

Doktori (PhD) értekezés tézisei

**Potenciálisan orvosbiológiai felhasználásra
alkalmas polivinil-alkohol – boroszilikát hibrid, és
kalcium alginát aerogélek nanoszerkezeti
tulajdonságai**

Balogh Zoltán

Témavezetők:

Dr. Kalmár József, egyetemi docens

Dr. Dudás Zoltán Imre, tudományos főmunkatárs



DEBRECENI EGYETEM
Kémiai Tudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2024.

Az értekezésben előforduló rövidítések jegyzéke

BSP	Boroszilikát – polivinil-alkohol hibrid gél
DPSC	Fogpép őssejt (Dental Pulp Stem Cell)
EDS	Energiadisziperzív röntgenfluoreszcencia spektroszkópia
FT-IR	Fourier-transzformált infravörös spektroszkópia
HAp	Hidroxiapatit
ICP-OES	Induktív csatolású plazma optikai emissziós spektroszkópia
PVA	Polivinil-alkohol
SANS	Kisszögű neutronszerzés
SEM	Pásztázó elektronmikroszkóp
SLD	Szóráshossz-sűrűség
ssNMR	Szilárdfázisú mágneses magrezonancia spektroszkópia
TEM	Transzmissziós elektronmikroszkóp
V/V%	Térfogatszázalék
m/m%	Tömegszázalék
XRD	Röntgendiffrakció

I. Bevezetés és célkitűzés

Az aerogélek olyan szilárd gélek, amelyekben a pórusokat kitöltő folyadékot az eredeti gélváz összeesése nélkül cserélik le levegőre, jellemzően szuperkritikus szárítást alkalmazva. Általánosan nyitott és összefüggő mezopórusos szerkezettel, nagy fajlagos felülettel (400-1200 m²/g) valamint kis sűrűséggel (0,02-0,50 g/cm³) rendelkeznek.

A gélváz szintézise szol-gél eljárással valósítható meg, amelynek végén egy kétfázisú rendszer alakul ki, amely a szilárd vázból és a pórusokat kitöltő folyadékból áll. A szintézis során számos prekursor alkalmazása lehetséges. A szakirodalomban megtalálhatók szervetlen, szerves vagy (bio)polimer prekursorokból, valamint ezek együttes alkalmazásával előállított úgynevezett hibrid aerogélek is.

Kémiai és morfológiai tulajdonságaiktól függően számos alkalmazásuk lehetséges. A (bio)polimer és hibrid aerogélek megjelenésével sok kutatás indult ezen anyagok orvosbiológiai alkalmazásának feltérképezésére, például a gyógyszerhordozás és a szövetregenerálás területén.

A különböző alkalmazási területek szempontjából fontos és kedvező kémiai és morfológiai tulajdonságok meghatározása komplex feladat. Ezek meghatározásában segítséget nyújthatnak az alkalmazás során ígéretes eredményeket mutató anyagok vizsgálata.

Doktori kutatómunkám során az aerogélek nanoszerkezeti tulajdonságait, és az alkalmazásuk során bekövetkező változásokat vizsgáltam két különböző rendszeren. Elsőként az újonnan szintetizált boroszilikát-polivinil-alkohol (PVA) hibrid aerogélek nanoszerkezetét tanulmányoztam, amelyek potenciálisan alkalmazhatók csontszövet regenerálásra. Különös figyelmet fordítottunk továbbá a hibrid aerogélek

vízzel való kölcsönhatása során fellépő morfológiai változások megismerésére.

Másrészt egy olyan matematikai modell kidolgozásával foglalkoztunk, amely képes leírni egy tipikus kalcium alginát aerogél nedvesedése során bekövetkező morfológiai változásokat kisszögű neutronszerkezeti (SANS) mérések alapján. A nedvesedés vizsgálata azért fontos, mert a kalcium alginát aerogélek potenciálisan a gyógyszerhordozás, valamint sebkezelés területén alkalmazhatók, ahol a vízzel való érintkezés elkerülhetetlen.

II. Módszerek

Az új, Ca(II)-tartalmú boroszilikát-PVA (BSPXY) aerogélek szintézise szol-gél eljárással történt. A géleket egy autokláv reaktorban szárítottuk ki szuperkritikus CO₂ alkalmazásával. Az aerogélek összetétele alapján történő megkülönböztetésére a BSPXY kódrendszert alkalmaztuk. A BSP a boroszilikát-PVA hibrid gélre, az X a PVA molekulatömegére (X = 13/49/89, ha a PVA molekulatömege 13/49/89 kDa), az Y pedig a Ca(II) vegyület (nincs Ca(II) forrás = 0; CaCl₂ = Cl; β -Ca₃(PO₄)₂ = P; hidroxiapatit = H) jellegére utal.

Különbőféle karakterizálási technikákat alkalmaztunk az újonnan szintetizált BSPXY hibrid aerogélek szerkezetének, valamint a PVA molekulatömegének és/vagy a beépített Ca(II) vegyületek típusának megváltozásakor fellépő szerkezeti változások átfogó tanulmányozása érdekében. Az aerogélek kémiai tulajdonságait Fourier-transzformált infravörös spektroszkópia (Perkin Elmer Spectrum Two FT-IR Spectrometer), valamint szilárdfázisú nukleáris magrezonancia spektroszkópia (3,2 mm HX MAS szondával felszerelt 600 MHz Varian Spektrométer) segítségével vizsgáltuk. Az ssNMR méréseket Dr. Andraž Krajnc, a Szlovén Nemzeti Kémiai Intézet munkatársa végezte.

Az aerogélek morfológiai tulajdonságait pásztázó (Thermo Fisher Scientific Scios 2) és transzmissziós elektronmikroszkópok (CS korrigált Thermo Fisher Themis TEM) segítségével, valamint N₂ adszorpciós-deszorpciós porozimetria (Quantachrome Nova 2000e) alkalmazásával vizsgáltuk. A SEM felvételek vizuális információt szolgáltatnak a gélváz 3D szerkezetéről a nanométeres mérettartományban, míg a TEM képek a vázat alkotó nanorészecskék méretéről és azok kapcsolódásáról adnak információt. A N₂ adszorpciós-deszorpciós porozimetria a minta

pórusméret-eloszlásáról szolgáltat információt a mezopórusos mérettartományban, valamint a pórustérfogataról és fajlagos felületéről.

A gélvázba beépült Ca(II)-tartalom meghatározása érdekében az aerogéleket oxidatív környezetben emésztettük, majd az elroncsolt minták Ca(II)-tartalmát induktív csatolású plazma optikai emissziós spektrofotométer (ICP-OES, Agilent 5100 SVDV spektrométer) segítségével határoztuk meg. Energiadiszerzív röntgenfluoreszcencia spektroszkópiás (EDS) elemtérkép felvételeket is készítettünk a TEM mérések során pásztázó módban, hogy elemezni tudjuk a gélvázba beépült Ca(II) vegyületek méretét és eloszlását a vázon belül. Röntgendiffrakciós (Rigaku SmartLab 9,0 kW-os röntgendiffraktométer) méréseket végezve a nyers Ca(II) vegyületeken és az azokkal funkcionalizált mintákon információt szereztünk a vázba beépült Ca(II) vegyületek kristályszerkezetére vonatkozóan.

A nanoszerkezeti tulajdonságok vizsgálatára kisszögű neutronszórásos (Yellow Submarine pinhole típusú SANS műszer a Budapesti Neutron Központban) méréseket végeztünk a száraz és a nedves BSPXY aerogél mintákon. A száraz minták szórási görbéi a nanométeres tartományban lévő szóró objektumokról, például a pórusok és a részecskeagglomerátumok fraktál jellegéről és méretéről szolgáltat információt. Vizsgáltuk továbbá a nedvesedés során potenciálisan fellépő morfológiai változásokat is, illetve különböző arányú H₂O és D₂O elegyekkel feltöltve a pórusokat kontrasztvariációs vizsgálatokat is végeztünk. A kontrasztvariációs mérések segítségével a Ca(II)-mentes minták hibrid szerkezetéről, míg a Ca(II)-tartalmú minták esetén a gélvázba beépült Ca(II) vegyületekről kaptunk képet.

