Research, Development and Innovation Office (NKFI), Hungary.

Elektrosztatikus szálképzéssel előállított amorf szilárd diszperziók kritikus minőségi paramétereinek vizsgálata PAT-alapú módszerekkel

Investigation of Critical Quality Attributes of electrospun amorphous solid dispersion using PAT-based methods

Fazekas Bettina, Galata Dorián László, Nagy Zsombor Kristóf, Hirsch Edit³³

Összefoglaló

Napjainkban a gyógyhatású készítmények iránti fokozott kereslet nem csupán a megfelelő minőségű és hatású gyógyszerek előállítását, hanem azok megfelelő módszerrel történő ellenőrzését is megköveteli. Mivel a biohatóanyagok bonyolult, komplex szerkezettel rendelkeznek, így formulációjuk, illetve tárolásuk során a környezeti körülmények változására szerkezetük módosulhat, ami befolyásolja felszívódásukat, ezáltal pedig csökkentheti hatékonyságukat. Az ilyen készítmények óriási kockázatot jelentenek mind a humán-, mind az állatgyógyászat számára, hiszen a hatóanyag nem várt szerkezeti átalakulása (például a kristályosodás vagy a degradáció) nemcsak a készítmény hatástalanságához vezethet, hanem szélsőséges esetben káros mellékhatásokat vagy toxikus bomlástermékek képződését is eredményezheti. Egy nem megfelelően monitorozott formuláció alkalmazása jelentős kockázatot jelent mind a gyártó, mind a felhasználó számára. Ezért elengedhetetlen olyan non-destruktív analitikai módszerek alkalmazása, amelyekkel a gyártástól a felhasználásig monitorozhatók a készítmény kritikus minőségi paramétere. Így kutatásom során olyan érzékeny biohatóanyagok formulálását valósítottam meg, mint például az állatorvostudományban használt BHV-1- és TGEV-vírusok, illetve a humán gyógyászatban alkalmazott doxiciklin és a GFP-modellfehérje. Továbbá folyamatfelügyelő és -analizáló technológiai módszerek (PAT) segítségével olyan minőségbiztosítási rendszerek fejlesztése volt a célom, amelyekkel megbízhatóan, költséghatékonyan és gyorsan monitorozhatók a minták kritikus minőségi paramétere (koncentráció, morfológia, szál- és részecskeátmérő) nemcsak a gyártás, hanem a tárolás során is.

Köszönetnyilvánítás

A Doktoranduszi Kiválósági Ösztöndíj Program (DKÖP-25-1-BME-13) 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.

Summary

Nowadays, the increasing demand for therapeutic products requires not only high-quality production but also effective monitoring using appropriate analytical methods. Since bioactive ingredients have complex structures, environmental changes during formulation or storage can modify their structure, which affects their absorption and can reduce their efficacy. Such preparations pose a significant risk to both human and veterinary medicine, as unexpected structural changes (crystallization or degradation) can lead to ineffective treatment or, in extreme cases, harmful side effects and the formation of toxic by-products. Using a formulation that is not properly monitored represents a serious risk for both the manufacturer and the user. Therefore, it is essential to utilize non-destructive analytical methods on the production line, that can monitor critical quality parameters from production to final use. In my research, I focused on the formulation of sensitive bioactive agents, like the BHV-1 and TGEV viruses used in veterinary science, as well as doxycycline and the GFP model protein used in human medicine. Furthermore, my goal was to develop quality assurance systems using Process Analytical Technology (PAT) to reliably, cost-effectively, and rapidly monitor critical quality parameters (concentration, morphology, and fiber or particle diameter) not only during manufacturing but also throughout storage.

33 Szerves Kémiai és Technológiai Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Acknowledgement

The project supported by the Doctoral Excellence Fellowship Programme (DKÖP-25-1-BME-13) is funded by the National Research Development and Innovation Fund of the Ministry of Culture and Innovation and the Budapest University of Technology and Economics.

Granuláló folyadék hozzáadása nélküli folyamatos ikercsigás nedves granulálási technológia

Continuous twin-screw wet granulation
technology without the addition of granulation liquid

Fekete Dániel³⁴, Tóth Richárd Ferdinánd³⁵,
Nagy Zsombor Kristóf³⁶, Thorsten Cech³⁷, Lukas Ries³⁸, Szabó Edina³⁹

Összefoglaló

A nem megfelelő porfolyási és préselhetőségi tulajdonságú hatóanyagokat tablettázás előtt gyakran granulálják, leggyakrabban nedves granulálással, amely során granuláló folyadék segítségével alakulnak ki a szemcsék. A szilárd gyógyszerkészítmények fejlesztésében a granulálás kulcsfontosságú lépés, miközben egyre nagyobb hangsúlyt kapnak a folyamatos, integrált portól tablettáig tartó gyártósorok.

Kutatásom során egy új nedves granulálási technológiát vizsgáltam és fejlesztettem egy teljesen folyamatos gyártósoron működési és méretnövelési szempontból. A rendszer adagolási, granulálási, hűtési, őrlési és tablettázási egységekből állt. Az alkalmazott technológia különlegessége, hogy nem igényel külső granuláló folyadékot: a porkeverékhez adott kálium-nátrium-tartarát-tetrahidrát (angolul: „*potassium sodium tartrate tetrahydrate*”, PST) kristályvize hő hatására felszabadulva in situ granuláló folyadékot képez. Az eljárással kiváló porfolyási tulajdonságú granulátumokat és jó mechanikai tulajdonságú, azonnali kioldódású tablettákat állítottam elő. A folyamatos rendszer lehetővé tette a gyártási kapacitás egyszerű méretnövelését 0,5-ről 10 kg/h-ra változtatlan berendezés és folyamatparaméterek mellett. Az eredmények alapján a módszer ígéretes alternatíva lehet a gyógyszeripari granulálási technológiák között.

Köszönetnyilvánítás

A Doktoranduszi Kiválósági Ösztöndíj Program (DKÖP-25-1-BME-43) 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. A kutatás a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Richter Gedeon Talentum Alapítvány (székhely: 1103 Budapest, Gyömrői út 19–21.) támogatásával, a Richter Gedeon Kiválósági PhD Ösztöndíj keretében készült.

Summary

Active ingredients with poor flow and compressibility properties are often granulated prior to tableting, most commonly through wet granulation, a process in which granules are formed with the aid of a granulation liquid. Granulation is a key step in the development of solid dosage forms, while continuous, integrated production lines from powder to tablet are gaining increasing prominence.

In my research, a new wet granulation technology was investigated and developed on a fully continuous production line, focusing on operational performance and scalability. The system consisted of dosing, granulation, cooling, milling, and tableting units. A unique feature of the technology is that it does not require an external granulation liquid: the crystal water of potassium sodium tartrate tetrahydrate (PST) added to the powder mixture is released under the influence of heat, forming an in-situ granulation liquid. Using this process, granules were produced with excellent flow properties and tablets with good mechanical properties and immediate dissolution. The continuous system allowed for a simple increase in production

34 Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3.

35 BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Budapest

36 BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Budapest

37 BASF SE, Pharma Solutions, 67056 Ludwigshafen am Rhein, Carl-Bosch-Strasse 38.

38 BASF SE, Pharma Solutions, Ludwigshafen am Rhein

39 BME, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, Budapest

capacity from 0.5 to 10 kg/h while maintaining the same equipment and process parameters. Based on the results, the method may be a promising alternative among pharmaceutical granulation technologies.

Acknowledgments

The project supported by the Doctoral Excellence Fellowship Programme (DKÖP-25-1-BME-43) is founded by the National Research Development and Innovation Fund of the Ministry of Culture and Innovation and the Budapest University of Technology and Economics. The research was reached with the sponsorship of Gedeon Richter Talentum Foundation in framework of Gedeon Richter Excellence PhD Scholarship of Gedeon Richter.

Szemmozgás adatok elemzése szerelési feladat során a munkautasítások javítása érdekében

Analysis of eye movement data during assembly tasks to improve work instructions

Gugolya Mónika, Ruppert Tamás⁴⁰

Összefoglaló

A modern gyártási környezetben, amelyet a tömeges testreszabás (mass customization) és a növekvő termékváltozatosság jellemez, a hatékony munkautasítások kulcsszerepet játszanak az operátorok teljesítményének és tanulási folyamatának támogatásában. Az emberközpontú, a felhasználók tapasztalatához és kognitív terheléséhez igazodó munkautasítások hozzájárulhatnak a feladatvégzés hatékonyságának növeléséhez és a betanulási idő csökkentéséhez. A kutatás célja annak vizsgálata, hogy a szemkövetési adatok elemzése alkalmas-e a munkautasítások használatának visszamérésére.

A vizsgálat során a résztvevők egy szétszerelési feladatot hajtottak végre képi alapú munkautasítások segítségével, miközben szemmozgásukat Tobii Pro Glasses 2 szemkövető szemüveggel rögzítettük. A kísérlet két mérési alkalomból állt, amelyek között két hét telt el a tanulási hatás vizsgálata érdekében. A résztvevőket két csoportra osztottuk: az egyik csoport az első alkalommal részletes, majd a második alkalommal egyszerűsített munkautasítással végezte el a feladatot, míg a másik csoport mindkét alkalommal az egyszerűsített változatot használta. A szemkövetési adatok elemzése során azt vizsgáltuk, hogy a különböző részletességű munkautasításokat a résztvevők hogyan tekintették meg, hogyan változott a figyelem eloszlása a két instrukciótípus között, és ezek alapján milyen irányban célszerű az utasítások egyszerűsítése. A rögzített szemmozgás adatok elemzésével vizsgáltuk a figyelmi mintázatokat és azok változását az ismételten feladatvégzés során. Az eredmények hozzájárulhatnak a munkautasítások tervezésének fejlesztéséhez, valamint olyan adaptív munkautasítási rendszerek kialakításához, amelyek az operátorok tapasztalatához igazodva dinamikusan módosítják az információk részletességét.

Summary

In modern manufacturing environments characterized by mass customization and increasing product variety, effective work instructions play a critical role in supporting operator performance and learning. Adaptive work instructions that align with human cognitive processes and experience levels can improve task efficiency and reduce cognitive load. This study aims to examine whether eye-tracking data analysis is suitable for measuring the use of work instructions.

Eye-tracking data were collected using Tobii Pro Glasses 2 while participants performed a disassembly task supported by visual work instructions. The experiment involved two measurement sessions, separated by 2 weeks, to capture the effect of learning. Participants were divided into two groups: one group performed the task first with detailed (long) instructions and later with simplified (short) instructions. In contrast, the other group used the simplified instructions in both sessions. In our analysis of eye-tracking data, we examined how participants viewed work instructions of varying levels of detail, how their attention shifted between the two types of instructions, and, based on these findings, in what direction it would be advisable to simplify the instructions.

The recorded gaze data were analyzed to identify attention patterns and changes in visual behavior between the first and repeated task execution. The results provide insights into how instruction design influences operator attention during assembly-related tasks and how instruction simplification interacts with the learning process. These findings contribute to the development of adaptive work instruction systems that dynamically adjust instruction complexity based on operator experience.

40 Pannon Egyetem, Rendszermérnöki Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Cd_{0.5}Zn_{0.5}S fotokatalizátor Co(II)- és Ni(II)- módosítási körülményeinek vizsgálata

Investigation of the conditions for the modification of
Cd_{0.5}Zn_{0.5}S photocatalysts with Co(II)- and Ni(II) ions

Gulyás Ferenc, Fodor Lajos⁴¹

Összefoglaló

A globális éghajlatváltozás és az energiahiány miatt napjainkban egyre nagyobb figyelmet fordítanak környezetbarát energiaforrások felfedezésére és kihasználására. Kézzelfogható megoldást jelenthet a napenergia, mivel az emberiség energiaszükségletének többszöröse érkezik a Földre napsugárzás formájában. Egy másik ígéretesnek tűnő energiaforrás a hidrogén. Előnyei közé tartozik, hogy elégetése során nem keletkezik CO₂, illetve a többi fosszilis energiahordozóhoz képest jelentősen nagyobb energiasűrűséggel rendelkezik. Ennek a két energiaforrásnak az előnyös tulajdonságait ötvözi a heterogén fotokatalízissel történő hidrogénfejlesztés. Különös figyelmet élvez a szulfid alapú katalizátorok fejlesztése, amelyekkel kénhidrogént vagy annak oldatát lehet nagy hatékonysággal lebontani.

Munkám során Cd_{0.5}Zn_{0.5}S katalizátorokat módosítottam Ni(II) és Co(II) ionokkal impregnációs módszerrel. Az előzőekben alkalmazott együttes előállítással szemben most a két fémot külön-külön adtam hozzá a katalizátorhoz. Ezek az eddigiekben előállított fémmódosított katalizátoraim másik fémmel történő módosításai. Az így létrehozott nagy számú mintával vizsgáltam a különböző impregnációs körülményeket (hőmérséklet, komplexképző alkalmazása), valamint a különböző fémionkoncentrációkat. Célom a két fém szinergikus hatásának részletes felderítése volt, ennek érdekében bevilágítási kísérleteket végeztem. Megállapítható, hogy a módosítás sorrendjétől függően mindig csak az egyik fémre jellemző jelleggörbe érvényesül. A hidrogénfejlesztő képességre egyértelmű pozitív hatást a két fém együttes alkalmazása nem jelentett, azonban előállítási, gazdaságossági és felhasználhatósági szempontból előnyös tulajdonságai vannak a kettős kokatalizátort alkalmazó komplexeknek.

Köszönetnyilvánítás

A kutatás a Kulturális és Innovációs Minisztérium 2025-2.1.1-EKÖP-2025-00029 azonosító számú Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alaphól finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Summary

Due to global climate change and the energy shortage, increasing attention is being paid nowadays to the discovery and utilization of environmentally friendly energy sources. Solar energy may represent a tangible solution, as several times the energy demand of humanity reaches the Earth in the form of solar radiation. Another promising energy source is hydrogen. Among its advantages is that its combustion does not produce CO₂ and compared to other fossil energy carriers it has a significantly higher energy density. The advantageous properties of these two energy sources are combined in hydrogen production through heterogeneous photocatalysis. Most commonly used photocatalysts are sulphide-based catalysts, with which hydrogen sulphide or its solution can be decomposed with high efficiency.

During my work, I modified Cd_{0.5}Zn_{0.5}S catalysts with Ni(II) and Co(II) ions using the impregnation method. In contrast to the previously applied co-synthesis method, the two metals were now added separately to the catalyst. These samples are modifications of my previously prepared metal-modified catalysts with another metal.

41 Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

With the large number of samples prepared in this way, I investigated the different impregnation conditions (temperature, application of complexing agents) as well as different metal ion concentrations. My aim was to explore the synergistic effect of the two metals; therefore, illumination experiments were carried out. It can be concluded that depending on the order of modification, the characteristic curve of only one of the metals prevails. The combined application of the two metals did not show a clear positive effect on the hydrogen evolution capability; however, complexes containing dual cocatalysts have advantageous properties from the perspectives of preparation, economic efficiency, and applicability.

The research was carried out with the support of the 2025-2.1.1-EKÖP-2025-00029 University Research Scholarship Program of the Ministry of Culture and Innovation, financed from the National Research, Development and Innovation Fund.

Interconnected Digital Twin Representation for Operational Decision Support

Gergely Halász, Ruppert Tamás⁴²

Összefoglaló

A digitális iker fogalma az utóbbi években egyre hangsúlyosabbá vált a komplex rendszerek leírásában, monitorozásában és vezérlésében. A megközelítés lehetőséget teremt arra, hogy a rendszerek állapotai, jellemzői és változásai strukturált, dinamikusan frissülő reprezentáció formájában legyenek kezelhetők. Ugyanakkor számos alkalmazási környezetben nem egyetlen digitális iker, hanem több, egymással kapcsolatban álló, a rendszer komponenseit reprezentáló digitális ikerpár együttes értelmezése válik szükségessé, mivel a releváns rendszerelemek állapotai, paraméterei, képességei és korlátai kölcsönösen befolyásolják egymást. E kapcsolatok strukturális és funkcionális jellegűek lehetnek, és meghatározó szerepet játszanak a lehetséges beavatkozások következményeinek megítélésében.

A kutatás célja, hogy feltárja, miként szolgálhatnak az összekapcsolt digitális ikrek döntéstámogatási keretként. A kutatásban a rendszer egymással összefüggő rendszerelemek halmazaként jelenik meg, amelyekhez állapotjellemzők, leíró attribútumok, működési lehetőségek és korlátozó feltételek rendelhetők a már meglévő domain tudást és információs rendszereket felhasználva. Az ezek közötti kapcsolatok gráfalapú reprezentációja lehetővé teszi a kölcsönhatások, függőségek és tovagyűrűző hatások egységes kezelését. E logika az OODA-ciklus mentén is értelmezhető, ahol a megfigyelés, az orientáció, a döntés és a cselekvés az aktuális állapot, a kívánatos vagy megengedhető célállapot, a lehetséges akciókészlet és az ezekhez kapcsolódó becsült hatások összerendezésére épül.

Summary

In recent years, there has been an increasing attention on the concept of the digital twin in the domains of description, monitoring and control of complex systems. This approach offers the possibility of managing the states, characteristics and changes of systems in the form of a structured, dynamically updated representation. Furthermore, in many application environments, it is necessary to interpret not a single digital twin, but rather a set of interconnected digital twins representing the system's components. This is due to the fact that the states, parameters, capabilities, and limitations of the relevant system elements mutually influence one another. The relationships in question can be classified as either structural or functional, and they play a crucial role in evaluating the consequences of possible interventions.

The aim of the research is to explore the potential of interconnected digital twin pairs to function as a decision-support framework, thereby offering a novel approach to decision-making processes in this domain. In the research, the system is represented as a set of interconnected system elements to which state characteristics, descriptive attributes, operational possibilities, and constraints can be assigned using existing domain knowledge and information systems. The utilisation of a graph-based representation facilitates the consolidation of interactions, dependencies, and ripple effects. This logic can also be interpreted in terms of the OODA loop, where observation, orientation, decision, and action are based on the alignment of the current state, the desired or permissible target state, the set of possible actions, and the estimated effects associated with them.

42 Pannon Egyetem, Rendszermérnöki Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Virtuális vegyületek kisléptékű párhuzamos szintézise

Small-scale parallel synthesis of virtual molecules

Dávid Havasi⁴³, Éva Bodrogi⁴⁴, Róbert Kiss⁴⁵, Ádám Golcs⁴⁶

Summary

Virtual compounds have been utilized widely in the early stages of drug discovery. [1] These molecules can provide the novel starting points for computational investigations. Virtual compounds are based on commonly applied chemical transformations and accessible building blocks to ensure their feasibility for synthesis upon a successful screening. [2] Although the synthetic reactions utilized for generating virtual libraries incorporate certain reactivity affecting definitions, [3] the transfer from virtual-to-reality can be challenging, due to various factors: solubility of the building blocks, efficiency of the reaction, purification, etc. Among the many currently known reactions, amide synthesis is the most widely utilized coupling method in medicinal chemistry and in the generation of virtual libraries. [4] With the emergence of ultralarge chemical spaces, billions of novel screening compounds can be synthesized via this transformation from available building blocks. [5] However, as high throughput screening only requires small amounts from thousands of molecules, the supply of these molecules can become challenging – the chances of ordering a virtual molecule multiple times is very low. This raises the need for producing the minimum required amount for various building block combinations at a reasonable cost.

For accelerated parallel synthesis, automated solutions could be integrated. Automation has the advantage of performing repetitive steps with less uncertainty, which is crucial in small-scale synthesis, therefore the results of a synthetic protocol will more likely be repeatable. The automation of parallel reactions can be performed via liquid handling techniques if the developed conditions and protocol steps are versatile enough to provide good yields for the targeted amounts. The presented work focused on developing amide synthesis protocols that can be performed via liquid handling robots (which are commonly applied in high throughput screening as well) and can facilitate up to 96 reactions / a standard SLAS (Society for Laboratory Automation and Screening) container. SLAS design was selected as it is a key standard in laboratory automation, allowing the compatibility of the setup with commercially available laboratory robots and other systems (e.g. robotic arms, analytical instruments). The setup was tested with a library created from 8 selected amines and 12 carboxylic acids. The general synthetic protocol we developed showed that without individual optimizations 90% of the reactions provided the target product selectively. Additionally, multiple coupling agents were tested under similar conditions to provide the conceptual basics of high-throughput optimization and validation methodology for amide synthesis. To investigate the adaptability of the designed protocol, two types of liquid handling equipment were utilized with commonly applied well plates, tube racks and reservoirs. The various setups proved that the presented approach can be adapted to various laboratory setups, without affecting the efficiency of the synthesis. Our results showed that the small-scale amide synthesis protocol can be a time and cost efficient alternative to manual protocols.

References

- [1] Walters, P. W., *J. Med. Chem.* 62, 3, 1116–1124 (2019)
 - [2] Takács, G., Havasi, D., Sándor, M., Dohánics, Z., Balogh, G. T., Kiss, R., *ACS Med. Chem. Lett.* 14, 9, 1188–1197 (2023)
-
- 43 Department of Chemical and Environmental Process Engineering, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, Műegyetem rkp. 3., 1111 Budapest; Mcule.com Kft., Bartók Béla út 105–113., 1115 Budapest
- 44 Department of Chemical and Environmental Process Engineering, FCTB, BME, Budapest
- 45 Mcule.com Kft., Budapest
- 46 Department of Pharmaceutical Chemistry, Semmelweis University, Budapest; Department of Organic Chemistry and Technology, FCTB, BME, Budapest

- [3] Havasi, D., Angyal, M., *Magyar Kémiai Folyóirat*, 131, 2–4, 145–151 (2025)
- [4] Roughley, S. D., Jordan, A. M., *J. Med. Chem.*, 54, 10, 3451–3479 (2011)
- [5] Hoffmann, T., Gastreich, M., *Drug Discovery Today* 24, 5, 1148–1156 (2019)

Acknowledgement

The presented work was funded by the National Research, Development and Innovation Office, under grant ID 2023-1.1.1-PIACI_FÓKUSZ-2024-00001.

Ipari eredetű szennyvíziszap anaerob biogázfermentációjának nyomon követése biokinetikai és dielektromos paraméterekkel

Monitoring the anaerobic biogas fermentation
of industrial sludge using biokinetic and dielectric analysis

Dr. Jákói Zoltán Péter, Dobozi Réka, Sütő Zsófia Réka, Dr. Illés Erzsébet, Dr. Beszedes Sándor⁴⁷

Összefoglaló

Kutatásunkban a mikrohullámú (MH) és mágneses fém-nanorészecskék (MNR) kombinációjára épülő iszap-előkezelési eljárások anaerob biogázfermentációra (AD) gyakorolt hatását elemeztük. A vizsgálatot biokinetikai elemzéssel, valamint dielektromos paraméterek mérésére alapozott nyomon követési módszerrel egészítettük ki. A kísérletek során összesen öt, különböző módon kezelt iszapmintát vizsgáltunk: natív iszap (kezeletlen kontroll), MNR-kontroll (mikrohullámú besugárzás nélkül), MH-kontroll (fém-nanorészecskék nélkül), MH + MNR kombinációja, amelynek az egyik esetben a fém-nanorészecskék az anaerob lebontás során végig a fermentációs közegben maradtak, míg a másik esetben ezek az AD-t megelőzően eltávolításra kerültek. A kumulatív biometán-termelési folyamatot három különböző biokinetikai modell segítségével elemeztük: a Gompertz-modell, a Weibull-modell és a logisztikus modell alkalmazásával. A különböző módon kezelt iszapminták esetében a legmagasabb biometán-hozamot és a legmagasabb termékképződési sebességet abban az esetben tapasztaltuk, amikor az MH+MNR kombinált kezelésen átesett mintáknál a fém-nanorészecskék a fermentációs folyamat alatt is a rendszerben maradtak. Ebben az esetben a biometán-képződési potenciál 52%-kal, míg a termékképződési sebesség 85%-kal növekedett (390 mL CH₄/gVS, ill. 37 mL CH₄/gVS/nap) a kontrollmintához képest. A dielektromos mérések során a vizsgált 200–2400 MHz-es frekvenciaintervallumban a relatív permittivitás (ϵ') maximumértéke fokozatosan csökkent, és a magasabb frekvenciák felé tolódott a fermentációs folyamat előrehaladtával. A maximális permittivitás értékek változásában ($\Delta\epsilon'_{\max}$), valamint a biokinetikai modellek segítségével kapott maximális termékképződési paraméterek ($R_{\max}$) között szoros korrelációt állapítottunk meg ($R^2 > 0.98$), amely igazolja a dielektromos paraméterek mérésén alapuló monitoring-módszer potenciális alkalmazhatóságát a fermentációs folyamatok nyomon követésére.

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) FK 146344 témaszámú projektje finanszírozta.

Summary

Our study investigated the effect of sludge pretreatment procedures based on the combination of microwave irradiation (MW) and magnetic metal nanoparticles (MNPs) on anaerobic biogas fermentation (AD). The study was complemented by biokinetic analysis and a monitoring method based on the measurement of dielectric parameters. During the experiments, a total of five differently treated sludge samples were examined: native sludge (untreated control), MNP control (without microwave irradiation), MW control (without metal nanoparticles), and a combined MW + MNP treatment, in which, in one case, the metal nanoparticles remained in the fermentation medium throughout the anaerobic digestion process, while in the other case, they were removed prior to AD.

The cumulative biomethane production process was analyzed using three different biokinetic models: the Gompertz model, the Weibull model, and the logistic model. Among the differently treated sludge samples, the highest biomethane yield and the highest product formation rate were observed in the samples subjected to the combined MW + MNP treatment when the metal nanoparticles remained in the system during the fermentation process. In this case, the biomethane production potential increased by 52%,

⁴⁷ Szegedi Tudományegyetem, Mérnöki Kar, 6724 Szeged, Mars tér 7.

while the product formation rate increased by 85% (390 mL CH₄/gVS and 37 mL CH₄/gVS/day, respectively) compared with the control sample.

During the dielectric measurements, within the investigated frequency range of 200–2400 MHz, the maximum value of relative permittivity (ϵ') gradually decreased and shifted toward higher frequencies as the fermentation process progressed. A strong correlation was established between the change in the maximum permittivity values ($\Delta\epsilon'_{\max}$) and the maximum product formation parameters ($R_{\max}$) obtained using the biokinetic models ($R^2 > 0.98$), confirming the potential applicability of the dielectric parameter-based monitoring method for tracking fermentation processes.

Acknowledgements

The research was financed by the National Research, Development and Innovation Office (NKFI) FK 146344 project.

