

Doktori (PhD) értekezés tézisei

**NMR relaxációs módszerek fejlesztése és
alkalmazásuk szén aerogélek szerkezetvizsgálatára**

Nyul Dávid

Témavezetők: Bányai István, Dr. Kéri Mónika



DEBRECENI EGYETEM
Kémiai Tudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2026.

I. Bevezetés és célkitűzés

A XXI. század egyik meghatározó tudományos és műszaki kihívása a fenntartható energiaellátás biztosítása. A megújuló energiaforrások alkalmazásának növekedésével egyre nagyobb szükség van olyan energiátárolási technológiákra, amelyek képesek az időben változó energiatermelés és -felhasználás közötti különbségek kiegyenlítésére. Ebben az akkumulátorok és a szuperkondenzátorok kiemelt szerepet töltenek be. A lítiumion-akkumulátorok mellett ezért intenzív kutatás irányul alternatív energiátárolási rendszerek, többek között lítium-kén- és nátriumion-akkumulátorok fejlesztésére.

Az elektrokémiai energiátároló rendszerekben alkalmazott szénelapú anyagok tulajdonságait jelentősen meghatározza pórusszerkezetük. A mikro- és mezopórusok mérete, térfogata, eloszlása és átjárhatósága, valamint a nagy fajlagos felület egyaránt fontos lehet az elektródanyagok működése szempontjából. A szuperkondenzátorok esetében különösen fontos az ionok számára hozzáférhető nagy felület és a megfelelő mezopórusos szerkezet, míg nátriumion-akkumulátoroknál a mikropórusok szerkezete és hozzáférhetősége is lényeges.

A porózus szénanyagok jellemzésére számos hagyományos módszer áll rendelkezésre, így többek között a gázadszorpció, az elektronmikroszkópia és az intrúziós porozimetria. Ezek a módszerek fontos információkat szolgáltatnak a pórusméretről és a morfológiáról, azonban a folyadékkal érintkező porózus rendszer teljes körű leírására önmagukban nem feltétlenül elegendők. A működés közben kialakuló szilárd–folyadék határfelület, a folyadék pórusokba történő behatolása, a folyadék molekuláris dinamikája és az oldott ionok felületi kölcsönhatásai további szerkezeti és dinamikai paramétereket határoznak meg.

Az aerogélek nagy porozitású, ultrakönnyű szintetikus anyagok, amelyek szol–gél átalakulással állíthatók elő. A szerves aerogélek pirolízisével létrehozott szén aerogélek nagy fajlagos felületük és szabályozható pórusszerkezetük miatt alkalmasak lehetnek többek között elektródanyagként és adszorbensként történő felhasználásra. A kiindulási rezorcin–formaldehid

alapú aerogélek pórusszerkezete a szintézis számos paraméterének változtatásával szabályozható. A végső szerkezet kialakulásában szerepet játszik a reaktánsok koncentrációja, a katalizátor típusa és mennyisége, a pH, a gélesedés hőmérséklete, valamint a szárítás és a pirolízis módja.

A szol–gél folyamat során kialakuló primer polimer részecskék mérete és aggregációja alapvetően meghatározza a gél pórusszerkezetét. A szárítás során a kialakult pórusszerkezet megőrzése, a pirolízis során pedig a szénváz és a mikropórusos szerkezet kialakulása válik meghatározóvá. A reakcióközeg összetétele és a különböző porogén vagy szerkezetirányító komponensek további lehetőséget biztosítanak a szerkezet szabályozására. Az ionos folyadékok ebből a szempontból különösen érdekesek, mivel oldószerként és a polimerizáció során szerkezetirányító közegként is szerepet játszhatnak.

A porózus szén aerogélek folyadék jelenlétében történő vizsgálatára az NMR több, egymást kiegészítő módszert biztosít. Az NMR-relaxometria a folyadék molekuláris mozgására és a folyadék–felület kölcsönhatásra érzékeny, az NMR-krioporozimetria a pórusméret és pórusméret-eloszlás meghatározására alkalmas, míg az NMR-diffúziometria a pórusrendszeren belüli molekuláris transzport vizsgálatát teszi lehetővé. A többdimenziós relaxációs módszerek további lehetőséget biztosítanak különböző folyadékpopulációk és az eltérő dinamikai környezetek elkülönítésére.

Az oldott alkálifémionok és a porózus szén felülete közötti kölcsönhatás vizsgálata különösen fontos lehet az elektrokémiai energiatároló rendszerekben. A ^{23}Na kvadrupólus mag, amelynek relaxációs tulajdonságai érzékenyen függenek a lokális környezettől. Ez megfelelő NMR-módszerek alkalmazásával lehetőséget teremt a különböző dinamikai állapotú ionpopulációk azonosítására.

A doktori munkám átfogó célja olyan NMR-alapú módszerek fejlesztése és alkalmazása volt, amelyek segítségével a porózus szén aerogélek szerkezete és folyadékfázisban mutatott viselkedése részletesen vizsgálható. A kutatás során különböző módon előállított rezorcin–formaldehid alapú szén aerogélek összehasonlító vizsgálatát végeztem, valamint tanulmányoztam a

szintézisparaméterek és az ionos folyadék porogén valamint a grafén-oxid adalékanyag szerkezetmódosító hatását.

A kutatás céljai közé tartozott a szén aerogélek szerkezetének folyadékfázisú NMR-relaxometriás, krioporozimetriás és diffúziometriás jellemzése, valamint a kisterű NMR általános alkalmazási lehetőségeinek vizsgálata és új impulzusprogramok kidolgozása. Kiemelt cél volt továbbá a porózus rendszerek nedvesítési folyamatainak relaxometriás vizsgálata és a polidiszperzitás eredményekre gyakorolt hatásának elemzése.