A szuszpendált aerogél részecskék ζ -potenciálját MALVERN Zetasizer Nano ZS műszerrel mértük a 3-8 közötti pH tartományban. A ζ -potenciál információt nyújt a szuszpendált részecskéket körülvevő

elektrosztatikus kettős rétegről. Ennek ismerete azért fontos, mert befolyásolhatja a szuszpendált aerogél részecskék és a sejtek közötti kölcsönhatásokat.

A kalcium alginát aerogél nedvesedése során fellépő morfológiai változásokat leíró anyagspecifikus SANS modell fejlesztése Dr. Cedric J. Gommessal, a Liège-i egyetem docensével együttműködésben valósult meg. A vizsgált szórási görbéket egy korábbi tanulmányban már publikálták, amelyben egy kvalitatív modellt állítottak fel a nedvesedés során lejátszódó szerkezeti változásokra vonatkozóan.¹ Célunk egy új matematikai modell kidolgozása volt ezekre a szórási görbékre, hogy kvantitatív információt szerezzünk a morfológiai változásokról. A modell felállításánál figyelembe vettük a száraz kalcium alginát aerogél morfológiai és kémiai tulajdonságait, valamint a hidratált alginát polimer lánc girációs sugarát és a polimer térfogatát. A modell tesztelését MATLAB szoftver segítségével végeztük, és a szórási görbék illesztése a nemlineáris legkisebb négyzetek módszerével történt.

¹ Forgács, A.; Papp, V.; Paul, G.; Marchese, L.; Len, A.; Dudás, Z.; Fábíán, I.; Gurikov, P.; Kalmár, J., Mechanism of Hydration and Hydration Induced Structural Changes of Calcium Alginate Aerogel. *ACS Applied Materials & Interfaces* **2021**, *13* (2), 2997-3010. [10.1021/acsami.0c17012](https://doi.org/10.1021/acsami.0c17012)

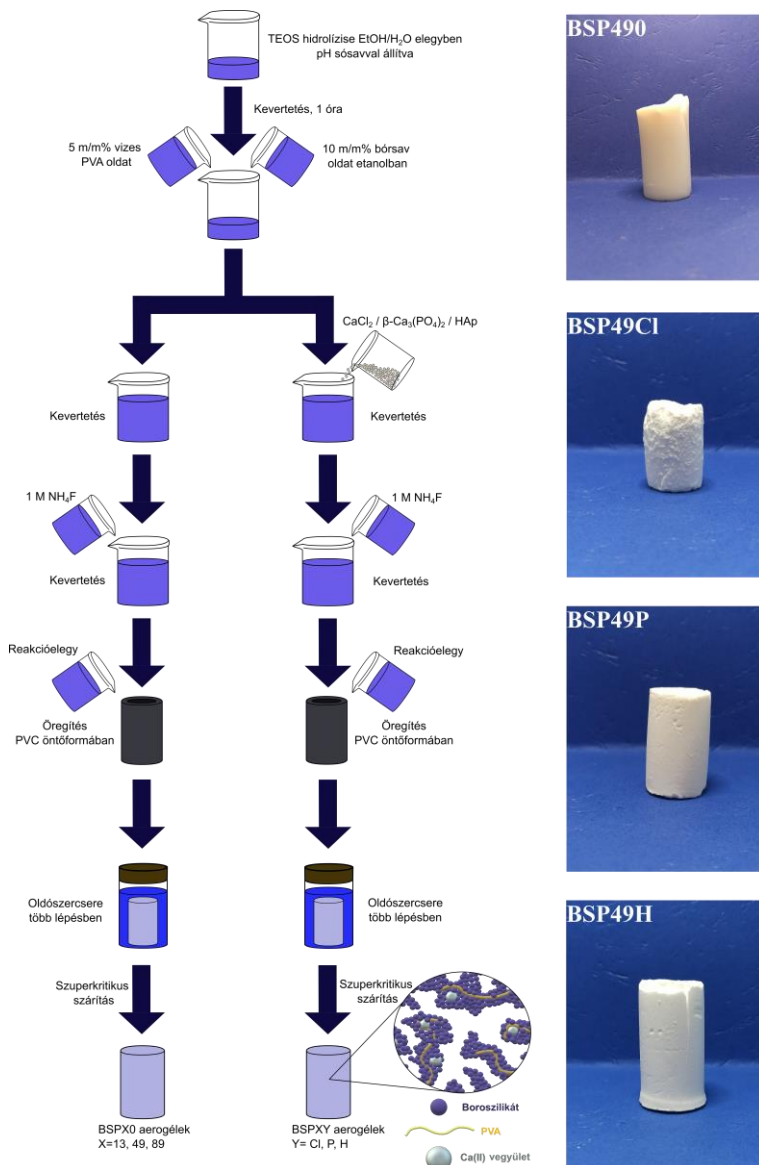
III. Új tudományos eredmények

1. Új hibrid boroszilikát – polivinil-alkohol (PVA) aerogéleket állítottunk elő.

1.1.) A hibrid boroszilikát-PVA gélek szintézise szol-gél eljárással történt. Első lépésben savas katalízist alkalmaztunk a szilika prekursor hidrolízise érdekében. A következő lépésben bórsavat és PVA-t tartalmazó oldatokat öntöttünk a reakcióelegyhez, majd végső lépésben a gélesedés elősegítése érdekében NH_4F katalizátort használtunk. A szintézis során három különböző molekulatömegű (13-23 kDa, 49 kDa és 89-98 kDa) PVA-t alkalmaztunk. Az előállított géleket egy többlépéses oldószercserre során tiszta acetonba vittük át, végezetül pedig szuperkritikus CO_2 alkalmazásával szárítottuk ki.

1.2.) A Ca(II)-tartalmú gélek előállításához három különböző Ca(II) forrást alkalmaztunk, amelyek a CaCl_2 , $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ és a hidroxiapatit ($\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$ – HAp). A Ca(II) forrást közvetlenül a bórsavas és a PVA oldatok után adtuk a reakcióelegyhez. A szintézis további lépései azonosak a Ca(II)-mentes minták esetén leírtakkal (**1. ábra**).

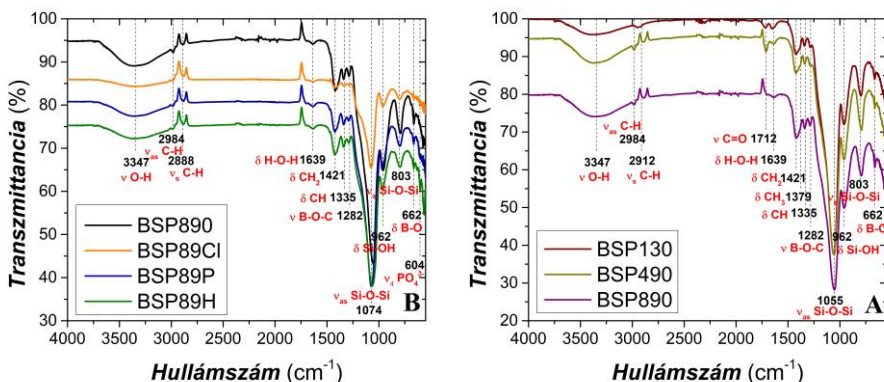
Potenciálisan orvosbiológiai felhasználásra alkalmas polivinil-alkohol – boroszilikát hibrid, és kalcium alginát aerogélek nanoszerkezeti tulajdonságai



1. ábra: A BSPXY aerogélek szintézisének sematikus ábrája, valamint az előállított BSP49Y monolit aerogélek fényképei.

2. Bizonyítottuk, hogy a hibrid aerogélek esetében kémiai kötés csak a PVA és a bórsav között jön létre. A többi alkotó között csak fizikai kölcsönhatások alakulnak ki. Ennek ellenére sikerült egy homogén hibrid gélvázat előállítani, ahol a nanométeres skálán nem különíthetők el fázisok.