A katódos védelem alkalmazásának vizsgálata magas hőmérsékleten

Evaluation of Cathodic Protection Performance in High-Temperature Environments

Jankovics Péter, Kristóf Tamás, Lukács Zoltán⁴⁸

Összefoglaló

A katódos védelem széles körben alkalmazott korrózióvédelmi eljárás, amelynek az a lényege, hogy a védendő objektumot egy egyenáramú tápegység negatív kimenetére kötjük, a pozitív kimenetre pedig egy alkalmasan megválasztott földelőanódot csatlakoztatunk. A kialakuló elektrokémiai rendszer redukzív viszonyokat teremt a védett szerkezeten, ami az anódos oxidációs folyamatok visszaszorításával jár; ez a katódos védelem mechanizmusának az alapja. A katódos védelmet elterjedten használják csővezetékek külső, valamint tartályok külső és belső korrózióvédelmére, továbbá kutak bélésűcsöveinek védelmére. Ez utóbbi alkalmazásban az eredmények ellentmondásosak, számos esetről tudunk, amikor a látszólag jól beállított katódos védelem ellenére a kutak bélésűcsöveinek alsó szakasza (a kúttalp) jelentős mértékű külső oldali korróziót szenvedett, és a kutat fel kellett hagyni. Ezek az esetek rávilágítottak arra a tényre, hogy nagyon keveset, jóformán semmit nem tudunk arról, hogy a kúttalpnál uralkodó fizikai-kémiai körülmények (200 °C hőmérséklet, 200–500 bar nyomás, magas szén-dioxid-, klorid- és kén-hidrogén-tartalmú formációs vizek) mellett milyen védelmi kritériumok alkalmazhatóak. További probléma, hogy az elektrokémiai rendszerek kinetikájának hőmérsékletfüggése jóval nehezebben tanulmányozható, mint egyéb kinetikai rendszerek esetében, ami további módszertani korlátokat jelent a kérdés vizsgálatában. A PE Mérnöki Karának Korróziós Kutatócsoportjában korábban sikeres módszertani kutatásokat végeztünk abból a célból, hogy olyan kinetikai kritériumot fejlesszünk, amely képes a katódos védelmet minősíteni. Ezen kísérleti módszertan felhasználásával vizsgáltuk ötvözetlen acélminták katódos védelmének hatékonyságát 80 °C hőmérsékleten, különböző agresszivitású oldatokban. Az eredmények alapján a módszertan és a korábban alkalmazott katódos védelmi kinetikai kritérium ezen körülmények között is alkalmas a védettség megállapítására.

Köszönetnyilvánítás

A 2025-2.1.1-EKÖP-2025-00029/81 számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a 2025-2.1.1-EKÖP pályázati program finanszírozásában valósult meg.

Summary

Cathodic protection (CP) is a widely applied corrosion mitigation technique. Its fundamental principle involves connecting the structure to be protected to the negative terminal of a direct current (DC) power supply, while a suitably selected groundbed anode is connected to the positive terminal. The resulting electrochemical system establishes reductive conditions on the protected structure, which leads to the suppression of anodic oxidation processes; this forms the mechanistic basis of cathodic protection. CP is extensively utilized for the external corrosion protection of pipelines, the internal and external protection of storage tanks, as well as the protection of well casings. In the latter application, however, the outcomes are often contradictory. There are numerous documented cases where, despite apparently well-calibrated CP systems, the lower section of the well casing (the well bottom) suffered severe external corrosion, leading to the abandonment of the well. These failures highlight the fact that there is a significant lack of knowledge regarding the applicable protection criteria under the extreme physico-chemical conditions prevailing at the bottom of the wells (temperatures of 200°C, pressures of 200–500 bar, and formation waters with high concentrations of carbon dioxide, chlorides, and hydrogen sulfide). A further complication is that the temperature dependence of electrochemical reaction kinetics is considerably more difficult to study than

48 Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Természettudományi Központ, Korróziós Kutatócsoport, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

that of other kinetic systems, imposing additional methodological constraints on the investigation of this issue. The Corrosion Research Group at the Faculty of Engineering of PE has previously conducted successful methodological research aimed at developing a kinetic criterion capable of qualifying the effectiveness of cathodic protection. Utilizing this experimental methodology, we investigated the effectiveness of the cathodic protection of unalloyed carbon steel samples at 80°C in solutions of varying corrosivity. The results indicate that both the methodology and the previously applied CP kinetic criterion are suitable for determining the state of protection under these conditions as well. Project no. 2025-2.1.1-EKÖP-2025-00029/81 has been implemented with the support provided by the Ministry of Culture and Innovation of Hungary from the National Research, Development and Innovation Fund, financed under the 2025-2.1.1-EKÖP funding scheme.

Természetes hatóanyagok szelektív rákellenes hatásának vizsgálata jelölésmentes optikai bioszenzorokkal

Investigation of the selective anti-cancer effect of natural active compounds using label-free optical biosensors

Beatrix Péter⁴⁹, Tim Aushüttel⁵⁰, Nikolett Kanyo⁵¹, Péter Joó⁵², Kinga Tóth⁵³, Zoltán Szittner⁵⁴, Inna Szekács⁵⁵, Szilvia Bosze⁵⁶, Gábor M. Kovács⁵⁷, Imre Boldizsár⁵⁸, Robert Horvath⁵⁹

Összefoglaló

A természetes eredetű kis molekulák kiemelkedő szerepet játszanak a daganatellenes gyógyszerek fejlesztésében, így új megközelítést jelenthetnek a terápiás lehetőségek számára. A jelölésmentes bioszenzorokon alapuló módszerek lehetővé teszik a bioaktív vegyületek élő sejtekre gyakorolt hatásának valós idejű vizsgálatát, így a hagyományos végpontméréseknél részletesebb információt adnak a sejtadhézióról, a sejtváándorlásról és a jelátviteli folyamatokról. A jelölésmentes optikai módszerek – például a rezonáns hullámvezető rács (RWG) technológia és a digitális holografikus mikroszkópia – nagy érzékenységgel teszik lehetővé a sejtadhézió valós idejű vizsgálatát.

A sejtadhézió kulcsfontosságú folyamat a sejtek növekedésében, osztódásában, mozgásában és differenciációjában, így a daganatok áttétképzése során is. A sejtek adhéziós tulajdonságainak módosítása ezáltal hozzájárulhat ezen folyamatok szabályozásához. Sejtjeink expresszálnak olyan receptorokat, amelyek az extracelluláris mátrix komponenseit, így például a fibronektint ismerik fel, és ez a felismerés a sejtek adhézióját eredményezheti. A fibronektin a daganatprogresszió szempontjából ígéretes terápiás célpont. [1], [2], [3], [4]

Kutatásunk célja annak vizsgálata volt, hogy különböző lignánok – köztük deoxipodofilotoxin (DPT), angeloyl-podofilotoxin (APT) és anhydropodorhizol (AHP) –, valamint ezeket tartalmazó növényi kivonatok hogyan befolyásolják a rákos és egészséges sejtek fibronektinhez való adhézióját. [3], [5]

A vizsgálatba további, szerkezetiileg eltérő természetes metabolitokat is bevontunk, összesen 11 izolált vegyületet és 4 nyers kivonatot vizsgáltunk. Kimutattuk, hogy a HeLa sejtek fibronektinen történő adhéziójának gátlását a deoxipodofilotoxin és az angeloyl-podofilotoxin fibronektinnel történő interakciója váltja ki. Ezzel szemben a balanofonin és a vermelhotin vélekedésünk szerint közvetlenül a sejtek integrinjeihez kapcsolódva fejtik ki adhéziógátló hatásukat. Ez a megközelítés hatékony eszközt nyújt a bioaktív természetes vegyületek gyors előszűrésére, lehetővé téve a további vizsgálatok szempontjából releváns hatóanyagjelöltek azonosítását. [5]

49 Nanobiosensorics Laboratory, Institute of Technical Physics and Materials Science, HUN-REN Centre for Energy Research, Budapest

50 Department of Pharmacognosy, Semmelweis University, Budapest

51 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest; Chemical Engineering and Material Sciences Doctoral School (CEMSDS), University of Pannonia, Veszprém

52 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest; CEMSDS, University of Pannonia, Veszprém

53 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest

54 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest

55 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest

56 HUN-REN-ELTE Research Group of Peptide Chemistry, Institute of Chemistry, ELTE, Budapest; Department of Genetics, Cell- and Immunobiology, Faculty of Medicine, Semmelweis University, Budapest

57 Department of Plant Anatomy, Institute of Biology, ELTE, Budapest; Plant Protection Institute, Centre for Agricultural Research, Budapest

58 Department of Pharmacognosy, Semmelweis University, Budapest; Department of Plant Anatomy, Institute of Biology, ELTE, Budapest; Center for Pharmacology and Drug Research & Development, Semmelweis University, Budapest

59 Nanobiosensorics Lab., ITPMS, HUN-REN EK, Budapest; Institute of Biophysics, HUN-REN BRC, Szeged

Summary

Natural small molecules play a prominent role in the development of anticancer drugs and may therefore represent a new approach to therapeutic options. Label-free biosensor-based methods enable real-time analysis of the effects of bioactive compounds on living cells, providing more detailed information on cell adhesion, cell migration, and signal transmission processes than traditional end-point measurements. Label-free optical methods—such as resonant waveguide grating (RWG) technology and digital holographic microscopy—enable real-time analysis of cell adhesion with high sensitivity.[1], [2], [3], [4]

Cell adhesion is a crucial process in cell growth, division, movement, and differentiation, and thus also in tumor metastasis. Modulating the adhesion properties of cells can therefore contribute to the regulation of these processes. The receptors expressed by our cells recognize components of the extracellular matrix, such as fibronectin, and this recognition can lead to cell adhesion. Fibronectin is a promising therapeutic target for tumor progression.

The aim of our research was to investigate how various lignans—including deoxypodophyllotoxin (DPT), angeloyl-podophyllotoxin (APT), and anhydropodorhizol (AHP)—as well as plant extracts containing these compounds influence the adhesion of cancerous and healthy cells to fibronectin.[3], [5]

In addition, we involved other structurally diverse natural metabolites in the study, examining a total of 11 purified compounds and 4 crude extracts. We demonstrated that the inhibition of HeLa cell adhesion to fibronectin is mediated by the interaction of deoxypodophyllotoxin and angeloyl-podophyllotoxin with fibronectin. In contrast, balanophonin and vermelhotin, according to our opinion, express their adhesion-inhibiting effects by binding directly to the cells' integrins. This approach provides an effective method for the rapid screening of bioactive natural compounds, enabling the identification of candidate active compounds relevant for further studies.[5]

Irodalomjegyzék/References

- [1] B. Péter és mtsai., „Label-free biosensing of lignans for therapeutics using engineered model surfaces”, *International Journal of Biological Macromolecules*, köt. 233, o. 123528, ápr. 2023, doi: 10.1016/j.ijbiomac.2023.123528.
- [2] B. Peter, N. Kanyo, I. Szekacs, A. Csampai, S. Bosze, és R. Horvath, „Epigallocatechin-gallate tailors the cell adhesivity of fibronectin coatings in oxidation and concentration-dependent manner”, *Mater. Adv.*, köt. 3, sz. 23, o. 8684–8694, nov. 2022, doi: 10.1039/D2MA00765G.
- [3] B. Péter és mtsai., „Natural Compounds as Target Biomolecules in Cellular Adhesion and Migration: From Biomolecular Stimulation to Label-Free Discovery and Bioactivity-Based Isolation”, *Biomedicines*, köt. 9, sz. 12, o. 1781, dec. 2021, doi: 10.3390/biomedicines9121781.
- [4] B. Peter és mtsai., „Green tea polyphenol tailors cell adhesivity of RGD displaying surfaces: multicomponent models monitored optically”, *Scientific Reports*, köt. 7, sz. 1, o. 42220, febr. 2017, doi: 10.1038/srep42220.
- [5] B. Péter és mtsai., „In situ monitoring of cell adhesion kinetics using label-free optical biosensors: Evaluating anticancer potential and selectivity of natural compounds”, *VIEW*, köt. n/a, sz. n/a, o. 20250061, doi: 10.1002/VIW.20250061.

Acknowledgments

This project was supported by the Momentum (Lendület) Program of the Hungarian Academy of Sciences and the National Research, Development, and Innovation Office (NKFIH) (ERC_HU, and KKP_19 Programs), TKP2021-EGA-04 program, K-135712 (to I.B.), OTKA K 142904 (to S.B.), and the PD 134195 (to Z.S.). This paper was supported by the János Bolyai Research Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences (to B.P. and Z.S.), the NKFIH University Research Scholarship Program 2025-2.1.1-EKÖP-2025-00025 of University of Pannonia (to N.K.), and VEKOP-2.3.3-15-2017-00020 (to I.B., G.M.K., and S.B.).

SARS-CoV-2 S1 fehérje és integrinek kölcsönhatásának kinetikai vizsgálata élősejtes, jelölésmentes optikai bioszenzorral

Kinetic Analysis of SARS-CoV-2 S1
–Integrin Binding Using Live-Cell Label-Free Optical Biosensing

Kanyó Nicolett⁶⁰, Borbely Krisztina⁶¹, Péter Beatrix⁶², Kovács Kinga Dóra⁶³,
Balogh Anna⁶⁴, Magyaródi Beatrix⁶⁵, Kurunczi Sándor⁶⁶, Székács Inna⁶⁷, Horváth Róbert⁶⁸

Összefoglaló

A SARS-CoV-2 vírus sejtekbe történő bejutása elsősorban az ACE2 receptorhoz való kötődésen keresztül történik, azonban egyre több bizonyíték utal arra, hogy alternatív kötődési útvonalak is léteznek. A vírus tüskefehérjéjének S1 alegysége egy Arg-Gly-Asp (RGD) motívumot tartalmaz, amely lehetővé teheti az RGD-felismerő integrinekhez való kötődést, különösen ACE2-negatív sejtek esetében.

Munkánkban a SARS-CoV-2 S1 fehérje és integrinek közötti kölcsönhatást vizsgáltuk élő HeLa sejtek alkalmazásával egy rezonáns hullámvezető rács (RWG) elven működő, jelölésmentes optikai bioszenzor segítségével. A módszer lehetővé teszi a sejtek tapadásának valós idejű követését, így kvantitatív információ nyerhető a ligand–receptor kölcsönhatások kinetikájáról. A mérések során S1 fehérjével bevont felületeken vizsgáltuk a sejtek tapadási kinetikáját, valamint kompetitív gátlási kísérleteket végeztünk oldott S1 fehérje jelenlétében.

A kapott adatok alapján kinetikai modellezést alkalmaztunk az integrin–S1 kölcsönhatás disszociációs állandójának meghatározására. A modell és a gátlási kísérletek eredményei alapján a kölcsönhatás effektív disszociációs állandója a mikromólos tartományba esik. Eredményeink azt is jelzik, hogy a felületre immobilizált S1 fehérjéknek körülbelül egyharmada marad funkcionálisan hozzáférhető az integrinek számára.

Az eredmények alátámasztják, hogy az integrinek potenciális alternatív kötődési útvonalat biztosíthatnak a SARS-CoV-2 számára, valamint demonstrálják a jelölésmentes optikai bioszenzorok alkalmazhatóságát a vírus–sejt kölcsönhatások kvantitatív vizsgálatában.

Summary

SARS-CoV-2 cell entry is primarily mediated by the interaction between the viral spike protein and the ACE2 receptor. However, increasing evidence suggests that alternative attachment pathways may also contribute to viral entry. The S1 subunit of the spike protein contains an Arg–Gly–Asp (RGD) motif that may enable binding to RGD-recognizing integrins, especially in ACE2-negative cells.

In this study, we investigated the interaction between the SARS-CoV-2 S1 protein and integrins using live HeLa cells and a label-free optical biosensor based on resonant waveguide grating (RWG) technology. This method enables real-time monitoring of cell adhesion, providing quantitative information about ligand–receptor interaction kinetics. Adhesion kinetics were measured on S1-coated surfaces, and competitive inhibition assays were performed using soluble S1 protein.

60 HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Nanobioszenzorika Laboratórium, Budapest; Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Anyagtudományi Doktori Iskola, Veszprém

61 HUN-REN EK, Nanobioszenzorika Lab., Budapest; Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Anyagtudományi Doktori Iskola, Veszprém

62 HUN-REN EK, Nanobioszenzorika Lab., Budapest

63 HUN-REN EK, Nanobioszenzorika Lab., Budapest; ELTE, Biológiai Fizika Tanszék, Budapest

64 HUN-REN EK, Nanobioszenzorika Lab., Budapest; ELTE, Biológiai Fizika Tanszék, Budapest

65 HUN-REN EK, Nanobioszenzorika Lab., Budapest; Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Anyagtudományi Doktori Iskola, Veszprém

66 HUN-REN EK, Nanobioszenzorika Lab., Budapest

67 HUN-REN EK, Nanobioszenzorika Lab., Budapest

68 HUN-REN EK, Nanobioszenzorika Lab., Budapest; HUN-REN Szegedi Biológiai Kutatóközpont, Szeged

Kinetic modeling of the experimental data was applied to estimate the dissociation constant of the integrin–S1 interaction. The results indicate an effective dissociation constant in the micromolar range. Furthermore, the analysis suggests that approximately one-third of the immobilized S1 molecules remain functionally accessible for integrin binding.

These findings support the existence of an integrin-mediated alternative interaction pathway for SARS-CoV-2 and demonstrate the capability of label-free optical biosensors to quantitatively investigate virus–host interactions under physiologically relevant conditions.

Irodalomjegyzék/References

- [1] Kanyó, N., Borbely, K., Péter, B., Kovács, K. D., Balogh, A., Magyaródi, B., Kurunczi, S., Székács, I., Horváth, R., Kinetic Analysis of SARS-CoV-2 S1–Integrin Binding Using Live-Cell, Label-Free Optical Biosensing, Biosensors, 15, 534 (2025).

Hidrogén előállítása Li-ion akkumulátorból származó hulladékok újrahasznosításával

Hydrogen production by recycling Li-ion battery waste

Kis-Iván Alex⁶⁹, Zsinka Viktória⁷⁰, Miskolczi Norbert⁷¹, Ningbo Gao⁷², Cui Quan⁷³

Összefoglaló

A fosszilis energiahordozók felhasználásának és a környezetbe került káros anyagok mennyiségének csökkentése miatt egyre nagyobb jelentőséggel bírnak az akkumulátorok. A Li-ion akkumulátorok széles körben alkalmazott energiatárolók, melyek felhasználása jelentősen növekszik. A Li-ion akkumulátorok elektródjainak pirometallurgiai és hidrometallurgiai módszerekkel végzett újrahasznosítását széles körben vizsgálják, ugyanakkor a bennük lévő egyéb alkotók további felhasználásával csak kevesen foglalkoznak. Ilyen többek között az akkumulátorokban lévő szeparátorfólia is. A különböző területeken alkalmazott Li-ion akkumulátorok összetétele jelentősen különbözik. Elsősorban a bennük lévő átmenetifémek mennyisége eltérő. Kutatómunkánk során Li-ion akkumulátorokból származó szeparátorfólia és elektródok hidrogéncélú értéknövelt újrahasznosításával foglalkoztunk. Különböző alkalmazásokból származó Li-ion akkumulátorok elektródjaiból olyan katalizátorokat állítottunk elő, melyek előnyösen alkalmazhatók a szeparátorfólia hidrogénné és egyéb szénhidrogénné történő átalakításában. Az alapanyagokat laboratóriumi elgázosító reaktorban vizsgáltuk magas hőmérsékleten. A katalizátorok aktivitása és a termékek hidrogéntartalma nagymértékben függött a Li-ion akkumulátorok származásától és azok összetételétől.

Köszönetnyilvánítás

A 2024-1.2.5-TÉT-2024-00025 számú projektet a Kulturális és Innovációs Minisztérium a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozta a 2024-1.2.5-TÉT program keretében.

Summary

Due to reduction of fossil energy sources and the amount of harmful substances released into the environment, batteries have great important. Li-ion batteries are widely used energy storage devices, the use of which is increasing significantly. The pyrometallurgy and hydrometallurgy recycling of electrodes obtained from Li-ion batteries are widely investigated, but only a few are concerned with the further use of other components in them. Among these the separator foil in batteries looks key. The composition of Li-ion batteries used in different areas differs significantly. Primarily, the amount of transition metals is different in them. During this work, the value-added recycling of separator foil and electrodes from Li-ion batteries for hydrogen purposes was investigated. Catalysts were synthesized from electrodes of Li-ion batteries used in different applications. Catalysts can be advantageously used in the conversion of separator foil into hydrogen and other hydrocarbons. The raw materials were tested in a laboratory gasification reactor at high temperatures. The activity of the catalysts and the hydrogen content of the products depended largely on the origin of the Li-ion batteries and their composition.

Acknowledgements

The project No. 2024-1.2.5-TÉT-2024-00025 was financed by the Ministry of Cultural and Innovation from the National Research Development and Innovation Fund, within the 2024-1.2.5-TET program.

69 Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Bio-, Környezet- és Vegyészmérnöki Kutató-Fejlesztő Központ, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

70 PE MK, Bio-, Környezet- és Vegyészmérnöki KF Központ, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék, Veszprém

71 PE MK, Bio-, Környezet- és Vegyészmérnöki KF Központ, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék, Veszprém

72 School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, P.R. China

73 School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, P.R. China

Precizitásorientált hibridmodell alkalmazása többcélú optimalizálásban

Reliability oriented hibrid model in multiobjective optimization

Kiss Bendegúz⁷⁴, Szilágyi Botond⁷⁵

Összefoglaló

A modern vegyészmérnöki gyakorlat szerves részét képezik a fizikai alapokon nyugvó, részletes termodinamikai és (reakció)kinetikai összefüggéseket tartalmazó nagy pontosságú folyamatmodellek használata. Ezek a tervezési fázisban, a készülékek méretezésén túl a folyamatok optimális működtetésében is kulcsszerepet játszanak. A modellalapú irányítás gyorsabb zavaráskompenzációt és biztonságosabb üzemet tesz lehetővé. Ugyanakkor a pontosság és megbízhatóság mértéke egyenesen arányos a számítási igényrel, így a komplex mechanisztikus modellekkel végzett valós idejű irányítás csak szélsőséges esetekben kivitelezhető. A számítási költség az optimális tervezésnél is kritikus: egyes optimalizálási feladatok futási ideje napokra vagy hetekre is nyúlhat. Kompromisszumként (elsősorban az irányítástechnikában) gyakran alkalmaznak fekete doboz modelleket, amelyek előzetes adatokból tanulva képesek kiváltani az időigényes mechanisztikus számításokat. Ezekben azonban általában hiányoznak a fizikai összefüggések, ezért megbízhatóságuk sem garantált [1]. Az előadás célja egy olyan, az irodalomból ismert statisztikai és mechanisztikus megközelítéseket ötvöző hibrid modellezési keretrendszer bemutatása, amely kihasználja a fekete dobozok kínálta számítási kapacitás-megtakarítást az elvárt pontosság megőrzése mellett [2].

A működés során párhuzamosan kapcsolunk egy mechanisztikus modellt és egy regressziós neurális hálót, ahol minden egyes bemenetet egy pontosságorientált réteg ellenőriz. Ha a réteg becslése szerint a regresszió megfelelően pontos lesz, a komplex szimulációt kikerüljük a neurális hálóval, ellenkező esetben viszont visszatérünk az eredeti mechanisztikus modell alkalmazásához. Így elérhető, hogy a könnyen becsülhető pontoknál ne terheljük a rendszert bonyolult szimulációkkal, miközben szükség esetén továbbra is a fizikai modellre támaszkodunk. A cél tehát nem a fizikai modell teljes helyettesítése, hanem a döntéshozatal felgyorsítása úgy, hogy annak továbbra is szerves részét képezze a mechanisztikus leírás.

Az alkalmazás során az offline tanítás helyett minden egyes optimalizálás során elmentettük a mechanisztikus modell bemenet-kimenet adatpárjait. Ezáltal nem generáltunk külön előképzést szolgáló adatpontokat, hanem a döntéshozatal közben születő eredményeket hasznosítottuk, kikerülve az előképzési fázist. Ez lehetővé tette a tanítóadathalmaz folyamatos frissítését és a statisztikai modellek iteratív fejlesztését. Az így elért adaptív működés révén a hibrid modell regressziója egyre szélesebb bemeneti tartományban vált képessé pontos predikciókra. Az előadáson egy egyensúlyra vezető enzimreakció többcélú optimalizálásán keresztül mutatjuk be a keretrendszer teljesítőkéességét. Különböző célfüggvények és kényszerfeltételek mellett is azt tapasztaltuk, hogy a hibrid megoldás lényegében olyan pontosan teljesített, mint mechanisztikus társa, miközben a számítások ~40%-át általánosságban a regressziós komponens végezte. A bővülő és diverzifikáltabb adathalmaznak köszönhetően a regresszió az iterációk során egyre nagyobb arányban volt képes kiváltani az eredeti szimulációt.

Summary

The use of high-fidelity process models based on physical principles, incorporating detailed thermodynamic and (reaction) kinetic relationships, is an integral part of modern chemical engineering practice. These models play a key role not only in the design phase and equipment sizing but also in the optimal operation of processes. Model-based control enables faster disturbance rejection and safer operation. However, the level of accuracy and reliability is directly proportional to the computational demand; thus, real-time control using complex mechanistic models is feasible only in extreme cases. Computational cost is also

74 Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3-9.

75 Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3-9.

critical in optimal design, where the runtime of certain optimization tasks can extend to days or weeks. As a compromise (primarily in control engineering) black-box models are frequently applied. These learn from prior data and can bypass time-consuming mechanistic calculations. However, these generally lack physical relationships, and thus their reliability is not guaranteed [1]. The objective of this work is to introduce a hybrid modeling framework, known from the literature, which combines statistical and mechanistic approaches. This framework leverages the computational savings offered by black-box models while maintaining the required accuracy [2]. During operation, a mechanistic model and a regression neural network are connected in parallel, where every input is verified by an accuracy-oriented layer. If this layer estimates that the regression will be sufficiently accurate, the complex simulation is bypassed using the neural network; otherwise, the system reverts to the original mechanistic model. This ensures that the system is not burdened with complex simulations for points that can be easily estimated, while still relying on the physical model when necessary. The goal, therefore, is not the complete replacement of the physical model, but rather the acceleration of decision-making such that the mechanistic description remains an integral part of it. In this application, instead of offline training, the input-output data pairs of the mechanistic model were saved during each optimization. Consequently, no separate data points were generated for pre-training; instead, results produced during the decision-making process were utilized, bypassing the pre-training phase. This allowed for the continuous updating of the training dataset and the iterative development of the statistical models. Through the resulting adaptive operation, the regression of the hybrid model became capable of accurate predictions over an increasingly wide input range. In this study, we demonstrate the performance of the framework through the multi-objective optimization of an equilibrium-limited enzymatic reaction. Even with various objective functions and constraints, we found that the hybrid solution performed essentially as accurately as its mechanistic counterpart, while approximately ~40% of the calculations were generally handled by the regression component. Thanks to the expanding and more diversified dataset, the regression was able to bypass the original simulation in an increasing proportion of cycles throughout the iterations.

