



# SpectrOpus

Az MKE Spektrokémiai Társaságának hírlevele. Megjelenik negyedévente.

VI. évfolyam, 4. szám

2024. december 31.

## Előszó / Foreword

Kedves Olvasók!

Az év vége mindig remek alkalom arra, hogy visszatekintsünk az elmúlt hónapokra, és egyúttal előretekintsünk a következő esztendő várható eseményeire. A SpectrOpus idei utolsó száma is ezt a kettős célt szolgálja: számot vet az elmúlt időszak fontos történéseivel, és ízelítőt ad a 2025-ös év tudományos programjaiból. Hírt adunk a 2025. február 11-12-én megrendezésre kerülő **Laborotechnika Kiállításról és Analitikai Ankétről**, amely az ELTE Gömb Aulájában kerül lebonyolításra. Előzetes értesítést olvashatnak a **64. Magyar Spektrokémiai Vándorgyűlésről**, amelyet 2025. november 5-7. között Balatonszárszón rendezünk meg. A Vándorgyűléssel párhuzamosan szerveződik a **XVI. Környezetvédelmi Analitikai és Technológiai Konferencia** is. Az új generáció képviselőiként Dorkota Andrea és Kántor Mónika ismertetik kutatási témáikat, amelyek a vízminőség-ellenőrzéstől a fenntarthatóságig számos aktuális kérdést érintenek. Továbbá beszámolunk a **40. Borsodi Vegyipari Napról**, amely jubileumi alkalommal, a Magyar Tudomány Ünnepe keretében került megrendezésre, és a magyar vegyipar jeles eseményeit idézte fel. Külön öröm számunkra, hogy ebben a lapszámban közöljük a 2024. október 4-én, a Magyar Tudományos Akadémia Titkárságán megtartott **Tudományos Ülésünk** előadásainak ki-

Dear Readers,

The end of the year is always a great opportunity to reflect on the past months while also looking ahead to the events of the coming year. The final issue of SpectrOpus for this year serves this dual purpose: it reviews significant happenings of the recent period and offers a preview of the scientific programs planned for 2025. We bring you news about the **Laboratory Technology Exhibition and Analytical Symposium** to be held on February 11-12, 2025, at the ELTE Globe Hall. You will also find preliminary information about the **64<sup>th</sup> Hungarian Spectrochemical Conference**, which will take place from November 5-7, 2025, in Balatonszárszó. The **16<sup>th</sup> Environmental Analytical and Technological Conference** will be held concurrently with our conference. Representing the new generation, Andrea Dorkota and Mónika Kántor will introduce their research topics, covering a range of timely issues from water quality monitoring to sustainability. Additionally, we report on the **40<sup>th</sup> Borsod Chemical Industry Day**, a jubilee event held during the Hungarian Science Festival, which recalled notable milestones in Hungarian chemical industry history. We are especially delighted to include abstracts of the presentations delivered at our **Scientific Meeting** held on October 4, 2024, at the Secretariat of the Hungarian Academy of Sciences.

## Tartalom/ Content

Foreword	1
Analytical Scientific Meeting 2025	2
64 <sup>th</sup> Spectrochemical Conference	3
Andrea Dorkota	4
Mónika Kántor	6
40 <sup>th</sup> Borsod Chemical Industry Day	7
Presentation by Ferenc Krausz	10
Abstract by András Dancsó	14
Abstract by Zita Zrínyi	14
Abstract by Gábor Maász	17
Proceedings by Péter Horváth	18

vonatát is. Végül, de nem utolsó sorban olvashatnak Krausz Ferenc, Nobel-díjas tudósunk **Tudományos Expón** tartott előadásáról, amely a kutatás és az innováció határait feszegető alap kutatások jelentőségét mutatta be. Reméljük, hogy a mostani lapszám is értékes olvasnivalót nyújt Önöknek, és inspirációt merítenek a tudományos közösségünk gazdag és változatos munkájából. Kívánunk Önöknek sikerekben, eredményekben és felfedezésekben gazdag újévet!

Minden jót kívánunk!

Üdvözlettel:

A Spectropus szerkesztősége  
2024. december

Last but not least, you can read about the lecture delivered by our Nobel Prize-winning scientist, Ferenc Krausz, at the **Science Expo**, where he highlighted the importance of groundbreaking fundamental research that pushes the boundaries of innovation and discovery. We hope this issue offers valuable reading material and inspiration, drawing from the rich and diverse work of our scientific community. We wish you a new year filled with success, achievements, and discoveries!

Best regards,

The Editorial Team of SpectrOpus

December, 2024.

## **Analitikai Ankét a Labortechnika Kiállításon/ *Analytical Scientific Meeting at the Laboratory Technology Exhibition***

Kedves Kollégák!

Szeretnénk felhívni a figyelmüket a 2025. február 11-12-én megrendezésre kerülő Labortechnika Kiállításra és **Analitikai Ankétra**, melynek az ELTE Gömb Aulája ad otthont, Budapesten. A tudományos Ankét az AKKTB, az MKE Analitikai Szakosztálya és az MKE Spektrokémiai Társasága közös szervezésében valósul meg és analitikai fejlesztésekről, valamint korszerű alkalmazásokról szóló előadások bejelentésére van lehetőség, doktoráns hallgatók szakmai bemutatkozásra is kitűnő alkalmat teremtve.

További részletek és a jelentkezési lehetőségek a Labortechnika Kiállítás és az Analitikai Ankét honlapján (<https://analitikaexpo.mke.org.hu/>) található. A rendezvény nyelve a magyar.

Üdvözlettel:  
Szerkesztők

Dear Colleagues,

We would like to draw your attention to the Laboratory Technology Exhibition and Analytical Scientific Meeting to be held on February 11-12, 2025, hosted in the ELTE Sphere Hall, Budapest. The scientific meeting is jointly organized by the Analytical and Environmental Chemical Scientific Committee (AKKTB), the Analytical Department of the Hungarian Chemical Society (MKE) and the Spectrochemical Society of the MKE. It is possible to announce presentations on analytical developments and modern applications there, creating an excellent opportunity for doctoral students to introduce themselves professionally.

Further details and application options can be found on the website of the Laboratory Technology Exhibition and the Analytical Scientific Meeting (<https://analitikaexpo.mke.org.hu/>). The language of the event is Hungarian.

Regards,  
Editors

## Előzetes értesítés a 64. Magyar Spektrokémiai Vándorgyűlésről / *Preliminary notice on the 64<sup>th</sup> Hungarian Spectrochemical Conference*

Kedves Olvasók!

A Magyar Kémikusok Egyesületének (MKE) Spektrokémiai Társasága (SKT) 2025-ben megrendezi a **64. Magyar Spektrokémiai Vándorgyűlést**.

A rendezvény helyszíne és időpontja:

**Balatonszárszó, SDG Családi Hotel és Konferencia-központ, 2025. november 5-7.**

Társrendezvényünk immáron hagyományosan:

**a XVI. Környezetvédelmi Analitikai és Technológiai Konferencia,**

melyet azonos helyszínen és időpontban, önálló, párhuzamosan lebonyolított rendezvényként tervezünk megszervezni. Az MSV fórumot biztosít az atom- és a molekulaszpektroszkópia elméleti kérdéseivel és gyakorlati alkalmazásaival, valamint a környezetvédelmi analitika aktuális kérdéseivel foglalkozó szakemberek véleménycseréjéhez és továbbképzéséhez.

### Általános információk

A 64. MSV hivatalos nyelve magyar, ugyanakkor a magyarországi kutató- és felsőoktatási intézményben kutatást végző külföldi hallgatóknak szakmai munkájuk angol nyelven történő bemutatására is lehetőséget biztosítunk. A rendezvény keretében a Török Tibor Emlékérem átadására is sor kerül. Mind szóbeli, mind poszter előadásokat elfogadunk, de a szóbeli



Dear Readers,

The Spectrochemical Society (SKT) of the Hungarian Chemical Society (MKE) will organize the **64<sup>th</sup> Hungarian Spectrochemical Conference** in 2025.

Venue and date of the event:

**Balatonszárszó, SDG Family Hotel and Conference Center, November 5-7, 2025**

Our companion event is now traditionally:

**the XVI. Environmental Analytical and Technological Conference,**

which we plan to organize at the same location and time, as an independent, parallel event. The MSV provides a forum for the exchange of opinions and further training of specialists dealing with the theoretical issues and practical applications of atomic and molecular spectroscopy, as well as current issues of environmental analytics.