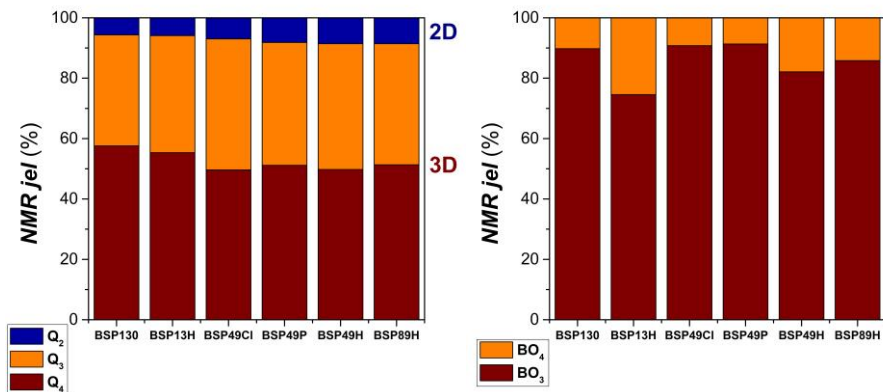
2.1.) AZ FT-IR spektrumokon azonosítottuk a gélvázat felépítő komponensek karakterisztikus rezgéseit, valamint a B-O-C kötésre jellemző csúcsot, ami a bórsav és a PVA közötti komplexképzésre utal (2. ábra). Az Si-O-B kötés kialakulását a 890 cm^{-1} körüli csúcs megjelenése bizonyítaná, de ez a csúcs egyik minta esetén sem detektálható. Az FT-IR spektrumok nem nyújtanak információt a CaCl_2 -ra vonatkozóan, viszont a HAp-tartalmú minták esetén kimutatható a PO_4^{3-} jelenléte. Ez a jel a $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ esetében is várható, de feltételezhetően a kisebb Ca(II)-tartalom miatt kisebb az intenzitása.



2. ábra. A hibrid borszilikát-PVA aerogélek FT-IR spektruma, ahol az egyes minták különböző színnel vannak jelölve. Az „A” ábrán a PVA molekulatömegének hatása, míg a „B” ábrán a Ca(II) vegyületek jellegének hatása látható.

2.2.) A BSPXY aerogélek ^{29}Si -NMR spektrumain minden esetben három jel látható, amelyek a Q_2 (-91,3 ppm), Q_3 (-100,6 ppm) és Q_4 (-110 ppm) szerkezetekre utalnak, és általános a $\text{Si}(\text{OSi}\equiv)_x(\text{OH})_{4-x}$ képlet szerint írhatók fel. Az Si-O-C kötés kialakulására a kb. 60 ppm-nél megjelenő jel utalna, de ez a mi esetünkben nem detektálható. Általánosan a hosszabb PVA láncok alkalmazása esetén a 3D szerkezet (Q_3+Q_4) kialakulásának kismértékű csökkenése, míg a Ca(II) vegyületek beépülése esetén a Q_4 szerkezetek kialakulásának kismértékű csökkenése figyelhető meg (**3. ábra**).

2.3.) A ^{11}B NMR spektrumok esetén két csúcs detektálható. Az első, 10-18 ppm tartományba eső csúcs a trigonális BO_3 , míg a másik 0 ppm körüli csúcs a tetraéderez BO_4 szerkezetekhez rendelhető. A BO_3 csúcs számos jeltől áll, amelyek a ciklikus és a nyíltláncú BO_3 szerkezetű csoportokra jellemző. A 13 ppm körüli csúcs a B-O-Si kötések jelenlétére is utalhatna, de mivel az IR spektrumokban az erre a kötésre jellemző csúcs nem detektálható, így nem tudjuk megerősíteni a kötés kialakulását. Az ilyen típusú kötések látszólagos hiánya azzal magyarázható, hogy a B-O-Si kötések kialakulása szobahőmérsékleten kedvezőtlen, valamint érzékenyek a hidrolízisre. A Ca^{2+} jelenléte stabilizáló hatással van a BO_4 szerkezetekre, ezzel elősegítve azok képződését. A BO_4 csoportok legnagyobb mennyiségben a BSPXH minták esetén figyelhető meg, feltételezhetően a relatíve kis méretű HAp részecskék felületén nagy mennyiségben előforduló Ca^{2+} ionoknak köszönhetően. Ugyanakkor a PVA lánchosszának növekedésével egy csökkenő tendencia figyelhető meg, ami utalhat arra, hogy a hosszabb polimer láncok jobban képesek lefedni a HAp részecskék felületét (**3. ábra**). A BO_4 csoportok megjelenése továbbá utalhat a bórsav és PVA komplexképzésére is, ami megerősíti a B-O-C kötések kialakulásának valószínűségét.

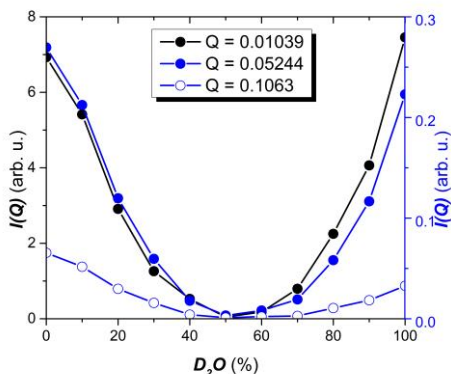


3. ábra. A bal oldali ábrán a szilika váz 3D (Q₃+Q₄) és 2D (Q₂) szerkezetének aránya látható a ²⁹Si-MAS NMR spektrumukból számolt Q₂, Q₃ és Q₄ csoportok csúcsintenzitás arányaival együtt. A jobb oldali ábrán a BO₃ és BO₄ csoportok ¹¹B-MAS NMR spektrumaiból számolt csúcsintenzitás arányai láthatók.

2.4.) Az ¹H-MAS NMR spektrumokon azonosítani tudtuk az Si-OH, B-OH, C-OH, CH₂, és CH kötésekre jellemző csúcsokat, továbbá a BSP13Y és BSP49Y aerogélek esetén a CH₃ csoportot is azonosítani tudtuk, ami a hidrolízis során visszamaradt acetát csoportok jelenlétére utal a PVA láncban. A BSPXH minták esetén egy további csúcs detektálható 0 ppm-nél, ami a hidroxapatit OH csoportjára jellemző.

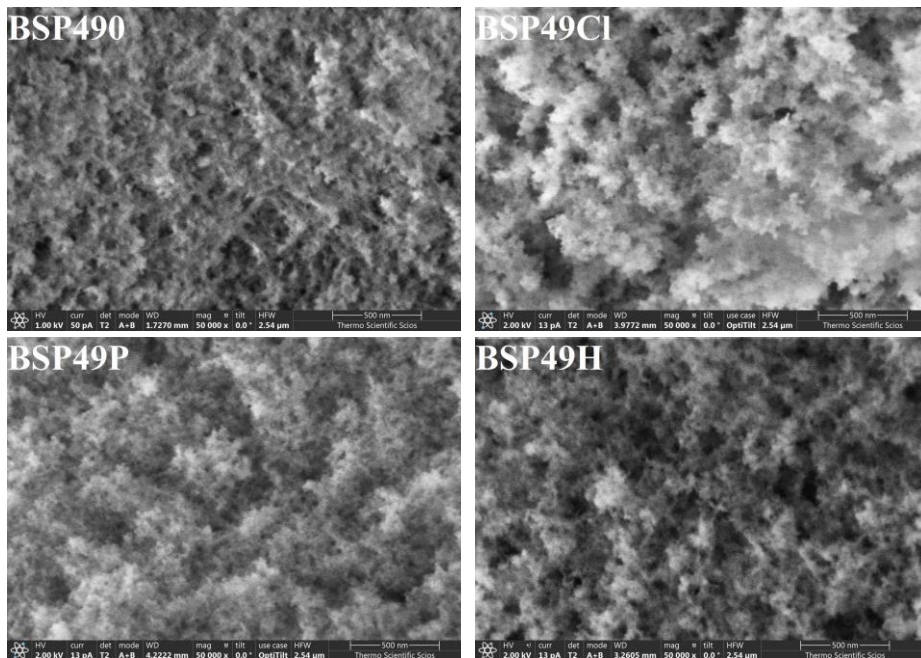
2.5.) A BSP130-as mintán egy SANS mérést sorozatot végeztünk, melynek során az aerogél pórusait különböző arányú H₂O:D₂O keverékekkel töltöttük fel, szisztematikusan változtatva a folyadék összetételét. A korrigált intenzitásokat a D₂O-tartalom függvényében ábráztuk három különböző Q értéknél, amint az a 4. ábrán látható. Az egyetlen minimum pont kb. 50 (V/V)% D₂O esetén azt jelzi, hogy a szóráshossz-sűrűsége (SLD) a keveréknek megegyezik az aerogél vázáéval. Továbbá elméleti úton is kiszámítottuk azt a vízelegy

összetételt, amelynek szóráshossz-sűrűsége megegyezik a gélvázéval. A számított összetétel 51,8 (V/V)% D₂O, ami kiválóan egyezik a kísérleti eredménnyel.