Egyszerű, kísérleti eljárás kidolgozását tűztem ki célul e hatás felismerésére és kiküszöbölésére.

Célul tűztem ki olyan kvadrupólus-NMR impulzusszekvenciák kidolgozását is, amelyek alkalmasak a ^7Li , ^{23}Na és hasonló magok vizsgálatára, valamint a különböző dinamikai állapotú, többek között szabad és kötött ionpopulációk elkülönítésére.

II. Módszerek

A vizsgálatokhoz olyan módszeregyüttest alkalmaztunk, amely lehetővé tette a szén aerogélek szerkezetének, pórusméret-eloszlásának, folyadékfelvételének, folyadék–felület kölcsönhatásainak és molekuláris transzportfolyamatainak egymást kiegészítő jellemzését. A vizsgálatok központi eleme a kisfelbontású NMR volt, amelyet NMR-krioporozimetriával, diffúziometriával, többkvantum-NMR-mérésekkel és SEM–EDS vizsgálatokkal egészítettem ki.

2.1. A vizsgált anyagok előállítása

A vizsgált RF hidrogéleket szol–gél eljárással, báziskatalizált polikondenzációval állítottam elő. Három, eltérő hőmérsékleten és katalizátorarányral rendelkező vizes rendszer készült (RF1–RF3), amelyeket a szenesítést követően CA1–CA3 jelöléssel használtam. A grafén-oxidot tartalmazó rendszer az RF2 összetételéhez hasonló volt, azonban a polimerizáció előtt GO-t adtam a reakcióelegyhez 0,02 GO/rezorcin tömegarányban, és a pH-t 7-re állítottam.

A porogén közeg vizsgálatához 1-etil-3-metilimidazólium etilszulfátot (EMIM–EtSO₄) tartalmazó ionos folyadék–víz rendszerekben szintetizált szén aerogéleket alkalmaztam.

A géleket mosás és oldószercsere után szuperkritikus szárítással alakítottuk aerogéllé. Az acetont folyékony CO₂-ra cseréltük, majd a szárítást 40–60 °C-on és 100 bar nyomáson végeztük. A polimer aerogélek szenesítése nitrogénatmoszférában, 800 °C véghőmérsékleten történt. A felfűtési sebesség 5 °C/perc, a szenesítési idő 1 óra, a nitrogénáram körülbelül 20 L/perc volt.

2.2. NMR-krioporozimetria

Az NMR-krioporozimetriát a pórusméret és a pórusméret-eloszlás meghatározására alkalmaztuk. A módszer a pórusokban lévő folyadék fagyási és olvadási hőmérsékletének a pórusmérettől való függésén alapul. A pórusméretet a módosított Gibbs–Thomson összefüggés segítségével számítottuk, tesztfolyadékként vizet és ciklohexánt is alkalmaztunk. A fagyási

és olvadási görbéket logisztikus függvényekkel illesztettem. Az illesztett görbe alapján meghatározható a pórusméret sűrűségfüggvénye, amelynek deriválásával a pórusméret-eloszlás számítható.

2.3. Kisfelbontású NMR-relaxometria

A kisfelbontású NMR-relaxometriás méréseket Bruker Minispec MQ20 készüléken végeztem. A longitudinális T_1 relaxáció mérésére inverzió visszaépülés (inversion-recovery), a transzverzális T_2 relaxáció mérésére CPMG impulzusszekvenciát alkalmaztam. A T_2 kísérletekben az ekhóidőt és a mérési pontok számát a vizsgált relaxációs tartományhoz igazítottam. A minimális alkalmazott ekhóidő 0,08 ms volt.

A pórusrendszer fokozatos feltöltődésének vizsgálatához a mintákhoz lépésenként vizet adagoltam, majd az egyensúly beállása után végeztem el a relaxometriás méréseket. A relaxációs időállandók meghatározásához a lecsengéseket exponenciális modellekkel értékeltem.

A relaxációs adatok értelmezéséhez a Ioan Ardelean által javasolt felületi relaxivitáson alapuló modellt alkalmaztam, amely a mért transzverzális relaxációs sebességet a folyadékkal érintkező felület és pórustérfogat arányához kapcsolja:

$$\frac{1}{T_2} = \xi \frac{S}{Vfk} + \frac{1}{T_{2,bulk}} \quad (1)$$

Ahol: T_2 : a mért relaxációs időállandó, ξ : a felületi relaxivitas, f : a pórusok feltöltöttségének mértéke, S : a pórus felülete, V : a pórustérfogat, $T_{2,bulk}$: a szabad folyadék relaxációs időállandója.

A modellt alkalmazva a feltöltődés menetéből a nedvesedés kinetikája és a felület hidrofilitása becsülhető.

2.4. Kétdimenziós T_1 — T_2 relaxometria

A különböző folyadékpopulációk elkülönítésére T_1 — T_2 korrelációs relaxometriát is alkalmaztam. A módszerben az inversion-recovery szakaszt CPMG mérés követi, így az adatsor egyszerre tartalmaz információt a longitudinális és a transzverzális relaxációról. A kétdimenziós megközelítés lehetővé teszi a különböző relaxációs tulajdonságú folyadékpopulációk térbeli

elkülönítését a T_1 – T_2 síkban, és alkalmas a molekuláris mobilitással, illetve a felületi kölcsönhatásokkal összefüggő relaxációs jellemzők összehasonlítására.

2.5. Nagyfelbontású NMR és NMR-diffúziometria

A nagyfelbontású NMR-méréseket Bruker Avance I 360 MHz és Bruker Avance II 400 MHz készülékeken végeztük. A diffúziós méréseket impulzus térgradienssel végzett PGSE módszerrel, a ledbp2s szekvenciával és annak konvekciókompenzált változatával végeztem.