### General information

The official language of the 64<sup>th</sup> MSV is Hungarian, but at the same time, we offer foreign students conducting research in Hungarian research and higher education institutions the opportunity to present their professional work in English. The Tibor Török Memorial Medal will also be handed over as part of the event. Both oral and poster presentations are accepted, but oral presentations are preferred. We welcome any presentation illustrating the frontier between science and in-

előadásokat részesítjük előnyben. Szívesen fogadunk a tudomány és ipar határterületét bemutató bármilyen előadást is.

Amint az első körlevél megszületik, értesítjük olvasóközönségünket a jelentkezés részleteiről.

dustry, as well.

As soon as the first circular is published, we will inform our readers about the details of the registration.

## Bemutakoznak fiatal kollégáink/ *Our young colleagues introduce themselves*

Nagy öröm számunkra, hogy ismét két fiatal kolléga bemutatkozását kínálhatjuk olvasóinknak, ezúttal Gödöllőről. Fogadják szeretettel!

It is with great pleasure that we can again offer our readers the introduction of two young colleagues, this time from Gödöllő. Welcome them with love!



**Andrea Dorkota, Ph. D. student**

### Dorkota Andrea

A következő pár gondolattal szeretnék bemutatkozni a MKE Spektrokémiai Társaság hírlevelében. A nevem Dorkota Andrea, 2000-ben születtem Budapesten. A középiskolai tanulmányaimat egy 8 osztályos gimnáziumban, a László Gyula Gimnázium és Általános Iskolában végeztem.

Az alapképzésemet a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetemen teljesítettem (volt Szent István Egyetem), mint környezetmérnök. Szakdolgozatom „*A Biodóm szennyvízkezelésében rejlő lehetőségek*” címre hallgatott, mely a Biodóm vízgazdálkodásával és annak lehetséges kezelési és felhasználási lehetőségeivel foglalkozott. A körforgásos gazdálkodásra is kitértem, a szennyvízkezelés során keletkező iszap, valamint az egyéb képződő szerves hulladék kapcsán. A szakdolgozatom előzménye „*A Biodóm vízgazdálkodása - a szennyvízkezelésben rejlő lehetőségek*” című pályamunkám volt, mellyel a Körös Campus Alapítvány által szervezett pályázaton I. helyezést értem el.

Mesterképzésem helyéül a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemet választottam, ahol az Építőmérnöki Karhoz tartozó Infrastruktúra-építőmérnöki szak mellett döntöttem. A képzés során a „Víz- és vízi környezetmérnöki” specializációt választottam. A mesterképzésem ideje alatt III. helyezést értem el az „*Ivóvízbázis és víztisztító telep rekonstrukciója*” című pályamunkámmal a BME szervezésében megrendezett TDK konferencián, a Zöld TDK – Tiszta víz és környezet szekcióban. A pályamunkám a későbbi diplomamunkám alapjául szolgált. A diplomamunkám végül az „*Ivóvízbázis és víztisztító telep rekonstrukciójának tervezése*” címet kapta. A téma egy olyan üzemelő telephely volt, melyen bemutathatóak voltak az ivóvíztisztítás feltételei, az elérhető és alkalmazott technológiák, valamint a kivitelezéshez szükséges tervezés követelményei.

Jelenleg a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem első éves PhD hall-



gatója vagyok. A témavezetőm Dr. habil. Horváth Márk Kálmán. A doktori kutatásom témája a „*Mesterségesen tartott vízi élőlények életterének kémiai minőség-ellenőrzése és a vizek újrafelhasználásának lehetősége*”. A doktori képzésem keretein belül a mesterségesen tartott vízi élőlények vízkémiai paramétereit vizsgálom és az így a kapott eredmények alapján megfogalmazom, hogy egyes vizek milyen további felhasználásra alkalmasak. Modellkísérletekkel próbálom bizonyítani, hogy hogyan jelennek meg a vizekben mért paraméterek a növényekben, valamint, hogy ezek milyen hatásokat eredményeznek. A Környezettudományi Doktori Iskolában végzett kutatásaimmal szeretném alátámasztani azt a hipotézisemet, miszerint a mesterségesen tartott állatok alól kikerülő jelentős mennyiségű vizeket nem szabad veszni hagyni, hiszen számos alternatív vízfelhasználás alapjául szolgálhat. A kutatási témám aktualitása azon alapszik, hogy a jó minőségű vizek aránya nemcsak hazánkban, hanem globális szinten is egyre aggasztóbb mértékben csökken.

A tanulmányaimmal párhuzamosan egy olyan cégnél dolgoztam/dolgozom, ahol egyszerre gyakorolhatom a környezetmérnöki és infrastruktúra-építőmérnök végzettségemet. A változatos munkáknak köszönhetően hol környezetvédelmi tanulmányírásban kell helytállnom, hol egy konkrét vízi létesítmény tervezésében kell segédkezniem.

I would like to introduce myself in the newsletter of the Spectrochemical Society (MKE) with the following few thoughts. My name is Andrea Dorkota, I was born in 2000 in Budapest. I completed my high school studies in an 8-grade high school, the László Gyula High School and Primary School.

I completed my bachelor's degree at the Hungarian University of Agricultural and Life Sciences (formerly Szent István University) as an environmental engineer. My thesis was entitled "*Possibilities inherent in the Biodome's wastewater treatment*", which dealt with the Biodome's water management and its possible treatment and use options. I also touched on circular farming, in relation to the sludge generated during sewage treatment, as well as other generated organic waste. The precursor to my thesis was my project entitled "*The water management of the Biodome - the possibilities inherent in wastewater treatment*", with which I achieved first place in the competition organized by the Körös Campus Foundation.

I chose the Budapest University of Technology and Economics (BME) as the location for my master's degree, where I decided to major in Infrastructure-Civil Engineering belonging to the Faculty of Civil Engineering. During the training, I chose the "*Water and aquatic environmental engineering*" specialization. During my master's degree, I won IIIrd place with my project entitled "*Reconstruction of drinking water base and water treatment plant*" at the Scientific Student (TDK) conference organized by BME, in the Green TDK - Clean water and environment section. My internship served as the basis for my later diploma work. In the end, my thesis was entitled "Planning



of the reconstruction of the drinking water base and water treatment plant". The topic was an operating site where the conditions for drinking water purification, the available and applied technologies, and the planning requirements for implementation could be presented.



**Mónika Kántor, Ph. D.**  
student

## Kántor Mónika

**Kántor Mónika** vagyok, Miskolcon születtem. Középiskolai tanulmányaimat a miskolci Andrassy Gyula Műszaki Középiskolában végeztem. Érettségi után az egri Eszterházy Károly Főiskolán folytattam tanulmányaimat környezettan BSc. szakon, ahol már a tanulmányaim elején magával ragadott a sugárvédelem és a radioanalitika, így már első éves hallgatóként megkezdtem kutatómunkámat termál és karsztvizek radontartalmának vizsgálata témakörben. A mérésekben segítséget kaptam az ELTE Atomfizika Tanszékétől, ahol folyadékszintillációs spektrométerrel végezhettem a vízminták radonmérését. A kutatásom eredményeként részt vettem két TDK konferencián, melyeken első helyezést értem el, valamint 2013-ban a XXXI. ODTK konferencián. Szakdolgozatom is ezzel a témával foglalkozott, bükkaljai és mátraaljai területeken karszt és termálvizekben mértem radonkoncentrációt. A radioanalitikai mérések kiegészítésre kerültek vízkémiai paraméterek meghatározásával és a geológiai összefüggések vizsgálatával.

2021-ben Gödöllőn a Magyar Agrár- és Élettudományi Egyetem környezetmérnök MSc szakán folytattam tovább tanulmányaimat, ahol diplomamunkámban korábbi kutatásom kibővítésre került újabb mintaterületekkel a gödöllői dombság területén, továbbá a vizek elemanalitikai vizsgálata is megkezdődött. Az vízminták potenciálisan toxikus elemtartalma ICP-OES technológia segítségével került meghatározásra.

2024. szeptemberében kezdtem meg PhD tanulmányaimat a MATE Környezettudományi Doktori Iskolájában. Témavezetőim: Dr. habil. Géczi Gábor és Dr. habil. Horváth Márk. Kutatásom során fizikai, kémiai és radiológiai vízparaméterek közötti kapcsolatokat és összefüggéseket szeretnék vizsgálni, melynek eredményeként célom, hogy megértsük és monitorozzuk a víz minőségét és összetételét.