4. ábra. A vízeleggyel feltöltött BSP130-as minta inkoherens hátérrel korrigált szórási intenzitásai a H₂O:D₂O keverék összetételének függvényében ábrázolva három különböző Q érték esetén (Q = 0,01039; 0,05244 és 0,1063 Å).

2.6.) Elektronmikroszkópos felvételek bizonyítják, hogy a Ca(II)-mentes aerogélek váza nyitott és összefüggő porózus rendszert alkot, ami 10 nm-nél kisebb átmérőjű primer gömbi nanorészecskékből épül fel (**5. ábra**). Ezen részecskék gyöngyfűzészerű hálózata a mezopózusos tartományba eső pórusokat határol körül (<50 nm). A PVA molekulatömegének és/vagy a beépített Ca(II) forrás típusának megváltoztatásával az alapvető morfológiai tulajdonságok megmaradnak.



5. ábra. A BSP49Y aerogélek kisfeszültségű pásztázó elektronmikroszkópos (LV-SEM) felvételei 50k × nagyításban.

2.7.) A N₂ adszorpciós-deszorpciós porozimetria mérések során minden esetben IVa típusú izotermákat tudunk meghatározni H3-as hiszterézishurokkal ami bizonyítja, hogy a hibrid aerogélek jellemzően mezopórusos anyagok, ugyanakkor makropórusokat is tartalmaznak. A mérések alapján az aerogélek fajlagos felülete kb a 400-1040 m²/g tartományba esik. A PVA molekulatömegének növelése, valamint a Ca(II) vegyületek beépítése a gélvázba hatással van a pórusméret-eloszlásra, továbbá csökkentik a minták fajlagos felületét és pórustérfogatát. A gélvázba beépülő Ca(II) vegyületek eltérő módon változtatják meg a minta morfológiai tulajdonságait, amit a Ca(II) vegyületek eltérő mennyisége, mérete és a beépülés módja határoz meg.

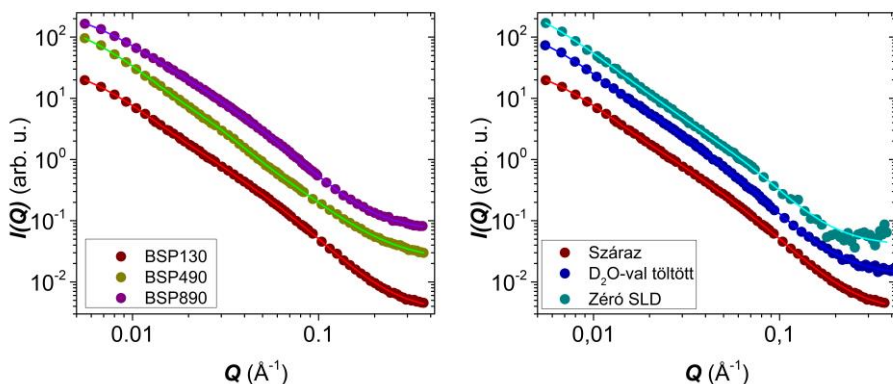
Mindazonáltal a főbb morfológia jegyek minden esetben megmaradnak. A számított morfológiai paramétereket az **1. táblázat** tartalmazza.

1. táblázat: A BSPXY aerogélek N₂-szorpciós porozimetriás mérésekből számított morfológiai paraméterei.

Minta	Látszólagos fajlagos felület (m ² /g)	Jellemző pórusátmérő (nm)	Pórustérfogat (cm ³ /g)
BSP130	1038	28	6,1
BSP13Cl	763	4	2,0
BSP13P	747	22	3,7
BSP13H	579	5	3,0
BSP490	880	5	4,2
BSP49Cl	604	5	2,0
BSP49P	726	5	3,3
BSP49H	517	5	2,1
BSP890	949	26	5,0
BSP89Cl	593	4	1,8
BSP89P	665	5	2,9
BSP89H	417	5	1,7

2.8.) A BSPX0 aerogélek SANS görbét a két struktúrális szintet leíró Beaucage modell segítségével illesztettük meg (**6. ábra**). A kisebb struktúrális szinten a szóró objektumok a pórusoknak felelnek meg, és a mérésekből 18-23 nm átlagos átmérőt tudtunk meghatározni. A nagyobb struktúrális szinten a szóró objektumok a SEM felvételeken megfigyelhető laza részecske-agglomerátumokhoz rendelhetők, amelyek számított átlagos mérete 71-80 nm. A *p* kitevők a kisebb struktúrális

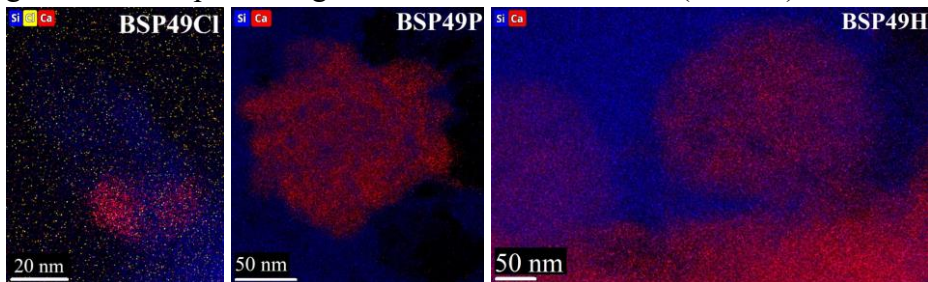
szinten 2,4 és 2,9 közé esnek, míg a nagyobb szinten 3,8 és 4,4 közé. Az első esetben ezek a hatványkitevők a pórusrendszer tömegfraktál szerkezetére utalnak, míg az utóbbi esetben a szóró objektum felületéről adnak információt. A BSP130 aerogél pórusait egy kísérletben D₂O-val, egy másikban pedig 8 V/V% D₂O-t és 92 V/V% H₂O-t tartalmazó keverékkel töltöttük fel, amelynek SLD értéke a levegőével egyenértékű (zéró SLD). A nedves BSP130 aerogél háttérkorrigált szórási görbéinek alakja nagyon hasonló a száraz mintáéhoz (6. ábra). A számított szerkezeti paraméterek, valamint a szórási görbék alakja bizonyítja, hogy az aerogél morfológiai tulajdonságai megmaradnak a nedvesedés során.



6. ábra. A bal oldali ábra mutatja a száraz BSPX0 aerogélek szórási görbéit. A jobb oldali ábrán látható a száraz és a nedves (D₂O-val vagy 8% D₂O-92% H₂O keverékkel töltött) BSP130 aerogél szórási görbéi. A pontok a kísérleti adatokat, míg a vonalak az illesztett értékeket jelölik. A jobb áttekinthetőség érdekében a szórási görbéket egymáshoz képest függőlegesen eltoltuk.

3. Sikeresen építettünk be különböző Ca(II) vegyületeket a hibrid gélvázba, amelyek ugyan hatással voltak az aerogélek nanoszerkezeti tulajdonságaira, de a főbb morfológiai jegyek minden esetben megmaradtak. A szuszpendált Ca(II)-tartalmú aerogél mikrorészecskék jó sejttadhéziós tulajdonságokkal rendelkeznek detektálható toxicitás nélkül.