A diffúziometriát a folyadékmolekulák póruson belüli mozgásának vizsgálatára használtam. A diffúziós adatokból meghatározható a részecskék saját diffúziós együtthatója, amely a pórusszerkezet által létrehozott geometriai korlátozások és a folyadék–felület kölcsönhatások vizsgálatára is felhasználható.

2.6. Kvadrupólus NMR módszerek

A mozgásában korlátozott nátriumion populációk vizsgálatához többkvantum-szűrt NMR-kísérleteket alkalmaztam. A TQF-kísérletekben rádiófrekvenciás impulzusokkal hoztam létre és alakítottam vissza a többkvantum-koherenciákat. A módszer érzékenységének javítására TQTPPI-alapú eljárást is alkalmaztam, amely a különböző koherenciákat Fourier-transzformáció segítségével különíti el, így a mozgásában korlátozott és a szabad fémion egyszerre detektálható. A fázisciklus javítása érdekében CYCLOPS ciklust is alkalmaztam a kiolvasóimpulzuson és a vevőn.

2.7. Pásztázó elektronmikroszkópia

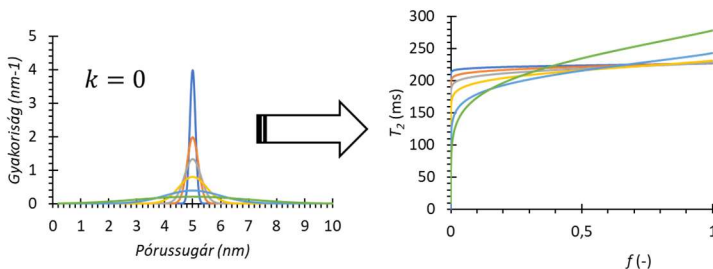
A szén aerogélek morfológiai vizsgálatát pásztázó elektronmikroszkópiával egészítettük ki. A SEM–EDS mérések a HUN-REN Atommagkutató Intézetében, Bruker elektronmikroszkóppal történtek. A mikroszkóp energiadiszipatív röntgendetektorral is rendelkezett, amely a lokális elemösszetétel meghatározására szolgált. A módszer különösen a grafén-oxidot tartalmazó minták vizsgálatában hozott hasznos információkat a kialakuló morfológiai szerkezetnek a jellemzésére.

III. Új tudományos eredmények

1. Elemeztem a pórusok nedvesítési mechanizmusára vonatkozó eddig alkalmazott NMR relaxometriás modellt. Megállapítottam, hogy a nagyon polidiszperz pórusos rendszerek esetében az egyenletes és a dugószerű nedvesítési mechanizmus elkülönítésére a modell nem alkalmas.

A porózus anyagok folyadékkal történő feltöltődésének NMR-relaxometriás leírására alkalmazott modellek általában abból indulnak ki, hogy a pórusrendszer jól meghatározott méretű és alakú pórusokból áll, illetve hogy a pórusokat kitöltő folyadék egyetlen karakterisztikus transzverzális relaxációs idővel jellemezhető. A felületi relaxációra épülő modellben a folyadék T_2 relaxációs időállandója a felület/térfogat aránnyal kapcsolható össze. A modell megfelelően alkalmazható jól definiált, közel monodiszperz rendszerekre, azonban a valós porózus anyagok jelentős része ennél összetettebb.

A probléma vizsgálatára egy erősen polidiszperz, jól átjárható modell pórusrendszert dolgoztam ki. A pórusrendszert olyan henger alakú pórusokkal írtam le, amiknek a magassága megegyezik az átmérőével, majd meghatároztam a nedvesített felületet, a folyadéktérfogat, az S/V arányt és az ezekből számítható T_2 relaxációs időállandó változását a feltöltöttség függvényében. Két alapvető feltöltődési mechanizmust vizsgáltam. Az egyenletes nedvesítés során a teljes pórusfelület fokozatosan nedvesedik, miközben a folyadékréteg vastagsága növekszik. A dugószerű feltöltődés során ezzel szemben egy folyadékfront halad végig a pórusokon a kisebbek felől a nagyobbak irányába, így a rendszerben egyszerre vannak jelen teljesen feltöltött és még nem feltöltött régiók.



1. ábra: Normális pórusméreteloszlású hidrofób pórusrendszer pórusméret eloszlása és a pórusméret eloszlásból számolt relaxometriás görbék különböző szórásértékek esetén. A számolt relaxometriás görbék erősen polidiszperz pórusméret eloszlás esetén nem követik az Ardelean által javasolt modellt.

A számítások alapján erősen polidiszperz hidrofil rendszer esetében az egyenletes feltöltődéshez a T_2 és a feltöltöttségi fok között közel lineáris kapcsolat tartozik. Hidrofób, dugószerűen feltöltődő rendszerben azonban széles pórusméret-eloszlás esetén a relaxációs idő már nem tekinthető a feltöltöttségi foktól független állandónak: telítési jellegű $T_2(f)$ görbe alakul ki (1. ábra).

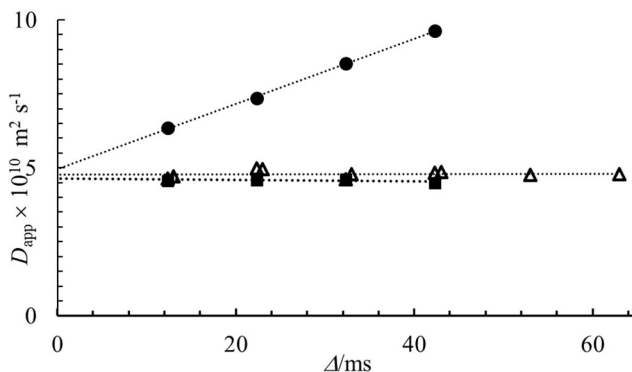
A pórusméret-eloszlás szélességének figyelembevételével megmutattam, hogy a monodiszperz modellhez képest már a pórusméret-eloszlás önmagában lényegesen módosíthatja a feltöltődési görbe alakját. Ez alapvető jelentőségű a relaxometriás nedvesítési görbék értelmezésében: egy telítési jellegű görbe nem feltétlenül a megnövekedett hidrofilicitás közvetlen bizonyítéka, hanem a polidiszperzitás következménye is lehet.