Irodalomjegyzék

- [1] Bradley, W.; Kim, J.; Kilwein, Z.; Blakely, L.; Eydenberg, M.; Jalvin, J.; Laird, C.; Boukouvala, F., *Computers & Chemical Engineering*, 166, 107898. (2022)
- [2] Orosz, Á.; Neal, M.; Rao, R.; Roberts, C.; Szilágyi, B.; Nagy, Z. K., *AIChE Journal*, 71 (12), e70094. (2025)

A mikroalga-kutatás új horizontjai: a precíziós biotechnológiától a körforgásos gazdaságig

New horizons in microalgae research:
from precision biotechnology to circular economy

Kiss Bernadett, Németh Áron⁷⁶

Összefoglaló

A 21. század globális környezeti és gazdasági kihívásai – nevezetesen az antropogén klímaváltozás, az élelmezésbiztonság és a fosszilis erőforrások kimerülése – sürgetővé teszik a fenntartható, bioalapú megoldásokra való áttérést [1]. Ezen a területen a mikroalgák mint „harmadik generációs” alapanyagok kaptak központi szerepet. A korai kutatások fókuszában álló bioüzemanyag-előállítást napjainkban felváltotta a biorefinery (biofinomító) koncepció, amely a körforgásos gazdaság elveit követve a teljes biomassza értékesítésére törekszik [2]. A modern molekuláris biológiai eszközök új távlatokat nyitottak a specifikus anyagcsere-utak módosításában [3], lehetővé téve nagy értékű bioaktív vegyületek, például polikatalizátorok, speciális lipidek és rekombináns fehérjék célzott termelését. Jelen előadás a legújabb kutatási trendeket elemzi, kitérve a mikroalgák szerepére a szén-dioxid-megkötésben és a fenntartható mezőgazdasági biostimulátorok fejlesztésében [4].

Summary

The global environmental and economic challenges of the 21st century—notably anthropogenic climate change, food security, and the depletion of fossil resources—necessitate an urgent transition toward sustainable, bio-based solutions. In this field, microalgae have taken center stage as „third-generation” feedstocks. The focus on biofuel production that characterized early research has now been superseded by the biorefinery concept, which follows the principles of the circular economy to strive for the full valorization of the entire biomass. Modern molecular biology tools have opened new horizons in modifying specific metabolic pathways, enabling the targeted production of high-value bioactive compounds such as poly-catalysts, specialized lipids, and recombinant proteins. This presentation analyzes the latest research trends, including the role of microalgae in carbon capture and the development of sustainable agricultural biostimulants.

Irodalomjegyzék/References

- [1] Tyoker Kukwa, Donald, and Chetty, Maggie. *Microalgae: The Multifaceted Biomass of the 21st Century*. Biotechnological Applications of Biomass. IntechOpen. (2021) doi:10.5772/intechopen.94090.
- [2] Santos, Bruna, Filomena Freitas, Abílio JFN Sobral és Telma Encarnação. *Microalgae and circular economy: unlocking waste to resource pathways for sustainable development*. International Journal of Sustainable Engineering 18 (1). (2025) doi:10.1080/19397038.2025.2501488.
- [3] Quynh-Giao Tran, Trang Thi Le, Dong-Yun Choi, Dae-Hyun Cho, Jin-Ho Yun, Hong Il Choi, Hee-Sik Kim, Yong Jae Lee, *Progress and challenges in CRISPR/Cas applications in microalgae* Journal of Microbiology Vol. 63, No. 3, (2025) <https://doi.org/10.71150/jm.2501028>
- [4] Brenda Karen González-Pérez, Andrea Margarita Rivas-Castillo, Alejandro Valdez-Calderón & Manuel Aaron Gayosso-Morales *Microalgae as biostimulants: a new approach in agriculture*. World J Microbiol Biotechnol 38, 4. (2022) <https://doi.org/10.1007/s11274-021-03192-2>

⁷⁶ Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Elszenesítéssel előkezelt biomassza elgázosítása biochar jelenlétében a CO₂-kibocsátás csökkentése érdekében

Gasification of carbonized biomass in the presence of biochar to reduce CO₂ emissions

Kollár Adél, Zsinka Viktória, Miskolczi Norbert⁷⁷

Összefoglaló

A biomassza-hulladékok újrahasznosítása napjaink egyik kiemelt kutatási területe. Éves szinten több milliárd tonna biomassza-hulladék keletkezik, amelyek értékesebb termékekké történő átalakítása nemcsak környezetvédelmi, hanem energetikai szempontból is fontos. A biomassza pirolízisével és elgázosításával hidrogén és értékes szénhidrogének állíthatók elő, amelyek megfelelő körülmények között integrálhatók meglévő értékláncokba, és azokból nemcsak energia, hanem egyéb vegyipari termékek állíthatók elő. A biomassza pirolízise és elgázosítása a legtöbb esetben CO₂-neutrálisnak tekinthető. Az eljárás technológiai-gazdasági jellemzői a biomassza feldolgozása során keletkezett CO₂ csökkentésével tovább javíthatók. Ennek egyik módja az alapanyagok előkezelése és a CO₂ megkötése. Kutatómunkánk során a mezőgazdasági biomassza elszenesítéssel kombinált elgázosítását vizsgáltuk biochar jelenlétében. Kimutattuk, hogy az alkalmazott kísérleti elrendezésnél a biochar előnyösen alkalmazható CO₂ megkötésére, illetve CO₂-hordozóként a száraz reformálási reakciók elősegítése céljából. Ezzel a technológiai megoldással a reakcióban keletkezett CO₂ in situ felhasználásán keresztül akár teljes mértékben megszüntethető a biomasszából keletkező CO₂-emisszió. Továbbá a CO₂ hidrogénné és szén-monoxiddá történő átalakításával a szintézisgáz-hozam tovább növelhető.

Köszönetnyilvánítás

A 2020-2.1.1-ED-2024-00335 számú projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal által kibocsátott pályázati program finanszírozásában valósult meg.

Summary

Recycling of biomass waste is one of the most important research areas. Billions of tons of biomass waste are generated annually, and its transformation into more valuable products is important not only from environmental but also energetic aspects. Hydrogen and valuable hydrocarbons can be produced by pyrolysis and gasification of biomass, which can be integrated into existing value chains under appropriate conditions and can be used to produce not only energy but also other chemicals. Pyrolysis and gasification of biomass can be considered CO₂ neutral in most cases. The technological and economic characteristics of the process can be further improved by reducing the CO₂ generated during biomass gasification. One of the possible ways is to pre-treating the raw materials and capture the CO₂. During this work, the gasification of agricultural biomass combined with carbonization in the presence of biochar was investigated. It was found, that biochar can be advantageously used for CO₂ capture and as a CO₂ carrier to promote dry reforming reactions. The CO₂ emissions from biomass can be completely eliminated through the in-situ use of the CO₂ generated in the reaction with this technological layout. Furthermore, the synthesis gas yield can be further increased by converting the CO₂ into hydrogen and CO.

Acknowledgements

Project number 2020-2.1.1-ED-2024-00335 was implemented with the support of the Ministry of Culture and Innovation from the National Research Development and Innovation Fund, financed by the application program issued by the National Research Development and Innovation Office.

⁷⁷ Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Bio-, Környezet- és Vegyészmérnöki Kutató-Fejlesztő Központ, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Röntgentomográfiás eljárás mint komplex technológiai fejlesztési eszköz

X-ray Tomography as a Complex Technological Development Tool

Dr. Kovács András⁷⁸

Összefoglaló

A röntgentomográfiás mérési eljárás ma már nem pusztán képalkotó technika, hanem az anyagszerkezet mélyebb megértését és a célzott technológiafejlesztést támogató komplex anyagfejlesztési eszköz. A módszer roncsolásmentes módon teszi vizsgálhatóvá a belső pórusszerkezetet, az inhomogenitásokat, a zárványokat és a cellaszerkezet térbeli eloszlását, így közvetlen kapcsolat teremthető a gyártási paraméterek, a mikroszerkezet és a makroszkopikus tulajdonságok között. Az alkalmazott kutatások alapján a komputertomográfia nemcsak a szerkezeti hibák feltárására alkalmas, hanem a hulladékalapú polimerek minősítésében, a habosított rendszerek optimalizálásában, a cement- és geopolimeralapú anyagok pórusrendszerének elemzésében, valamint az ipari felhasználhatóság előrejelzésében is kulcsszerepet játszik. Ezáltal a röntgentomográfia a korszerű anyagfejlesztésben olyan integráló analitikai platformként jelenik meg, amely a szerkezet–technológia–tulajdonság kapcsolat feltárásán keresztül közvetlenül támogatja új, nagyobb teljesítményű és fenntarthatóbb anyagrendszerek fejlesztését.

Summary

X-ray computed tomography is no longer merely an imaging technique. Rather, it is a complex materials development tool that supports a deeper understanding of material structure and enables targeted technological innovation. The method makes it possible to examine internal pore structure, inhomogeneities, inclusions, and the spatial distribution of cellular architectures in a non-destructive manner, thereby establishing a direct link between processing parameters, microstructure, and macroscopic properties. Based on the presented applied research, computed tomography is suitable not only for detecting structural defects, but also plays a key role in the qualification of waste-based polymers, the optimization of foamed systems, the analysis of pore networks in cement- and geopolimer-based materials, and the prediction of industrial applicability. In this way, X-ray computed tomography emerges in modern materials development as an integrating analytical platform that, through revealing the structure–technology–property relationship, directly supports the development of new, higher-performance, and more sustainable material systems.

⁷⁸ Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Szelektív fényáteresztést és víztaszító felületi tulajdonságot mutató nanoszerkezetű bevonatok fejlesztése

Development of nanocoatings with selective light transmission and water-repellent surface properties

Kovács Kinga⁷⁹, Zámbo Dániel⁸⁰, Hórvölgyi Zoltán⁸¹, Albert Emőke⁸²

Összefoglaló

A nap energiájának elektromos formában való hasznosítására a fotovoltaiikus hatáson alapuló napelemek megoldást nyújtanak. A napelemek hatékony működése félvezető technológián, a tiltott sáv és a beérkező fény energiájának relatív nagyságán múlik. A termális energiaként disszipálódó energiaveszteségek a napelemek hatékonyságát csökkentik, így célszerű a napelemekre beérkező, hőként disszipálódó fény intenzitásának csökkentése. A kutatás célja a napelemekre érkező fény spektrumának kontrollálása, valamint az öntisztuló tulajdonság kialakítása víztaszító felületi tulajdonságon keresztül, transzparens szilárd hordozóra kialakított nanobevonatok segítségével. A kísérleti munkát megelőzően vékonyréteg optikai modellek segítségével meghatároztuk a bevonatok célkitűzésnek megfelelő optimális optikai tulajdonságait, majd megfelelő anyagi rendszer kiválasztása után, a kísérleti munka során kialakítottuk és jellemeztük a többrétegű nanobevonatokat.

Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom testvéremnek, Kovács Leventének a szimulációs program elindításáért.

A TKP-9-8/PALY-2021 és TKP-6-6/PALY-2021 számú projektek a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a TKP2021-EGA és a TKP2021-NVA pályázati programok finanszírozásában valósultak meg. A kutatáshoz hozzájárult a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) STARTING 152904 számú pályázata.

Summary

Solar cells based on the photovoltaic effect provide a solution for harnessing the sun in electrical form. The efficient operation of solar cells depends on semiconductor technology, the relative magnitude of the band gap and the energy of the incoming light. Energy losses dissipated as thermal energy reduce the efficiency of solar cells, so it is advisable to reduce the intensity of the light dissipated as heat entering the solar cells. The aim of the research is to control the spectrum of light arriving at solar cells and to develop self-cleaning properties through water-repellent surface properties using nanocoatings formed on a transparent solid substrate. Prior to the experimental work, the optimal optical properties of the coatings are determined using thin-film optical models, and then the appropriate material system is selected and the multilayer nanocoatings formed during the experimental work.

Acknowledgements

I am grateful to my brother, Levente Kovács, for initiating the simulation program.

The projects TKP-9-8/PALY-2021 and TKP-6-6/PALY-2021 were implemented with the support of the Ministry of Culture and Innovation from the National Research, Development and Innovation Fund, and financed by the TKP2021-EGA and TKP2021-NVA grant programs. The research was supported by the STARTING 152904 grant of the National Research, Development and Innovation Office (NKFIH).

79 Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 1–3.

80 HUN-REN Energiatechnológiai Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet, 1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29–33.

81 BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Budapest

82 BME, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Budapest

Immunszorbens vizsgálatok fehérjekomponenseinek fejlesztése

Development of protein components for immunosorbent assays

Kovács Noémi, Jankovics Hajnalka⁸³

Összefoglaló

Az immunabszorbens vizsgálatok olyan specifikus immunanalitikai módszerek, amelyek főként antitesteket és antigéneket használnak a célmolekulák kimutatásához, esetleg mennyiségi meghatározásához. A vizsgálatok két fontos csoportját az ELISA-tesztek (Enzyme-Linked Immunosorbent Assay) és a laterális áramlású tesztek (Lateral Flow Assay, LFA) alkotják, amelyeket elsősorban a diagnosztikában, az élelmiszer-biztonsági vizsgálatokban és a kutatásban használnak, például hormonok, antitestek és vírusok kimutatására.

Működésük alapja az antigén-antitest kölcsönhatás, amelyet kihasználva a detektáláshoz használt szelektív érzékelőmolekulákat (immunszorbenseket) egy szilárd hordozóhoz vagy felülethez rögzítik, így ezek lokalizáltan képesek megkötni a mintában található célmolekulát. Ez az eredmény pedig különböző módszerekkel kimutatható. Az ELISA- és az LFA-tesztek esetén a detektáláshoz gyakran egy másodlagos antitestet használunk, amely a tormaperoxidáz enzimhez (HRP) kapcsolódik. A HRP-enzim képes katalizálni a kromogén szubsztát molekuláinak színváltozással járó oxidációját, ez pedig lehetővé teszi a tesztek eredményeinek egyszerű, kolorimetriás detektálását.

Az ELISA- és LFA-tesztek fehérjekomponenseinek előállítása komoly kihívást jelent a gyakorlatban. A szükséges immunglobulin antitestek gyártása bonyolult és költséges, mivel méretük nagy, szerkezetük pedig bonyolult az őket felépítő négy, diszulfidhíd-kötésekkel összekapcsolt polipeptidláncnak köszönhetően. Emellett a detektáláshoz használt HRP-enzim előállítása sem egyszerű, hiszen szerkezete szintén diszulfidhíd-kötéseket tartalmaz, továbbá biológiai aktivitásához több kofaktorra is szüksége van. Kutatásom célja olyan ELISA- és LFA-tesztekben használható fehérjekomponensek létrehozása, amelyek felhasználásával egy olyan modellrendszert fejleszthetnek, amelyben a célmolekula kimutatásához immunglobulinok helyett egyszerűbben előállítható egydoménes antitesteket, a HRP-enzim helyett pedig a kevésbé kofaktorfüggő APEX2 szójaperoxidázt használok. Munkám során olyan rekombináns fehérjéket terveztem, amelyek bakteriális úton, egyszerűen, olcsón, akár nagy hozammal, biológiailag aktív formában előállíthatók, továbbá nikkel-affinitás kromatográfiával egyszerűen tisztíthatók.

Summary

Immunoassays are specific immunological analytical methods that primarily use antibodies and antigens to detect, and in some cases quantify, target molecules. Two important groups of these assays are ELISA tests (Enzyme-Linked Immunosorbent Assay) and lateral flow assays (LFA), which are primarily used in diagnostics, food safety testing, and research, for example, to detect hormones, antibodies, and viruses. Their principle of operation is based on antigen-antibody interaction; to facilitate detection, selective sensor molecules (immunosorbents) are immobilized on a solid support or surface, enabling them to bind the target molecule in the sample in a localized area, and the result can be detected using various methods. In ELISA and LFA assays, a secondary antibody linked to horseradish peroxidase (HRP) is often used for detection. The HRP enzyme is capable of catalyzing the oxidation of chromogenic substrate molecules, which results in a color change, allowing for simple, colorimetric detection of the test results.

The production of protein components for ELISA and LFA tests poses a significant challenge in practice. The production of the necessary immunoglobulin antibodies is complex and costly due to their large size and complex structure. Furthermore, the production of the HRP enzyme used for detection is also not simple, as its structure contains disulfide bonds and it requires several cofactors for its biological activity. The

83 Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet, Bio-Nanorendszerek Kutatólaboratórium, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

aim of my research is to create protein components suitable for use in ELISA and LFA assays, which I can use to develop a model system in which I employ single-domain antibodies—which are easier to produce than immunoglobulins—for the detection of the target molecule, and APEX2 soybean peroxidase—which is less cofactor-dependent—instead of the HRP enzyme. In my work, I designed recombinant proteins that can be produced via bacterial expression in a simple, inexpensive, and high-yield process in a biologically active form, and that can be easily purified using nickel affinity chromatography.

Köszönetnyilvánítás

A kutatás 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.

A mechanokémiaailag aktivált kaolinit mikroszerkezeti és morfológiai tulajdonságai a puccolános reaktivitás tükrében

Microstructural and morphological properties of mechanochemically activated kaolinite in the light of pozzolanic reactivity

Kristófné Makó Éva, Őze Csilla, Kovács Margit, Pekker Péter⁸⁴

Összefoglaló

Egyre nagyobb az érdeklődés a mechanokémiaailag aktivált kaolin, mint a cement-kiegészítő anyagokhoz használt korszerű puccolán iránt. A jól meghatározott szerkezetű és morfológiájú, nagymértékben puccolános kaolinit-nanorészecskék költséghatékony előállítása azonban továbbra is kihívást jelent, mivel a kaolinit mikro- és nanoszintű mechanokémiai deformációjának és amorfizációjának mechanizmusa még nem teljesen ismert. Ebben a munkában a mechanokémiaailag aktivált kaolinit szerkezetét és morfológiáját részletesen vizsgáltuk röntgendiffrakcióval, Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiával, nagy felbontású transzmissziós elektronmikroszkópiával, szilárd fázisú mágneses magrezonancia-spektroszkópiával, valamint a fajlagos felület meghatározásával. A puccolános reaktivitást a reaktív szilícium-dioxid-tartalom, a hidratált pép korrigált kémiaailag kötött víztartalma (BW) és a kötőanyag (amelyben a hagyományos portlandcement (OPC) 10%-át aktivált kaolinnal helyettesítettük) 28 napos nyomószilárdsága alapján jellemeztük.

A mechanokémiai aktiválás első szakaszában (2,2 Wh/g fajlagos energiaigényig) a kaolinit szerkezetének torzulása és delaminációja főként a (001) sík mentén ment végbe, ami mérsékelt puccolános reaktivitást eredményezett, és a kötőanyag nyomószilárdsága nem érte el az OPC referenciaértékét. A második szakaszban (2,2–6,7 Wh/g között) az aktiválás jelentős szerkezeti leépülést okozott a kaolinitrétegek belsejében a $[hk0]$ irányok mentén, ami nagy puccolános reaktivitáshoz vezetett, és a kötőanyag nyomószilárdsága nagyobb lett az OPC referenciánál. A harmadik szakaszban (6,7–20,3 Wh/g között) a kaolinit amorfizálódásának mértéke már nagyon lassan nőtt, és egyre intenzívebb agglomeráció lépett fel, ami a puccolános reaktivitás fokozatos csökkenését okozta. Az energiafogyasztás minimalizálása és a puccolános aktivitás maximalizálása közötti optimum elérésére egy 45 perces őrlési folyamat (6,7 Wh/g) bizonyult kellően nagy reaktivitásúnak (12,2 g/100 g BW és az OPC referencia szilárdság 118%-a), amikor a kaolinit mechanokémiai átalakulását a belső rétegszerkezet szinte teljes amorfizációja jellemezte. Itt a reaktív szilícium-dioxid-tartalom elérte a teljes SiO_2 -tartalom közel 90%-át, valamint számottevő volt a négyes és ötös koordinációs számú alumíniumionok aránya.

Summary

There is a growing interest of mechanochemically activated kaolin as advanced pozzolan for supplementary cementitious materials. The cost-efficient production of highly pozzolanic kaolinite nanoparticles with well-defined structure and morphology, however, remains challenge due to the lack of understanding of the mechanochemical deformation and amorphization state of kaolinite on the micro- and nanoscale. In this work, the structure and morphology of the mechanochemically activated kaolinite were thoughtfully examined by X-ray diffraction, Fourier transform infrared spectroscopy, high-resolution transmission electron microscopy, solid-state nuclear magnetic resonance spectroscopy, as well as by the determination of the specific surface area. The pozzolanic reactivity was characterized by the reactive silica content, the corrected chemically bound water content of hydrated pastes (BW), and the 28-day compressive strength of binders, in which 10% of ordinary Portland cement (OPC) was substituted by activated kaolins.

In the first period of the mechanochemical activation (up to 2.2 Wh/g of specific energy demand), the distortion and delamination of the kaolinite structure occurred along the (001) plane, which was insufficient for the binder to achieve a higher compressive strength than the OPC reference due to the moderate

84 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

pozzolanic reactivity. In the second period (between 2.2-6.7 Wh/g), the activation caused significant structural degradation inside the kaolinite layers along the $[hk0]$ directions, which resulted in an increase in the compressive strength of the binder above the OPC reference value owing to the high pozzolanic reactivity. In the third period (between 6.7-20.3 Wh/g), the degree of kaolinite amorphization increased very slowly and increasingly intense agglomeration of particles occurred, which caused a gradual decrease in the pozzolanic reactivity. To attain an optimal balance between minimizing energy consumption and maximizing pozzolanic activity, a 45-min grinding process (6.7 Wh/g) proved to be highly reactive (12.2 g/100 g BW and 118% of the OPC reference strength), when the mechanochemical deformation and amorphization state of kaolinite can be characterized by the almost complete amorphization of the inner layer structure, with a reactive silica content of nearly 90% of the total SiO_2 content and a significant four- and five-fold coordinated aluminum environment.

Laboratóriumi méretű PGSS-berendezés fejlesztése polietilén-glikol – ibuprofen modellrendszer segítségével

Development of a laboratory-scale PGSS apparatus
using a polyethylene glycol–ibuprofen model system

Luterán Gergő, Arany Dóra, Kőrösi Márton⁸⁵

Összefoglaló

A mikro- és nanoméretű részecskék előállítása fontos szerepet játszik a modern ipar számos területén, például az élelmiszeriparban, a gyógyszeriparban, a kozmetikumokban, valamint a festékek és polimerek gyártásában. Magas hozzáadott értékű termékek esetében a szuperkritikus szén-dioxidot alkalmazó eljárások lehetőséget kínálnak szűk szemcseméret-eloszlású mikronizált termékek előállítására. A szerves oldószert nem használó PGSS-technológia (*Particles from Gas Saturated Solutions*) méretnövelhető és folyamatos üzemmódban is működtethető [1, 2]. Az eljárás során nagynyomású szén-dioxid (CO_2) oldódik a mintába, amely csökkenti a vizsgált anyag olvadáspontját és viszkozitását, majd egy fúvókán történő hirtelen expanzió gyors megszilárdulást és finom részecskék képződését eredményezi. Az üzemi paraméterek beállítását segíti a mikronizálni kívánt anyag szén-dioxid nyomás alatti olvadási viselkedésének ismerete. Ezen megfontolásokból kiindulva elsőként a tiszta, 3000 Da molekulatömegű polietilén-glikol (PEG 3000) olvadási hőmérsékletét határoztuk meg 2,5–30 MPa nyomástartományban. A kísérletekből kapott eredmények jól illeszkedtek a szakirodalomban leírt tendenciákhoz, valamint megfigyelhettük a szén-dioxid olvadáspont-csökkentő hatását is [3]. Majd a PEG 3000 és a racém ibuprofen különböző összetételű keverékének fázisegyensúlyi viselkedését vizsgáltuk 10 MPa nyomáson. Az eredmények alapján valószínűsíthető, hogy a két komponens eutektikus rendszert alkot. Munkánk célja volt egy laboratóriumi méretű PGSS-berendezés kialakítása és üzembe helyezése. A kialakított készülékkel sikeresen megvalósítottuk szuperkritikus szén-dioxid alkalmazásával PEG 3000, PEG 6000, valamint 10% ibuprofent tartalmazó PEG 3000 kompozit por előállítását. A berendezésen elvégzendő további fejlesztések elsődleges célja a robusztusabb kialakítás és a vizsgálható modellvegyületek körének kibővítése.

Summary

The production of micro- and nanosized particles plays an important role in several areas of modern industry, such as the food sector, pharmaceuticals, cosmetics, as well as in the manufacturing of paints and polymers. In the case of high value-added products, supercritical carbon dioxide-based processes provide the possibility to obtain micronized powders with a narrow particle size distribution. The PGSS (*Particles from Gas Saturated Solutions*) technology does not use any organic solvents, and it can be scaled up and operated in continuous mode [1, 2]. In this process, high-pressure carbon dioxide (CO_2) dissolves into the molten material, reducing its melting point and viscosity. Subsequent rapid expansion through a nozzle results in fast solidification and the formation of fine particles. The adjustment of operating parameters is facilitated by knowledge of the melting behavior of the material under pressurized CO_2 . Based on these considerations, first we determined the melting temperature of pure PEG 3000 (polyethylene glycol with a molecular weight of 3000 Da) in the pressure range of 2.5–30 MPa. As a result, we observed the melting point depression effect of CO_2 , and our results fit well with the trends described for similar systems [3]. In the next step, we investigated the phase equilibrium behavior of the PEG 3000–racemic ibuprofen system at 10 MPa. The results suggest that the two components form a eutectic system. The aim of our work was to construct and operate a laboratory scale PGSS apparatus. The system we built was capable of producing powders from PEG 3000, PEG 6000, as well as PEG 3000 composites containing 10% ibuprofen. Further

85 Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

development of the apparatus primarily aims at a more robust setup and the expansion of the circle of model compounds to be studied.

Irodalomjegyzék/References

- [1] A. V. M. Nunes, C. M. M. Duarte, *Materials*. 2011, 4 (11), 2017–2041. DOI: <https://doi.org/10.3390/ma4112017>.
- [2] E. Weidner, *Journal of Supercritical Fluids*. 2009, 47 (3), 556–565. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.supflu.2008.11.009>.
- [3] I. Pasquali et al, *Int J Pharm*. 2008, 356 (1–2), 76–81. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2007.12.048>.

Köszönetnyilvánítás/Acknowledgements

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 közös támogatásával, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatallal kötött támogatási szerződés alapján valósult meg, amelyet A.D. hálásan köszön.