3.1.) A kalciumban gazdag részek jelenléte az EDS elemterképeken megerősíti a Ca(II) vegyületek beépülését az aerogél vázába (**7. ábra**), továbbá ezek mérete megegyezik a Ca(II) vegyületek méretével. A BSP49Cl minta esetén a kalciumban gazdag régiók a nanométeres tartományba esnek, míg a másik két Ca(II) vegyületet tartalmazó minta esetén mikrométeres nagyságúak. Ez a különbség abból adódik, hogy a CaCl_2 feloldódik a reakcióelegyben, megváltoztatva annak ionerősségét, valamint elősegíti a nagyobb aggregátumok képződését. A beépült Ca(II)-tartalom valószínűleg ionos formában van jelen a gél vázában, továbbá egy része nanoméretű részecskék formájában kristályosodik a pórusokba. A Cl eloszlása eltér a Ca eloszlásától a gél vázában, ami arra utal, hogy a CaCl_2 az eredeti állapotától eltérő formában épül be. Ezzel szemben a $\beta\text{-Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ és a HAp nem oldódik a reakcióelegyben, és a gél vázába beépülve megőrzik eredeti szerkezetüket (**7. ábra**).



7. ábra: A BSP49Y aerogélek elemterképei.

3.2.) Az elemvizelés mérés az mutatják, hogy az elméletileg várt és a mért Ca(II)-tartalom jó egyezést mutat a BSP49P és BSP49H minták esetében. A BSP49Cl minta kalciumtartalma azonban lényegesen alacsonyabb a vártnál (**2. táblázat**). Ezek az eredmények a Ca(II) vegyületek eltérő beépülési módjával magyarázhatók.

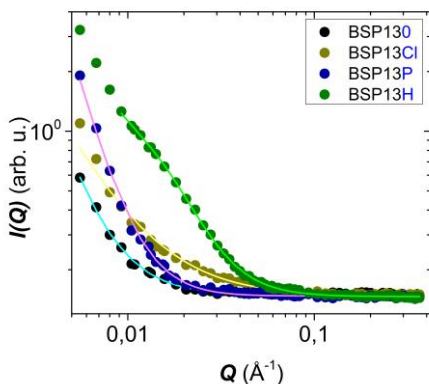
2. táblázat. A BSP49Y és a BSPXCl aerogélek Ca(II)-tartalma.

	BSP49Cl	BSP49P	BSP49H
Várt Ca(II)-tartalom (m/m%)	~7	~7	~10
Mért Ca(II)-tartalom (m/m)%	0,8 ± 0,1	7,5 ± 0,4	11,5 ± 0,5
Mért <u>Ca(II) vegyület</u> tartalom (m/m)%	2,1 ± 0,2	19,4 ± 0,9	28,8 ± 1,3

3.3.) A BSP49P és a BSP49H minták esetén az XRD spektrumok azonos csúcsokat mutatnak, mint a gélvázukba beépített eredeti Ca(II) vegyületek, míg a BSP49Cl minta esetén nem láthatók csúcsok. Ez azt bizonyítja, hogy a β -Ca₃(PO₄)₂ és a HAp megőrizte eredeti kristályszerkezetét a beépülés során. A jellegzetes csúcsok hiánya a BSP49Cl spektrumában arra utal, hogy a CaCl₂ az eredeti kristályszerkezetétől eltérő formában épült be a gélvázba.

3.4.) A Ca(II) vegyületet tartalmazó BSP13Y aerogélek pórusait a gélváz szórás-hossz-sűrűségének megfelelő, 52 (V/V)% D₂O – 48 (V/V)% H₂O keverékkel töltöttük fel, hogy információt szerezzünk a beépült Ca(II) vegyületekről. A szórás-görbék a BSP13H minta kivételével power law modellel illeszthetők (**8. ábra**). Ez azt jelenti, hogy a CaCl₂ és a β -Ca₃(PO₄)₂ tartalmú minták esetén méret nem határozható meg a szórás

görbékéből. A legvalószínűbb magyarázat az, hogy a β - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ részecskék mérete valószínűleg túl nagy, míg a BSP13Cl Ca(II) részecskéinek mennyisége a vázban nem elegendő.

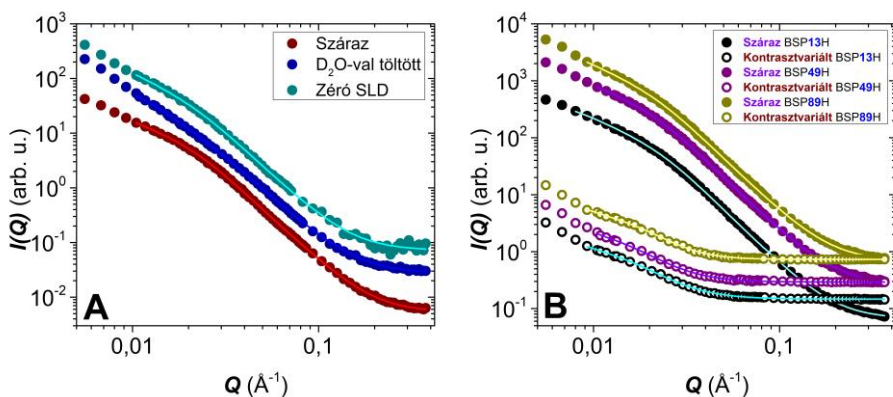


8. ábra: 52(V/V)% D_2O – 48(V/V)% H_2O keverékkel feltöltött BSP13Y aerogélek SANS szórásgörbéi. A pontok a kísérleti adatokat, míg a vonalak az illesztett értékeket jelölik.

3.5.) A BSP13Cl és a BSP49P minták szerkezeti tulajdonságait ezek alapján a BSPX0 mintákhoz hasonlóan lehetne értelmezni, ugyanakkor ezen esetekben sem lehet elhanyagolni a beépített Ca(II) vegyületek hozzájárulását a teljes szórási mintázathoz. A β - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ részecskék felszínéről történő szórás további hozzájárulást eredményez a kis Q tartományban a szórási görbéhez, így ezen régió értelmezése körülményes, míg a CaCl_2 részleges beépülése a hibrid gélvázba kismértékben megváltoztatja a váz SLD-jét.

3.6.) A HAp beépülése jelentősen megváltoztatja a hibrid aerogélek szórási görbéinek alakját (**9. ábra**). A száraz és a kontrasztvariált BSPXH aerogélek szórási görbéit az egy strukturális szintet leíró Beaucage

modellel illesztettük meg. A BSPXH aerogélek szórási mintázatát a pórusokról, az agglomerátumokról és a HAp-részecskékről érkező szórás adja, aminek következtében a számított méret nem rendelhető hozzá egyetlen szóróobjektumhoz. Ugyanakkor a kontrasztvariált szórási görbék esetén a számított méret megadja a SANS-mérettartományon belüli HAp-részecskék átlagos méretét. A beépült HAp részecskék átlagos mérete megközelítőleg 61 nm a girációs sugárból gömbgeometriával számítva, továbbá a hatványkitevő felületi szórásra utal.



9. ábra. A bal oldali ábrán látható a száraz és a nedves (D_2O -val vagy 8% D_2O -92% H_2O keverékkel töltött) BSP49H aerogél szórási görbéi. A jobb oldali ábra mutatja a száraz és a kontrasztvariált BSPXH aerogélek SANS szórásgörbéit. A pontok a kísérleti adatokat, míg a vonalak az illesztett értékeket jelölik. A jobb áttekinthetőség érdekében a szórási görbéket egymáshoz képest függőlegesen eltoltuk.

3.7.) A HAp-tartalmú minták nedvesedése során bekövetkező morfológiai változások tanulmányozása érdekében a BSP49H minta pórusait D_2O -val, valamint zéró SLD-nek megfelelő vízeleggyel

töltöttük fel. A minta szerkezeti paramétereit zéró SLD-vel nedvesítve ugyanazok, mint száraz állapotban, míg a D₂O-val nedvesített mintánál kisebb eltérések figyelhetők meg (**9. ábra**). Ennek ellenére ezen minták esetén sem tapasztalható szignifikáns változás a nedvesedés során.

3.8.) A szuszpendált BSP490 aerogél részecskék ζ -potenciálja -8 mV-ról -27 mV-ra csökken a pH növekedésével. A kalciumvegyületek beépülése a gélvázba pozitívabb, de még mindig negatív ζ -potenciálokat eredményez, mint a Ca(II)-mentes minta esetén, ami a beépült kalciumvegyületek felületén található Ca²⁺ ionok jelenlétével magyarázható. Ezek a kis negatív ζ -potenciál értékek kedvezőek a sejttadhézió szempontjából.