A vízparaméterek mérésére egyedi mérőkör került kialakításra, amely alkalmas a kísérleti víztest redoxpotenciál, hőmérséklet és pH értékének folyamatos kimutatására. A kutatás kiegészítésre kerül időszakos laboratóriumi vizsgálatokkal, mely során elemanalitikai méréseket is végzek. A folyamatos mérések lehetővé teszik az ok-okozati kapcsolatok feltárását és a vízminőséget meghatározó tulajdonságok közötti összefüggések megértését, ami fontos lehet a különböző ipari vagy mezőgazdasági alkalmazások szempontjából.

My name is Mónika Kántor, I was born in Miskolc. I completed my secondary school studies at the Andrassy Gyula Technical Secondary

School in Miskolc. After graduation, I continued my studies at the Károly Eszterházy University in Eger, BSc. degree, where radiation protection and radioanalytics captivated me from the beginning of my studies, so as a first-year student I started my research work in the field of testing the radon content of thermal and karst waters. I received help in the measurements from the Department of Atomic Physics of ELTE, where I was able to measure radon in water samples with a liquid scintillation spectrometer. As a result of my research, I participated in two TDK conferences, where I won first place, and in 2013, at the XXXI. National Scientific Student (ODTK) conference. My thesis also dealt with this topic, I measured radon concentration in karst and thermal waters in Bükkalja and Mátraalja areas. The radioanalytical measurements were supplemented by the determination of water chemical parameters and the investigation of geological relationships.

In 2021, in Gödöllő, I continued my studies at the MSc in environmental engineering at the Hungarian University of Agricultural and Life Sciences, where my previous research in my thesis was expanded with new sample areas in the Gödöllő hilly area, and the elemental analysis of the waters also began. The content of potentially toxic elements in the water samples was determined using ICP-OES technology.

In September 2024, I started my PhD studies at the MATE Doctoral School of Environmental Sciences. My supervisors: Dr. habil Gábor Gécz and Dr. habil Mark Horváth. During my research, I would like to investigate the relationships and correlations between physical, chemical and radiological water parameters, as a result of which my goal is to understand and monitor the quality and composition of water.

A unique measuring circuit was designed to measure the water parameters, which is suitable for continuously detecting the redox potential, temperature and pH value of the experimental water body. The research is supplemented with periodic laboratory tests, during which I also carry out elemental analytical measurements. Continuous measurements make it possible to reveal cause-and-effect relationships and to understand the relationships between properties that determine water quality, which can be important for various industrial or agricultural applications.



## **Beszámoló a 40. Borsodi Vegyipari Napról/**

### ***Report on the 40<sup>th</sup> Borsod Chemical Industry Day***

A hagyományokhoz híven idén is megrendezésre került a Borsodi Vegyipari Nap a Magyar Tudomány Ünnepe alkalmából. A 40. jubileumi eseménynek a Miskolci Akadémiai Bizottság patinás székháza adott otthont. A rendezvényen Dr. Szalay Péter, a Magyar Ké-

True to tradition, the Borsod Chemical Industry Day was held again this year on the occasion of the Hungarian Science Festival. The 40<sup>th</sup> anniversary event was hosted by the patina headquarters of the Miskolc Academic Committee. At the event, Dr. Péter Szalay,

mikusok Egyesületének elnöke üdvözölte a résztvevőket. Köszöntötte szépkorú tagjainkat, ezután az előadásában hangsúlyozta a kémikus utánpótlás fontosságát és ismertette a **Kémia Mindenkinek** Program előrehaladását ([www.kemiamindenkinek.hu](http://www.kemiamindenkinek.hu)).

president of the Hungarian Chemical Society, welcomed the participants. He welcomed our well-aged members, then in his presentation he emphasized the importance of bringing-up chemists and described the progress of the **Chemistry for Everyone** Program ([www.kemiamindenkinek.hu](http://www.kemiamindenkinek.hu)).

*Idén őket ünnepeltük / This year we celebrated them:*

Dr. Paksy László (95), Kalmár Mihály (85), Nagy Istvánné (80), Dr. Marossy Kálmán (75)

A vegyipar területén zajló innovációk és kutatások jelentős előrelépéseket mutatnak a fenntarthatóság és a hatékonyság terén. A 40. jubileumi alkalmon bemutatták a legújabb projekteket és fejlesztéseket a hallgatóságnak mint a környezetvédelem, az energia- hatékonyság valamint az újrahasznosítás terén hozhatnak áttörést.

A délelőtti szekció levezető elnöke Dr. Lakatos János, a délutáni pedig Dr. Bánhidi Olivér volt.

Elsőként a klímaváltozás vegyiparra gyakorolt hatásairól és az alkalmazkodási lehetőségekről esett szó. A Kazincbarcikán megvalósult projektek közül kiemelkedik a Sajó alacsony vízállásamiatt elindított szennyvíz újrahasznosítási kísérlet.

A BorsodChem által fejlesztett konténeres prototípus sikeresen tisztította a szennyvizet, ez a technológia gazdaságosabb megoldás

Innovations and research in the chemical industry show significant progress in terms of sustainability and efficiency. On the occasion of the 40<sup>th</sup> anniversary, the latest projects and developments were presented to the audience as breakthroughs in the field of environmental protection, energy efficiency and recycling.

The chairman of the morning session was Dr. János Lakatos, and Dr. Oliver Bánhidi was the one in the afternoon.

First of all, the effects of climate change on the chemical industry and the possibilities of adaptation were discussed. Among the projects implemented in Kazincbarcika, the waste water recycling experiment launched due to the low water level of the river Sajó stands out.

The container prototype developed by BorsodChem successfully purified wastewater, this technology can be a more economical solution than processing natural water resources. Solutions have also been found to reduce evaporation from cooling towers: the use of groundwater as a cooling capacity is promising, but its long-term biological effects still need to be investigated.

In the spirit of sustainability, within the framework of the Life project, a project aimed at purifying 2,000,000 m<sup>3</sup> of water per year was launched as part of the Life project.

Solutions related to this include the alternative utilization of waste water



János Lakatos (left) and Olivér Bánhidi (right) at the event  
(©MKE)



lehet, mint a természetes vízkészletek feldolgozása. A hűtőtornyok párolgásának csökkentésére is születtek megoldások: a talajvíz felhasználása hűtési kapacitásként ugyan ígéretes, de hosszú távú biológiai hatásait még vizsgálni kell.

A fenntarthatóság jegyében a Life projekt keretében elindították évi 2.000.000 m<sup>3</sup> víz megtisztítását célzó programot. Az ehhez kapcsolódó megoldások között szerepel a szennyvízmedencék alternatív hasznosítása, például napelemparkok létesítése vagy puffertárolóként való használatuk.

A hulladékok újrahasznosítása szintén kiemelt téma volt. A lítium-ion akkumulátorok feldolgozása során kinyerhető lítium, nikkell és kobalt gazdasági jelentősége mellett rávilágítottak arra is, hogy Európában még nincs hidrometallurgiai újrahasznosító üzem, miközben Kínában már több ilyen működik. A PET-palackok újrafeldolgozása terén is született előrelépés: a MOHU és a MOL együttműködésében válogatás, tisztítás és szárítás után új palackokat készítenek, biztosítva a körforgásos gazdálkodás fenntarthatóságát.

Az analitikai fejlesztések terén a NIR spektroszkópiával eredtünk láthatatlan veszélyek nyomába. A módszer bizonyította hatékonyságát a foszgénmaradékok és melléktermékek kimutatásának pontosságával és gyorsaságával. Továbbá a bifunkciós diizocianátból képződő polikarbodiimid gél vizsgálata rotációs viszkoziméterrel című előadást hallgathattuk meg.

A technológiai fejlesztések sem maradtak el. Az új katalizátorok és a poliuretán hulladékokból készült nanokompozit habok új felhasználási területeket nyitnak meg. Emellett bemutattak egy megoldást, amely a CO<sub>2</sub> abszorpciójához szükséges MEA oldatot vízzel helyettesítené, csökkentve a technológia környezeti terhelését.

A PVC-gyártás során használt víz újrahasznosítása is kiemelt figyelmet kapott. A Bor-

basins, for example the establishment of solar parks or their use as buffer storage.