A modellvizsgálatok a rezorcin–formaldehid alapú szén aerogélek folyadékfázisban való vizsgálatát pontosították, és arra a következtetésre jutottunk, hogy az eredmények értelmezése az alkalmazott modell viselkedésének részletes megismerése nélkül könnyen hibás következtetésre vezethet.

2. Kidolgoztunk egy egyszerű módszert a termikus konvekció kiküszöbölésére a környezettől eltérő hőmérsékletű diffúziómérésekben.

Az impulzus térgradienssel végzett NMR-diffúziometria során a mért jelesökkenésből meghatározható a vizsgált részecskék sajátdiffúziós együtthatója. Amennyiben a minta hőmérséklete eltér a környezete hőmérsékletétől, a minta hossz tengelye mentén kialakuló hőmérséklet-gradiens termikus konvekciót hozhat létre. Ez a koherens áramlás a molekuláris diffúzióhoz hasonló jelvestést okozhat, és így a diffúziós együttható meghatározását szisztematikusan torzíthatja.

A probléma vizsgálatára nátrium-alkil-szulfátokat, nátrium-oktil-szulfátot (NaOS), nátrium-decil-szulfátot (NaDS) és nátrium-hexadecil-szulfátot (NaHDS) alkalmaztunk. A méréseket 319 K-en végeztük. A különböző lánc hosszúságú tenzidek azért voltak különösen alkalmasak a jelenség vizsgálatára, mert a monomer és micella móltörtje is ismert az adott körülmények mellett, illetve a micellaméret a tenzid lánc hosszának variálásával széles tartományban változtatható volt.



2. ábra: NaDS micellák látszólagos diffúziós együtthatója a diffúzióidő függvényében 319 K hőmérsékleten. ● 5 mm üveg NMR cső egyszerű impulzusszekvenciával mérve, ■ 5 mm zafir NMR cső egyszerű impulzusszekvenciával mérve, Δ 5 mm üveg NMR cső konvekció kompenzációs impulzus szekvenciával mérve.

Megmutattuk, hogy a termikus konvekció egyik legfontosabb kísérleti indikátora a látszólagos diffúziós együttható diffúzióidőtől, Δ -tól való függése (2. ábra). A diffúziós együttható diffúzióidőfüggése az alábbi egyenlettel írható le:

$$D_{app} \approx D + v^2 \Delta \quad (2)$$

ahol D a valódi diffúziós együttható, D_{app} a mért érték, v pedig a konvektív áramlás sebessége és a Δ a diffúzió idő.

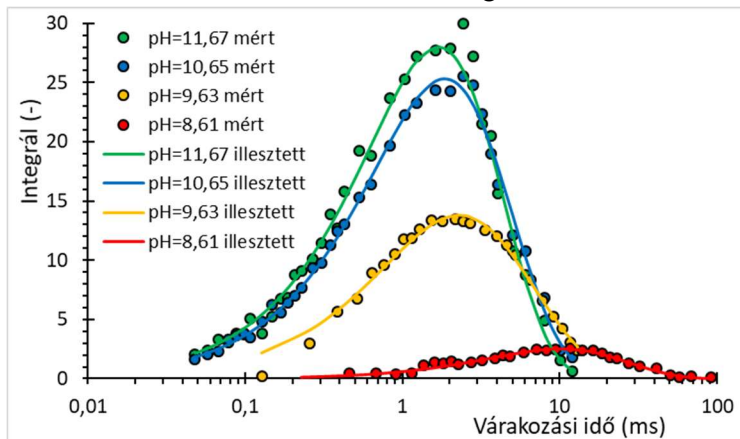
A kidolgozott egyszerű korrekció lényege, hogy a diffúziós együtthatót több diffúzióidő mellett meghatározva a $D_{app}(\Delta)$ függvényt lineárisan extrapoláljuk a $\Delta=0$ pontra. A módszer helyességét nagy hővezetésű zafír NMR-cső alkalmazásával, illetve Jerschow-féle konvekciókompenzált impulzusszekvenciával végzett mérésekkel igazoltuk.

3. Elkészítettem egy olyan NMR impulzusszekvenciát, amely segítségével a kvadrupólus alkalicím magok kötött (koordinált, makromolekula elektromos kettősrétegében mozgó, vagy adszorbeált) és szabad formáit külön jelleként lehet észlelni és arányuk az eddigi szekvenciákhoz képest sokkal pontosabban.

A ^{23}Na és ^7Li kvadrupólus magok relaxációja érzékeny a lokális környezetre és a molekuláris mozgásra. A nátrium egyetlen, $I=3/2$ spinű NMR-aktív izotópja mérésekor. megfelelő kiindulási gerjesztési feltételek alkalmazása esetén magasabb rendű koherenciák is megjelenhetnek, amik kiválóan alkalmasak a megváltozott körülmények igazolására. A triplakvantumszűrt-relaxáció különösen érzékeny a lassan mozgó, nagy rotációs-korrelációs idejű nátriumionok kimutatására. A módszert már sikeresen alkalmazták biomakromolekulákhoz koordinálódó nátriumion kimutatására.