3.9.) A Debreceni Egyetem munkatásai, Dr. Szemán-Nagy Gábor és csoportja *in vitro* sejtes (karczáródási és sejtnövekedési) vizsgálatokat végeztek a Ca(II) vegyületeket tartalmazó mintákon. Ezekhez a biológiai kísérletekhez DPSC (Dental Pulp Stem Cells) és MG-63 sejttípusokat használtak. Mind a két sejttípus esetén megfigyelhető volt az aerogél részecskék kedvező sejttadhéziós tulajdonsága, aminek következtében a sejtek odavándoroltak a részecskékhez és rátapadtak azokra. Ez a hatás kezdetben csökkentette az monoréteg kialakulásának sebességét és a tenyészet regenerálódását. A kísérletek végére (48 óra) azonban mind a két sejttípusnál teljesen beborították a sejtek a gél részecskéket és beépítették a monorétegbe. A sejtnövekedési vizsgálatok során a kezdeti késleltetés ellenére a generációs idő a kísérletek végére a kezeletlen tenyészetekéhez hasonlítható volt. Megfigyelték továbbá, hogy a növekvő Ca(II)-tartalom kedvezően hat a monoréteg kialakulására.

4. Kidolgoztunk egy szerkezetileg valóságghű modellt az alginát aerogélek nedvesedése során fellépő kisszögű szórási mintázatok kvantitatív elemzésére.

4.1.) A modell megalkotása során azzal a feltételezéssel éltünk, hogy az aerogél mezopórusos szerkezetű és a szilárd vázat sűrű polimerhálózat alkotja. Nedvesedéskor a víz fokozatosan beépül a vázszerkezetbe, aminek következtében az megduzzad, valamint amikor a duzzadt rostok egymással érintkeznek, akkor nagyobb objektumokká alakulnak. A nedvesedés végén ezek makroszkópikus méretűvé válnak. A folyamat során a váz belső szerkezete is fokozatosan átalakul egy száraz, sűrű polimerhálózatból hidrogéllé. A szórási mintázatot a szerkezeti változások két struktúrális szinten történő változása adja.

4.2.) Feltételezve, hogy a vázon kívül nincs víz, sem polimer, ezek lokális relatív aránya a vázon belül megegyezik az aerogél makroszkópikus víztartalmával:

$$\varphi_w = \frac{V_w}{V_w + V_p} = \frac{\frac{V_w}{V_p}}{\frac{V_w}{V_p} + \frac{V_p}{V_p}} = \frac{V}{V + 1} \quad (1)$$

ahol φ_w a víz térfogatfrakciója a hidratált vázban és V a víz (V_w) és a polimer (V_p) térfogatának hányada a teljes mintán belül.

4.3.) A hierarchikus szerkezet intenzitásfüggvényét a szóráshossz-korrelációs függvény Fourier-transzformációja adja meg, amelyet általános formában a következő módon írhatunk fel:

$$\bar{C}_b(r) = \langle b(x)b(x+r) \rangle - \langle b(x) \rangle^2 \quad (2)$$

A (2) egyenlet kifejezéséhez a nedves aerogél vázra és a polimerre vonatkozó indikátorfüggvényei $I_{s/p}(x)$ segítségével határoztuk meg a helyzetfüggő szóráshossz-sűrűségét $b(x)$:

$$b(x) = I_s(x)[b_w + (b_p - b_w)I_p(x)] \quad (3)$$

ahol b_w és b_p a víz és a polimer szóráshossz-sűrűsége. A polimer és a vázszerkezet korrelációs függvényre $\bar{C}_b(r)$ gyakorolt hatásának megkülönböztetése érdekében azok centrális kovarianciáit vettük figyelembe, izotróp szerkezeteket feltételezve. Gyakorlati szempontból az általános intenzitásfüggvény $I(Q)$ a következőképpen írható fel:

$$I(Q) = A \times \left\{ \left[\varphi_w + \frac{b_p}{b_w - b_p} \right]^2 \frac{I_s(Q)}{\phi_s} + I_p(Q, \varphi_w) \right\} \quad (4)$$

Az A egy numerikus tényező, ami a szórási görbék nem abszolút kalibrált jellege miatt szükséges. ϕ_s a váz térfogatfrakciója. Az $I_s(Q)$ és $I_p(Q, \varphi_w)$ a vázra és a polimerre vonatkozó centrális kovariancia függvények Fourier-transzformált alakja. A zárójelben lévő első tag a makroszkopikus szerkezetből, míg a második kifejezés a váz belső szerkezetéből adódó szórási mintázatot definiálja.

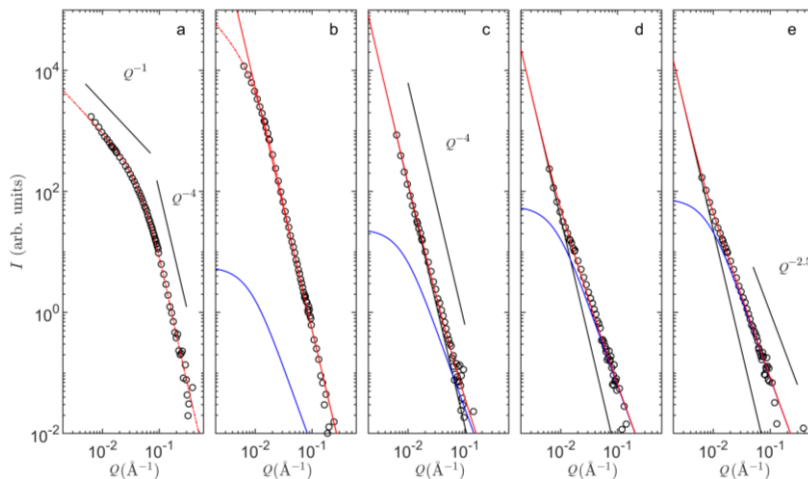
4.4.) A váz belső szerkezetének nedvesedés hatására bekövetkező változásainak leírására a Boole-féle megközelítést alkalmaztuk. A belső szerkezetre vonatkozó centrális kovarianciát a következőképpen fejezhetjük ki

$$\bar{C}_p(r) = (1 - \varphi_p)^2 (\exp[\theta K_p(r)] - 1) \quad (5)$$

ahol $K_p(r)$ az alkalmazott motívum geometriai kovariogramja, ahol a mi esetünkben a geometriai motívum a polimer gombolyag. A kisszögű szórási mintázatok szempontjából $K_p(r)$ Fourier transzformáltja

szolgáltatja az egyes polimer gombolyagok forma faktorát. A polimer gombolyagok definiálásához a következő anyagspecifikus információkat használtuk fel: az alginát polimer szórás hossz-sűrűsége, a polimerlánc térfogata, valamint a hidratált polimer lánc girációs sugara híg oldatban.

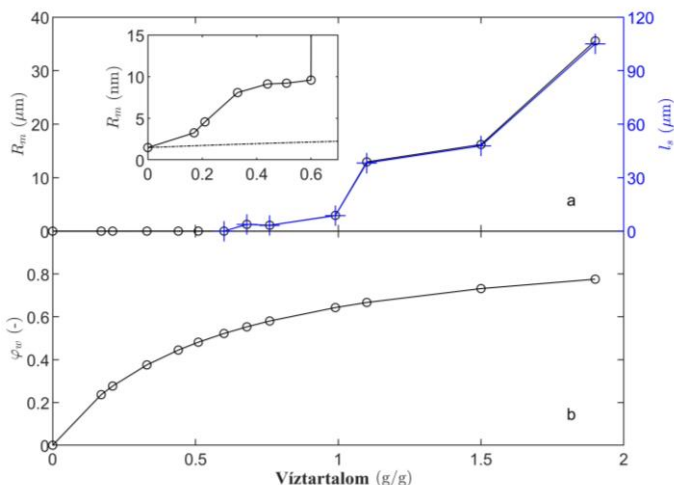
4.5.) A váz szórási mintázatának leírása érdekében két megközelítést alkalmaztunk. A száraz aerogél szórási görbéje -1-es meredekséget mutat a kis Q tartományban és -4-es meredekséget a nagy Q tartományban (**10.a ábra**). Ez a szórási mintázat szálak szerkezetek jelenlétére utal és hengeres geometriai modellel írható le. Mivel azonban a váz karakterisztikus mérete egy bizonyos víztartalom felett a mérési tartományon kívülre esik, ezért abban az esetben csak a felületéről szórt intenzitás figyelhető meg. Ebben a tartományban elegendő a Porod-féle aszimptotikus értékét figyelembe venni a váz modellezéséhez $I_s(Q)$. A Porod-modell alkalmazása esetén az illesztett értékek csak a 0,6 g/g víztartalom alatt mutatnak jelentős eltéréseket a mért értékektől (**10. ábra**). Ez azt jelenti, hogy az ennél kisebb víztartalom esetén a váz karakterisztikus mérete elég kicsi ahhoz, hogy a mért Q tartományon belül szórjon, és ebben az esetben csak a hengeres modell alkalmazása lehetséges.