Waste recycling was also a prominent topic. In addition to the economic importance of lithium, nickel and cobalt, which can be extracted during the processing of lithium-ion batteries, it was also highlighted that there are no hydrometallurgical recycling plants in Europe yet, while several such plants are already operating in China. Progress has also been made in the recycling of PET bottles: in cooperation between MOHU and MOL, new bottles are made after sorting, cleaning and drying, ensuring the sustainability of circular economy.

In the field of analytical developments, we tracked down invisible dangers with NIR spectroscopy. The method proved its effectiveness with the accuracy and speed of detection of phosgene residues and by-products. Furthermore, we could listen to the presentation entitled "Investigation of the polycarbodiimide gel formed from bifunctional diisocyanate with a rotary viscometer."

Technological developments were not left behind either. New catalysts and nanocomposite foams made from polyurethane waste open up new areas of application. In addition, they presented a solution that would replace the MEA solution needed for CO<sub>2</sub> absorption with water, reducing the environmental impact of the technology.

The recycling of water used during PVC production also received special attention. BorsodChem has already started using an ultrafiltration system, which allows water to be used not only once, but several times in production processes.

At the closing presentation of the event, the participants could hear about a topic that caused considerable confusion. Removal of aluminum from brine. New technologies for aluminum extraction at alkaline pH, the efficiency of which has been improved by opti-

sodChem már megkezdte egy ultraszűrő rendszer alkalmazását, amely lehetővé teszi, hogy a víz ne csak egyszer, hanem többször is felhasználásra kerüljön a gyártási folyamatokban.

A rendezvény záró előadásán egy jelentős fejtörést okozó témáról hallhattak a résztvevők. Alumínium eltávolítása a sóoldatból. Új technológiák a lúgos pH-n történő alumínium-kivonásra, melyek hatékonyságát hőmérséklet és ioncserélő gyanták optimalizálásával javították.

A rendezvényt Dr. Szabó János, MKE ügyvezető igazgató zárta.

mizing temperature and ion exchange resins.

The event was closed by Dr. János Szabó, the Managing Director of MKE.

Írta Benke Máté, Hegedüs Marica/

Written by Máté Benke, Marica Hegedüs

## Krausz Ferenc előadása a Tudományos Expón/ *Ferenc Krausz's presentation at the Science Expo*

2024. november 23-án a Szépművészeti Múzeumban tartott előadást népszerű Nobel-díjasunk, Dr Krausz Ferenc „Basic research addressing greatest challenges in our time” címmel.

A Professzor úr a világon kialakult óriási társadalmi egyenlőtlenségek leírásával, a két-részre szakadt emberiség közötti életvitelbeli és egészségügyi szakadék létezését adatokkal érzékeltette. Ez azt is jelenti, hogy hiába elérhető egyre többféle és hatásosabb gyógymód pl a különböző rákos megbetegedések kezelésére, nem egyforma a diagnózis lehetősége és a kezeléshez való hozzájutás. A halálozások 75%-át rák, cukorbetegség, szív- és érrendszeri megbetegedés vagy krónikus légzőszervi betegség okozza.

Krausz professzor kijelentette, hogy olyan medicinára van szükség, amely ezen betegségek kialakulását a legkorábbi stádiumban felismeri, ami által a gyógyítás sikeressége nagymértékben megnövekedhet. Felmerül a kér-

On November 23, 2024, our popular Nobel laureate, Dr. Ferenc Krausz, gave a lecture at the Museum of Fine Arts entitled “Basic research addressing greatest challenges in our time”.

The Professor, by describing the enormous social inequalities that have developed in the world, the existence of a gap in lifestyle and health between humanity divided into two parts were demonstrated by data. This also means that even though more diverse and effective methods are available, for example for the treatment of various cancers, the possibility of diagnosis and access to treatment is not the same. 75% of deaths are caused by cancer, diabetes, cardiovascular disease or chronic respiratory disorders.

Professor Krausz stated that there is a need for medical practice that can recognize the development of these diseases at the earliest stage, which could greatly increase the success of treatment. The question arises,



dés, hogyan tudunk költséghatékonyan hozzáférni olyan egészségügyi adatokhoz, amelyek elég átfogóak ahhoz, hogy erre a célra felhasználhatók legyenek?

Osztrák-magyar-olasz együttműködésben sikerült Bécsben attoszekundumos ( $10^{-18}$  s) élettartamú, lézer fényimpulzust előállítani, az ilyen rövid lézerefény-villanások lehetővé teszik az elektronok mozgásában történő változások érzékelését, valamint az atomok és molekulák viselkedését és reakcióit meghatározó állapotváltozások időbeni tanulmányozását. Az attoszekundumos 700-750 nm-es hullámhosszú fényimpulzussal történő besugárzást követően egy, az adott molekulára jellemző ujjlenyomat-görbe detektálható.

Krausz Ferenc 2023-ban Pierre Agostini és Anne L'Huillier kutatókkal megosztva fizikai Nobel-díjat kapott „olyan kísérleti módszerek kifejlesztéséért, amelyek attoszekundumos fényimpulzusokat generálnak az anyag elektrodinamikájának tanulmányozására”.

Egy közelmúltbeli kapcsolódó alkalmazásban a biológiai mintákat ultrarövid lézerimpulzusokkal gerjesztik, és az elektromos válaszgörbét attoszekundumos pontossággal rögzítik. Az orvosi biológiailag releváns minták esetében a válaszjelek rendkívül összetettek. Ennek ellenére igazolható volt, hogy a válasz attoszekundumos léptékű változásai összefüggésbe hozhatók a kritikus betegségek korai szakaszával.

A feltételezés logikus, ha arra gondolunk, hogy az elváltozások kialakulása olyan betegségmarkerek megjelenésével jár, ami az attoszekundumos impulzus által kiváltott válaszgörbében (ujjlenyomat) változást okozhat.

A cél tehát az volt, hogy az egyes biomolekulák keresése helyett a globális molekuláris környezetet írják le, a molekulák "szívdobbanásainak" mérésével, ami nem más, mint a szervezet állapotának molekuláris ujjlenyomata. A probléma tipikusan "tű a szénakazalban" jellegű.

A megközelítés paradigma váltást jelent, mi-

how can we cost-effectively access health data that are comprehensive enough to be used for this purpose?

An Austrian-Hungarian-Italian collaboration succeeded in Vienna in producing laser light pulses lasting only attoseconds ( $10^{-18}$  s). Such short flashes of laser light make it possible to capture electrons in their motion and study in time the state changes that determine the behavior and reactions of atoms and molecules. After irradiation with an attosecond light pulse with a wavelength of 700-750 nm, a fingerprint curve characteristic of the given molecule can be detected.

In 2023, Ferenc Krausz received the Nobel Prize in Physics together with the researchers Pierre Agostini and Anne L'Huillier for the development of “experimental methods that generate attosecond pulses of light for the study of electron dynamics in matter”

In a recent related application, biological samples are excited with ultrashort laser pulses, and the electric response field is captured with attosecond precision. For biomedically relevant samples the response signals are extremely complex. Nevertheless, it could be verified that attosecond-scale changes in the response can be correlated with early stages of critical diseases.

The assumption is logical if we consider that during the development of the lesions is associated with the appearance of disease markers that can cause a change in the response curve (fingerprint) induced by the attosecond pulse.

The goal was therefore to describe the global molecular environment instead of searching for individual biomolecules, by measuring the "heartbeats" of the molecules, i.e. the molecular fingerprint of the state of the organism. The problem is typically "needle in a haystack".

The approach represents a paradigm shift, since, if implemented, a quick and cheap scre-

vel gyors és olcsó szűrési módszert lehet segítségével kifejleszteni, ami korai diagnózist tenne lehetővé a társadalom széles rétegében.

Az elgondolást először tüdőrákos betegeken tesztelték. 2015-től hét éven át gyűjtöttek mintákat. 470 tüdőrákos alany és 470 életkor, nem és BMI szerint illesztett egészséges alany spektrumát hasonlították össze, a több ezer felvételtől (az illesztés maga 2-3 éves munka volt). Azt találták, hogy az egyedi különbségek ellenére, a betegek spektrumgörbéi eltértek az egészségesekétől.