K.M. hálásan köszöni a Nemzeti Kutatási és Innovációs Hivatal támogatását (OTKA PD 23 146145).

Gépi látó platform fejlesztése tabletták minőségének vizsgálatára

Development of a machine vision platform for the quality assessment of tablets

Madarász Lajos, Mészáros Lilla Alexandra, Nagy Zsombor Kristóf⁸⁶

Összefoglaló

A folyamatos gyógyszeripari gyártástechnológiák térnyerésével egyre nagyobb igény mutatkozik a roncsolásmentes, valós idejű minősbiztosítási módszerek iránt. Kutatásunk célja egy gépi látás alapú, UV-megvilágítást alkalmazó rendszer és egy felhasználóbarát képelemző platform fejlesztése volt szilárd gyógyszerformák hatóanyagtartalmának (API) in-line meghatározására. A mérőrendszert egy átalakított 3D-nyomtatóból, egy UV- és VIS-tartományban is érzékeny ipari kamerából, valamint egy 365 nm-es UV-lámpából alakítottuk ki. A mérések kiértékelésére egy saját fejlesztésű, drag-and-drop jellegű képelemző platformot hoztunk létre, amely programozási tudás nélkül teszi lehetővé az automatizált, valós idejű vizsgálatot. A kísérletek során 0–6 m/m% canrenone-hatóanyagtartalmú, mikrokristályos cellulóz alapú tablettákat vizsgáltunk szállítószalagon (0,206 m/s sebességgel), 30 fps képalkotási frekvencia mellett. Az eltérő UV-abszorpció miatt a tabletták felületén létrejövő szürkeárnyaltos intenzitáseloszlásokból kinyert hisztogramokat részleges legkisebb négyzetek (PLS) regressziós modellek bemeneteként használtuk. A prediktált és névleges API-tartalom között kiváló lineáris összefüggést kaptunk (RMSEC: 0,20 m/m%, RMSECV: 0,24 m/m%, RMSEP: 0,27 m/m%), a 4 m/m%-os célkoncentrációnál a relatív predikciós hiba mindössze 6,78% volt. A kifejlesztett rendszer gyors, nagy áteresztőképességű, roncsolásmentes és költséghatékony alternatívát nyújt az API-tartalom in-line meghatározására.

Summary

With the expansion of continuous pharmaceutical manufacturing technologies, there is an increasing demand for non-destructive, real-time quality assurance methods. This research aimed to develop a machine vision system using UV illumination and a user-friendly image analysis platform for the in-line determination of the active pharmaceutical ingredient (API) content of solid dosage forms. The measurement setup was built from a modified 3D printer, an industrial camera sensitive in both UV and VIS ranges, and a 365 nm UV lamp. For data evaluation, a custom-developed, drag-and-drop image analysis platform was created, enabling automated, real-time inspection without requiring programming skills. During the experiments, tablets containing 0–6 w/w% canrenone API and microcrystalline cellulose excipient were investigated on a conveyor belt (0.206 m/s) with an imaging speed of 30 fps. Due to differences in UV absorption, distinct grayscale intensity distributions appeared on the tablet surfaces. The extracted histograms were used as inputs for partial least squares (PLS) regression models. A strong linear correlation was found between the predicted and nominal API content (RMSEC: 0.20 w/w%, RMSECV: 0.24 w/w%, RMSEP: 0.27 w/w%), with a relative prediction error of only 6.78% at the 4 w/w% target concentration. The developed system provides a fast, high-throughput, non-destructive, and cost-effective alternative for in-line API content prediction.

Köszönetnyilvánítás/Acknowledgements

A kutatás a Kulturális és Innovációs Minisztérium EKÖP-25-4-II-BME-91 kódszámú Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alaphól finanszírozott szakmai támogatásával készült. Supported by the EKÖP-25-4-II-BME-91 University Research Scholarship Program of the Ministry for Culture and Innovation from the source of the National Research, Development and Innovation Fund.

⁸⁶ Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

A PHSRN-szinergiapeptid sejttapadásra gyakorolt hatásának vizsgálata valós idejű jelölésmentes technológiákkal

Investigation of the effect of the PHSRN synergy peptide on cell adhesion using real-time label-free technologies

*Beatrix Magyaródi⁸⁷, Kinga Dóra Kovács⁸⁸, Anna Balogh⁸⁹, Ildikó Szabó⁹⁰,
Ferenc Vonderviszt⁹¹, Inna Székács⁹², Szilvia Bősze⁹³, Róbert Horváth⁹⁴*

Összefoglaló

Az extracelluláris mátrix (ECM) egyik legfontosabb adhéziós motívuma az RGD (Arg-Gly-Asp) szekvencia, amely kulcsszerepet játszik a sejtek ECM-hez való tapadásában. Ezenkívül a fibronectin tartalmaz egy másik rövid peptidszekvenciát, a PHSRN-t (Pro-His-Ser-Arg-Asn), amely az RGD jelenlétében szinergikusan fokozza a sejttapadást, önmagában azonban nem elegendő a sejtek adhéziójának kiváltásához. Korábbi vizsgálatok kimutatták, hogy az RGD-motívumok közötti távolság csökkentése növeli a sejttapadást, azonban ez a hatás egy bizonyos ponton telítődik. Kísérleteink azonban azt mutatták, hogy ebben a telített állapotban a PHSRN jelenléte tovább növeli a sejttapadást, ami további bizonyítékot szolgáltat az RGD és a PHSRN közötti szinergikus kölcsönhatásra.

Kutatásunk célja annak vizsgálata, hogy az oldatban jelen lévő különböző koncentrációjú PHSRN-peptid hogyan befolyásolja a HeLa sejtek tapadását RGD-t és fibronectint tartalmazó felületeken. A mérésekhez jelölésmentes optikai bioszenzorokat és mechanikai erőmérésen alapuló módszereket alkalmaztunk, amelyek lehetővé tették az élő sejtek kvantitatív és valós idejű analízisét.

Vizsgálatunk központi kérdése az, hogy a PHSRN – amikor szintetikus peptidként oldatban alkalmazzuk – képes-e ugyanazt a szinergikus hatást kifejteni, mint amikor felülethez immobilizált formában van jelen.

Summary

One of the most essential adhesive motifs of the extracellular matrix (ECM) is the RGD (Arg-Gly-Asp) sequence, which plays a crucial role in cell attachment to the ECM. Additionally, fibronectin contains another short peptide sequence, PHSRN (Pro-His-Ser-Arg-Asn), that synergistically enhances cell adhesion in the presence of RGD, while on its own, it is insufficient to induce cell adhesion. Previous studies showed that decreasing RGD spacing enhances cell adhesion, but this effect saturates beyond a certain point. However, our experiments revealed that in this saturated state, the presence of PHSRN further increases adhesion, providing additional evidence of the synergistic interaction between RGD and PHSRN.

Our research aims to investigate how various concentrations of PHSRN peptide, present in solution, influence the adhesion of HeLa cells on surfaces expressing RGD and fibronectin. For our measurements, we employed label-free optical biosensors and mechanical force-based methods, which enabled quantitative and real-time analysis of live cells.

87 Nanobiosensorics Laboratory, HUN-REN Centre for Energy Research, 1121 Budapest, Konkoly-Thege Miklós Street 29–33; Doctoral School of Chemical Engineering and Material Science, University of Pannonia, Veszprém

88 Nanobiosensorics Lab., HUN-REN EK, Budapest; Department of Biological Physics, ELTE, Budapest

89 Nanobiosensorics Lab., HUN-REN EK, Budapest; Department of Biological Physics, ELTE, Budapest

90 HUN-REN–ELTE Peptide Chemistry Research Group, ELTE, Budapest; MTA-TTK Lendület “Momentum” Peptide-Based Vaccines Research Group, Institute of Materials and Environmental Chemistry, HUN-REN Research Centre for Natural Sciences, Budapest

91 Bio-Nanosystems Laboratory, University of Pannonia, Veszprém

92 Nanobiosensorics Lab., HUN-REN EK, Budapest

93 HUN-REN–ELTE Peptide Chemistry Research Group, Hungarian Research Network, Eötvös Loránd University, 1117 Budapest; MTA-TTK Lendület “Momentum” Peptide-Based Vaccines Research Group, Institute of Materials and Environmental Chemistry, HUN-REN Research Centre for Natural Sciences, 1117 Budapest; Department of Genetics, Cell- and Immunobiology, Faculty of Medicine, Semmelweis University, 1089 Budapest

94 Nanobiosensorics Lab., HUN-REN EK, Budapest

The central question of our study is whether PHSRN, when employed as a synthetic peptide in solutions, can exert the same synergistic effect as when immobilized on a surface.

Köszönetnyilvánítás/Acknowledgments

This project was supported by the Momentum (Lendület) Program of the Hungarian Academy of Sciences and the National Research, Development, and Innovation Fund (NKFIH) of Hungary under grant TKP2021-EGA-04, ADVANCED 153121, and 2024-1.2.10-TÉT-IPARI-IL-2024-00030.

Azonos viszkozitású Group I és Group II bázisolaj-keverékek tribológiai vizsgálata nanorészecskék és nanorészecske-kombinációk felhasználásával

Tribological investigation of equal-viscosity Group I and Group II base oil blends using nanoparticles and combinations of nanoparticles

Marsicki Márk⁹⁵

Összefoglaló

A kutatás célja az azonos viszkozitással rendelkező, de különböző bázisolaj-csoportba tartozó olajminták vizsgálata nanorészecskék és nanorészecske-kombinációk felhasználásával a tribológiai mérőszámok csökkentése érdekében és az azonos viszkozitással rendelkező, különböző bázisolaj-csoportba tartozó olajok eltérő hatásának alátámasztása különböző nanorészecskékkel. A kutatás során három különböző nanorészecske került felhasználásra, melyek a cirkónium-dioxid (ZrO_2), réz-oxid (CuO) és szilícium-dioxid (SiO_2) voltak. Emellett vizsgálatok történtek ZrO_2+SiO_2 , valamint $CuO+SiO_2$ nanorészecskékkel a szilícium-dioxid erősítő hatásának alátámasztására. A vizsgálatok egy Optimol SRV[®]5 tribométeren történtek 100 N terheléssel és 100 °C hőmérsékleten, 50 Hz frekvenciával és 1 mm-es lökethosszal annak érdekében, hogy a mérések teljes mértékben összehasonlíthatók legyenek. A kiértékelés során felhasználásra kerültek a tribométer által szolgáltatott adatok, digitális és konfokális mikroszkóppal készített felvételek, valamint a pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) és az energiadiszperzív röntgenspektroszkópiával (EDX) készült felvételek. A kiértékelés során értékeltük a súrlódási abszolút integrál, a tapadási súrlódási együttható, a golyó kopásának nagysága, a felhasznált tárcsa és golyó próbatest kopásának térfogati eredményei. Az eredmények alapján elmondható, hogy a különböző bázisolajokba kevert nanorészecskék bázisolaj csoportonként eltérő hatást mutattak az egyadalekos és keverék minták esetében is, de minden esetben javítottak a referenciaként szolgáló adalékmentes bázisolajhoz képest. Ezenfelül a nanorészecske-keverékek esetében alátámasztásra került, hogy a SiO_2 nanorészecske javító hatással bír más nanorészecskékkel együtt alkalmazva.

Summary

The aim of the research is to investigate oil samples with identical viscosity but belonging to different base oil groups, using nanoparticles and combinations of nanoparticles in order to reduce tribological performance parameters, and to demonstrate the differing effects of various base oil groups with identical viscosity when combined with different nanoparticles.

During the study, three types of nanoparticles were used: zirconium dioxide (ZrO_2), copper oxide (CuO), and silicon dioxide (SiO_2). In addition, experiments were conducted with ZrO_2+SiO_2 and $CuO+SiO_2$ combinations to confirm the enhancing effect of silicon dioxide.

The experiments were carried out using an Optimol SRV[®]5 tribometer under a load of 100 N, at a temperature of 100 °C, with a frequency of 50 Hz and a stroke length of 1 mm, ensuring full comparability of the measurements. The evaluation was based on data provided by the tribometer, as well as images obtained through digital and confocal microscopy, and analyses performed using scanning electron microscopy (SEM) and energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX).

During the evaluation, the frictional absolute integral, coefficient of adhesion friction, wear magnitude of the ball, and the volumetric wear results of both the disc and ball specimens were determined. Based on the results, it can be concluded that nanoparticles added to different base oils exhibited varying effects depending on the base oil group, both in single-additive and combined samples; however, in all cases, they improved performance compared to the additive-free reference base oil. Furthermore, it was confirmed that SiO_2 nanoparticles have an enhancing effect when used in combination with other nanoparticles.

95 Széchenyi István Egyetem, Audi Hungaria Járműmérnöki Kar, 9026 Győr, Egyetem tér 1.

Kitozánnal borított mezopórusos szilikabevonatok színezékvételének és -leadásának tanulmányozása

Studying the dye uptake and release process of
a mesoporous silica-chitosan bilayer nanocoating system

Péter Márton⁹⁶, Simon Titkó⁹⁷, András Marton⁹⁸, Bálint Fodor⁹⁹, Péter Basa¹⁰⁰, Gergely Stankovits¹⁰¹,
Benjámín Gyarmati¹⁰², János Rohonczi¹⁰³, Tamás Szabó¹⁰⁴, Dániel Zámbo¹⁰⁵, Zoltán Hórvölgyi¹⁰⁶

Összefoglaló

Kétrétegű nanobevonat-modellrendszereket fejlesztettünk ki egy kationos modellhatóanyag (rodamin 6G színezék) felvételi és leadási kinetikájának vizsgálatához. A rendszerek előállításához üveghordozókra egy 130 nm vastag mezopórusos szilikaréteget alakítottunk ki (30%-os porozitás és 1,8 nm-es átlagos pórusugár), majd ezt egy 470 nm vastag kitozánbevonattal fedtük be (molekulatömeg: 390 kDa, acetilezettségi fok: 18–19%). A modellrendszereket a színezék vizes oldatában impregnáltuk (6,0; 7,4 és 8,8 pH-jú oldatokban, 12 °C, 22 °C és 32 °C hőmérsékleten), hogy tanulmányozzuk az elektrosztatikus kölcsönhatások és a pórusszerkezet hatását a színezékvételre. A rodamin 6G felhalmozódásának kinetikáját pszeudo-elsőrendű és pszeudo-másodrendű modellekkel jellemeztük, míg a leadási profilt (pH 7,4-en és 25 °C-on mérve) a Korsmeyer–Peppas- és a Higuchi-modellekkel írtuk le. A Higuchi-modell illesztésének eredményei rávilágítottak arra, hogy a leadási görbék két elkülönülő lineáris szakaszra oszthatók: egy kezdeti, nagyobb meredekségű gyors leadási szakaszra, amelyet egy kisebb meredekségű, elnyújtott leadási szakasz követ. Úgy találtuk, hogy a meredekségértékek és azok változásai erősen függtek az impregnálás körülményeitől: a lúgos pH-n történő impregnálás nemcsak a színezékvétel mértékét növelte, hanem a leadást is gyorsította. Az eredmények hozzásegíthetnek az ilyen típusú bevonatrendszerek alkalmazásorientált tervezésének megvalósításához.

Summary

To investigate the loading and release dynamics of a cationic model molecule (rhodamine 6G dye), two-layer nanocoating model systems were developed. These systems were prepared by applying a ca. 130 nm thick mesoporous silica layer (featuring a 30% porosity and a 1.8 nm average pore radius) onto glass substrates and covering them with a ca. 470 nm thick chitosan coating (molecular weight 390 kDa, degree of acetylation 18–19%). The coatings were impregnated in the aqueous solution of the dye (pH 6.0, 7.4 and 8.8 on 12°C, 22°C and 32°C) to study the effect of electrostatic interactions and morphology on the dye uptake. The dye accumulation kinetics were evaluated by applying pseudo-first-order and pseudo-second-order models, whereas the release profile (measured at pH 7.4 and 25°C) was described using the Korsmeyer–Peppas and Higuchi models. The Higuchi model indicated that the experimental release curves could be divided into two distinct linear regions: an initial “fast rate” stage with a higher slope, followed by a “slow rate” stage with a reduced slope. Remarkably, these slope values and their variations were heavily

96 Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.; HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, 1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29–33.

97 Semilab Félvezető Fizikai Laboratórium Zrt., 1117 Budapest, Pirelle Kornélia u. 2.

98 Semilab Félvezető Fizikai Laboratórium Zrt., Budapest

99 Semilab Félvezető Fizikai Laboratórium Zrt., Budapest

100 Semilab Félvezető Fizikai Laboratórium Zrt., Budapest

101 BME, Budapest

102 BME, Budapest

103 Eötvös Loránd Tudományegyetem, 1117 Budapest, Pázmány Péter stny. 1/A.

104 HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Budapest

105 HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Budapest

106 BME, Budapest

dependent on the initial impregnation parameters; specifically, impregnation at an alkaline pH not only maximized dye uptake but also made the subsequent release faster. The results may help to implement application-oriented design of this type of coating systems.

Acknowledgments

Projects no. TKP-9-8/PALY-2021 and TKP-6-6/PALY-2021 have been implemented with the support provided by the Ministry of Culture and Innovation of Hungary from the National Research, Development and Innovation Fund, financed under the TKP2021-EGA and TKP2021-NVA funding schemes. Further support was provided by the National Research, Development and Innovation Office (Project no.: EKÖP-25-4-1-BME-132, FK 138029 and STARTING 152904). B. Gyarmati acknowledges the postdoctoral scholarship of BME József Varga Foundation.

Hatóanyag-leadás szabályozása poliaszpartamid alapú szálak mátrixokkal

Controlling drug release using polyaspartamide based fibrous matrices

Mihalovics Bence, Gyarmati Benjámin, Szilágyi András¹⁰⁷

Összefoglaló

A gyógyszerkutatás fejlődésével új problémák kerültek előtérbe a hatóanyagok célba juttatásának szempontjából. Az új hatóanyagok többsége rossz vízoldhatósággal és/vagy gátolt felszívódással rendelkezik, amelyek leküzdésére időben elnyújtott, a terápiás célnak megfelelően kontrollált hatóanyag-leadásra van szükség. A szabályozott hatóanyag-leadás csökkenti a hatóanyag-koncentráció túlzott ingadozását, csökkenti az adagolás gyakoriságát, ezzel növelve a beteg komfortérzetét és együttműködésének valószínűségét. A hatóanyag szabályozásának célszerű módja különböző oldhatóságú polimerekből előállított amorf szilárd diszperziók (ASD) alkalmazása. Az ASD-k a hatóanyagot a polimer mátrixban amorf formában elosztatva tartalmazzák, így annak kioldódását a mátrix duzzadása, oldódása, esetleges degradációja határozza meg [1].

ASD-k előállítására korszerű lehetőség az elektrosztatikus szálképzés. A technológia alapja, hogy egy polimer oldatot vezetünk át egy nagyfeszültségre kapcsolt szálképző kapillárison. Az oldatból kilépő szál egy földelt kollektoron gyűjtjük. A szálképzést a polimer oldat fizikai-kémiai tulajdonságai (viszkozitás, felületi feszültség és vezetőképesség), a technológiai paraméterek (a polimer oldat térfogatárama, az elektromos feszültség és a szálképző kapilláris–kollektor távolság), valamint a környezeti tényezők (hőmérséklet, relatív páratartalom) befolyásolják [2].

Munkánk célja egy időben elnyújtott hatóanyag-leadást biztosító polimer mátrix előállítása volt elektrosztatikus szálképzéssel. Modellhatóanyagként a rosszul oldódó és vízben kémiaiilag instabil rifampicint alkalmaztunk. A hatóanyag-leadás szabályozását különböző oldhatósággal rendelkező alkil- és hidroxialkil-oldalcsoportokkal módosított poliaszpartamid-származékok előállításával értük el. Az oldalcsoportok lánc hosszának és egymáshoz viszonyított arányának változtatásával oldódás, duzzadás és diffúzió által kontrollált hatóanyag-leadást értünk el. A 60 perc alatt kioldódott hatóanyag mennyiségét 10 és 60% között szabályoztuk.

Summary

With the advancements made in pharmaceutical development new hurdles are identified in drug administration. New active pharmaceutical ingredients (API) have either poor water solubility, low permeability, or both, leading to the need of high and regular dosing. Controlled drug delivery through the use of amorphous solid dispersions (ASD) is a possible solution to overcome these problems. In ASDs the API is dispersed in an amorphous form in a way that drug release is controlled mainly by the dissolution, degradation and swelling of the matrix [1].

Electrostatic fiber formation (electrospinning) is a modern technique for the production of ASDs. Electrospinning is based on the electro-hydrodynamic phenomenon in which a polymer solution can eject a jet of liquid when exposed to an external electrostatic field. The polymer solution flows through a capillary (emitter) connected to a high voltage, and a polymer fiber is drawn towards a grounded plate (collector). The whole process is governed by the physico-chemical properties of the solutions (viscosity, surface tension, and conductivity), the technological parameters (flow rate of the polymer solution, applied voltage, and collector-emitter distance), and the ambient conditions (temperature, relative humidity) [2]. The aim of our work was the development of controlled release dosage forms using electrospinning. As a model drug rifampicin, an API with poor water solubility and stability, was used. Controlled drug release was achieved with using polyaspartamide (PASPAm) derivatives of a wide range of solubility. PASPAm were

107 Soft Matters Group, Department of Physical Chemistry and Materials Science, Faculty of Chemical Technology and Biotechnology, Budapest University of Technology and Economics, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

synthesised and modified with alkyl as well as hydroxyalkyl side chains of different lengths. By changing either the length or the molar ratio of the side groups, different drug release mechanisms were achieved, namely diffusion-, swelling-, and dissolution-controlled release. The amount of dissolved drug after 60 min was controlled between 10 and 60 %.

Irodalomjegyzék/References:

[1] Pahuja, P. et. al.: *Expert Opin Drug Deliv.*, 9, 837-861 (2012)

[2] Cs. Németh et. al.: *Eur. Polym. J.*, 130, 109624 (2020)

Köszönetnyilvánítás/Acknowledgements

A munka a DKÖP-25-1-BME-60, a TKP-9-8/PALY-2021 és az NKKP ADVANCED 152811 számú projektek a Kultúra

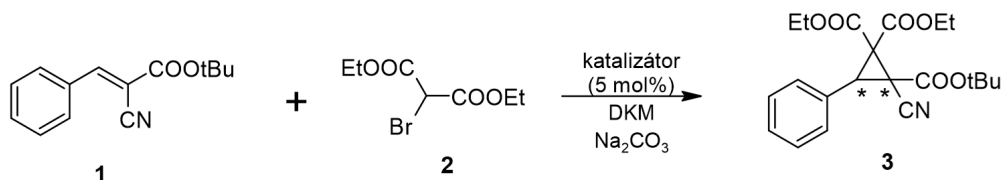
Királis ciklopropán-származékok Krapcho-dekarboxilezésének vizsgálata

Investigation of Krapcho decarboxilation of chiral cyclopropane derivatives

Miklós Bence, Varga Bertalan, Rapi Zsolt¹⁰⁸

Összefoglaló

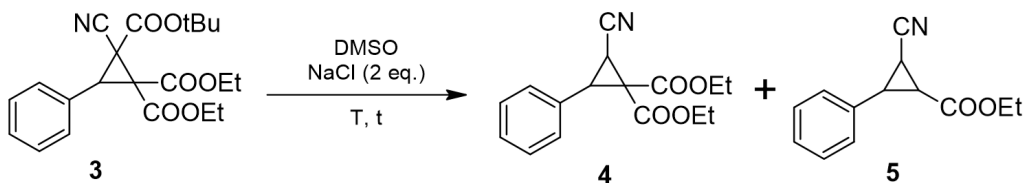
A ciklopropángyűrű számos természetes vegyületben és biológiailag aktív molekulában előforduló szerkezeti egység. Az ilyen vegyületek gyakran jelentős biológiai aktivitással rendelkeznek, például vírus-, baktérium- vagy tumorelles hatást mutathatnak [1,2]. A ciklopropán-származékok emellett a szintetikus szerves kémiában is fontos intermedierek, amelyeket számos szintézis során sikeresen alkalmaztak [3–]. Előállításukra egy gyakran alkalmazott módszer a nukleofil addíciós gyűrűzási reakció, amelyet a szakirodalomban MIRC-reakciónak (Michael-initiated ring closure) neveznek, és amely megvalósítható aszimmetrikus fázistranszfer körülmények között. Kutatócsoportunk számos királis ciklopropán-származékot állított elő királis koronaéterek jelenlétében. Kiemelendő ezek közül a *tert*-butil-2-ciano-3-fenilakrilát (**1**) reakciója dietil-brómmalonáttal (**2**), ahol 89%-os enantiomerfelesleget is sikerült elérni (1. ábra) [6]. A **3** vegyület és analogonjai továbbalakításához a ciklopropángyűrűn található csoportok szelektív lebontása lehet szükséges, ami kihívást okozhat.



1. ábra. Aszimmetrikus MIRC-reakció

Kutatásom során a megfelelő ciklopropán-származékokat fázistranszfer körülmények között MIRC-reakcióval állítottam elő jó termeléssel. A kapott benzilidén-ciánecetészter-származékok (pl. **1**) dekarboxilezését Krapcho-féle körülmények között vizsgáltam, amely során elsősorban a hőmérséklet, a reakcióidő, valamint a szervetlen só minőségének és mennyiségének hatását tanulmányoztam. Megállapítottam, hogy megfelelően megválasztott paraméterek esetén a dekarboxilezés szelektíven vezethet egyszeresen (**4**) vagy kétszeresen dekarboxilezett ciklopropán-származékokhoz (**5**). Alacsonyabb hőmérsékleten elsősorban az egyszeresen dekarboxilezett **4** termék keletkezett, míg magasabb hőmérsékleten a kétszeres dekarboxileződés vált dominánssá. Továbbá megállapítottam, hogy az észtercsoportban megtalálható alkilcsoport rendiségének növelése a Krapcho-féle dekarboxilezést elősegíti, és szelektivitás is érhető el más típusú észterek együttes jelenléte esetén. A dekarboxilezést királis mintákkal is elvégeztem, a sztereokémiai következményeket királis HPLC-méréssel vizsgáltam. A keletkező vegyületek potenciálisan továbbalakíthatók nem természetes β - vagy γ -aminosavakká, és a reakciókörülmények további optimalizálásával a gyógyszeripar számára is alkalmazható szintézisútvonal dolgozható ki.