10.ábra. A különböző víztartalmú alginát aerogélek illesztett SANS görbéi, ahol az egyes ábrák a következő víztartalmakat jelölik: **(a)** száraz aerogél, **(b)** 0,33 g/g, **(c)** 0,68 g/g, **(d)** 1,1 g/g és **(e)** 1,9 g/g. A folytonos vonalak a Porod modell, a szaggatott vonalak pedig a hengeres modell alkalmazását jelölik. A két modell nem különböztethető meg magasabb víztartalom esetén. Az egyes szerkezeti hozzájárulásokat a szórási mintázathoz a következő színekkel jelöltük: polimer oldat (hidrogél) **(kék)**; víz **(fekete)**, valamint ezek összege **(piros)**.

4.6.) Az illesztésekből számított átlagos sugarak (R_m) egy kétlépcsős nedvesedési mechanizmusra utalnak. A kb. 0,6 g/g víztartalom alatti tartományban a szálak mérete fokozatosan nő, míg nem a számított sugarak a kezdeti 14 Å-ről kb. 100 Å-re nem emelkedik **(11.a ábra)**. Nagyobb víztartalom esetén jelentősebb növekedés figyelhető meg, ahol a szálak sugara már mikrométeres nagyságúvá válik. Ebben a tartományban a Porod-modell alkalmazása is lehetséges. Annak érdekében, hogy a két modellel kapott, vízre vonatkozó illesztett értékeket össze tudjuk hasonlítani, a hengeres modellből meghatározott átlagos sugarakat átszámítottuk karakterisztikus méretekké (l_s). Ezek

alapján a két modell segítségével közel azonos értékeket tudunk meghatározni.



11. ábra. Az "a" ábrán láthatók a SANS görbék illesztéséből számított átlagos sugarak R_m (bal tengelyen, fekete színnel jelölve) és a váz karakterisztikus mérete l_s (jobb tengelyen, kék színnel jelölve) a víztartalom függvényében ábrázolva. A bal felső sarokba beszúrt kis ábra az R_m értékek változását mutatja egy kisebb méretskálán a jobb áttekinthetőség érdekében, ahol a szaggatott vonal jelöli a számított értékeket kizárólag duzzadást feltételezve. A "b" ábrán az (1) egyenlet alapján számított vázban található víz térfogatfrakciója φ_w látható a víztartalom függvényében ábrázolva.

4.7.) A SANS görbék elemzése alapján a kalcium alginát aerogél nedvesedése egy kétlépcsős folyamat. Az első szakaszban (kb. 0,6 g/g víztartalomig) a vázat alkotó szálak vastagsága tízszeresére növekedik. Ebben a szakaszban a szálak nem csak duzzadnak, hanem nagyobb struktúrákká aggregálódnak. A víztartalom további növekedésével (kb. 0,6 g/g víztartalom felett) egy drasztikus méretváltozás figyelhető meg, melynek során a váz mérete a nanométeres tartományból mikrométeres

nagyságúvá válik (**11.a ábra**). A víztartalom minimális, 0,5 g/g-ról 0,7 g/g-ra történő változásával a váz méretének százszoros növekedése figyelhető meg, miközben a víz térfogati frakciója φ_w kevesebb mint 10%-kal nő csupán. Ez a drámai változás a váz karakterisztikus mértében l_s a vázdomének jelentős átrendeződésével és összeolvadásával magyarázható, aminek következtében a teljes külső felület jelentősen csökken miközben a térfogatuk szinte változatlanul marad. Ennek az átmenetnek a hirtelensége egy perkolációs jelenséggel magyarázható, amely során a vázdomének méretének kismértékű növekedése is már sokukat érintkezésbe hozza. Továbbá a víztartalom növekedésével a kapilláris erők is megnőnek, ami a nedves gél nanoszerkezetét instabillá teszi. Ezek a hatások együtt okozzák a hidratált szálakból kialakuló homogén hidrogél képződését.

IV. Az eredmények hasznosítási lehetőségei

Az aerogélek kémiai és morfológiai tulajdonságaiktól függően számos területen alkalmazhatók, mint például hőszigetelő anyagokként, katalizátor- vagy gyógyszerhordozókként, szorbensekként, vagy akár a szövetregenerálás területén.

Doktori kutatásom során két különböző típusú aerogélt vizsgáltam, amelyek potenciálisan az orvosbiológia területén alkalmazhatók. A bemutatott Ph.D. kutatás ezen aerogélek nanoszerkezeti tulajdonságainak vizsgálatára irányult, amelyek meghatározzák a célterületeken való alkalmazhatóságukat.

A szuszpendált hibrid aerogél mikrorészecskék vizsgálata a csontszövetek regenerálásának céljából ígéretes eredményeket mutat. Ugyanakkor a további fejlesztések érdekében *in vivo* vizsgálatok szükségesek. Ezen túlmenően az aerogélek részletes tanulmányozása betekintést ad a szintézis során alkalmazott körülmények szerkezetre gyakorolt hatására vonatkozóan. Ezek az információk útmutatásul szolgálhatnak olyan új hibrid aerogélek szintéziséhez, amelyek szerkezeti tulajdonságai kedvezőek a célterületen történő alkalmazás szempontjából.

A kisszögű szórási mintázatok elemzésére kidolgozott modell jóval általánosabb annál, mint hogy csak az alginát aerogélek nedvesedése során bekövetkező változásokat írja le. Elméletileg ez a modell hasznos lehet az alginát aerogélekhez hasonló kémiai és morfológiai tulajdonságokkal rendelkező aerogélek nedvesedésének leírására. Elsősorban a szálas nanostruktúrált poliszacharid aerogélek nedvesedése során bekövetkező szerkezeti változások vizsgálatára lehet alkalmas, ahol a polimer szálak vízzel való molekuláris kölcsönhatása során hasonló szerkezeti átrendeződések valósulnak meg a polimer

harmadlagos és negyedleges szerkezetében. Továbbá az aerogélek nedvesítése során megfigyelt szerkezeti változások feltételezhetően fordított sorrendben mennek végbe a szolvatált gélek szárítása során, így remélhetőleg a jelen munka ebben a kontextusban is hasznos információt szolgáltat.

Publikációk

Az értekezés alapját képző közlemények

- I. Balogh, Z., Len, A., Baksa, V., Krajnc, A., Herman, P., Szemán-Nagy, G., Czigány, Zs., Fábíán, I., Kalmár, J., Dudás, Z.
Nanoscale structural characteristics and in vitro bioactivity of borosilicate – polyvinyl alcohol (PVA) hybrid aerogels for bone regeneration
ACS Applied Nano Materials, 7(4), 4092-4102. (2024)
IF (2023): 5.3 (Q1)

- II. Balogh, Z., Kalmár, J., Gommes, C. J.
Wetting of alginate aerogels, from mesoporous solids to hydrogels: a small-angle scattering analysis
Journal of Applied Crystallography, 57(2), 369-379. (2024)
IF (2023): 5.2 (Q1)

- III. Ecsédi, B., Forgács, A., Balogh, Z., Fábíán, I., Kalmár, J.
Hydration and wetting mechanism of borosilicate–Polyvinyl alcohol (PVA) hybrid aerogels of potential bioactivity
Journal of Molecular Liquids, 401, 124605. (2024)
IF (2023): 5.3 (Q1)

Az értekezés anyagához szorosan nem kapcsolódó közlemények

- I. Herman, P., Moldován, K., Paul, G., Marchese, L., Balogh, Z., Len, A., Dudás, Z., Fábíán, I., Kalmár, J.
Selective and reversible surface complexation of aqueous palladium(II) by polycarboxylate (pyromellitic acid) functionalized hybrid aerogel sorbent
Applied Surface Science, 613, 156026. (2023)
IF (2023): 6.3 (Q1)