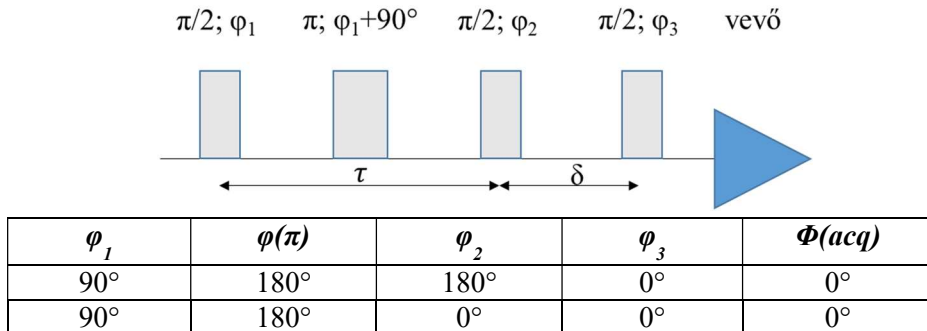
A karboximetilezett polietilénimin (CM—PEI) és a nátriumion közötti kölcsönhatás vizsgálatának első lépéseként a TQF (triplakvantum-szűrt) impulzusszekvenciát adaptáltam. A berendezés programkönyvtárában rendelkezésre nem álló szekvenciát az irodalmi leírás alapján készítettem el,

majd a fázisromlás csökkentése érdekében a hatlépéses fázisciklust CYCLOPS ciklussal egészítettem ki. Az így módosított TQF szekvencia alkalmas volt a nátriumion és a CM—PEI közötti kölcsönhatás igazolására.



3. ábra: A CM-PEI mintára kapott TQF ^{23}Na -NMR relaxációs görbék a várakozási idő (τ) függvényében, féllogaritmikus skálán ábrázolva. Balról jobbra: pH = 11,67; pH = 10,65; pH = 9,63 és pH = 8,61. $C(\text{CM-PEI}) = 40 \text{ mg/mL}$, $c(\text{Na}^+) = 50 \text{ mM}$.

A TQF relaxációs görbe két exponenciális komponens különbségével írható le, amelyek a kisebb belső szférás relaxációs útvonalhoz és a nagyobb külső szférás relaxációs útvonalhoz rendelhetők. Mivel a belső szférás relaxáció csak akkor jelenik meg, ha az ion mozgása lelassul, ezért a módszer lehetőséget ad a kötött és szabad formák elkülönítésére. A CM-PEI vizsgálata során a pH változtatásával követhetővé vált a kötött ionpopuláció változása, és igazolhatóvá vált, hogy a Na^+ kötődése a makromolekula töltésállapotával összefügg (3. ábra).



4. ábra: A TQTPPI módszer impulzusszekvenciája és a hozzá tartozó fázisciklus a CYCLOPS nélkül. A duplakvantum szűrés a második 90° -os impulzus 180° -os fáziseltolásával történik.

A TQF módszer fontos korlátja, hogy a többkvantumszűrés során a jel egy része elvész, ami korlátozza az érzékenységet. Ennek kiküszöbölésére TQTPPI (triplakvantum időarányos fázistolás) módszert dolgoztam ki és adaptáltam a rendelkezésre álló készülékekre. A TQTPPI-ben a különböző koherenciák elkülönítése Fourier-transzformációval történik, így nincs szükség a közvetlen jelvesztéssel járó szűrésére.

Az alap TQTPPI fázisprogram (4. ábra) rövid keveredési idők esetén megfelelő volt, azonban hosszabb keveredési időnél, illetve heterogén rendszerekben gyors fázisromlás következett be. A fázisciklus kiolvasóimpulzusát és a vevőt ezért a CYCLOPS ciklussal, $\Delta p = \pm 2$ koherenciakiválasztással módosítottam. A módosítás lényegesen csökkentette a fázisromlásból eredő bizonytalanságot, és lehetővé tette a TQ-koherencia megbízhatóbb detektálását hosszabb keveredési idők mellett is.

A módszer alkalmazását kiterjesztettem grafén-oxid szuszpenziókra is. A GO-szuszpensióban a TQTPPI módszerrel vizsgáltam a nátriumionok állapotát. A GO negatívan töltött felületén az elektromos kettősrétegben mozgó Na^+ ionok hozzájárulhatnak a TQ-jelhez, így a módszer nem kizárólag klasszikus koordinációs komplexek vizsgálatára használható.

Fontos megállapítás, hogy a TQ/SQ intenzitásarány közvetlenül nem azonosítható általánosan a kötött/szabad ionok koncentrációarányával, amennyiben a rendszerben van olyan nátriumion, ami a vevő holtideje alatt relaxál. A disszertációban ezt a korlátot is feltártam. A fejlesztett szekvenciával ugyanakkor a kötött és szabad formák sokkal érzékenyebb és reprodukálhatóbb elkülönítése vált lehetővé.

Az így módosított TQTPPI-alapú NMR impulzusszekvencia és fázisciklus alkalmas kvadrupólus alkálifémionok kötött és szabad formáinak elkülönített detektálására, és jelentősen növeli a jel stabilitását, érzékenységet és a relatív populációk meghatározásának megbízhatóságát.

4. Olyan kisterű NMR, 1D és 2D, relaxációs módszeregyüttest fejlesztettünk ki és alkalmaztunk szén aerogélek vizsgálatára, amely alkalmas a porózus rendszerek alapvető pórusszerkezeti és nedvesítési tulajdonságainak meghatározására közel homogén mágneses térben.

A szén aerogélek folyadékfázisú jellemzésére egymást kiegészítő 1D és 2D kisterű NMR-relaxációs módszeregyüttest dolgoztunk ki. A módszeregyüttest NMR-krioporozimetriával és NMR-diffúziometriával egészítettük ki.