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



2. ábra. 2-*tert*-Butil-1,1-dietil-2-ciano-3-fenilciklopropán-1,1,2-trikarboxilát (1) dekarboxilezése

Summary

The cyclopropane ring is a structural unit that occurs in numerous natural compounds and biologically active molecules. Such compounds often exhibit significant biological activity, for example antiviral, antibacterial, or antitumor effects [1,2]. Cyclopropane derivatives are also important intermediates in synthetic organic chemistry and have been successfully applied in numerous preparative syntheses [3–5]. One commonly used method for their preparation is the nucleophilic addition ring-closure reaction, known in the literature as the MIRC reaction (Michael-initiated ring closure), which can be carried out under asymmetric phase-transfer conditions. Our research group has prepared several chiral cyclopropane derivatives in the presence of chiral crown ethers. A noteworthy reaction is the reaction of *tert*-butyl-2-cyano-3-phenylacrylate (1) with diethyl bromomalonate (2), where enantiomeric excesses of up to 89% were achieved (Figure 1) [6]. However, the selective cleavage of the substituents located on the cyclopropane ring can pose challenges during further transformations.

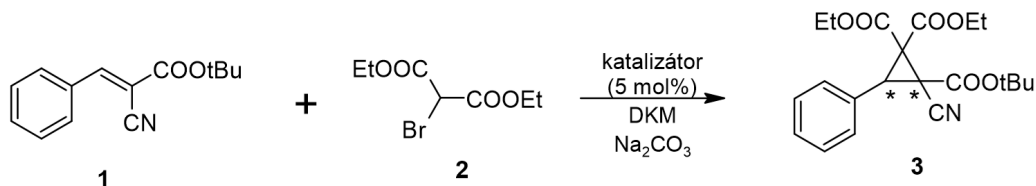


Figure 1. Asymmetrical MIRC-reaction

During my research, the appropriate cyclopropane derivatives were synthesized under phase-transfer conditions via the MIRC reaction in good yields. The decarboxylation of the obtained benzyldiene cyanoacetate derivatives were investigated under Krapcho conditions, during which the effects of temperature, reaction time, and the type and amount of the inorganic salts were primarily studied. I found that under appropriately chosen conditions, the decarboxylation can selectively lead to either mono-decarboxylated (4) or double-decarboxylated cyclopropane derivatives (5). At lower temperatures, the mono-decarboxylated product 4 was mainly formed, whereas at higher temperatures the double decarboxylation became dominant. Furthermore, it was established that increasing the degree of substitution of the alkyl group in the ester moiety facilitates the Krapcho decarboxylation, and selectivity can also be achieved in the presence of other types of esters. The decarboxylation was also carried out with chiral samples, and the stereochemical consequences were investigated by chiral HPLC measurements. The resulting compounds can potentially be further transformed into non-natural β - or γ -amino acids, and with further optimization of the reaction conditions, a synthetic route applicable for the pharmaceutical industry may be developed.

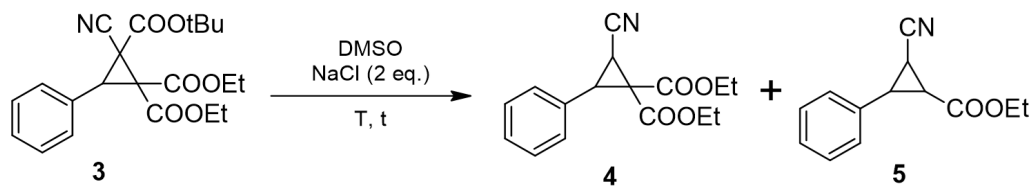


Figure 2 Decarboxylation of 2-tert-butyl-1,1-diethyl-2-cyano-3-phenylcyclopropane-1,1,2-tricarboxylate (1)

Irodalomjegyzék/References

- [1] Faust, R.; Angewandte Chemie – International Edition, 2001, (40), 2251-2253.
- [2] Salaün, J.; Topics in Current Chemistry, 2000, (207), 1-67.
- [3] Reissig, H. U.; Topics in Current Chemistry, 1988, (144), 73-135.
- [4] Nonhebel, D. C.; Chemical Society Reviews, 1993, (22), 347-359.
- [5] Goldschmidt, Z.; Crammer, B.; Chemical Society Reviews, 1988, (17), 229-267.
- [6] Orbán, I.; Varga, B.; Bagi, P.; Holczbauer, T.; Rapi, Zs. European Journal of Organic Chemistry 2022, 2022, e202200112.

A Human-Centric Approach to Degradation-Aware Scheduling in Reconfigurable Manufacturing System

Nadaffard Ahmadreza, Ruppert Tamás¹⁰⁹

Summary

Nowadays, achieving higher levels of flexibility in manufacturing systems is necessary to maintain and enhance competitiveness. To meet customer demand for personalised products, the structure of production systems and the corresponding software should be reconfigured. Accordingly, a new generation of production machine, namely Reconfigurable Machine Tool (RMT), has been introduced that can be effectively adapted to changes. Nevertheless, such systems are more worker-reliant, due to of different skill categories may be required to process an operation, and changing the configuration of a reconfigurable machine (i.e., adding, removing, or changing its modules) depends directly on their intervention. Consequently, neglecting workforce aspects results in suboptimal or even infeasible production schedules. Different configurations of a manufacturing system can have profound impacts on its reliability performance. However, in practice, the efficiency of machines always decreases due to machine failure as the working time duration increases, which is called the deterioration effect (DE). Improper balancing between maintenance and reconfiguration actions can result in system breakdowns and can hamper system health and ability to reconfigure.

To address this gap, this study proposes a Combining Human-Aware Degradation Scheduling in Reconfigurable Manufacturing Systems. Simulation with analytical models can enhance modelling flexibility and offer additional modelling capabilities. For instance, the potentiality of discrete event simulation (DES) can be increased through the combination with analytical optimization methods, such as linear programming, to implement efficient search of optimal manufacturing system configuration and management strategies. To overcome these drawbacks, Simulation-Based Optimization (SBO) emerged as a powerful method enabling the use of advantages of both simulation and optimization. The proposed approach has the capability to capture the causality between operational action sequences and the resulting system deterioration. Furthermore, a human-centric adaptive manufacturing approach is presented to address these challenges through coevolution of human skills and system capabilities via human-machine collaboration and on-site upskilling.

109 University of Pannonia, Department of System Engineering, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Oxigénátadási viszonyok tanulmányozása pilotléptékű probiotikum fermentációkban

Investigation of oxygentransfer in pilot scale probiotics fermentation

Németh Áron¹¹⁰

Összefoglaló

Az élesztők fermentációja régóta ismert folyamat, ám ezalatt jellemzően a *Saccharomyces cerevisiae* (pékélesztő) szaporítását és/vagy alkohol termelését értik. Éppen ezen sejtek ipari alkalmazása kapcsán írtak le két jelenséget: a Pasteur- és a Crabtree- (vagy reverz-Pasteur-) effektust, amelyek közül az előbbi szerint az oxigén kontrollálja az anyagcserét, az utóbbi szerint pedig a cukorkoncentráció [1]. Ipari és oktatási szempontból is érdekes élesztő a *Saccharomyces boulardii*, amelynek fermentációjáról kevés információ lelhető fel a szakirodalomban; többek között az sem ismert, hogy a fenti két effektus hogyan határozza meg a növekedését. 20 L-es keverős és airlift, valamint 200 L-es keverős pilot fermentorban végzett kísérleteink alapján a *S. boulardii* – szemben a duplapozitív *S. cerevisiae*-vel – Crabtree-negatívnak és Pasteur-pozitívnak tűnik, mivel aerob körülmények között viszonylag nagy cukorkoncentráció esetén sem fermentál alkoholt, míg oxigénlimitált körülmények mellett alkoholos fermentációt végez. A folyamat jobb megértése érdekében több módszerrel is meghatároztuk az eredő folyadékoldali oxigénabszorpció tényezőt (KLa-t), ami kijelöli azt a tartományt, ahol érvényes a két növekedési effektusra tett megállapítás.

Summary

Yeast fermentation has long been known, but it is typically understood as the propagation and/or production of alcohol by *Saccharomyces cerevisiae* (baker's yeast). Two phenomena have been described in connection with the industrial application of these cells: the Pasteur and Crabtree (or reverse-Pasteur) effects, according to the former, oxygen controls metabolism, and according to the latter, sugar concentration. *Saccharomyces boulardii* is an interesting yeast from both an industrial and educational perspective, but little information can be found about its fermentation in the literature, including how the above two effects determine its growth. Based on our experiments in a 20L stirred and airlift, as well as a 200L stirred pilot fermenters, the cell line appears to be Crabtree negative and Pasteur positive in contrast to the double positive *S. cerevisiae*, since it does not ferment alcohol even under aerobic conditions at relative high sugar concentrations, while it ferments alcohol under oxygen-limited conditions. In order to better understand the process, we determined the resulting liquid-side oxygen absorption factor (KLa) using several methods, which indicates the range where the statement made for the two growth effects is valid.

Irodalomjegyzék/References

- [1] De Deken RH. The Crabtree Effect: A Regulatory System in Yeast *Microbiology*, 44, 149-156 (1966) <https://doi.org/10.1099/00221287-44-2-149>
- [2] Duffey, H. E., Hedin, K. A., Gelli, H. P., Vaaben, T. H., & Sommer, M. O. A. Genomic and phenotypic comparison of *Saccharomyces cerevisiae* and *Saccharomyces boulardii*. *bioRxiv: the preprint server for biology*, 2025.09.08.674931. (2025) <https://doi.org/10.1101/2025.09.08.674931>

110 Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Hazai agyag- és betonhulladék-frakciók mechanokémiai aktiválásának hatása a puccolános reaktivásra

Effect of mechanochemical activation of domestic
clay and concrete waste fractions on pozzolanic reactivity

Őze Csilla, Kristófné Makó Éva¹¹¹

Összefoglaló

A hulladékok építőipari felhasználása cement-kiegészítő anyagként napjainkban kiemelt jelentőséggel bír, tekintettel a hagyományos kiegészítő anyagok (SCMs) egyre csökkenő elérhetőségére. Kutatásunkban magyarországi agyag- és betonhulladék 32 mikrométer alatti, illetve 4 mm alatti frakciójának mechanokémiai aktiválását végeztük el különböző őrlési idők mellett. A mechanokémiai aktiválás során bekövetkező szerkezeti változásokat röntgendiffrakcióval (XRD), infravörös spektroszkópiával (FTIR) és pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM) követtük nyomon. Meghatároztuk az aktív szilícium-dioxid-tartalom változását az őrlési idő függvényében. Az aktivált minták puccolános reaktivitását a szilárdság és a vízfelvevő képesség mérésével jellemeztük.

Az eredmények alapján megállapítható, hogy a betonhulladék frakcionálása önmagában nem segíti elő a puccolános reaktivitást. Ezzel szemben az agyag mechanokémiai aktiválása, valamint az agyag betonhulladékhoz való keverése lényegesen javítja a puccolános reakcióképességet. Az őrlési idő növelésével a kristályos fázisok amorfizálódtak, az aktív szilícium-dioxid-tartalom nőtt, ami kedvezően befolyásolta az aktivált minták reaktivitását.

Summary

The utilisation of waste materials as cement supplementary materials in the construction industry is of particular importance today, given the decreasing availability of conventional supplementary cementitious materials (SCMs). In this study, the mechanochemical activation of fractions below 32 micrometres and 4 mm of Hungarian clay and concrete waste was carried out at different grinding times. The structural changes induced by mechanochemical activation were monitored by X-ray diffraction (XRD), infrared spectroscopy (FTIR) and scanning electron microscopy (SEM). The variation in active silica content was determined as a function of grinding time. The pozzolanic reactivity of the activated samples was characterised by measuring compressive strength and water absorption capacity.

The results indicate that fractionation of concrete waste alone does not enhance pozzolanic reactivity. In contrast, the mechanochemical activation of clay and blending clay with concrete waste significantly improves pozzolanic reactivity. With increasing grinding time, the crystalline phases underwent amorphisation and the active silica content increased, which favourably influenced the reactivity of the activated samples.

111 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Digitális ikrekben alkalmazott flowsheet modellek karbantartása valós idejű adatvezérelt tanulással a vegyiparban

Maintenance of flowsheet models in digital twins through real-time data-driven learning in
the chemical industry

Palotai Balázs¹¹², Kis Gábor¹¹³, Chován Tibor¹¹⁴, Takács-Bárkányi Ágnes¹¹⁵

Összefoglaló

A digitális ikrekben alkalmazott flowsheet modellek kulcsszerepet töltenek be a vegyipari folyamatok valós idejű monitorozásában és optimalizálásában. Pontosságuk azonban az üzemeltetési változások, a berendezések öregedése és a minőségi ingadozások következtében idővel romlik, ami modell-drift kialakulásához vezethet, és ezáltal csökkenti a modellalapú döntéstámogatás megbízhatóságát. A kutatás célja egy olyan integrált, adatvezérelt módszertan kidolgozása volt, amely a flowsheet modellek karbantartását surrogate modellekre épülő kalibrációval és valós idejű online tanulással támogatja. A megközelítésben egy globális surrogate modell helyettesíti a nagy számítási igényű flowsheet szimulációk viselkedését, lehetővé téve egy többcélú kalibráció hatékony végrehajtását, amely figyelembe veszi a mérési bizonytalanságokat és a modellezési prioritásokat. Ezt egy inkrementális online tanulási stratégia egészíti ki, amely a surrogate modellt folyamatosan frissíti az új munkapontok alapján, miközben megőrzi a korábban tanult globális összefüggéseket. Az integrált kalibrációs és tanulási ciklus biztosítja, hogy a digitális iker hosszú távon is pontos, adaptív és robusztus maradjon, miközben jelentősen csökkenti a közvetlen flowsheet szimulációk számát és a manuális modellbeavatkozások szükségességét. Az ipari esettanulmányok eredményei igazolják, hogy a módszer hatékonyan kezeli a modell-drift jelenségét, mérsékli a számítási költségeket, és megbízható alapot teremt a valós idejű, adatvezérelt döntéstámogatás számára a vegyipari gyakorlatban.

Summary

Flowsheet models embedded in digital twins play a key role in the real-time monitoring and optimization of chemical processes. However, their predictive accuracy gradually deteriorates due to operational changes, equipment aging, and variations in process conditions, which can lead to model drift and reduce the reliability of model-based decision support. This work presents an integrated, data-driven methodology for maintaining flowsheet models through surrogate-based calibration combined with real-time online learning. In the proposed approach, a global surrogate model approximates the behavior of computationally expensive flowsheet simulations, enabling efficient multi-objective calibration that incorporates measurement uncertainty and modeling priorities. This is complemented by an incremental online learning strategy that continuously updates the surrogate model based on new operating points while preserving previously learned global relationships. The integrated calibration and learning cycle ensures that the digital twin remains accurate, adaptive, and robust over the long term, while significantly reducing the number of direct flowsheet simulations and the need for manual model adjustments. Industrial case studies demonstrate that the proposed method effectively mitigates model drift, reduces computational costs, and provides a reliable foundation for real-time, data-driven decision support in chemical industry applications.

112 MOL Group Plc., 1117 Budapest, Dombóvári Street 28; University of Pannonia, 8200 Veszprém, Egyetem Street 10

113 MOL Group Plc., Budapest

114 University of Pannonia, Veszprém

115 University of Pannonia, Veszprém

Döntéstámogató módszerek értelmezhetőségének vizsgálata vegyipari rendszerekben

Analysis of model interpretability approaches
in decision-support frameworks in chemical industry

Somogyi Áron¹¹⁶, Bárkányi Ágnes¹¹⁷, Chován Tibor¹¹⁸, Kis Gábor¹¹⁹

Összefoglaló

A döntéstámogató rendszerek a vegyipar területén napjaink egyik nélkülözhetetlen technológiájává váltak a versenyelőny fenntartásához, legyen szó valós idejű optimalizációról vagy prediktív karbantartásról. Azonban, ahogy ezek a rendszerek a hagyományos megoldásoktól a komplex, sokdimenziós gépi tanulási architektúrák felé mozdulnak el, a modellek fekete doboz jellege gyakran rontja az operátori bizalmat és nem biztosítja a rendszer által hozott döntések átláthatóságát. A kutatás célja a vegyiparban alkalmazott fekete doboz modellek értelmezhetőségének kritikus szerepének vizsgálata. A modellezési filozófiák összehasonlításától kezdve – kiemelve azok átláthatóságát – az értelmezhetőséghez kapcsolódó fogalmakon át, bemutatásra kerül a jelenleg alkalmazott modell értelmezhetőség megkönnyítésére szolgáló algoritmusok osztályozása is. A vizsgált módszereket egy vegyipari esettanulmányon keresztül mutatjuk be: egy kőolajfinomítói gázfrakcionáló üzem modellezését és optimalizációját követően a korábban ismertetett módszerek a folyamatparaméterek modell kimenetre, illetve az optimalizációs célfüggvény értékére gyakorolt hatásának feltárására szolgálnak. Ezáltal kiemelhető, hogy a döntéstámogató rendszerek esetén az átláthatóság hasonlóan nagy jelentőséggel bír, mint a hatékonyság.

Summary

Decision-support systems have become one of the essential technologies in the chemical industry today for maintaining competitive advantage, whether it is real-time optimization or predictive maintenance. However, as these systems shift from traditional solutions toward complex, multidimensional machine learning architectures, the black-box nature of the models often undermines operator trust and fails to ensure transparency in the decisions produced by the system. The aim of this research is to examine the critical role of interpretability of black-box models applied in chemical industry. Starting from the comparison of modeling philosophies, highlighting their transparency, and moving through the concepts related to interpretability, the work also presents a classification of currently used algorithms designed to facilitate model interpretability. The investigated methods are demonstrated through a chemical industry case study: following the modeling and optimization of a gas fractionation unit of a crude oil refinery, the previously introduced methods are used to uncover how process parameters influence model outputs and the value of the optimization objective function. This highlights that, in decision-support systems, transparency is just as important as efficiency.

116 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.; MOL Nyrt., 1117 Budapest, Dombóvári út 28.

117 Pannon Egyetem, Veszprém

118 Pannon Egyetem, Veszprém

119 MOL Nyrt., Budapest

Kontrollált kioldódású műtrágya fejlesztése geopolimer bázison

Development of a geopolimer-based controlled-release fertilizer

Balczár Ida, Takács Natasa, Kovács András, Rauch Renáta, Varga Béla¹²⁰

Összefoglaló

A műtrágya az emberiség élelmiszer-ellátásának egyik alappillére: nélküle nem lenne lehetséges a növekvő népesség fenntartásához szükséges terméshozam biztosítása. A hagyományos műtrágyák azonban túl gyorsan kioldódnak, így nemcsak a tápanyagok vesznek kárba, hanem a környezet is jelentősen szennyeződik. A kontrollált kioldódású műtrágyák olyan tápanyaghordozó rendszerek, amelyek célja, hogy a növények számára szükséges elemeket ne egyszerre, hanem időben elnyújtva, szabályozott ütemben bocsássák rendelkezésre. E megközelítés előnye, hogy jobban igazodik a növények tápanyagfelvételi dinamikájához, ezáltal csökkentheti a tápanyagveszteséget, valamint mérsékelheti a kimosódásból, párolgásból és túltrágyázásból eredő környezeti terhelést.

A kutatás célja ilyen rendszer előállítására geopolimer kötőanyag segítségével. A geopolimer kötése során kialakuló háromdimenziós alumínium-szilikát háló alkalmas lehet különböző tápanyagforrások stabil mátrixba ágyazására, ezáltal lehetőséget nyújtva lassú tápanyagleadású, környezetbarát kompozitok fejlesztésére.

A kutatás során metakaolin alapú alkáli-aktivált rendszereket állítottunk elő granulátum formában, amelyekbe különböző makrotápanyagokat ágyaztunk be, mint a nitrát- és foszfát-káliumsók, töltőanyagként pedig mészkövet vagy gipszet használtunk. A próbatetek értékelése mechanikai szilárdságvizsgálatok, röntgentomográfiás pórusszerkezet-elemzés, pH-változás mérése, valamint a főkomponensek kioldódási viselkedésének meghatározása alapján történt.

A roppantási szilárdságvizsgálatok alapján a mészkő jelentősen javította a geopolimer-mátrix mechanikai stabilitását: a legnagyobb szilárdságot a 4 M KOH oldattal készült minta érte el, míg az alacsonyabb lúgkoncentrációval készült minta gyengébbnek bizonyult. A gipsz alapú minták általában kisebb szilárdságot mutattak. A CT-vizsgálatok szerint a töltőanyag típusa és az aktivátor koncentrációja erősen befolyásolta a belső szerkezetet és a porozitást. A mészkő alapú rendszerekben nagyobb, összefüggőbb pórusok alakultak ki, míg a gipszes minták tömörebbek voltak, de repedéseket mutattak. Az alacsonyabb lúgkoncentráció minden esetben lazább, porózusabb szerkezetet eredményezett.

A pH-mérések alapján egyik granulátum sem okozott a növények számára kedvezőtlenül magas kémhatást. A kioldódási vizsgálatok gyors kezdeti tápanyag-felszabadulást, majd lelassuló kioldódást mutattak. A tömörebb, stabilabb minták egyenletesebb és elnyújtottabb tápanyag-leadást biztosítottak, míg a porózusabb rendszerek gyorsabb kioldódást eredményeztek.

Az eredmények alapján megállapítható, hogy a geopolimer alapú granulátumok alkalmas kiindulási alapot jelenthetnek kontrollált kioldódású, környezetbarát műtrágyák fejlesztéséhez. A technológia további optimalizálása tudományos és gyakorlati szempontból egyaránt indokolt.

Summary

Fertilizer is one of the cornerstones of humanity's food supply: without it, the crop yields required to sustain a growing population would not be possible. However, conventional fertilizers dissolve too quickly, so not only are nutrients wasted, but the environment is also significantly polluted. Controlled-release fertilizers are nutrient carrier systems designed to provide the elements required by plants not all at once, but in a prolonged and regulated manner over time. The advantage of this approach is that it better matches the dynamics of plant nutrient uptake, thereby reducing nutrient loss and mitigating the

120 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

environmental burden caused by leaching, volatilization, and over-fertilization.

The aim of the research was to produce such a system using a geopolymer binder. The three-dimensional aluminosilicate network formed during geopolymer setting may be suitable for embedding various nutrient sources into a stable matrix, thereby providing an opportunity for the development of slow nutrient-releasing, environmentally friendly composites.

During the research, metakaolin-based alkali-activated systems were produced in the form of granules, into which different macronutrients were embedded, such as the potassium salts of nitrate and phosphate, while limestone or gypsum was used as a filler. The test specimens were evaluated on the basis of mechanical strength tests, X-ray tomographic pore structure analysis, pH change measurements, and determination of the leaching behavior of the main components.

Based on the crushing strength tests, limestone significantly improved the mechanical stability of the geopolymer matrix: the sample prepared with 4 M KOH solution achieved the highest strength, while the sample prepared with a lower alkali concentration proved to be weaker. The gypsum-based samples generally showed lower strength. According to the CT investigations, both the type of filler and the concentration of the activator strongly influenced the internal structure and porosity. In the limestone-based systems, larger and more interconnected pores developed, while the gypsum-based samples were denser but showed cracks. In every case, lower alkali concentration resulted in a looser, more porous structure.

Based on the pH measurements, none of the granules caused an unfavorably high pH for plants. The leaching tests showed a rapid initial nutrient release followed by slower leaching. The denser, more stable samples provided a more even and prolonged nutrient release, while the more porous systems resulted in faster leaching.

Based on the results, it can be concluded that geopolymer-based granules may represent a suitable starting point for the development of controlled-release, environmentally friendly fertilizers. Further optimization of the technology is justified from both scientific and practical points of view.

Gépi látáson alapuló UV-térképezés összevetése NIR- és Raman-alapú kémiai térképezési módszerekkel

Comparison of Machine Vision-Based UV Mapping with
NIR and Raman Chemical Mapping Methods

*Szabó Bence, Mészáros Lilla Alexandra, Farkas Attila, Pataki Hajnalka,
Madarász Lajos, Galata Dorián László, Nagy Zsombor Kristóf¹²¹*

Összefoglaló

A gyógyszeripari tabletták minőségellenőrzésében különös jelentősége van azoknak a roncsolásmentes analitikai módszereknek, amelyek nemcsak a komponensek jelenlétéről, hanem azok térbeli eloszlásáról is információt szolgáltatnak. A közeli infravörös (NIR) és Raman-alapú kémiai képalkotás széles körben alkalmazott referenciaeljárás, ugyanakkor mérési ideje és adatkiértékelési igénye jelentős lehet. Jelen munka célja egy új generációs, UV-érzékeny kamerára épülő UV-reflektancia képalkotási megközelítés értékelése, valamint annak összevetése NIR- és Raman-alapú kémiai térképezéssel spironolaktont tartalmazó modelltabletták esetében.

A vizsgálatokhoz alacsony hatóanyag-tartalmú, spironolaktont, mikrokristályos cellulózt és laktóz-monohidráttal tartalmazó tablettákat állítottunk elő. Öt tablettasorozatot vizsgáltunk, amelyek kizárólag a spironolakton szemcseméretében különböztek egymástól. Az UV-reflektancia mérések során a tablettákat ~270 nm hullámhosszúságú megvilágítás alatt, Alvium 1800 U-812 monokróm UV-kamerával rögzítettük. Az így kapott szürkeárnyaltos képek alapján, egy referencia-kompaktból meghatározott intenzitástartományokra építve, intenzitásalapú klaszterezéssel és képfeldolgozási lépésekkel komponensterképeket készítettünk. Az öt minta közül a 100–150 µm részecskeméretű spironolaktont tartalmazó tablettát NIR- és Raman-kémiai képalkotással is elemeztük, hogy ugyanazon minta esetében közvetlen módszer-összehasonlítást végezhesünk.

Az UV-reflektancia képek megfelelő kontrasztot biztosítottak a spironolakton, a laktóz-monohidrát és a mikrokristályos cellulóz elkülönítéséhez. A referencia-kompakt hisztogramja alapján a három fő komponens szürkeárnyalat-intenzitásai kellően elkülönültek, ami lehetővé tette a tablettafelület gyors és reprodukálható feltérképezését. Az UV-alapú komponensterképek kvalitatív egyezést mutattak mind a NIR-, mind a Raman-alapú eloszlási térképekkel: a tablettafelületen döntően a laktóz és a mikrokristályos cellulóz dominált, míg az alacsony koncentrációban jelen lévő spironolakton kisebb, jól lokalizált tartományokban jelent meg. A három módszer közötti legfontosabb különbség az adatgyűjtés időigényében mutatkozott meg. Az UV-reflektancia képalkotás esetében a teljes felületi információ egyetlen, 0,09 s expozícióval rögzíthető volt, 4,1 µm/pixel térbeli felbontás mellett, míg a NIR-alapú teljes felületi térképezés 77 percet, a Raman-alapú, 3000 × 3000 µm² méretű kijelölt terület vizsgálata pedig megközelítőleg 83 órát igényelt 25 µm-es lépésközzel.