- II. Lihi, N., Balogh, Z., Diószegi R., Forgács A., Moldován K., May V. N., Herman P., Fábíán I., Kalmár J.
Functionalizing Aerogels with Tetraazamacrocyclic Copper(II) Complexes: Nanoenzymes with Superoxide Dismutase Activity Applied Surface Science, 611, 155622. (2023)
IF (2023): 6.3 (Q1)
- III. Forgács, A., Balogh, Z., Andrási, M., Len, A., Dudás, Z., May, N. V., Herman, P., Juhász, L., Fábíán, I., Lihi, N., Kalmár, J.
Mechanistic explanation for differences between catalytic activities of dissolved and aerogel immobilized Cu(II) cyclen Applied Surface Science, 579, 152210. (2022)
IF (2022): 6.7 (Q1)
- IV. Lázár, I., Forgács, A., Horváth, A., Király, G., Nagy, G., Len, A., Dudás, Z., Papp, V., Balogh, Z., Moldován, K., Juhász, L., Cserháti, Cs., Szántó, Zs., Fábíán, I., Kalmár, J.
Mechanism of hydration of biocompatible silica-casein aerogels probed by NMR and SANS reveal backbone rigidity Applied Surface Science, 531, 147232. (2020)
IF (2020): 6.707 (D1)

Hazai referált tudományos folyóiratokban megjelent közlemények

- I. Balogh, Z., Lázár, I., Kalmár, J., Fábíán, I., Forgács, A.
Cu(II)-ciklén tartalmú aerogél katalizátor hatásmechanizmusa
I. FKF Szimpózium: Fiatal Kémikusok Fóruma (2019)

Az értekezés anyagához kapcsolódó előadások és posztterek

Konferencia előadások

- I. Balogh, Z., Kalmár, J., Gommes, C. J.
Wetting of alginate aerogels, from mesoporous solids to hydrogels: a small-angle scattering analysis
2nd International Seminar on Modelling, Simulation and Machine Learning for the Rapid Development of Porous Materials Workshop
2024. március 4-6., Madrid, Spanyolország

- II. Balogh, Z., Kalmár J., Gommes C. J.
Ca(II)-alginát aerogél nedvesedési mechanizmusának tanulmányozása kissetű neutronszerzés alkalmazásával
Hatvani István Szakkollégium 2023. Őszi Tudományos Hallgatói Konferencia
2023. december 1., Debrecen, Magyarország

- III. Balogh, Z., Kalmár, J., Gommes C. J.
Egy tipikus kalcium-alginát aerogél nedvesedésének mechanizmusa kissetű neutronszerzés (SANS) mérések alapján
MTA Kolloidkémiai Munkabizottság Őszi ülése
2023. október 30., Budapest, Magyarország

- IV. Balogh, Z., Len, A., Kalmár, J., Dudás, Z.
Funkcionalizált és hibrid aerogélek kissetű neutronszerzés (SANS) vizsgálata
Hatvani István Szakkollégium 2022. Őszi Tudományos Hallgatói Konferencia
2022. december 8., Debrecen, Magyarország

- V. Balogh, Z., Baksa, V., Len, A., Szemán-Nagy, G., Moldován, K., Herman, P., Fábíán, I., Kalmár, J., Dudás, Z.
Synthesis and structural investigation of borosilicate-PVA hybrid aerogels for bone regeneration application
Budapest Neutron Centre seminar
2022. november 24., Budapest, Magyarország
- VI. Balogh, Z., Kalmár, J., Dudás, Z.
Csontpótlásra potenciálisan alkalmas boroszilikát aerogélek előállítás és szerkezeti vizsgálata
Hatvani István Szakkollégium 2022. Tavaszi Tudományos Hallgatói Konferencia
2022. május 6., Debrecen, Magyarország
- VII. Balogh, Z., Veres, E., Moldován, K., Baksa, V., Szemán-Nagy, G., Fábíán, I., Len, A., Dudás, Z., Kalmár, J.
Boroszilikát aerogélek mint potenciális csontpótló anyagok
II. Fialtal Kémikusok Fóruma Szimpózium
2021. június 16-18., Online

Konferencia poszterek

- I. Balogh, Z., Dudás, Z., Kalmár, J., Len, A.
Small angle neutron scattering (SANS) investigation of functionalized and hybrid silica aerogels
Workshop on Aerogels Characterization and Modelling
2023. március 29-31., Debrecen, Magyarország



Nyilvántartási szám: DEENK/7/2025.PL
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Balogh Zoltán
Doktori Iskola: Kémiai Tudományok Doktori Iskola
MTMT azonosító: 10076745

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (3)

1. Ecsédi, B., Forgács, A., **Balogh, Z.**, Fábán, I., Kalmár, J.: Hydration and wetting mechanism of borosilicate - Polyvinyl alcohol (PVA) hybrid aerogels of potential bioactivity.
J. Mol. Liq. 401, 1-8, 2024. ISSN: 0167-7322.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2024.124605>
IF: 5.3 (2023)
2. **Balogh, Z.**, Len, A., Baksa, V., Krajnc, A., Herman, P., Szemán-Nagy, G., Czigány, Z., Fábán, I., Kalmár, J., Dudás, Z.: Nanoscale Structural Characteristics and In Vitro Bioactivity of Borosilicate-Poly(vinyl alcohol) (PVA) Hybrid Aerogels for Bone Regeneration.
ACS Appl. Nano Mater. 7 (4), 4092-4102, 2024. ISSN: 2574-0970.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/acsanm.3c05668>
IF: 5.3 (2023)
3. **Balogh, Z.**, Kalmár, J., Gommès, C. J.: Wetting of alginate aerogels, from mesoporous solids to hydrogels: a small-angle scattering analysis.
J Appl Crystallogr. 57 (2), 1-11, 2024. ISSN: 1600-5767.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1107/S1600576724001705>
IF: 5.2 (2023)

További közlemények

Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (4)

4. Lihí, N., **Balogh, Z.**, Diószegi, R., Forgács, A., Moldován, K., May, N. V., Herman, P., Fábán, I., Kalmár, J.: Functionalizing Aerogels with Tetraazamacrocyclic Copper(II) Complexes: Nanoenzymes with Superoxide Dismutase Activity.
Appl. Surf. Sci. 611, 1-12, 2023. ISSN: 0169-4332.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.155622>
IF: 6.3





5. Herman, P., Moldován, K., Paul, G., Marchese, L., **Balogh, Z.**, Len, A., Dudás, Z., Fábíán, I., Kalmár, J.: Selective and reversible surface complexation of aqueous palladium(II) by polycarboxylate (pyromellitic acid) functionalized hybrid aerogel sorbent.
Appl. Surf. Sci. 613, 1-14, 2023. ISSN: 0169-4332.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.156026>
IF: 6.3
6. Forgács, A., **Balogh, Z.**, Andrási, M., Len, A., Dudás, Z., May, N. V., Herman, P., Juhász, L., Fábíán, I., Lihí, N., Kalmár, J.: Mechanistic Explanation for Differences Between Catalytic Activities of Dissolved and Aerogel Immobilized Cu(II) Cyclen.
Appl. Surf. Sci. 579 (30), 1-11, 2022. ISSN: 0169-4332.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.152210>
IF: 6.7
7. Lázár, I., Forgács, A., Horváth, A., Király, G., Szemán-Nagy, G., Len, A., Dudás, Z., Papp, V., **Balogh, Z.**, Moldován, K., Juhász, L., Cserhádi, C., Szántó, Z., Fábíán, I., Kalmár, J.: Mechanism of hydration of biocompatible silica-casein aerogels probed by NMR and SANS reveal backbone rigidity.
Appl. Surf. Sci. 531, 1-13, 2020. ISSN: 0169-4332.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.147232>
IF: 6.707

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 41,807

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapjául szolgáló közleményekre): 15,8

A DEENK a Jelölt által az iDEa Tudóstérbe feltöltött adatok bibliográfiai és tudományometriai ellenőrzését a tudományos adatbázisok és a Journal Citation Reports Impact Factor lista alapján elvégezte.

Debrecen, 2025.01.16.