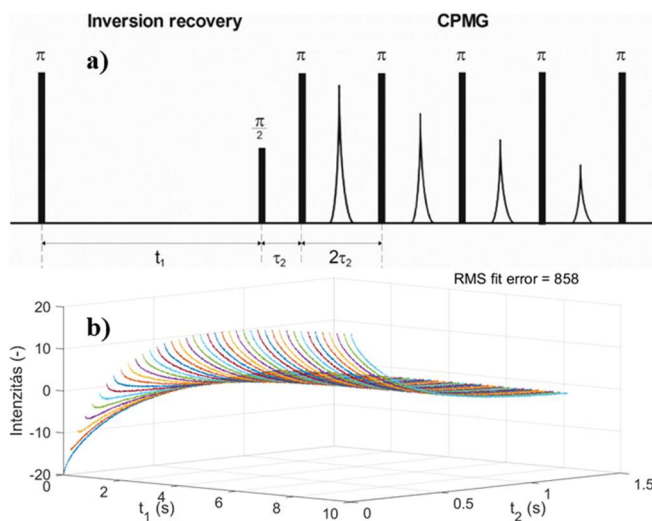
A módszeregyüttes alapját a kislebontású relaxometria képezte. A pórusok fokozatos feltöltését gravimetriával és NMR-el egyaránt követtük. A T_2 relaxációt a folyadék és a pórusfal közötti kölcsönhatás, valamint a folyadék mobilitása befolyásolja, ezért a relaxációs idő változása a pórusrendszer nedvesedésének követésére használható.

Az NMR-krioporozimetriával a vízzel vagy ciklohexánnal feltöltött pórusrendszerre jellemző pórusalakot és pórusméret-eloszlását határoztunk meg. A fagyási–olvadási histerézis a pórusalak meghatározására használható.

Az NMR-diffúziometria harmadik elemként a pórusokban lévő folyadék mobilitását és a részlegesen feltöltött pórusok közötti anyagtranszportot vizsgálta. A részlegesen telített rendszerekben a folyadék és gőzfázisú transzport együttes vizsgálata lehetővé tette a pórusok egymás utáni feltöltődésének követését. A különböző diffúziós komponensek a

mikropórusokhoz kötött víz, a felületi vízklaszterek, a részlegesen feltöltött mezopórusok és a teljesen telített pórusok elkülönítésében is szerepet kaptak.

A módszeregyüttes egyik továbbfejlesztése a T_1 – T_2 kétdimenziós relaxometria volt (5. ábra). Az inversion-recovery szakasz minden időpontját egy CPMG mérés követte, így a mért adatok a longitudinális és transzverzális relaxáció két dimenziójában voltak kiértékelhetők. A kétdimenziós Laplace-inverzióval kapott korrelációs spektrumokban az egyes folyadékpopulációk a T_1 és T_2 értékeik alapján különíthetők el. A módszer ezért lényegesen nagyobb felbontást biztosít a komplex folyadékpopulációk vizsgálatában, mint az egydimenziós relaxometria. Ezen felül az exponenciális összegek illeszthetősége is biztosabb a T_1 súlyozott T_2 módszer esetén.

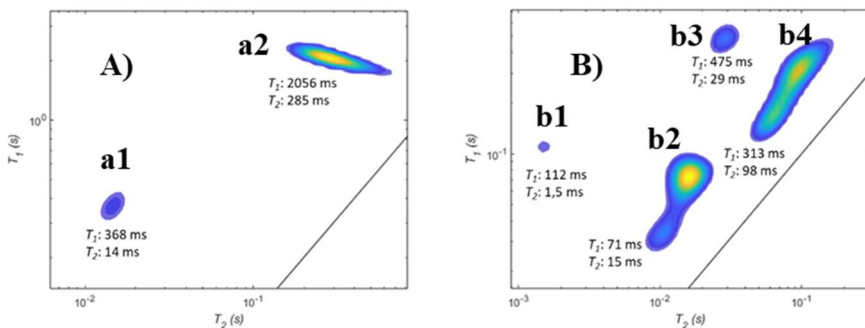


5. ábra: A T_1 – T_2 korrelációs kísérlet impulzusszekvenciája (a) és a CA2 szögél T_1 – T_2 korrelációs kísérlet primer adatsora (b). t_1 : longitudinális várakozási idő, t_2 : transzverzális várakozási idő, -2τ : ekhóidő.

A módszeregyüttest grafén-oxiddal (GO) módosított szén aerogélre alkalmaztam. A GO hozzáadásának hatását az RF polimer és az abból előállított

szén aerogél szerkezetére SEM, EDS, XPS, N₂-adszorpció, kriporozimetria és relaxometria segítségével vizsgáltuk. A GO beépítése módosította a pórusgeometriát és a felületi tulajdonságokat, miközben a polimerizáció során kialakuló RF hálózat és a GO közötti kölcsönhatás a végső szénstruktúrában is megmaradt.

A grafénnal módosított szén aerogél (CAGO) esetében a relaxometriás eredmények szerint a telített pórusok T_2 értékei lényegesen különböztek az adalékolatlan szén aerogélétől, miközben a feltöltöttségtől való függésük is eltérő nedvesítési viselkedést jelezett. A GO jelenléte a polimerben a gömbszerű RF-pórusokhoz képest hengeresebb pórusgeometriához vezetett, és ez a geometriai változás a pirolízis után is megmaradt. A kriporozimetria és a relaxometria együttes értelmezése alapján a GO-val módosított anyagban a hidrofób és lokálisan hidrophil felületi helyek együttes jelenlétével lehetett értelmezni a nedvesedést.



6. ábra: A CA2 (A) és a CAGO (B) szén aerogélek vízzel részlegesen töltött pórusrendszerének T_1 – T_2 korrelációs spektrumai. A különböző vízpopulációk a longitudinális (T_1) és transzverzális (T_2) relaxációs időállandók alapján különülnek el. A fekete átló az $T_1=T_2$ feltételnek megfelelő „extreme narrowing” tartományt jelöli, amelyhez gyengébb felület–folyadék kölcsönhatás és gyors molekuláris mozgás társul. A CA2 esetében két domináns komponens, míg a CAGO esetében négy különálló vízpopuláció azonosítható.