Az eredmények alapján az UV-reflektancia képalkotáson alapuló gépi látási megközelítés gyors, felületérzékeny és információgazdag szűrőmódszerként alkalmazható gyógyszeripari tabletták komponenseloszlásának vizsgálatára. Előnye a teljes felület rendkívül gyors rögzítése, valamint a heterogén régiók és az API-ban gazdag tartományok hatékony azonosítása. Ugyanakkor kémiai specificitása elmarad a vibrációs spektroszkópiai képalkotási technikákétól, ezért nem azok helyettesítőjeként, hanem azok kiegészítőjeként értelmezhető. Gyakorlati szempontból különösen alkalmas gyors előszűrésre, régiókijelölés támogatására és több minta nagy áteresztőképességű összehasonlítására, például eltérő hatóanyag-részecskeméretű tételek vizsgálatában.

A jövőbeli vizsgálatok tovább növelhetik a módszer információtartalmát az UV-reflektancia képalkotás fluoreszcenciaalapú képalkotással történő kombinálásával, valamint az eljárás validálásával összetettebb, ipari relevanciájú formulációkon és nagyobb mintaszámú adathalmazokon. Összességében az UV-

121 Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Budafoki út 8., F épület

reflektancia képalkotáson alapuló gépi látási megközelítés gyors és információgazdag szűrő módszernek tekinthető komplex szilárd gyógyszerformák vizsgálatában, amelyet célszerű lassabb, de nagyobb kémiai specifikitású referenciaeljárások mellett alkalmazni, amikor részletes megerősítésre is szükség van.

Summary

In the quality control of pharmaceutical tablets, non-destructive analytical methods that provide information not only on the presence of the components but also on their spatial distribution are of particular importance. Near-infrared (NIR) and Raman-based chemical imaging are widely used reference techniques; however, their measurement time and data-processing requirements can be considerable. The aim of the present work was to evaluate a UV reflectance imaging approach based on a next-generation UV-sensitive camera and to compare it with NIR- and Raman-based chemical mapping in model tablets containing spironolactone.

For the study, low-dose tablets containing spironolactone, microcrystalline cellulose, and lactose monohydrate were prepared. Five tablet series were investigated, differing only in the particle size of spironolactone. During UV reflectance measurements, the tablets were imaged under illumination at approximately 270 nm using an Alvium 1800 U-812 monochrome UV camera. Based on the resulting grayscale images, component maps were generated by intensity-based clustering and image-processing steps using intensity ranges defined from a reference compact. Of the five samples, the tablet containing spironolactone with a particle size fraction of 100–150 μm was also analyzed by NIR and Raman chemical imaging to enable direct comparison of the methods on the same sample.

The UV reflectance images provided sufficient contrast to distinguish spironolactone, lactose monohydrate, and microcrystalline cellulose. Based on the histogram of the reference compact, the grayscale intensity ranges of the three main components were sufficiently distinct, allowing rapid and reproducible mapping of the tablet surface. The UV-based component maps showed qualitative agreement with both the NIR- and Raman-based distribution maps: the tablet surface was dominated mainly by lactose and microcrystalline cellulose, whereas spironolactone, present at low concentration, appeared in smaller, well-localized regions. The most important difference among the three methods was observed in data acquisition time. In the case of UV reflectance imaging, the complete surface information could be recorded in a single 0.09 s exposure at a spatial resolution of 4.1 $\mu\text{m}/\text{pixel}$, whereas full-surface NIR mapping required 77 minutes, and Raman mapping of a selected 3000 $\times$ 3000 μm^2 area required approximately 83 hours with a 25 μm step size.

Based on the results, the machine vision approach based on UV reflectance imaging can be applied as a rapid, surface-sensitive, and information-rich screening method for investigating the component distribution of pharmaceutical tablets. Its main advantages are the extremely fast acquisition of the entire surface and the efficient identification of heterogeneous regions and API-rich domains. At the same time, its chemical specificity is lower than that of vibrational spectroscopic imaging techniques; therefore, it should be regarded not as a substitute for these methods, but as a complementary approach. From a practical perspective, it is particularly suitable for rapid prescreening, support of region-of-interest selection, and high-throughput comparison of multiple samples, for example in the investigation of batches containing different API particle size fractions.

Future studies may further increase the information content of the method by combining UV reflectance imaging with fluorescence imaging and by validating the approach on more complex, industrially relevant formulations and larger datasets. Overall, machine vision based on UV reflectance imaging can be considered a rapid and information-rich screening tool for the investigation of complex solid dosage forms, best applied alongside slower reference methods with higher chemical specificity when detailed confirmation is required.

Aktivált felületű, 3D-nyomtatható porózus enzimhordozó rendszerek

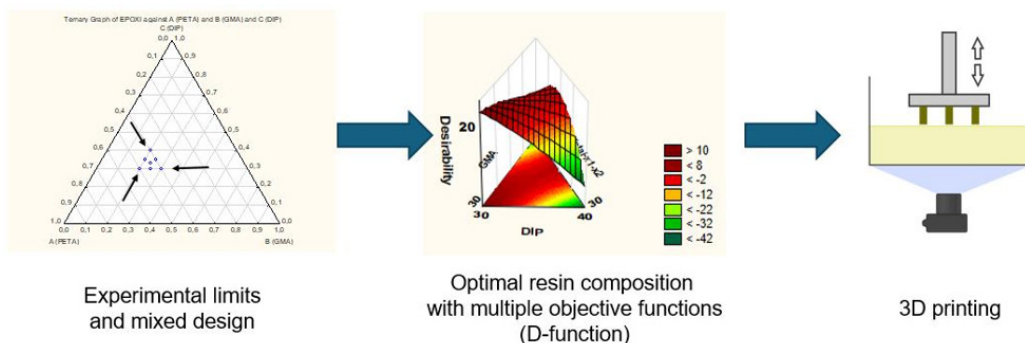
Activated surface 3D printable porous enzyme support systems

Szabó Domonkos, Dötsch Anna, Szilágyi András¹²²

Összefoglaló

Funkcionális, áteresztő mezopózusos és makropózusos enzimhordozó rendszereket fejlesztettek ki a polimerizációval indukált fázisszeperáció (PIPS) integrálásával a digitális fénylevilágításon (DLP) alapú 3D-nyomtatási technológiába.

Korábban már tettek kísérleteket porózus rendszerek létrehozására 3D-nyomtatással [1], de néhány kivételtől eltekintve [2] a nagy pontosságú, áteresztő, mezopózusos és makropózusos 3D-nyomtatott rendszereket ritkán tudták előállítani. Erre a kihívásra válaszul a PIPS-módszert és a fotoindukció jelenségét kombinálták [3]. A PIPS során a monomerek, egy iniciátor és egy inert hígító kezdetben egyfázisú folyadékkeveréke a polimerizáció eredményeként folyamatos gélfázissá alakul. Ezt követően a gélszerkezet az inert hígító rossz nedvesítő hatása miatt összeomlik, ami áteresztő porózus polimer hálózat kialakulásához vezet [4]. Megközelítésünk újdonsága egy 3D-nyomtatható gyanta kifejlesztése, amelyben a levilágítás hatására gyökös polimerizáció indul be az akrilát csoportok között, ezáltal létrehozva a későbbi vázszerkezetet, amelynek felülete szabad epoxicsoportokban gazdag. A kísérletekben a pentaeritritol-tetraakrilát szolgált a pórusfalak fő alkotóanyagaként, glicidil-metakrilát biztosította a szabad epoxicsoportokat és ftalátokat használtunk inert hígítószerként. A kísérleteket elegyterv alapján végeztük (a kísérleti tervezés egyik változata), és a végső összetétel optimalizálásához d-függvényt alkalmaztunk. A 3D-nyomtatott mátrixok felülete kb. 1–2 mmol/g epoxicsoportot tartalmaz, amelyekhez EDTA-t kapcsoltunk diaminobutánon keresztül. A porózus vázszerkezet fajlagos felületét, ionkötő képességét és mechanikai tulajdonságait egyaránt vizsgáltuk. A projekt következő szakaszában a PAL enzimet immobilizálják a hordozó felületén, és megvizsgálják annak enzimatiszus aktivitását.



1. ábra. A kísérlet menete

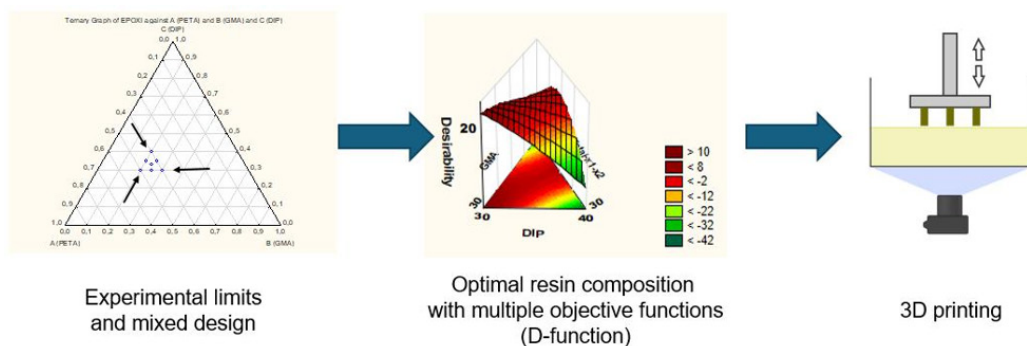
Summary

Functionalised, permeable meso- and macroporous enzyme support systems were developed by integrating polymerisation-induced phase separation (PIPS) into Digital Light Processing (DLP)-based 3D printing technology.

Previous attempts have been made to create porous systems using 3D printing [1], but with a few exceptions [2], high-precision, permeable, meso- and macroporous 3D-printed systems are rare. In response to this challenge, the PIPS method and the phenomenon of photoinduction were combined [3]. During PIPS, the initially single-phase liquid mixture of monomers, an initiator and an inert diluent transforms in to

122 Fizikai Kémiai és Anyagtudományi Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

a continuous gel phase as a result of polymerization. Subsequently, the gel structure collapses due to its poor wetting by the inert diluent, resulting in the formation of a permeable porous polymer network [4]. The novelty of our approach is the development of a 3D printable resin in which radical polymerization is initiated between acrylate groups upon exposure to light, thereby creating a polymer network rich in free epoxy groups on its surface. In our experiment, the polymerization of pentaerythritol tetraacrylate main material of the pore walls, glycidyl methacrylate comonomer was used to provide free epoxy groups, and phthalates were used as inert diluents. The experiments were carried out based on a mixture design (a variant of experimental design), and a d-function was used to optimize the final composition. The surface of the 3D printed matrices contains approximately 1-2 mmol/g of epoxy groups, to which EDTA was attached via diaminobutane. We examined the specific surface area, ion-binding capacity, and mechanical properties of the porous matrices. In the next phase of the project, we plan to immobilize the PAL enzyme on the surface of the carrier and examine its enzymatic activity.



2. ábra. Course of experiments

Köszönetnyilvánítás/Acknowledgements

A TKP-9-8/PALY-2021 projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium támogatásával, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap (NKFI) finanszírozásával, a TKP2021-EGA támogatási program keretében valósult meg. További támogatást nyújtott az NKFI Hivatal az NKKP ADVANCED 152811 pályázat keretében. A kutatást a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen végeztük, a Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszéken. Külön köszönjük Wacha András segítségét a SAXS-mérésekben.

TKP-9-8/PALY-2021 has been implemented with the support provided by the Ministry of Culture and Innovation of Hungary from the National Research, Development and Innovation (NRDI) Fund, financed under the TKP2021-EGA funding scheme. Further support was provided by the NRDI Office via grant NKKP ADVANCED 152811. The research was conducted at the Budapest University of Technology and Economics, Department of Physical Chemistry and Materials Science. Special thanks to András Wacha for his assistance with the SAXS measurements.

Irodalomjegyzék/References

- [1] F. Zhang, Y. Ma, J. Liao, V. Breedveld, and R. P. Lively, 'Solution-Based 3D Printing of Polymers of Intrinsic Microporosity', *Macromolecular Rapid Communications*, vol. 39, no. 13, p. 1800274, 2018, doi: 10.1002/marc.201800274.
- [2] H. Steldinger, '3D Printing of Activated Carbon and Exemplary Application as Adsorbent in the Electric Swing Adsorption', p. 33, 2020, doi: 10.25534/TUPRINTS-00011724.
- [3] B. Mattiasson, A. Kumar, and I. Y. Galeaev, *Macroporous Polymers: Production Properties and Biotechnological/Biomedical Applications*. CRC Press, 2009.
- [4] O. Okay, 'Macroporous copolymer networks', *Progress in Polymer Science*, vol. 25, no. 6, pp. 711–779, Aug. 2000, doi: 10.1016/S0079-6700(00)00015-0.

Ciklodextrinalapú karbamidok in situ előállítása

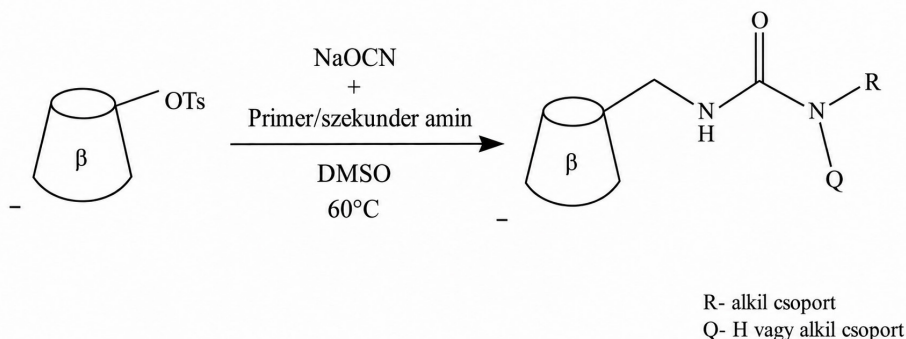
In-situ synthesis of cyclodextrin-based ureas

Szabó Emese Kinga, Varga Bertalan, Rapi Zsolt¹²³

Összefoglaló

A ciklodextrinek (CD) a természetben is megtalálható gyűrűs oligoszacharidok, amelyek 6, 7 vagy 8 glükózegységből épülnek fel (α -, β - vagy γ -CD). Jellemzőjük, hogy külső felületük hidrofíl karakterű, míg belső üregük apolárisabb, így hajlamosak zárványkomplexek kialakítására különböző hidrofób szubsztrátokkal [1]. Kutatócsoportunk már több éve foglalkozik a CD-k különböző szintéziseivel. A CD-k komplexképző tulajdonságának köszönhetően a gyógyszeriparban előszeretettel alkalmazzák őket segédanyagként oldhatóság javítására, de ismertek CD-alapú hatóanyagok, víztisztító ágensek, illetve felületaktív anyagok is. A CD-k szintetikus eljárásai – néhány széles körben ismert reakcióúton kívül – a szakirodalomban kevésbé feltártak. A CD-k karbamidszármazékainak szintézise szintén a kevésbé kutatott reakciók közé tartozik; a szakirodalom ezeket többnyire védett CD-származékokból kiindulva, több lépésben állítja elő [2]. Ezen szintézisutak jelenlegi korlátai indokoltá teszik a reakcióút fejlesztési lehetőségeinek megfontolását. Kutatómunkám során 6-os helyzetben szubsztituált β -CD-ből kiindulva egy lépéses szintézissel állítottam elő CD-alapú karbamidszármazékokat nátrium-cianát és aminok segítségével. Az eljárás előnye, hogy nem igényel speciális reakciókörülményeket – például inert atmoszférát –, emellett primer és szekunder aminokkal egyaránt hatékonyan kivitelezhető. A reakcióidőt elsődlegesen az alkalmazott amin nukleofilitása határozza meg. Emellett a hőmérséklet megválasztása, valamint az oldószer minősége is döntő befolyással bír a szubsztituált CD-k S_N^2 típusú reakciókészségére.

A karbamidcsoportok kiváló kötőelemként szolgálnak, amelyek lehetővé teszik különféle szubsztrátumok hatékony és stabil rögzítését a CD-vázhoz. Munkám célja egy olyan optimalizált szintézisút kidolgozása, amely növeli a szakirodalomban ismert eljárások hatékonyságát, kiküszöböli azok korlátait, és egy reprodukálhatóbb folyamatot eredményez.



Summary

Cyclodextrins (CDs) are naturally occurring cyclic oligosaccharides composed of 6, 7, or 8 glucose units (α -, β -, vagy γ -CD). They are characterized by a hydrophilic outer surface and a more apolar internal cavity, which enables them to form inclusion complexes with various hydrophobic substrates. Our research group has been engaged in the synthesis of various CD derivatives for several years. The complex-forming properties of CDs are extensively exploited by the pharmaceutical industry, where they are widely utilized as both excipients and active ingredients. Beyond a few well-known pathways, the synthetic methods for

¹²³ Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

CDs are less thoroughly explored in the literature. The synthesis of CD-urea derivatives also belongs to these less investigated reactions; the literature generally describes their preparation from protected CD derivatives through multi-step processes. The current limitations of these synthetic routes justify the exploration of further development opportunities for the reaction pathway.

In my research, I have synthesized CD-urea derivatives in a single step starting from 6-substituted β -CD, by reacting them with cyanate/thiocyanate in the presence of an amine. The primary advantage of this method is that it does not require specialized reaction conditions—such as an inert atmosphere—and it can be efficiently performed with both primary and secondary amines. The reaction time is primarily determined by the nucleophilicity (reactivity) of the employed amine. Furthermore, the choice of temperature and the quality of the solvent also exert a decisive influence on the $\text{S}_{\text{N}}2$ -type reactivity of the substituted CDs. Urea functional groups serve as excellent linkers, enabling the efficient attachment of various substrates to the CD scaffold. The objective of my work is to develop an optimized synthetic pathway that increases the efficiency of methods known in the literature, overcomes their limitations, and results in a more reproducible process.

Irodalomjegyzék/References:

- [1] G. Crini, *American Chemical Society*, 114 (21), 10940–10975 (2014)
- [2] F. Sallas, J Kovacs, I Pinter, A. Marsura, and H. Poincar, *Tetrahedron Letters*, 37, 4011-4014 (1996)

Desztillációs oszlop megerősítéses tanulás alapú szabályozása

Reinforcement learning-based control of a distillation column

Szatmári Kinga, Németh Sándor, Kummer Alex¹²⁴

Összefoglaló

A vegyipari folyamatirányítás kulcsfontosságú a biztonság, az egyenletes termékminőség és az energiahatékony működés biztosításához a folyamatiparban. A hagyományos megközelítések, mint a PID és a modellprediktív szabályozás (MPC), általában jól teljesítenek rögzített üzemi pontok környezetében, azonban hatékonyságuk csökkenhet erős nemlinearitások vagy zavarások esetén. Ebben a kontextusban a modern gépi tanulási módszerek lehetővé teszik adaptív, adatvezérelt szabályozók fejlesztését, amelyek közvetlenül a folyamat viselkedéséből tanulnak hatékony stratégiákat. Az egyik ilyen megközelítés a megerősítéses tanulás (reinforcement learning, RL), ahol egy ágens kölcsönhatásba lép a környezettel, megfigyeli a rendszer válaszát a beavatkozásokra, és próbálkozások útján javítja szabályozási stratégiáját. A klasszikus, explicit modellekre vagy linearizált közelítésekre támaszkodó szabályozókkal szemben az RL képes nemlineáris, többváltozós és időben változó dinamikák kezelésére a hosszú távú működési célok közvetlen optimalizálásával.

Kutatásunk egy RL-alapú felügyelő szabályozási keretrendszert mutat be egy desztillációs oszlop dinamikus szimulátorához. A szabályozási feladat hierarchikus struktúrában valósul meg. Az alsó szabályozási szinten PID-szabályozók stabilizálják az 5. és 12. tányér hőmérsékletét a reflux tömegáramának és a visszaforráló hőterhelésének manipulálásával. A felsőbb szinten egy RL-ágens kis lépésekben módosítja a hőmérséklet-alapjeleket a termékspecifikációk teljesítése és az energiafelhasználás csökkentése érdekében.

A hatékony tanításhoz az adatok Aspen HYSYS szimulátorból származnak. A főbb változók lépcsőugrásokra adott válasza alapján elsőrendű, holtidő nélküli átviteli függvényeket identifikáltunk. A felügyelő szabályozási politika Python környezetben, Proximal Policy Optimization (PPO) algoritmussal történt betanításra, olyan jutalomfüggvénnyel, amely bünteti a specifikációtól való eltéréseket és minimalizálja az energiafelhasználást. Az eredmények azt mutatják, hogy a módszer biztosítja a munkapontok közötti sima átmenetet, a termékminőség fenntartását és az energiaigény csökkenését, rávilágítva az RL-alapú felügyelő szabályozás potenciáljára nemlineáris desztillációs folyamatok esetén.

Kulcsszavak: megerősítéses tanulás, felügyelői szabályozás, desztillációs oszlop, Proximal Policy Optimization

Summary

Chemical process control is crucial for ensuring safety, consistent product quality, and energy-efficient operation in the process industry. Conventional approaches such as PID and model predictive control (MPC) typically perform well around fixed operating points, yet their effectiveness can decrease under strong nonlinearities or disturbances. In this context, modern machine learning enables adaptive, data-driven controllers that can learn effective strategies directly from process behavior. One such approach is reinforcement learning (RL), where an agent interacts with a process environment, observes how the system responds to control actions, and improves its policy through trial-and-error. Unlike classical controllers that depend on explicit models or linearized approximations, RL can address nonlinear, multivariable, and time-varying dynamics by directly optimizing long-term operational objectives.

This work presents an RL-based supervisory control framework for a dynamically simulated distillation column. The control task is organized in a hierarchical structure. At the regulatory level, PID controllers stabilize the temperatures of the 5th and 12th trays by manipulating the reflux mass flow rate and the reboiler heat duty. At the supervisory level, an RL agent adjusts the temperature setpoints in small increments to satisfy product specifications while reducing energy consumption.

¹²⁴ Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, Data-Centric Systems Engineering, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

To support efficient training, a data-driven dynamic model is derived from Aspen HYSYS simulation data. Step tests are applied around multiple operating points are used to fit first-order-plus-dead-time transfer functions that capture the key multivariable interactions. The supervisory policy is trained in Python using Proximal Policy Optimization (PPO) with a reward function that penalizes deviations from specifications and minimize energy use. The results demonstrate smooth transitions between operating points, sustained product quality, and lower energy demand, underscoring the potential of RL-based supervision for nonlinear distillation control.

Keywords: reinforcement learning, supervisory control, distillation column, Proximal Policy Optimization

* <https://www.datacentricse.com/>

Megnövelt szívósságú nyálkahártya-analóg poli(vinil-alkohol) hidrogélek előállítása

Development of toughness-enhanced mucosa-mimetic poly(vinyl alcohol) hydrogels

Szayly Kata, Szilágyi András, Gyarmati Benjámin¹²⁵

Összefoglaló

Általános gyógyszeripari cél a helyi és szisztémás gyógyszeradagolás megoldása minél nagyobb terápiás hatékonyság mellett, betegbarát módon, amelyre kitűnő megoldást kínálnak a nyálkahártyára tapadó, mukoadhézív készítmények [1]. Az állati szöveteken végzett *ex vivo* mukoadhéziós mérések értelmezése a minták természetes diverzitása miatt nehézkes, ezért a mukoadhéziós részfolyamatok megértése ezen mérések segítségével korlátozott; így szintetikus analógokra van szükség. Az irodalomból ismert, hogy a hidrogélek megfelelő analógok lehetnek magas víztartalmuk és a nyálkahártyához hasonló viszkoelasztikus tulajdonságaik miatt [2]. Korábbi eredményeink alapján a mucint – a nyálkahártya fő makromolekulás elemét – tartalmazó poli(vinil-alkohol) (PVA) alapú hidrogélek ígéretes nyálkahártya-analógok [3, 4], azonban egy, az eddigiekhöz hasonló merevségű és viszkoelaszticitású, mégis szívósabb hidrogél jobban modellezné a nyálkahártya mint szövet mechanikai viselkedését [5]. Ezért jelen munkában, új megközelítésként különböző molekulatömegű és hidrolizáltsági fokú PVA-k felhasználásával állítottunk elő mucin tartalmú PVA-hidrogéleket. Az előállított hidrogéleket mikroszerkezeti, reológiai és mechanikai tulajdonságaik alapján jellemeztük, valamint mértük az általános tablettázási segédanyagokból (poliakrilsav, hidroxipropil-metilcellulóz, kitozán) előállított tabletták adhézióját ezeken a géleken. Az eredmények alapján a molekulatömeg változtatásával jól szabályozhatóak voltak a gélek tulajdonságai; a molekulatömeg növelésével szívósabb hidrogéleket állítottunk elő, amelyek jól közelítették a valódi nyálkahártya tulajdonságait.

Köszönetnyilvánítás

A munka a DKÖP-26-1-BME-68, a TKP-9-8/PALY-2021 és az NKKP ADVANCED 152811 számú projektek Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával valósult meg.

Summary

An essential pharmaceutical aim is to achieve high bioavailability of active ingredients in both local and systemic drug administration in a patient-friendly way. Mucoadhesive dosage forms offer an excellent opportunity to meet this goal [1]. However, the interpretation of *ex-vivo* mucoadhesive measurements performed on animal tissues is challenging due to the natural diversity of the samples. Consequently, the understanding of the related sub-processes of mucoadhesion remains limited, highlighting the need for synthetic mucosa-mimetics. It is known from the literature, that hydrogels are suitable mucosa-mimetics, due to their high water content and viscoelastic properties, which are similar to those of native mucosa [2]. Based on our previous results, mucin-containing (the main macromolecular component of the mucosa) poly(vinyl alcohol) (PVA) hydrogels are promising candidates [3, 4]. Nevertheless, a hydrogel with similar stiffness and time dependent mechanical properties, yet with enhanced toughness, could model the mechanical properties of the mucosal tissues better [5]. Accordingly, as a new approach, mucin-containing PVA hydrogels were prepared in this work using PVA with different molecular weight and degree of hydrolysis. The hydrogels were characterized by their microstructural, rheological and mechanical properties. Furthermore, the adhesion of polymer tablets from generally used excipients (polyacrylic acid, hydroxypropyl methylcellulose, chitosan) on them were also analysed on these substrates. The properties of the hydrogels were highly tuneable by varying the molecular weight of the PVA; moreover, increasing the molecular weight enhanced the toughness of the hydrogels. These hydrogels closely approximated the properties of native mucosa.