A minták 80%-át számítógépes algoritmus tanítására használva, a fennmaradó 20%-on lehet tesztelni, hogy az algoritmus mennyire jól ismeri fel a betegség okozta elváltozást a mért görbék alapján. Későbbi vizsgálatoknál azt találták, hogy 1-es stádiumú betegeknél még nem volt elfogadható a helyes diagnózis aránya (kb. 60%), 2-es stádiumnál jobb, 3-as stádiumban 80% körüli. Ennek oka az egyéni eltérések okozta biológiai zaj, amit nem lehet csökkenteni.

A módszer akkor válik korai diagnózis felállítására alkalmassá, ha referenciaként az egyén saját görbéjét használjuk. Elég évről évre felvenni az egyének ujjlenyomatgörbéjét és ezt vizsgálni. Ilyen módon a variabilitás 2,3-3-szor kisebb. Ilyen körülmények közt az 1-es stádiumú betegek 90% fölötti találati aránnyal diagnosztizálhatók az elvégzett szimuláció szerint.

ening technique could be developed, which would enable early diagnosis and thus early screening in society widely.

The concept was tested on advanced lung cancer patients. From 2015, samples were collected for 7 years. 470 subjects with lung cancer and 470 age-, sex and BMI-matched healthy subjects were selected for analysis from the thousands of recordings (the matching itself took 2-3 years of work). They found that despite individual differences, the recorded infrared spectral traces of cancer patients differed from those of healthy individuals.

Using 80% of samples to train a computer algorithm, the remaining 20% can be used to test how well the algorithm recognizes the change caused by the disease based on the measured curves. In later studies, it was found that the rate of correct diagnosis was not yet acceptable for patients with stage 1 (about 60%), better for stage 2, and around 80% for stage 3. The reason for this is the biological noise caused by individual differences, which cannot be reduced.

The method becomes suitable for establishing an early diagnosis when the individual's own curve is used as a reference. It is enough to record the fingerprint curve of individuals year after year and examine it. In this way, variability is 2.3-3 times smaller.

#### Scientific mission of Center for Molecular Fingerprinting:

Research at CMF is driven by a vision: probing human health by capturing minuscule changes in the molecular composition of blood plasma with cutting-edge ultrashort-pulsed laser technology. Infrared molecular fingerprinting is to be established as a cornerstone of next-generation molecular diagnostics, paving the way towards future population health monitoring.

Ezen eredmények birtokában életre hívták a "Together for Health" kezdeményezést, aminek keretében nyolc féle ráktípus és a korábban említett kritikus betegségek estében is vizsgálták a

Under these conditions, stage 1 patients can be diagnosed with a success rate of over 90%, according to the performed simulation.

In possession of these results, the



módszer korai diagnózisra való alkalmasságát. A kutatás folytatására megalakult a Center for Molecular Fingerprinting intézmény Budapesten. Több mint 2000 fő vett részt a vizsgálatban eddig, akik legalább négyszer adtak vért. Folytatják a minták gyűjtését. A tapasztalat szerint becsülhető, hogy 10 év alatt kardiovaszkuláris esemény 1554 esetben, 826 cukorbeteg, 587 COPD és 165 rákos megbetegedés fordulhat elő a vizsgált egészségesekben. A vizsgálatokról a „Hungary for Health – Health for Hungary” honlapján tájékozódhatnak az érdeklődők.

A kutatásban jelentős szerepe van a müncheni Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) keretein belül működő Centre for Advanced Laser Application-nak és a Max Planck Institute of Quantum Optics-nak. A jövőben súlypontilag Budapestre kívánják helyezni a kutatásokat, a Lágymányosi kampuszon terveznek intézetet építeni a Molekuláris-Ujjlenyomat Kutató Központ (CMF) működéséhez.

Érdeklődéssel figyeljük a továbbiakban születő eredményeket!

Írta Ziegler Ildikó/

Written by Ildikó Ziegler

"Together for Health" initiative was launched, within the framework of which the suitability of the method for early diagnosis of eight types of cancer and the previously mentioned critical diseases was investigated. The Center for Molecular Fingerprinting was established in Budapest to continue the research. More than 2,000 people have participated in the study so far, who donated blood at least four times. They continue to collect samples. According to experience, it can be estimated that in 10 years, cardiovascular events may occur in 1554 cases, 826 diabetes patients, 587 COPD and 165 cancer cases in the examined healthy people. Those interested can find out about the tests on the website of "Hungary for Health - Health for Hungary".

The Ludwig-Maximilians-Universität (LMU) Centre for Advanced Laser Applications in Munich and the Max Planck Institute of Quantum Optics play a significant role in the research. In the future, they want to focus their research on Budapest, and it is planned to build an institute for the operation of the Center for Molecular Fingerprinting on the Lágymányosi campus.

We look forward to the future results!

Reviewed by, and with the permission of CMF

---

## We heard at the „Thousand faces of drug molecules” scientific meeting

Előző hírlevelünkben közzétettük, hogy 2024. október 04-én tudományos ülést tartott a spektrokémikusok közössége az MTA Könyvtárában. Köszönjük előadóink érdekes és színvonalas prezentációit!

Az ülésen elhangzott előadásokból készült összefoglalókat tesszük közzé olvasóinknak.

Jó szórakozást kívánunk!

A Szerkesztők

In our previous newsletter, we announced that on October 4, 2024, the community of spectrochemists held a scientific meeting in the Library of the Hungarian Academy of Sciences. We thank for the interesting and high-quality presentations of our speakers!

We are publishing summaries of the presentations given at the meeting for our readers.

We hope you enjoy!

The Editors

## Challenges of the structure elucidation in the generic drug development

by *András Dancsó, Zsófia Garádi, Péter Kővágó*

Egis Pharmaceuticals PLC

Our laboratory is part of the research directorate of the company, it is called Drug Substance Analytical Development Laboratory 2. We manage FT-IR, NMR, SC-XRD and Raman microscopy.

The generic drug development faces us with special needs. The generic development usually starts after the first patent appears about a new active compound. Parallel with the chemical development the spectroscopy has its usual tasks: to prove the structure of the intermediates, to elucidate the structure of the contaminants. All this work helps to understand the behavior of the reactions in the synthesis. We presented some examples: FT-IR of deuterated compounds,  $^{11}\text{B}$ -NMR of reagents in Suzuki coupling,  $^{19}\text{F}$ - $^{13}\text{C}$  HMQC of fluorinated compounds.

Single-crystal XRD has its role in generic drug substance development. There are some cases when NMR in itself is not enough to completely prove the structure, for example the molecule has multiple and disjunct stereocenters or too many heteroatoms, absolute configuration can be determined with SC-XRD. For molecular complexes SC-XRD is the method of choice. Some methods were illustrated for growing single crystals.



**András Dancsó presenting at the meeting**

---

## Detection of pharmaceutical residues in environmental samples, methods for environmental risk assessment, and the legal framework for protecting surface water quality

by *Zita Zrínyi, Ph.D.*

Soós Ernő Research and Development Center, University of Pannonia

### Summary

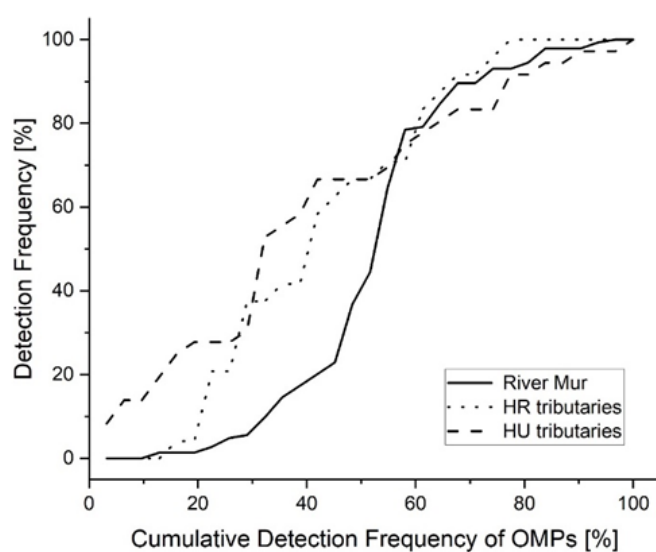
The presentation delivered at the MKE Spectrochemistry Society meeting provided a comprehensive overview of detecting pharmaceutical residues from environmental samples, their ecological and health risks, as well as the necessary regulatory and removal technology approaches. The regulation of water pollutants requires a combined approach that is based both on controlling pollution at the source (by setting emission limit values) and on establishing environmental quality standards. The European Union does not have an autonomous water policy; water policy is part of environmental policy. In Hungary, the main regulations currently in force regarding surface waters are as follows: Directive 2000/60/EC (establishing a framework for Community action in the field of water policy, WFD) and its daughter directives (EQS and DWD), which together form the foundation of the Community water policy. This is complemented on the regulatory side by Di-