A T_1 – T_2 korrelációs mérés olyan folyadékpopulációkat is elkülönített, amelyek az egydimenziós relaxációs spektrumban nem voltak egyértelműen szétválaszthatók. A 2D spektrum lehetőséget adott a különböző állapotú vízpólációk és azok felületi kölcsönhatásainak összehasonlítására (6. ábra).

5. Megállapítottuk, hogy az ionos folyadék, mint porogén közeg alkalmas a szén aerogélben lévő mezopórusok méretének és eloszlásának, valamint a felületi morfológiának a hangolására, ezáltal módosítja a pórusrendszer vízzel való kölcsönhatását.

Megállapítottuk, hogy az ionos folyadék mennyiségének növelésével nő a szén aerogélek felületének hidrofilicitása, miközben a kialakuló pórusrendszer is jelentősen módosul. A CA9, CA30, CA40 és CA50 minták NMR-krioporozimetriás vizsgálata alapján az ionos folyadék–víz elegy összetétele a pórusok méretét és eloszlását is jelentősen befolyásolja: a CA30 és CA40 minták jól definiált mezopórusos szerkezetet, míg a CA9 és CA50 elsősorban makropórusos szerkezetet mutattak.

Az NMR-relaxometriás vizsgálatok alapján az ionos folyadék jelenlétében előállított minták esetében a póruskitöltő víz mellett felületi vízhez rendelhető relaxációs komponens is megjelent, ami a víz és a szénfelület közötti kölcsönhatás megváltozására utal. A hidrofilicitást jellemző k paraméter a CA9, CA30, CA40 és CA50 minták esetében rendre 0,88; 0,58; 0,66 és 0,15 volt. A relaxometriás elemzés alapján az ionos folyadék hatása nagyobb koncentrációknál közvetlenül a felület tulajdonságaiban is megjelenik, míg kisebb koncentrációknál a fokozott vízfelvétel elsősorban a mikropórusok mennyiségének növekedésével kapcsolható össze.

A krioporozimetriai és relaxometriás eredmények együttes értelmezése alapján az ionos folyadék porogénként nemcsak a pórusok méretét és eloszlását, hanem a szén aerogél felületi tulajdonságait is hangolja; növekvő ionosfolyadék-tartalom mellett a pórusrendszer vízzel való kölcsönhatása és nedvesíthetősége is módosul.

IV. Az eredmények hasznosíthatóságának lehetőségei

A doktori kutatás során kidolgozott NMR-módszerek és a szén aerogélek vizsgálata során szerzett kvalitatív és kvantitatív információk elsősorban a porózus anyagok fejlesztésében és jellemzésében hasznosíthatók. Ezek lehetővé teszik a pórusszerkezet, a nedvesítés, a folyadék–szilárd határfelületi kölcsönhatások és az anyagtranszport együttes vizsgálatát, ezért alkalmazhatók olyan rendszerekben, ahol a porozitás mellett a folyadékfázissal való kapcsolat is meghatározó.

Különösen fontos alkalmazási területet jelenthetnek az elektrokémiai energiátároló rendszerek, így az akkumulátorok és szuperkondenzátorok porózus elektródanyagai. A fejlesztett módszerek hozzájárulhatnak az elektródanyagok pórusszerkezetének, nedvesíthetőségének és iontranszportjának megértéséhez, ezáltal a szerkezet és a működési tulajdonságok közötti kapcsolat feltárásához. A kvadrupólus alkálifém-NMR módszerek pedig az ionok és a szilárd felületek közötti kölcsönhatások vizsgálatára nyújthatnak lehetőséget.

A módszeregyüttes alkalmazható lehet továbbá adszorbensek, katalizátorok és egyéb funkcionális porózus anyagok vizsgálatára, ahol a felület nedvesíthetősége, a pórusok hozzáférhetősége és a folyadéktranszport fontos szerepet játszik. Az NMR egyik előnye, hogy a porózus anyagok folyadékkal érintkező állapotban is vizsgálhatók.

A fejlesztett módszerek emellett általánosabb NMR-módszertani alkalmazásokra is kiterjeszthetők, például diffúziós mérésekben a termikus konvekció okozta hibák felismerésére és korrigálására.

Publikációk

I A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények:

- (1) **Nyul, D.**; László, K.; Hollóczki, O.; Kéri, M. Tuning Aerogel Morphology Using Water-Ionic Liquid Binary Mixtures: A Mechanistic Journey from Synthesis to Carbon Properties. *J. Mater. Chem. A* **2026**, 10.1039.D5TA09939K.
<https://doi.org/10.1039/D5TA09939K>. (IF: 9,5, D1)
- (2) **Nyul, D.**; Kéri, M.; Novák, L.; Szabó, H.; Csík, A.; Bányai, I. NMR Characterization of Graphene Oxide-Doped Carbon Aerogel in a Liquid Environment. *Gels* **2025**, 11 (2), 129.
<https://doi.org/10.3390/gels11020129>. (IF: 7,01, Q1)
- (3) Novák, L.; Miklósi, T. S.; **Nyul, D.**; Shi, X.; Bányai, I. Synthesis and Characterization of Carboxymethylated Polyethylenimines. *ACS Appl. Polym. Mater.* **2023**, 5 (9), 7208–7219.
<https://doi.org/10.1021/acsapm.3c01090>. (IF: 4,99, Q1)
- (4) **Nyul, D.**; Novák, L.; Kéri, M.; Bányai, I. A Simple Elimination of the Thermal Convection Effect in NMR Diffusometry Experiments. *MOLECULES* **2022**, 27 (19).
<https://doi.org/10.3390/molecules27196399>. (IF: 5,27, Q1)
- (5) Kéri, M.; **Nyul, D.**; Nagyné László, K.; Novák, L.; Bányai, I. Interaction of Resorcinol-Formaldehyde Carbon Aerogels with Water: A Comprehensive NMR Study. *CARBON* **2022**, 189, 57–70. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.12.045>. (IF: 10,39, D1)