125 Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék, Lágyműanyag Kutatócsoport, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Acknowledgements

Projects no. DKÖP-26-1-BME-68, TKP-9-8/PALY-2021, NKKP ADVANCED 152811 have been implemented with the support provided by the Ministry of Culture and Innovation of Hungary from the National Research, Development and Innovation Fund

Irodalomjegyzék/References

- [1]: S. Mansuri et al, React. Funct. Polym. 100 (2016) 151–172
- [2]: D. Hall et al, Soft Matter 7 (2011) 9620
- [3]: B. Gyarmati et al, Colloids Surf. B Biointerfaces 213 (2022) 11240
- [4]: G. Stankovits et al, Mater. Today Bio 30 (2025) 101416
- [5]: K. Szayly et al, J. Mol. Liq. 446 (2026) 129266

Multidimenzionális problématerkép az adaptív ipari energiamedzszment strukturális integrációjához

A multidimensional problem map for the structural integration of adaptive industrial energy management

Szeles József, Pató Sándor, Ruppert Tamás¹²⁶

Összefoglaló

Az ipari energiafelhasználás optimalizálása elkülönült technológiai alrendszerek mentén valósul meg, amelyek korlátozzák a rendszerszintű energiahatékonyság javítását. A gyártási folyamatok és a kiszolgáló energetikai rendszerek (pl. HVAC) integrációjának hiánya, valamint a statikus szabályozási struktúrák alkalmazása rejtett energiaveszteségekhez és alacsony adaptivitáshoz vezet.

Kutatásunk során workshopokon és ipari egyeztetéseken feltárt tapasztalatok alapján rendszerszintű problématerképet állítottunk fel, amely négy, egymással kölcsönhatásban álló dimenzió mentén azonosítja az energiahatékonyságot korlátozó tényezőket: technológiai integrációs hiányosságok, adat- és modellkorlátok, döntéshozatali struktúrák, valamint szervezeti feltételek.

Az elemzés rámutat arra, hogy az energiafelhasználás optimalizálása nem redukálható lokális szabályozási beavatkozásokra, hanem a teljes döntési és működési lánc – az adatgyűjtéstől a modellezésen és prediktív elemzésen át a többváltozós optimalizálásig – rendszerszintű újragondolását igényli.

A kutatás elsődleges hozzájárulása egy multidimenzionális, rendszerszintű problématerkép létrehozása volt, amely strukturált módon tárja fel az ipari energiamedzszment integrációs hiányosságait, és koncepcionális alapot teremt adaptív, adatvezérelt szabályozási és döntéstámogatási struktúrák jövőbeli fejlesztéséhez.

Az eredmények alátámasztják, hogy az ipari energiahatékonyság javítása csak integrált folyamat- és energiaáram-kezeléssel, valamint tanuló, dinamikus modellek alkalmazásával érhető el. A javasolt megközelítés hozzájárulhat a rejtett energiaveszteségek feltárásához, az energiarugalmasság növeléséhez és a fenntartható ipari működés megalapozásához.

Köszönetnyilvánítás

Ez a kutatás a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapjának támogatásával valósult meg az Egyetemi Kutatói Ösztöndíj Program keretében, a 2025-2.1.2-EKÖP-KDP-2025-00018/1 azonosítószámú projekt támogatásával.

Summary

Industrial energy optimisation is typically implemented through separate technological subsystems, which limits improvements in system-level energy efficiency. A lack of integration between manufacturing processes and supporting energy systems (e.g. HVAC) and the use of static control structures result in hidden energy losses and low adaptability.

Based on experiences gathered during our research, workshops and industry consultations, we have created a system-level problem map identifying factors limiting energy efficiency across four interacting dimensions: technological integration gaps; data and model constraints; decision-making structures; and organisational conditions.

Our analysis shows that optimising energy use cannot be reduced to local regulatory interventions, but requires systemic rethinking of the entire decision-making and operational chain – from data collection, to modelling and predictive analysis, to multivariate optimisation.

126 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

The research's primary contribution was creating a multidimensional, system-level problem map that reveals integration gaps in industrial energy management in a structured way, providing a conceptual basis for future development of adaptive, data-driven regulatory and decision support structures. The results confirm that improving industrial energy efficiency requires integrated process and energy flow management, as well as the use of dynamic, learning models. The proposed approach can help to reveal hidden energy losses, increase energy flexibility and lay the foundations for sustainable industrial operations.

Acknowledgements

This research was supported by the National Research, Development and Innovation Fund of the Ministry of Culture and Innovation for the University Research Scholarship Programme under the project No. 2025-2.1.2-EKÖP-KDP-2025-00018/1

Információvezérelt folyamatfejlesztés: a Bayes-optimalizálás előnye a klasszikus kísérlettervezéssel szemben

Information-driven process development:
Bayesian Optimization advantages over classical DOE

Gréta Tálosi¹²⁷, Alex Kummer¹²⁸, Zoltán Eller¹²⁹, Bálint Levente Tarcsay¹³⁰

Összefoglaló

A modern vegyipari folyamatok optimalizálása során a hagyományos, statikus kísérlettervezési (DOE-) módszerek gyakran ütköznek korlátokba a rendszerek nemlineáris komplexitása miatt, ami információs vakfoltokhoz és hatékonyságvesztéshez vezet. Ezen problémákra az adaptív, modellalapú módszerek nyújthatnak megoldást. Jelen tanulmány a klasszikus DOE és az adaptív Bayes-optimalizálás (BO) teljesítőképességének és különbségeinek szemléltetése érdekében szisztematikusan és számszerűen hasonlítja össze az egyes stratégiák hatékonyságát. A kvantitatív értékelés alapját a szükséges szimulációk száma (mérési költség), a prediktív pontosság (R^2), a modellbizonytalanság, valamint a valódi optimumtól mért euklideszi távolság vizsgálata képezte.

A tanulmány egy kétlépcsős elemzésre épült: elsőként egy exoterm szakaszos reaktor elméleti modelljén határoztuk meg a teljesítménymutatókat, majd egy Aspen HYSYS szoftverben szimulált, ipari léptékű könnyűbenzin-izomerizáló egységen teszteltük a módszereket. Ez utóbbi modell már hűen tükrözte a finomítói műveletekre jellemző összetett, többkomponensű fázisegyensúlyokat és reakcióviszonyokat. A klasszikus stratégiákat (faktoriális, válaszfelület-módszerek, Taguchi) egy Gauss-folyamatokra és adaptív kiválasztási függvényekre épülő Bayes-optimalizálási keretrendszerrel vetettük össze. Az eredmények igazolták, hogy az adaptív mintavételezés jelentős minőségi előrelépést kínál a merev kísérleti sablonokkal szemben. A komplex ipari esettanulmányban a modellalapú megközelítés nagyságrendekkel pontosabb eredményt adott: a globális optimumtól való eltérést (euklideszi távolság) 0,91-ről 0,07-re csökkentette. Mindezt kiemelkedő hatékonyság mellett érte el, hiszen 45%-kal kevesebb szimulációt igényelt, mint a hagyományos, sűrű faktoriális terv.

A kutatás rávilágít a klasszikus DOE alkalmazhatósági határaitra, és gyakorlati döntési keretrendszert kínál a folyamatmérnökök számára. Az eredmények alátámasztják, hogy az információvezérelt algoritmusokra való áttérés az Ipar 4.0 egyik elengedhetetlen fejlődési iránya, amely jelentősen alacsonyabb kísérleti költségek mellett teszi lehetővé a technológiai optimum megközelítését.

Summary

In the optimization of modern chemical processes, classical, static Design of Experiments (DOE) methods often face limitations due to non-linear complexity, which can lead to information “blind spots” and reduced efficiency. Adaptive, model-based methods offer a potential solution to these challenges. To illustrate the capabilities and differences of these methods, this study provides a quantitative benchmarking of classical DOE against adaptive Bayesian Optimization (BO) in an industrial context. The benchmarking was based on the required number of runs (cost of experiment), predictive accuracy (R^2), model uncertainty, and the Euclidean distance to the true global optimum.

The investigation follows a two-stage approach: first, establishing performance baselines using a theoretical exothermic batch reactor model, and then testing the methodologies on an industrial-scale light naphtha isomerization unit simulated in Aspen HYSYS. The latter model accurately reflects the complex multicomponent phase equilibria and reaction conditions typical of modern refinery operations.

127 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.; MOL Nyrt., 1117 Budapest, Dombóvári út 28.

128 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.; MOL Nyrt., 1117 Budapest, Dombóvári út 28.

129 MOL Nyrt., Budapest

130 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.; MOL Nyrt., 1117 Budapest, Dombóvári út 28.

Classical strategies (including Factorial, Response Surface designs and Taguchi) were benchmarked against a Bayesian framework utilizing Gaussian Process surrogate models and adaptive acquisition functions. The findings demonstrate that adaptive sampling offers a transformative leap in efficiency compared to rigid experimental templates. In the complex industrial case study, the model-based approach achieved an order-of-magnitude improvement in precision, reducing the Euclidean distance to the global optimum from 0.91 to 0.07. Remarkably, this superior accuracy was achieved while utilizing 45% fewer simulations than traditional dense factorial grids.

The scientific contribution of this work lies in defining the operational limits of classical DOE and proposing a practical decision framework for process engineers. By demonstrating that information-driven algorithms enable near-theoretical process performance with significantly reduced experimental budgets, this research establishes a necessary evolution for Industry 4.0 process development.

Dugattyógyűrű–hengerpersely rendszer CFD-alapú modellezése és súrlódási állapotainak elemzése OpenFOAM környezetben

CFD-based modelling of the piston ring–cylinder liner system
and analysis of frictional behaviour in OpenFOAM

Tuboly Bence¹³¹

Összefoglaló

A dolgozat célja egyazon fizikai probléma többféle modellezési megközelítéssel történő vizsgálata és az így kapott eredmények összehasonlítása volt. A munka során az OpenFOAM környezetben elérhető dinamikus hálózási módszerek kerültek áttekintésre, majd ezek közül az Overset és ACMI megoldások kerültek kiválasztásra a vizsgált gyűrű–hengerfal kapcsolat modellezésére. Összesen három modell és hat konfiguráció készült, textúrált és textúrázatlan változatban. Az értékelés a nyomás- és fázisfrakció-mezők, valamint a Couette–Poiseuille alapú súrlódási együttható meghatározása alapján történt. Az eredmények alapján az ACMI bizonyult a legstabilabb és fizikailag leginkább értelmezhető megközelítésnek.

Summary

The aim of this work was to investigate the same physical problem using multiple modelling approaches and to compare the obtained results. Dynamic mesh methods available in OpenFOAM were reviewed, and the Overset and ACMI approaches were selected for the numerical representation of the piston ring–cylinder liner contact. Altogether three models and six configurations were analysed in textured and untextured form. The evaluation was based on the pressure and phase-fraction fields as well as on the determination of an effective friction coefficient derived from Couette–Poiseuille flow assumptions. Based on the results, the ACMI approach proved to be the most stable and physically interpretable solution.

Bevezetés

A belső égésű motorok veszteségeinek csökkentésében kiemelt szerepe van a gyűrű–hengerfal kapcsolat súrlódási viszonyainak. Ennek egyik lehetséges javítási módja a kompressziós gyűrűk textúrálása, amelynek során a felületen kialakított mikronléptékű mintázatok a kenési állapot és ezáltal a súrlódás befolyásolását célozzák. A hagyományos 1D-s és kvázi 2D-s modellek a kavitációt jellemzően a nyomás megszűnéseként írják le, míg a CFD-alapú megközelítések a beépített kavitációs modellek segítségével részletesebb fizikai leírást adhatnak, ezáltal a súrlódásra gyakorolt hatásuk is megbízhatóbban vizsgálható [1]. A CFD-s megoldások között különösen kevés olyan található, amely dinamikus hálózási módszert is alkalmaz, ezért a téma további vizsgálata indokolt.

Dinamikus hálózási módszerek

Az OpenFOAM-ban több dinamikus hálózási megközelítés érhető el, például az AMI/ACMI, a mesh morphing, az overset mesh, az adaptív hálófinoztás és a teljes mozgó tartomány kezelése. A jelen probléma szempontjából az Overset és az ACMI módszer bizonyult relevánsnak, mivel ezek alkalmasak a relatív mozgás és a lokális geometriai kölcsönhatások explicit kezelésére. Az Overset módszer esetén egy mozgó, finomabb háló ágyazódik egy háttérhálóba; az adatcsere interpoláció útján történik. Előnye, hogy nagyobb mozgások is kezelhetők hálódéformáció nélkül, ugyanakkor a stabilitás erősen függ az átfedési tartomány kialakításától és az interpoláció minőségétől [2], [3], [4], [5]. Az ACMI esetén két nem konform felület között valósul meg csatolás, akár részleges fedettséggel is. Ez a módszer különösen hasznos lehet csúszó vagy részben fedett interfészek esetén, ugyanakkor érzékeny a csatolási felület elhelyezésére és a lokális hálómínőségre [6], [7].

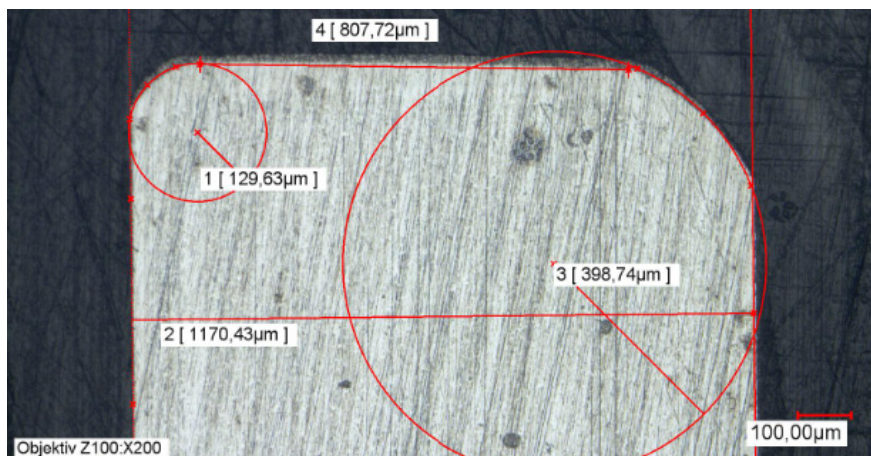
131 Széchenyi István Egyetem, Audi Hungaria Járműmérnöki Kar, 9026 Győr, Egyetem tér 1.

1. táblázat. A főbb dinamikus hálózási megközelítések összefoglalása

Módszer	Rövid leírás
ACMI	Nem konform, részlegesen fedett csúszó interfészek kezelése interpolációs csatolással.
Morphing	Hálódeformáció kis elmozdulások és topológiaváltozás nélküli mozgások leképezésére.
Overset	Egymást átfedő hálók alkalmazása nagyobb relatív mozgások kezelésére.
AMR	Lokális hálófinomítás a fontos régiókban a számítási költség csökkentése mellett.
Moving Domain	A teljes számítási tartomány merev testként mozog.

Modellek és topológiájuk

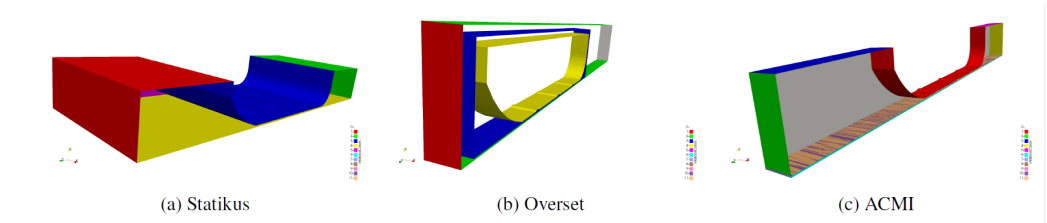
Három különböző modell került kialakításra, minden esetben kétdimenziós megközelítést alkalmazva a számítási igény csökkentése érdekében. A vizsgálatok során összesen hat konfiguráció került elemzésre: a statikus, az Overset és az ACMI megoldások textúrált és textúrázatlan változatai. A modellek geometriája Creo és Fusion 360 környezetben készült, míg a hálózás az OpenFOAM-ban elérhető módszerekkel történt. A modellek alapját egy EA888 2.0 TFSI motor kompressziós gyűrűje képezi. A gyűrű és a hengerfal közötti rés vastagsága egységesen $10\text{ }\mu\text{m}$ -nek került felvételre, amely a numerikus stabilitás és a megfelelő felbontás érdekében a valós értéknél nagyobb. Kisebb résvastagság alkalmazása esetén a szükséges hálófinomság jelentősen növekedne, ami kedvezőtlen cella-aspektus arányokhoz és nagyobb számítási igényhez vezetne. A két felület között $15\text{ }\mu\text{m}$ vastagságú, 0W-30 viszkozitási osztályú motorolaj paramétereivel jellemzett olajfilm került definiálásra. A geometria előkészítésének és a hálózási folyamatnak a részletesebb ismertetése a szakdolgozatban található [8].



1. ábra. Az EA888 2.0 TFSI motor kompressziós gyűrűjének elektronmikroszkópos keresztmetszeti becsült méretekkkel [1].

Mivel a különböző módszerekhez tartozó hálók közötti eltérések önmagukban nem szolgáltatnak elegendő információt, a modellek összehasonlítása topológiai szemléltetésen keresztül történik. A felületek külön színezésével lehetővé válik a különböző tartományok és interfészek egyértelmű azonosítása, ezáltal a működésbeli és szerkezeti különbségek szemléletes bemutatása. Az ábrák jobb átláthatósága érdekében minden bemutatott modell az x irány mentén azonos módon skálázásra került. A statikus modell topológiája

a legegyszerűbb, falakból és peremfelületekből áll. Az Overset-konfiguráció némileg összetettebb, mivel a mozgó geometria egy külön finomítási zónában helyezkedik el, és a háttérhálóval interpolációs kapcsolatban áll. A gyűrű és a hengerfal közötti résben a cellák interpolációja jelentős torzulást mutatott, ezért a felső tartomány nagyobb hézaggal került kialakításra a numerikus hibák és a divergencia elkerülése érdekében. Az ACMI-konfiguráció topológiája a statikus esethez hasonló, azonban a tartomány lokálisan kettéosztásra került egy, a hengerfaltól számított 5 µm magasságban elhelyezett sík mentén, létrehozva egy felső, mozgó és egy alsó, álló régiót.



2. ábra. A vizsgált modellek topológiai felépítése. A jobb átláthatóság érdekében a felület a +X irány felől szándékosan eltávolításra került [8].

Eredmények

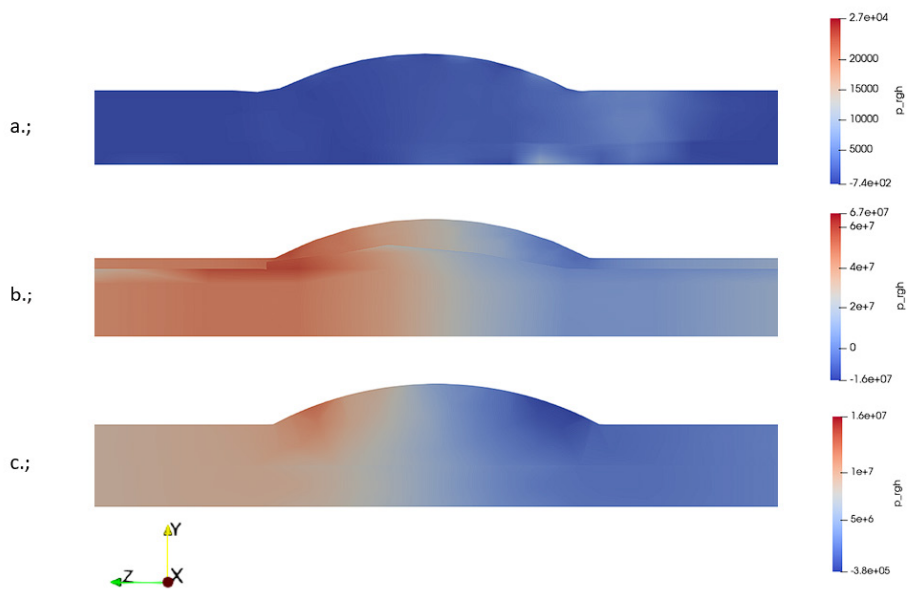
A kiértékelés a korábbi munkáimhoz hasonlóan [1], [8] a Couette–Poiseuille-áramlás feltételezésén alapult, amelynek segítségével egy effektív súrlódási együttható került meghatározásra a számított mezők alapján:

$$\mu_{\text{eff}} = \frac{\int_A \tau(x, y) \, dA}{\int_A P(x, y) \, dA} \tag{1}$$

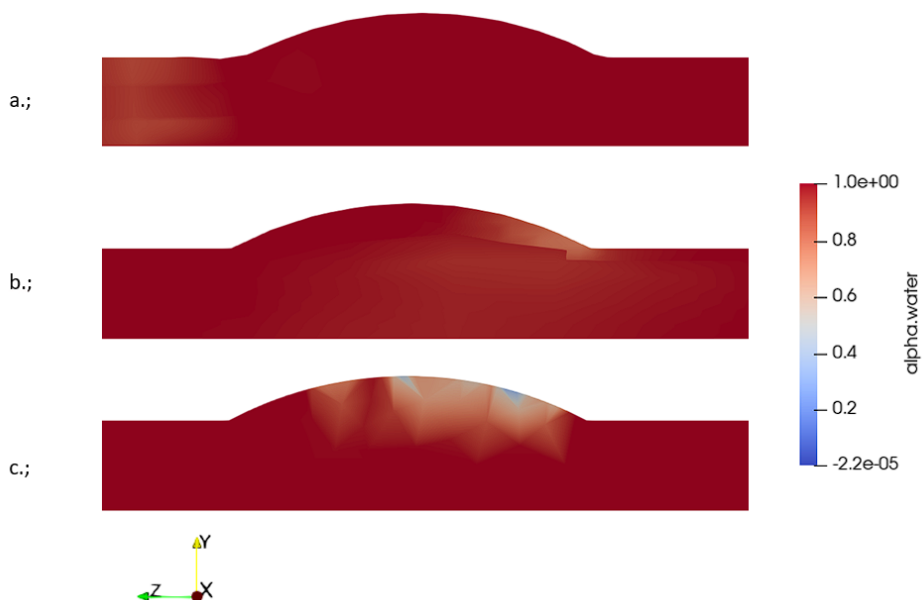
A vizsgálat során nem az abszolút súrlódási értékek közötti eltérést, hanem a textúrált és textúrázatlan esetek közötti relatív változás került értékelésre, mivel a modell nem képes a Stribeck-görbének megfelelő vegyes kenési állapot, illetve az időszakos fém–fém érintkezés leírására. 2. táblázat. A súrlódási együttható és a relatív változás összehasonlítása a különböző módszerek esetén [8].

Típus	Módszer	Gyűrű	COF, μ	$\Delta \mu$ [%]
Szimuláció	Statikus	textúrázatlan textúrált	0.0270853 0.0114788	41.41
Szimuláció	Overset	textúrázatlan textúrált	— 3.4312	—
Szimuláció	ACMI	textúrázatlan textúrált	0.0307757 0.0288649	6.62
Tribométer	—	textúrázatlan textúrált	0.1125 0.105	6.67

Az összesítő táblázat alapján megállapítható, hogy a statikus megközelítés esetén a mozgás gyűrűfalra történő kényszerítése nem vezet megbízható eredményekhez. Az Overset-módszer jelen alkalmazásban instablnak bizonyult, ami részben a hálómínőségéből, részben pedig a módszer sajátosságaiból, vagyis a topológiai változásból adódik. Ez a nyomás- és fázisfrakció-mezőkben is jól megfigyelhető. A textúrált Overset-esetben kapott súrlódási együttható jelentősen kilép a fizikailag értelmezhető tartományból, ezért e megközelítés további vizsgálata nem került folytatásra. Az ACMI-módszer bizonyult a legstabilabb megoldásnak; a fázisfrakció-mezőben jól azonosítható a kavitációs jelenség kialakulása.



3. ábra. A nyomásmezők összehasonlítása ugyanazon textúra környezetében:
(a) statikus, (b) Overset, (c) ACMI [8].



4. ábra. A fázisfrakció-mezők összehasonlítása ugyanazon textúra környezetében:
(a) statikus, (b) Overset, (c) ACMI [8].

Összefoglalás

A dolgozatban az OpenFOAM-ban elérhető dinamikus hálózási módszerek közül a vizsgált fizikai problémára releváns megoldások kerültek feltérképezésre és összehasonlításra. Három modell és hat konfiguráció alapján megállapítható, hogy a statikus megközelítés nem alkalmas a vizsgált jelenség megfelelő leírására, az Overset-módszer pedig a jelen konfigurációban instabillnak bizonyult. Az ACMI biztosította a legstabilabb és fizikailag leginkább értelmezhető eredményeket, valamint ennél a megközelítésnél volt a legjobban megfigyelhető a kavitáció kialakulása. A jövőbeni munka célja a különböző peremfeltételek hatásának részletes vizsgálata, az ACMI-módszer háromdimenziós kiterjesztése, valamint egy potenciálisan optimális textúrageometria meghatározása.

Irodalomjegyzék/References

- [1] B. Tuboly, "Kavitáció szimulációja texturált falak mentén: CFD megközelítések és modellek elemzése", TDK dolgozat, Győr, Magyarország, 2025. ápr. 6.
- [2] Z. Duan és Z. J.Wang, "High-Order Overset Flux Reconstruction Method for Dynamic Moving Grids", *AIAA Journal*, 58. évf., 10. sz., 4350–4363. old., 2020. doi: 10.2514/1.J059185.
- [3] M. Deuse és R. D. Sandberg, "Implementation of a stable high-order overset grid method for high-fidelity simulations", *Computers and Fluids*, 211. évf., 104449. old., 2020. doi: 10.1016/j.compfluid.2020. 104449.
- [4] D. J. Bodony, G. Zagaris, A. Reichert és Q. Zhang, "Provably stable overset grid methods for computational aeroacoustics", *Journal of Sound and Vibration*, 330. évf., 17. sz., 4161–4179. old., 2011. doi: 10.1016/j.jsv.2011.02.012.
- [5] F. Togashi, Y. Ito, K. Nakahashi és S. Obayashi, "Overset Unstructured Grids Method for Viscous Flow Computations", *AIAA Journal*, 44. évf., 7. sz., 1617–1623. old., 2006. doi: 10.2514/1.17933.
- [6] H. CFD. "Complex Mesh Motion Training Case". Accessed: 2026-03-30. cím: <https://holzmann-cfd.de/community/training-cases/complex-mesh-motion>.
- [7] E. Pusterhofer és colleagues, "Adaptive Cavitation Model Interface (ACMI) Coupling in OpenFOAM", *OpenFOAM Workshop Proceedings*, Implementation and validation of adaptive coupling for cavitation, 2018.
- [8] B. Tuboly, "Development of a moving mesh piston ring–cylinder liner model system for the analysis of friction states in OpenFOAM", BSc Thesis, Széchenyi István University, Audi Hungaria Faculty of Vehicle Engineering, Győr, 2025.