rective 91/271/EEC on the treatment of urban wastewater, which was revised in September 2023, with its enactment in progress. The basis for environmental quality standards also stems from the WFD, referencing Directive 2008/105/EC on environmental quality standards in the field of water policy (EQSD) and its amendment; the EU's priority pollutant monitoring list (Directive 2013/39/EU) and related watch lists (EU Watch Lists 1–4: 2015/495; 2018/840; 2020/1161; 2023/1307; with changes expected in 2025). On these watch lists, the gold standard detection methods for pharmaceutical residues are LCMS or GCMS techniques. Hungary fulfilled its obligations for micropollutant monitoring in 2023 and 2024 through the Soós Ernő Research and Development Center for surface water monitoring, commissioned by the General Directorate for Water Management. The Center also have finished and ongoing surface water monitoring projects regarding micropollutants. The sample preparation process was dominated by water filtration, solid-phase extraction (SPE), concentration, and advanced instrumental analysis (UPLC-MS/MS). Advanced instrumental techniques, such as the use of triple quadrupole mass spectrometers, provide outstanding sensitivity for detecting micropollutants.

State surveys have revealed that certain compounds, such as ibuprofen, diclofenac, carbamazepine, and lidocaine, are particularly present in areas affected by human activities (e.g., effluents from wastewater treatment plants, festival venues, and areas near thermal baths). The micropollutant removal efficiency of wastewater treatment plants shows significant variability, which influences the pollution levels of surface waters receiving treated wastewater.

These are typically smaller streams, which have lower resistance to pollution and whose water quality deteriorates rapidly. The role

of small streams in maintaining ecology and biodiversity is significant and particularly important, as they are often the primary habitats of biological life. (Figure 1)



**Figure 1.**  
Cumulative Detection Frequency values in the three different types  
of watercourses (Zrinyi et al, 2025. *J Haz Mat Advances*, DOI: 100572)

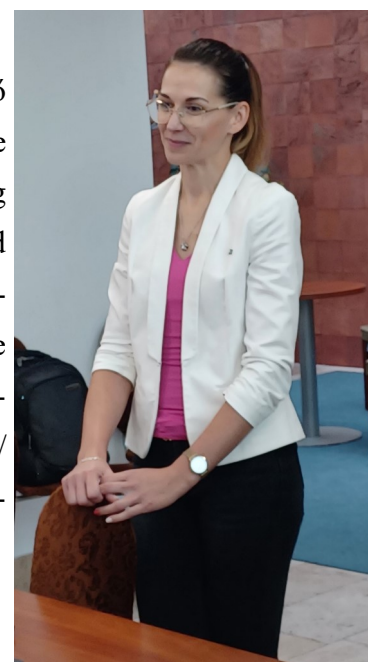


**Figure 2. Norman General Assembly Meeting (2025), Rome, Italy. (Bottom row, 13–14th from left: Gábor Maász, Zita Zrínyi)**

The environmental risk of pharmaceutical residues is classically assessed using the Risk Quotient (RQ) method, which is based on the ratio of the measured environmental concentration (MEC) to the predicted no-effect concentration (PNEC). Due to the limitations of this method and the mixture of substances present in the environment, multi-level risk assessment is gaining increasing importance. Furthermore, probabilistic risk assessment (PRA) and Weight of Evidence (WoE) approaches also play a key role in determining ecosystem safety.

### Future Objectives

In addition to fulfilling state measurement obligations, the Soós Ernő Research and Development Center considers its future tasks to include contributing to the Joint Danube Survey 2025 program by measuring pharmaceutical substances in wide range, as well as collecting and uploading available environmental monitoring data into a data repository. This is facilitated by joining the Norman Association (Figure 2), as the high-quality data appearing in the Substance Database managed by the Association (<https://www.norman-network.com/nds/susdat>) are forwarded to IPChem, which is also relied upon by the European Union's regulatory framework.



**Figure 3. Zita Zrínyi at the scientific meeting**



## Acknowledgments

This research was supported by the National Research, Development, and Innovation Office (NKFIH) under project RRF-2.3.1-21-2022-00008 (National Laboratory of Water Science and Water Security). Dr. Zrínyi's work is further supported by the Research Scholarship Program at the University of Pannonia (2024-2.1.1-EKÖP-2024-00025 /130) funded by the Ministry for Culture and Innovation.

## Eco-pharmacovigilance – Environmental Aspects of Safe Pharmaceutical Use and Intervention Possibilities

by *Gábor Maász, Ph.D.*

Soós Ernő Research and Development Center, University of Pannonia

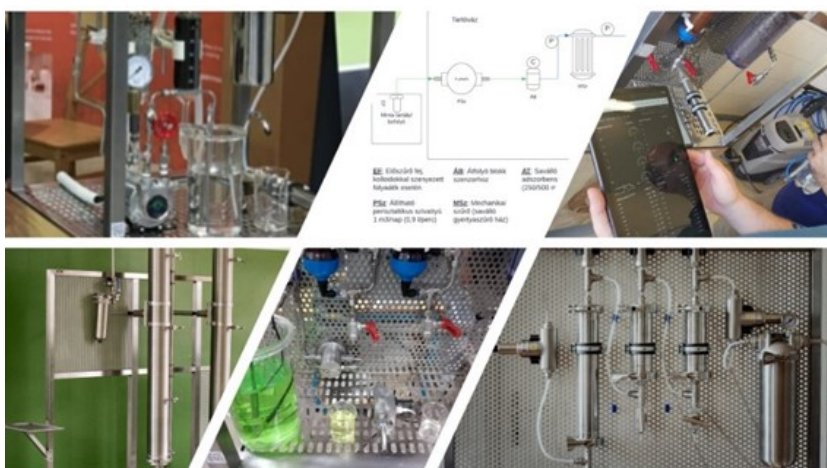
The presentation explores the concept of eco-pharmacovigilance, focusing on the environmental impact of pharmaceuticals and possible intervention strategies. Advances in medicine and pharmaceutical sciences have improved quality of life and extended life expectancy, but they have also introduced significant environmental challenges. Pharmaceutical active ingredients, despite wastewater treatment, often persist in natural waters, posing risks to ecosystems and indirectly to human health.

Eco-pharmacovigilance aims to monitor the entire lifecycle of pharmaceuticals and minimize their environmental impact. Its activities include risk assessment, understanding mechanisms of action, and developing preventive measures. The presentation emphasizes the importance of targeted eco-pharmacovigilance, focusing on the most hazardous substances, and highlights the need for a multidisciplinary approach.

Achieving sustainability requires several measures, such as proper collection of pharmaceutical



**Gábor Maász presenting**



waste, developing and implementing advanced wastewater treatment technologies, and introducing greener pharmaceutical manufacturing processes. The presentation provides a detailed overview of wastewater treatment

technologies, including adsorption, filtration, and oxidation methods, and evaluates their effectiveness.

Studies conducted on the Mura River revealed that wastewater treatment plants play a significant role in spreading pharmaceutical residues. The findings indicate that the ecological state of lower-order watercourses is crucial, as they serve as primary habitats for biodiversity and are most affected by treated wastewater.

The presentation concludes that achieving sustainable development necessitates close collaboration between various sectors, including the pharmaceutical.

**Acknowledgement:** The research was supported by the National Research, Development, and Innovation Office (NKFIH), Hungary (project identification numbers: 2020-1.1.2-PIACI-KFI-2021-00309) and the National Multidisciplinary Laboratory for Climate Change (project identification number: RRF-2.3.1-21-2022-00014).

## Applications of Circular Dichroism Spectroscopy from small molecules to biological macromolecules.

by Péter Horváth, Ph.D.

Faculty of Pharmacy, Semmelweis University

### 1. Chiroptical methods in a nutshell

Chiroptical spectroscopy is the umbrella term for spectroscopic techniques for the study of chiral molecules. Chiroptical methods include:

**ORD spectroscopy** - measurement of the optical rotation as a function of wavelength.

The practical application is rather limited, mostly restricted to the measurement of specific rotation. Specific rotation is a measure used to characterise chiral molecules and is an identification and purity parameter in pharmacopoeias. The specific rotation (1) is defined as the value measured on the NaD line at 20 °C, calculated by the following relationship,

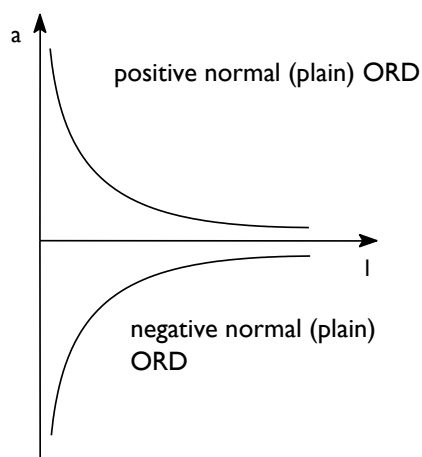


Figure 1. Normal ORD curves

$$[\alpha]_{20}^D = \frac{1000 \times \alpha}{c \times l} \quad (1)$$

where  $\alpha$  is the measured rotation, 'c' is the concentration (g/L), and 'l' is the pathlength given in dm.

It has the advantage that practically every chiral molecule has optical rotation and can be measured with a relatively cheap instrument. Its disadvantage is its insensitivity, which results in the need for relatively high concentrations and long pathlength. Its sensitivity increases with decreasing wavelength. In the absence of chromophores, a monotonic decreasing curve

is obtained from lower wavelengths to higher wavelengths (Figure 1). If the molecule has a chromophore group absorbing in the normal analytical range ( $\lambda > 200$  nm), the Cotton effect appears and the curve changes sign (Figure 2).

**ECD spectroscopy** - absorption-based method, analogue of UV-Vis spectroscopy. The main difference is that for chiral- or chirally perturbed chromophores, the difference in absorption between a right circularly polarized light wave (RCPL) and a left circularly polarized light wave (LCPL) is measured. In a chiral medium, the absorption (and refractive index!) of the two components will be different and the difference between the two components can be recorded as a function of wavelength. The main difference in the construction of the instrument from a UV spectrophotometer is that a polarizer produces a linearly polarized beam of light from a monochromatic beam, which is then split by a high-frequency modulator into right- and left-circularly polarized components. The sensitivity of the method depends on the rotatory strength but is broadly comparable to UV. A more significant technical difference is in the parameterisation of the spectral acquisition, due to the need to allow sufficient time for the detector to measure the difference between the two circularly polarised beams. The speed of the spectral acquisition and the acquisition time must be harmonised. The instrument manufacturers provide recommendations on the combinations of the two parameters to be used. The signal-to-noise ratio of spectra can be further improved by spectrum accumulation (3-5x).

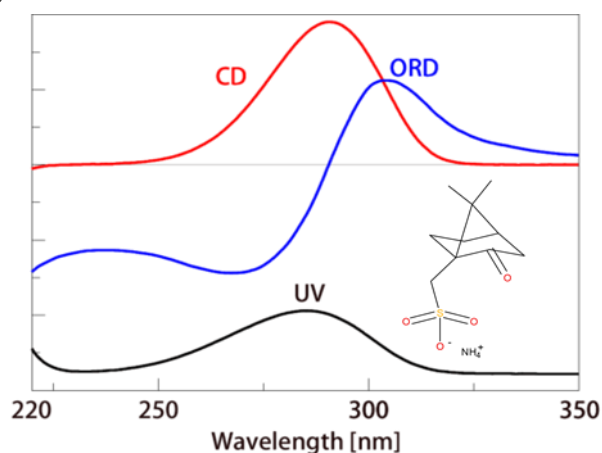
The correlation of ORD, ECD and UV spectra is illustrated in Figure 2. The ammonium d-camphorsulfonate is a very suitable molecule to illustrate this relationship, since the chromophore of the chirally perturbed carbonyl contains a single well-defined absorption band above 230 nm. The absorption band and the CD spectrum of the carbonyl chromophore appear in the same wavelength range and their maxima and the change of sign of the ORD curve coincide. The ORD curve then shows the normal monotonic decreasing spectrum.

Other types of chiroptical methods are described below, but I will not go into detail about them here.

**VCD spectroscopy** - analogue of IR

**MCD spectroscopy** - magnetic field induced optical activity of molecules

**LD spectroscopy** - interaction of linearly polarised light with anisotropic samples.



**Figure 2. Correlations between ORD-, CD- and UV-spectra**

## 2. Applications of CD spectroscopy

### 2.1 Small molecules

#### 2.1.1 Absolute configuration determination

The determination of the absolute configuration can be solved by X-ray diffraction for well crystallizing materials, but ECD spectroscopy is the most suitable spectroscopy for solution phase. Quantum chemical methods can be used to generate a theoretical spectrum, which can be compared with the measured spectrum to determine the configuration of the molecule.

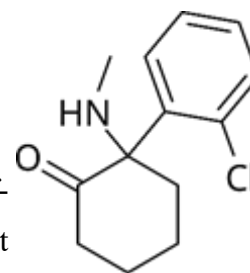


Figure 3. Structure of Ketamine

Less computationally demanding, but with much more limited possibilities for empirical methods, of which the octant rule is perhaps the best known. It could be used for chiral cyclohexanones such as ketosteroids. The problematic part of solution phase studies can be the conformational freedom of the molecule. A good example is ketamine ((2-(2-(2-chlorophenyl)-2-(methylamino)-cyclohexanone) (Figure 3). In the case of ketamine, the conformation of the cyclohexanone ring is pH dependent, which results in a change in the sign and maximum position of the carbonyl  $n-\pi^*$  band. In acidic medium, the *S* isomer gives a positive band with a maximum near 280 nm, whereas in alkaline medium it gives a negative band with a maximum at 315 nm. Further details are given in the following publication [1].

The third option is identification by structural analogy. Pantoprazole (Figure 4.) is a proton pump inhibitor and is marketed in racemic form. However, when separating the enantiomers, UV detection does not provide information on the elution sequence and obtaining a pure enantiomer would have been too costly. Thus, a comparison with the CD spectrum of the structural analogue pure *S*-isomer esomeprazole provided an opportunity to determine the elution sequence.

The CD spectrum of esomeprazole shows a negative band at 273 nm and a positive band at 228 nm. When pantoprazole was separated on a chiral column by CD/UV parallel detection, an on-line CD spectrum was recorded from the emerging peaks between 240-320 nm. The spectrum from the first peak appearing analogous to esomeprazole and could be assigned as an *S*-isomer. At discrete wavelengths (228 and 273 nm), peaks with a sign corresponding to the CD signal of esomeprazole were also detected [2].



Figure 4. Structures of esomeprazole (left) and a pantoprazole (right).

The fact that the central chirality comes from the sulphur atom makes these structures particularly interesting.



### 2.1.2 Determination of enantiomeric purity

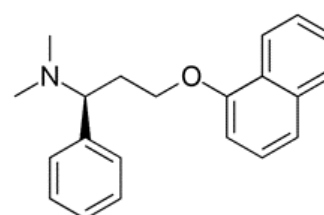
In a mixture of enantiomers, the enantiomeric ratio can be easily determined from the ratio of the dual, parallel measured CD and UV signals. The CD instruments measure the total absorbance of the sample in addition to the LCPL-RCPL component difference. As a result, both ellipticity and absorbance can be measured simultaneously in the same sample (layer thickness, concentration). The ratio of the two signals is the dissymmetry factor ( $g = \Delta\epsilon/\epsilon$ ) whose absolute value is the same for the two enantiomers, only their sign differs, and can be seen from equation 2 to be a concentration independent constant quantity. If we accept the fact that the two enantiomers have a dissymmetry factor of opposite sign, it is sufficient to have a standard of one of the enantiomers.

$$G = \frac{[\theta] \times c \times l}{\epsilon \times c \times l} = \frac{\theta}{A} \quad (2)$$

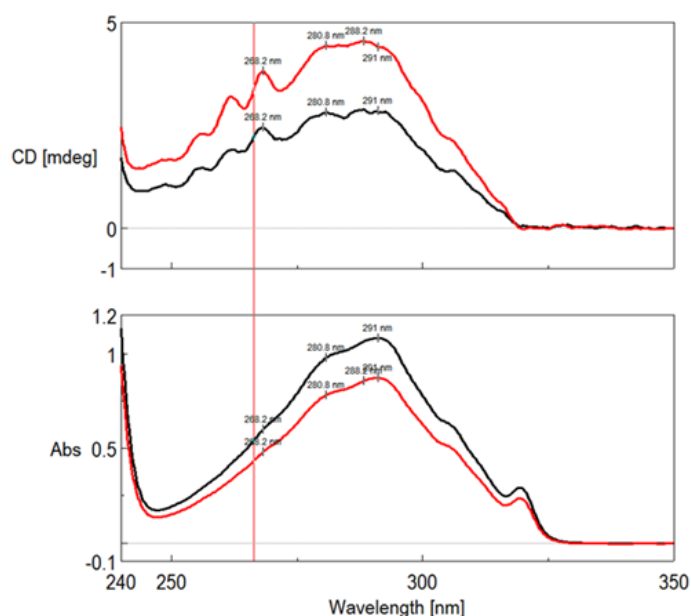
where  $G$  is the ratio of the measured ellipticity ( $\theta$ ) and absorbance ( $A$ ), 'c' is the concentration and 'l' is the pathlength.