Új SPE-töltetek fejlesztése szennyvíz-monitorozáshoz kationos ciklodextrinek elektrosztatikus immobilizálásával

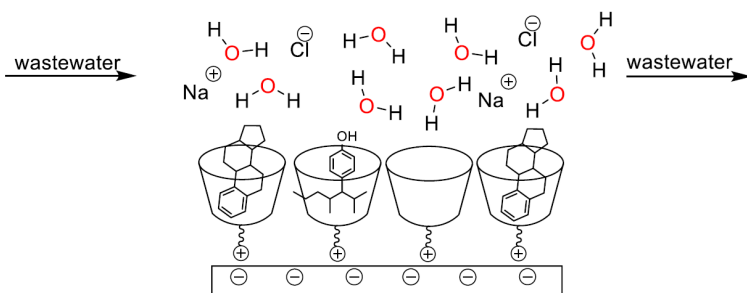
Development of novel SPE packings for wastewater monitoring via electrostatic immobilization of cationic cyclodextrins

Varga Bertalan, Ujj Dóra, Mireisz Tamás, Rapi Zsolt¹³²

Összefoglaló

A vízszennyezés az egyik legnagyobb kihívás a fenntarthatóság szempontjából, különösen az olyan szerves mikroszennyezők miatt, mint a gyógyszerek és hormonok, amelyeket a hagyományos szennyvíztisztítási eljárások nem távolítanak el hatékonyan. Ezek a vegyületek tartósan megmaradhatnak a környezetben, és akár az ivóvízbe is bekerülhetnek. Kimutatásuk érdekében világszerte vizsgálnak vízmintákat, gyakran szilárd fázisú extrakciót (SPE) alkalmazva az analitok feldúsítására. Az erős komplexképző képességükről ismert ciklodextrinek (CD-k) már több alkalommal ígéretesnek bizonyultak az ilyen szennyezők vizes oldatokból történő eltávolításában [1].

Kutatásunk célja pozitív töltésű CD-származékok szintézise, amelyek elektrosztatikus kölcsönhatás révén különböző szilárd fázisokra (pl. szilikagélre, kationcserélő gyantára) immobilizálhatók új SPE-töltetek fejlesztése céljából. Petr és munkatársai már igazolták ennek a módszernek az alkalmasságát β -ciklodextrin-(BCD-)származékok rögzítésével egy anionos membránon triptofán enantiomerek elválasztására [2]. Kutatásunk során különböző ismert és új BCD-származékokat állítottunk elő, amelyek permanens pozitív töltéseket tartalmaznak. Immobilizálásukat szulfonil-propil-módosított szilikagélen végeztük el. Eredményeink igazolják az ilyen típusú SPE-töltetek alkalmazhatóságát szennyvízanalízisben, azonban a szilárd hordozó típusát és a ciklodextrinek szerkezetét még optimalizálni kell. Jövőbeli célunk többször használható SPE-töltetek előállítását, amelyek hatékonyabbak és szelektívebbek a jelenleg kereskedelmi forgalomban kapható fordított fázisú termékeknél.



1. ábra. Szerves mikroszennyezők kötődése ciklodextrin-alapú SPE-töltethez.

Summary

Water pollution is a major challenge in environmental sustainability, particularly due to organic micropollutants such as pharmaceuticals and hormones that are not effectively removed by conventional wastewater treatment. These compounds can persist in the environment and even reach drinking water. To detect them, researchers analyze water samples worldwide, often applying solid phase extraction (SPE) to concentrate the analytes. CDs, known for their strong complexation ability, have already shown promise in removing such pollutants from aqueous solutions [1].

¹³² Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Szerves Kémia és Technológia Tanszék, 1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

The aim of our research is to synthesize positively charged CD derivatives, which can be immobilized on various solid phases (e.g. silica gel, cation exchange resin) via electrostatic interaction for the development of new SPE packings. Petr et al. have already proved the suitability of this method by anchoring several BCD derivatives on an anionic membrane for the separation of tryptophan enantiomers [2]. During our research work, a set of known and novel BCD derivatives were prepared containing permanent positive charges. Their immobilization was performed on sulfonylpropyl-modified silica gel. Our results demonstrate the applicability of this kind of SPE packings for wastewater analysis, however, the type of solid support and the structure of the CDs need to be optimized. Our future goal is the preparation of reusable SPE cartridges that are more efficient and selective than the reversed phase cartridges available on the market.

Irodalomjegyzék/References

- [1] Tian, B., Hua, S., Tian, Y., Liu, J., *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 28, 1317 (2021)
- [2] Kasal, P., Michel, M., Gaálová, J., Cuřínová, P., Izák, P., Dian, J., Jindřich, J., *Mater. Today Commun.* 27, 102234 (2021)

S. coelicolor biomassza extracelluláris polimer tartalmának vizsgálata hasznosítás céljából

Characterization of the extracellular polymeric substances of *S. coelicolor* biomass for potential utilization

Vonyó Viktória Zoltána, Hülberné Beyer Éva Anna, Koók László¹³³

Összefoglaló

Az extracelluláris poliszacharidok (EPS) számos mikroorganizmus által termelt nagy molekulatömegű szénhidrát alapú biopolimerek, amelyek elengedhetetlenek a biofilm kialakulásában. Szerkezetük rendkívül változatos, különböző monoszacharid egységekből (például glükózból, fruktózból vagy mannózból) épülhetnek fel. Az EPS fontos feladata a biofilm létrehozása és annak stabilizálása mellett a mikroorganizmusok védelme különböző környezeti stresszhatásokkal szemben. Ilyenek lehetnek a szélsőséges hőmérséklet vagy pH, kiszáradás, antibiotikumok, oxidáló anyagok és nehézfémek.

Kedvező fizikai és reológiai tulajdonságaik miatt az EPS-ok számos ipari területen alkalmazhatók, például gélképző, emulgeáló, sűrítő vagy flokkuláló anyagként az élelmiszer- és kozmetikai iparban, valamint a szennyvízkezelési folyamatokban. Emellett jelentős potenciállal rendelkeznek a gyógyszeripari és orvosi biológiai kutatásokban is, mivel egyes exopoliszacharidok bioaktív tulajdonságokkal bírnak.

Streptomyces fermentlevekkel végzett szűrési kísérleteink során azt tapasztaltuk, hogy az idősebb tenyészetek esetén adott pH-érték mellett a szűrhetőség jelentősen romlik a fiatal tenyészetekkel szemben. Feltételezhető, hogy a sejtfelületen kialakuló EPS-mátrix volt az oka.

A vizsgálat során *Streptomyces coelicolor* biomasszákból származó EPS-összetételét elemeztük két eltérő tenyésztési technikából származó minta esetében. Egy fermentációs kultúrából, illetve egy membrán felületen kialakult biofilmből. Az EPS-frakciót 60 °C-os hőkezeléssel, majd kationcserélő gyanta alkalmazásával választottuk el a sejtektől. A kapott frakcióból 24 órás dialízissel távolítottuk el az alacsony molekulatömegű komponenseket, majd a poliszacharid-tartalmat fenol-kénsavas fotometriás módszerrel határoztuk meg.

Az eredmények rámutattak, hogy az EPS-jelenléte a downstream műveletek hatékonyságát befolyásoló tényezőként jelenik meg, ugyanakkor új, hasznosítható melléktermékként is értelmezhető.

Köszönetnyilvánítás

A kutatás az NKKP-EXCELLENCE 153995 projekt keretében, a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal támogatásával valósult meg.

Summary

Extracellular polymeric substances (EPS) are high-molecular-weight, carbohydrate based biopolymers produced by numerous microorganisms, playing a crucial role in biofilm formation. Their structure is highly diverse, consisting of various monosaccharide units (e.g., glucose, fructose, or mannose). In addition to contributing to the formation and stabilization of biofilms, EPS protect microorganisms against various environmental stress factors, such as extreme temperature, or pH, desiccation, antibiotics, oxidizing agents, and heavy metals.

Due to their favorable physical and rheological properties, EPS can have several industrial applications, for example as gelling, emulsifying, thickening, or flocculating agents in the food and cosmetic industries, as well as in wastewater treatment processes. Furthermore, they hold significant potential in pharmaceutical and biomedical research, as certain exopolysaccharides exhibit bioactive properties.

133 Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

The present work was motivated by observations from previous fermentation experiments, where filtration of fermentation broth at specific pH values significantly slowed down, in some cases requiring several hours. It is hypothesized that EPS present on the cell surface may be responsible for this phenomenon.

In this study, the composition of EPS derived from *Streptomyces coelicolor* biofilms was analysed using samples obtained from two different cultivations techniques: a submerged fermentation culture and a biofilm from a membrane bioreactor. EPS extraction was performed using heat treatment (60°C) followed by a cation-exchange resin, agitation, and centrifugation. The obtained EPS extracts were subjected to 24-hour dialysis to remove low-molecular-weight components, and the polysaccharide content was determined using the phenol-sulfuric acid photometric method.

The results indicate that the presence of EPS acts as a factor influencing the efficiency of downstream processing operations, while also representing a potentially valuable by-product.

Acknowledgements

This work was supported by National Research, Development and Innovation Office under grant number NKKP-EXCELLENCE 153995.

A paraméterter kondicionálása a kristályosodási kinetika megbízható, optimalizáción alapuló azonosításához populációmérleg-modellekben

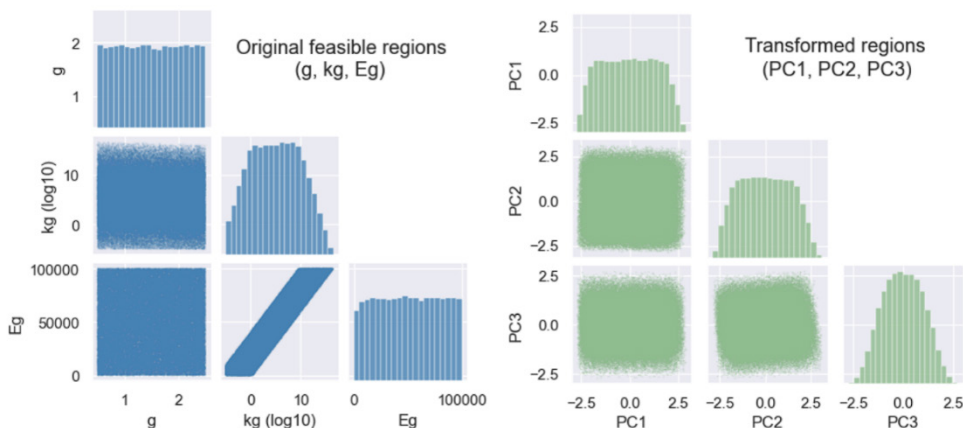
Conditioning the parameter space for reliable optimization-based identification of crystallization kinetics in population balance models

Wiederschitz Diána¹³⁴, Szilágyi Botond¹³⁵, Kovács Edith Alice¹³⁶

Összefoglaló

A kristályosodási modellek kinetikai paramétereinek becslése a gyakorlatban közismerten nehéz feladat, mivel a nehézség nem csupán a nemlinearitásból vagy a mérési zajból adódik. Sok paraméterkombináció esetén a populációmérleg-modell fizikailag értelmetlen viselkedést produkál. Ennek következtében az optimalizáló algoritmus a kiértékelések jelentős részét a fizikailag értelmezhető tartományon kívül végzi, ami miatt a modell numerikus megoldója az optimalizáció során gyakran hibával leáll.

Ebben a munkában egy olyan azonosítási keretrendszert javasolunk, amely kifejezetten kihasználja a megengedett paramétertartomány szerkezetét. Először diszkrét mintavételezést végeztünk annak meghatározására, hogy mely paraméterkombinációk vezetnek fizikailag elfogadható modellviselkedéshez. Ez a mintavételezés gyakorlatilag feltérképezi a paraméterter megengedett tartományát. Ezt követően főkomponens-analízist (PCA) alkalmaztunk koordinátatranszformációként. A főkomponensek becslése az eredeti kinetikai paraméterek helyett lazítja a nemlineáris kényszereket, és egyszerű határokkal helyettesíti azokat, ami lehetővé teszi, hogy az optimalizáló hatékonyan mintavételezzon, miközben elkerüli a fizikailag értelmetlen vagy numerikusan instabil régiókat.



1. ábra. Az eredeti paraméterter és az átalakított paraméterter a növekedési paraméterek esetén.

A módszert egy populációmérleg-alapú, szakaszos hűtési kristályosodási modellre alkalmazzuk, amely tartalmazza a nukleáció, a növekedés és az agglomeráció folyamatait. A célfüggvény az eltérést méri a hat különböző üzemi körülmény mellett gyűjtött kísérleti referenciaadatokról. Az eltérést a kristálméret-eloszlás percentilisei (D10, D50, D90), valamint a koncentrációprofilok alapján határozzuk meg, majd egy súlyozott célfüggvénybe aggregáljuk. Két további, a becslés során nem használt kísérlet szolgál a kapott

134 Analízis és Operációkutatás Tanszék, Matematikai Intézet, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

135 Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar, Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műgyetem rkp. 3–9.

136 Analízis és Operációkutatás Tanszék, Matematikai Intézet, BME

kinetikai paraméterek validálására. Az optimalizáció a transzformált térben Bayes-féle optimalizációval történik, Expected Improvement akvizíciós stratégiával, amely hatékonyan irányítja a mintavételezést. Az előzetes eredmények azt mutatják, hogy a keresés korlátozása a megengedett tartományra jelentősen csökkenti a szükséges modellkiértékelések számát, és javítja a robusztusságot a kezdeti becslésekre nézve. A keretrendszer célja tehát nem a fizikai modell lecserélése vagy egy új optimalizáló algoritmus bevezetése, hanem a paraméterbecslési feladat olyan újraformulálása, amelyben az optimalizáló csak fizikailag értelmes régiókban működik. Így a megközelítés célja elsősorban a kristályosodási kinetika azonosításának megbízhatóságának és reprodukálhatóságának javítása, nem pusztán a számítási idő csökkentése.

Summary

Estimating the kinetic parameters of crystallization models is well known to be difficult in practice, as the difficulty does not arise solely from nonlinearity or measurement noise. For many parameter combinations, the population balance model produces physically meaningless behavior. As a consequence, the optimization algorithm performs a significant portion of its evaluations outside the physically meaningful region, which often causes the numerical solver of the model to fail during optimization.

In this work, we propose an identification framework that explicitly exploits the structure of the feasible parameter region. First, discrete sampling is performed to determine which parameter combinations lead to physically acceptable model behavior. This sampling effectively maps the feasible region of the parameter space. Subsequently, principal component analysis (PCA) is applied as a coordinate transformation. Estimating the principal components instead of the original kinetic parameters relaxes the nonlinear constraints and replaces them with simple bounds, allowing the optimizer to sample efficiently while avoiding physically meaningless or numerically unstable regions.

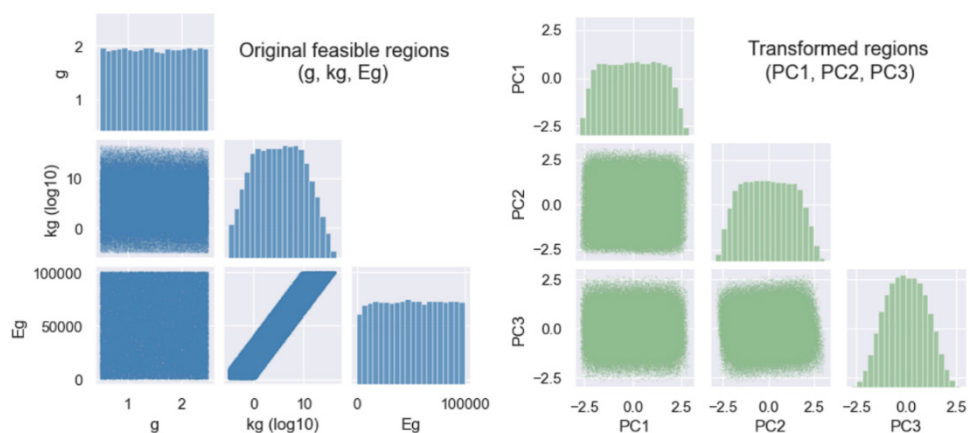


Figure 1. Original parameter space and transformed parameter space for the growth parameters.

The method is applied to a population balance–based batch cooling crystallization model that includes nucleation, growth, and agglomeration processes [1]. The objective function measures the deviation from experimental reference data collected under six different operating conditions. The mismatch is quantified using the crystal size distribution percentiles (D10, D50, D90) together with the concentration profiles and aggregated into a weighted objective function. Two additional experiments not used during the estimation are used to validate the obtained kinetic parameters. Optimization in the transformed space is performed using Bayesian optimization with an Expected Improvement acquisition strategy to efficiently guide sampling.

Preliminary results indicate that restricting the search to the feasible region significantly reduces the number of required model evaluations and improves robustness with respect to the initial parameter guesses. The aim of the framework is therefore not to replace the physical model or to introduce a new optimization algorithm, but to reformulate the parameter estimation problem so that the optimizer operates only within physically meaningful regions. In this way, the approach aims to improve the reliability and reproducibility of crystallization kinetic identification rather than merely reducing computational time.

Irodalomjegyzék/References

- [1] B. Szilagyi, A. Eren, J. L. Quon, C. D. Papageorgiou, Z. K. Nagy, *Crystal Growth & Design* 2020, 20, 3979–3996.

Nanoméretű fotokatalizátorok kapszulázása kitozánbevonatokban

Encapsulation of photocatalytic nanoparticles in chitosan coatings

Yu Lang Richard¹³⁷, Demény Petra¹³⁸, Márton Péter¹³⁹, Albert Emőke¹⁴⁰,
Szolnoki Beáta¹⁴¹, Madarász János¹⁴², Szabó Tamás¹⁴³, Hórvölgyi Zoltán¹⁴⁴

Összefoglaló

A fotokatalizátor-nanoszemcsékben az elektromágneses gerjesztés hatására az elektronok a vegyértéksávból a vezetési sávba gerjesztődnek, ezzel „lyukakat” hagyva maguk után. Az így keletkező töltéshordozók képesek redoxi-reakciókon keresztül szerves szennyezőket degradálni. Az ismételt felhasználás szempontjából előrelépést jelenthet olyan bevonatok fejlesztése, amelyekben a katalizátorszemcséket csapdázzuk, és emellett biztosítjuk mind a szennyezőanyagok, mind a fotodegradációs termékek megfelelő sebességű diffúzióját a rétegben. Ígéretes mátrixanyag erre a kitozán, amelynek tulajdonságait fizikai és kémiai keresztkötésekkel is lehet módosítani a megfelelő permeabilitás és – vizes közegekben való felhasználás esetén – a leázással szembeni stabilitás biztosítása érdekében. A kutatómunka során üvegfelületeken kialakított, citromsavval és tanninsavval keresztkapcsolt kitozánbevonatokban csapdázzunk fotokatalizátor nanoszemcséket (TiO_2 , $g\text{-C}_3\text{N}_4$), amelyek tulajdonságait terveink szerint UV-látható és FTIR-spektroszkópiai, pásztázó szögű reflektometriai, spektroszkópiai ellipszometriai, illetve elektrokémiai vizsgálatokkal jellemezzük. A kompozit bevonatok fotoaktivitását színezékdegradációs mérésekkel vizsgáljuk, metilnarancs-modellszínezéket alkalmazva. Távlati célunk az előállított bevonatok szennyvizek tisztításában való felhasználása.

Summary

In photocatalytic nanoparticles, electromagnetic excitation causes electrons to be excited from the valence band to the conduction band, leaving holes behind. The resulting charge carriers can degrade organic pollutants via redox reactions. In terms of reuse, progress can be made by developing coatings that trap catalyst particles and, in addition, ensure appropriate diffusion of pollutants and photodegradation products within the layer. Chitosan is a promising matrix material whose properties can be modified by physical and chemical cross-linking to ensure the appropriate permeability and, when used in aqueous media, stability against degradation. During our research, photocatalytic nanoparticles (TiO_2 , $g\text{-C}_3\text{N}_4$) are encapsulated in chitosan coatings modified with citric acid and tannic acid formed on a glass substrate. Their properties will be characterized by UV-visible and FTIR spectroscopy, scanning angle reflectometry, spectroscopic ellipsometry, and electrochemical tests. The photoactivity of the composite coatings will be examined by dye degradation measurements, applying methyl orange as a model dye. Our long-term goal is to use the coatings for wastewater treatment.

Köszönetnyilvánítás/Acknowledgments

A Doktoranduszi Kiválósági Ösztöndíjprogram (DKÖP, pályázati azonosító: DKÖP-26-1-BME-115) által támogatott projekt a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott, valamint a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem támogatásával valósult meg. Továbbá a kutatómunkát az

137 Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, 1111 Budapest, Műegyetem rakpart 1–3.

138 BME, Budapest

139 BME, Budapest; HUN-REN Energiatudományi Kutatóközpont, Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet, 1121 Budapest, Konkoly Thege Miklós út 29–33.

140 BME, Budapest

141 BME, Budapest

142 BME, Budapest

143 HUN-REN Természettudományi Kutatóközpont, Anyag- és Környezetkémiai Intézet, 1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

144 BME, Budapest

Egyetemi Kutatói Ösztöndíjprogram támogatta (pályázati azonosító: EKÖP-25-4-I-BME-132). A kutatáshoz hozzájárult a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) STARTING 152904 számú pályázata. A TKP-9-8/PALY-2021 és TKP-6-6/PALY-2021 számú projektek a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a TKP2021-EGA és a TKP2021-NVA pályázati programok finanszírozásában valósultak meg.

The project supported by the Doctoral Excellence Fellowship Programme (DCEP, grant no.: DKÖP-26-1-BME-115) is funded by the National Research Development and Innovation Fund of the Ministry of Culture and Innovation and the Budapest University of Technology and Economics. Further support was provided by the National Research, Development and Innovation Office (Project no.: EKÖP-25-4-1-BME-132). This work was supported by the National Research, Development and Innovation Office of Hungary (Project no.: STARTING 152904). This work was supported by Projects no. TKP-9-8/PALY-2021 and TKP-6-6/PALY-2021, which have been implemented with the support provided by the Ministry of Culture and Innovation of Hungary from the National Research, Development and Innovation Fund, financed under the TKP2021-EGA and TKP2021-NVA funding schemes.

Kaolinit nanotekercsek előállításának fejlesztése

Development of the Synthesis of Kaolinite Nanoscrolls

Zajác Miklós, Kristófné Makó Éva¹⁴⁵

Összefoglaló

A kaolinit szerkezeti felépítése a kettősrétegek közötti térbe megfelelő molekulák beépítésével és helyettesítésével megváltoztatható. Ezt a műveletet interkalációnak nevezik, amihez általában szerves molekulákat használnak fel. Ha több egymást követő interkalációval a rétegeket térben kellően elválasztjuk egymástól, akkor tekercseket formálnak. A kaolinit nanotekercseknek fontos szerepe lehet többek között a katalizátorok, műanyag nanokompozitok, elektorreológiai folyadékok és gyógyszerek fejlesztése szempontjából.

Kutatásommal a kaolinit nanotekercsek előállítását kívánom fejleszteni. Célom, hogy kísérleti úton összefüggéseket figyeljek meg a kiindulási kaolinit kristályosodottsági foka és a kialakult nanotekercsek minősége között. Továbbá azt is szeretném jobban megismerni, hogy az előbbiek hogyan befolyásolják az interkaláció egyes lépéseit. A kialakított prekursorok és termékek elemzése röntgendiffrakcióval, Fourier-transzformációs infravörös spektroszkópiával, termikus analízissel és transzmissziós elektronmikroszkóppal történt.

A kaolinit nanotekercsek előállítását három nyersanyag felhasználásával végeztem: surmini, zettlitz és szegi kaolin. Ezekben a kaolinit ásvány kristályosodottsági foka nagymértékben eltér egymástól. Ezeket a kaolinokat ugyanazon interkalációs lépéseknek vetettem alá, hogy a kialakított nanotekercsek tulajdonságai jól összehasonlíthatók legyenek. Első lépésben a mintákat 9:1 tömegarányú dimetil-szulfoxid-víz oldattal elkevertem, és 60 °C-on 24 órán át állni hagytam. Az így kapott prekuzort ezután metanollal interkaláltam 130 °C-on, háromszor 9 órás kezeléssel. A mintát ezután cetil-trimetil-ammonium-klorid metanolos oldatával kezeltem 80 °C-on 48 órán keresztül. Az eljárás végén a mintákat etanollal, ultrahangos keverő segítségével mostam.

A vizsgálatok alapján elmondható, hogy mindhárom kaolinitből sikerült minden lépésben a megfelelő interkalációs komplexet előállítani. Megállapítható, hogy a kristályosodottsági fok csökkenésével kismértékben romlik az interkalációfok, de a legrosszabb esetben is 87%-os érték érhető el. A kezelések eredményeként mindhárom kaolinitből nagy számban keletkeztek nanotekercsek. A tekercsek hossza és rendezettsége a kristályosodottság csökkenésével csökken.

Summary

The structure of kaolinite can be modified by the insertion and substitution of suitable molecules into the interlayer space between the double layers. This process is referred to as intercalation and is typically carried out using organic molecules. If the layers are sufficiently separated through successive intercalation steps, they form scroll-like structures. Kaolinite nanoscrolls can play an important role in the development of catalysts, polymer nanocomposites, electrorheological fluids, and pharmaceuticals.

The aim of my research is to improve the synthesis of kaolinite nanoscrolls. My objective is to experimentally investigate the relationship between the crystallinity of the raw kaolinite and the quality of the resulting nanoscrolls. Furthermore, I want to better understand how these factors influence the individual steps of the intercalation process. The prepared precursors and products were characterized by X-ray diffraction, Fourier transform infrared spectroscopy, thermal analysis, and transmission electron microscopy.

The synthesis of kaolinite nanoscrolls was carried out using three raw materials: Surmin, Zettlitz, and Szegi kaolin. The crystallinity of the kaolinite mineral differs significantly among these samples. All kaolins were subjected to the same intercalation steps to ensure comparability of the resulting nanoscroll properties. In the first step, the samples were mixed with a dimethyl sulfoxide–water solution (9:1 mass ratio) and

145 Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Anyagmérnöki Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

aged at 60°C for 24 hours. The obtained precursor was then intercalated with methanol at 130°C through three treatments of 9 hours each. Subsequently, the samples were treated with a methanol solution of cetyltrimethylammonium chloride at 80°C for 48 hours. Finally, the samples were washed with ethanol using ultrasonic agitation.

Based on the results, it can be concluded that the appropriate intercalation complexes were successfully formed at each step for all three kaolinites. It was observed that with decreasing crystallinity, the degree of intercalation slightly decreases; however, even in the least favorable case, a value of 87% was achieved. As a result of the treatments, a large number of nanoscrolls were formed from all three kaolinites. The length and structural order of the nanoscrolls decrease with decreasing crystallinity.