More information on the basics, advantages and limitations of the method can be found in the following publication [3]. Two examples illustrate its practical applicability.

A herbal potency enhancer advertised on the internet contained a medicinal substance that was not listed in the ingredients and was therefore illegal to market. The active ingredient was dapoxetine (Figure 5). From the CD and UV spectra of the active ingredient extracted from the illicit formulation and the standard S-dapoxetine (Figure 6), it was clear that higher absorbance in the illicit formulation



**Figure 5. Structure of Dapoxetine**



**Figure 6. CD and UV spectra of standard S-dapoxetine (red) and extracted, illicitly used dapoxetine (black).**

was associated with a lower CD signal, while the standard was associated with a higher CD signal at lower concentration. Comparison of the  $G$ -value determined in the standard with the illicit sample resulted in an enantiomeric ratio of 75:25, which was confirmed by chiral HPLC measurement.

In the other real-life case, we were contacted by the Institute of Forensic Science with a sample that had been seized. The mass spectrometry analysis identified methorphan, but they could not determine whether it was levomethorphan, a drug classified as a narcotic, or dextromethorphan, an over-the-counter cough suppressant. After comparison the  $G$ -value of

unknown with a G-value of standard substance, the test identified pure dextromethorphan, so the offender could only be convicted of a misdemeanour.

### 2.1.3 The Induced Circular Dichroism spectroscopy and its application

The most typical case of ICD spectroscopy is when there is a chiral, but in the absence of a chromophore CD-inactive molecule that interacts with an achiral (possibly racemic) but well-absorbing molecule. In this case, the interaction results in the absorption transition of the chromophore a chiral perturbation, and ultimately the appearance of the ICD signal. Typically, such phenomena are observed during the inclusion formation with cyclodextrins. If the guest molecule is titrated with increasing amounts of CD inactive cyclodextrin, the ICD signal changes until all guest molecules are complexed. Accordingly, a saturation curve is obtained. Since the measured signal is derived from the complex alone, the stability constant of the complex can be calculated from the analytical concentrations and the measured ICD signal. The ICD signal is also clear evidence for the formation of the complex [4a-4c]. Further information on the structure of the cyclodextrin complex can be obtained from the spectrum based on the Kodaka-Harata rules (see references [4a-4c]).

The ICD spectra can also be used for chiral macromolecules (DNA, proteins), for example to study the binding of drugs [5].

### 3. CD spectroscopy of biological macromolecules

Among the applications of CD spectroscopy, the study of proteins/peptides is perhaps the most common. As a structure elucidation method, it is suitable for the quantitative estimation of secondary structural elements (helices, folded layers,  $\beta$  turns and disordered structures) and for monitoring protein dynamics, kinetics and association processes. There are several software tools for secondary structure estimation, such as BeStSel [6] (Beta Structure Selection method), a free online software (<https://bestsel.elte.hu>).

As for proteins, it is possible to estimate the structure of DNA and RNA from CD spectra. The helical arrangement of DNA is well known, but unconventional special elements such as duplexes, triplexes, quadruplexes can appear in the sequence. And not only DNA, but also RNA can have these structures [7]. Similar to BeStSel, there is an on-line structure estimation software for polynucleotides, CD-NuSS (Circular Dichroism to Nucleic acids Secondary Structure, <https://project.iith.ac.in/cdnuss/>).

### References

- [1] Gergely A., Zsila F., Horváth P., Szász G.: Determination of absolute configuration of ketamine enantiomers by HPLC-CD-UV technique *Chirality* 11 (10) 1999  
[https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1520-636X\(1999\)11:10<741::AID-CHIR1>3.0.CO;2-2](https://doi.org/10.1002/(SICI)1520-636X(1999)11:10<741::AID-CHIR1>3.0.CO;2-2)
- [2] L. A. Papp, M. Foroughbakhshfasaei, B. Fiser, P. Horváth, E. Kiss, K. Sekkoum, A. Gyéresi, G. Hancu, B. Noszá, Z.I. Szabó, G. Tóth Reversed-phase HPLC enantioseparation of pantoprazole using a teicoplanin aglycone stationary phase—Determination of the enantiomer elution order using HPLC-CD analyses *Chirality* 32(2) 2020

MKE  
SPEKTROKÉMIAI  
TÁRSASÁG

Magyar Kémikusok Egyesülete  
Budapest  
Fehér út 10.  
1106

Telefonszám:  
+36 30 720 4417  
+36 20 212 5664

E-mail cím:  
spectropus1@gmail.com

A teljes adatvédelmi  
nyilatkozatunk  
megtalálható a  
honlapunkon.



VI. évfolyam, 4. szám

<https://doi.org/10.1002/chir.23146>

[3] Horváth P., Gergely A., Noszál B.: Determination of enantiomeric purity by simultaneous dual circular dichroism and ultraviolet spectroscopy *Talanta* 44 (8) 1997

[https://doi.org/10.1016/S0039-9140\(97\)00058-1](https://doi.org/10.1016/S0039-9140(97)00058-1)

[4a] Kiss E., Szabó V.A. Horváth P. Simple circular dichroism method for selection of the optimal cyclodextrin for drug complexation *J Incl Phenom Macrocycl Chem* 95 (2019) <https://doi.org/10.1007/s10847-019-00938-2>

[4b] Kraszni M., Agh F., Horváth D., Mirzahosseini A., Horváth P. Effect of Substitution Degree and Homogeneity on Cyclodextrin-Ligand Complex Stability: Comparison of Fenbufen and Fenoprofen Using CD and NMR Spectroscopy *Int. J. Mol. Sci.* 24 (8) 2023

<https://doi.org/10.3390/ijms24087544>

[4c] Kraszni M., Balogh B., Mándity I., Horváth P. Advantages of Induced Circular Dichroism Spectroscopy for Qualitative and Quantitative Analysis of Solution-Phase Cyclodextrin Host-Guest Complexes *Int. J. Mol. Sci.* 25 (1) 2024

<https://doi.org/10.3390/ijms25010412>

[5] Kiss E., Mirzahosseini A., Hubert Á., Ambrus A., Órfi L., Horváth P. DNA binding of sunitinib: Spectroscopic evidence via Circular Dichroism and Nuclear Magnetic Resonance *J. Pharm. Biomed. Anal.* 150 (2018)

<https://doi.org/10.1016/j.jpba.2017.12.004>

[6] András Micsónai, Éva Moussong, Frank Wien, Eszter Boros, Henrietta Vadászi, Nikoletta Murvai, Young-Ho Lee, Tamás Molnár, Matthieu Réfrégiers, Yuji Goto, Ágnes Tantos, József Kardos, BeStSel: webserver for secondary structure and fold prediction for protein CD spectroscopy, *Nucleic Acids Research*, Volume 50, Issue W1, 5 July 2022, Pages W90–W98, <https://doi.org/10.1093/nar/gkac345>

[7] Cervenak, M.; Molnár, O.R.; Horváth, P.; Smeller, L. Stabilization of G-Quadruplex Structures of the SARS-CoV-2 Genome by TMPyP4, BRACO19, and



*We wish everyone a fruitful new year in 2025!*

Impresszum

**SpectrOpus, VI. évfolyam 4. szám., 2024. december 31.**

**A SpectrOpus az MKE Spektrokémiai Társaság hírlevele. Megjelenik negyedévente.**

**Felelős kiadó: Ziegler Ildikó**

**Felelős szerkesztő: Baranyai Edina**

**Terjeszti az MKE titkársága, feliratkozni az alábbi e-mail címen lehet.**