II A PhD értekezés témájához kapcsolódó tudományos előadások

- (1) D. Nyul, M. Kéri, I. Bányai, T. Nagy, Á. Kuki, S. Kéki, L. Nagy: Graphene doped carbon aerogels: Characterization and application, Alpine NMR Workshop, **2025.09.18-22.**, Bled, Szlovénia
- (2) Nyul Dávid, Kéri Mónika, Bányai István, Kéki Sándor, Nagy Lajos: Grafén tartalmú porózus katódok előállítása és jellemzése, XXXI. Nemzetközi Vegyészkonferencia, **2025** Kolozsvár, Románia
- (3) D. Nyul, M. Kéri, I. Bányai, T. Nagy, Á. Kuki, S. Kéki, L. Nagy: Graphene doped carbon aerogels: characterization and application, Alpine NMR Workshop, **2024.09.20-22.** Cluj Napoca, Románia
- (4) Nyul Dávid, Kéri Mónika, Bányai István, Kéki Sándor, Nagy Lajos: Grafén tartalmú porózus katódok előállítása és jellemzése, XXX. Nemzetközi Vegyészkonferencia. **2024** Kolozsvár, Románia
- (5) D. Nyul, L. Novák, I. Bányai, L. Nagy, S. Kéki: Quadrupolar Relaxation measurements for better understanding of alkali metal ions on surface, Alpine NMR Workshop, **2023.09.14-17.** Mátrafüred

- (6) Nyul Dávid, Nagy Lajos, Kuki Ákos, Nagy Tibor, Bányai István, Zsuga Miklós, Kéki Sándor: ^7Li -NMR relaxációs módszerek alkalmazása lítium-levegő akkumulátorok határfelületeinek vizsgálatára, XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia, **2023**, Kolozsvár, Románia
- (7) Nyul Dávid, Novák Levente és Bányai István; ^{23}Na NMR néhány alkalmazása, MTA NMR Munkabizottság, **2020** őszi „on line” előadó ülés.
- (8) Nyul Dávid, Bányai István; Egyoldalú NMR, NMR-MoUSE (Mobile Universal Surface Explorer), Szeged, **2019**.

III Az értekezésben nem tárgyalt közlemények

- (1) Róth, G.; Nagy, T.; Kuki, Á.; Novák, L.; **Nyul, D.**; Zsuga, M.; Kéki, S. Detailed Compositional and Structure–Property Analysis of Ethylene Oxide-Propylene Oxide Triblock Copolymers. *Macromol. Mater. Eng.* **2025**, 310 (1), 2400297. <https://doi.org/10.1002/mame.202400297>. (IF: 4,91, Q1)
- (2) Nagy, T.; Róth, G.; Kuki, Á.; Pardi-Tóth, V. C.; **Nyul, D.**; Kyzy, Z. K.; Palacios, I. A. I.; Benedek, M.; Nagy, L.; Zsuga, M.; Kéki, S. The Triumvirate of Effective and Rapid Synthesis, Analysis, and Artificial Intelligence to Explore the Structure-Property Relationship of Copolymers. *GIANT* **2024**, 17. <https://doi.org/10.1016/j.giant.2024.100248>. (IF: 5,38, Q1)
- (3) Nagy, L.; Üneri, H. S.; Kordován, M. Á.; Nagy, T.; Kuki, Á.; **Nyul, D.**; Pál, P.; Erdélyi, Z.; Zsuga, M.; Kéki, S. Organic Solvent-Based Li–Air Batteries with Cotton and Charcoal Cathode. *J. Electrochem. Soc.* **2024**, 171 (4). <https://doi.org/10.1149/1945-7111/ad3857>. (IF: 3,75, Q1)
- (4) Nagy, T.; Kuki, Á.; Róth, G.; Kyzy, Z. K.; Zatalini, A. B.; **Nyul, D.**; Zsuga, M.; Kéki, S. Characterization of Polyacrylamide Diblock Copolymers by Mass Spectrometry Combined with Mass-Remainder Analysis (MARA). *Polym. Test.* **2023**, 117. <https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2022.107834>. (IF: 5,53, Q1)
- (5) Szabo, L.; Deák, G.; **Nyul, D.**; Kéki, S. Flexible Investment Casting Wax Patterns for 3D-Printing: Their Rheological and Mechanical Characterizations. *POLYMERS* **2022**, 14 (21). <https://doi.org/10.3390/polym14214744>. (IF: 5,37, Q1)
- (6) Udvardy, A.; Szolnoki, C. T.; Kováts, É.; **Nyul, D.**; Gál, G. T.; Papp, G. C.; Joó, F.; Kathó, Á. Water-Soluble Ag(I)-Based Coordination Polymers Obtained by Anion-Directed Self-Assembly of Various AgX Salts and a Phosphobetaine Derived from 1,3,5-Triaza-7-Phosphaadamantane. *INORGANICA Chim. ACTA* **2021**, 520. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2021.120299>. (IF: 2,46, Q2)

IV Az értekezéshez nem kapcsolódó konferencia előadások és poszterek

- (1) M. Kéri, V. Papp, *D. Nyul*: The role of test liquids in pore morphology characterization Alpine NMR Workshop, **2024.09.20-22.** Cluj Napoca, Románia
- (2) Kéri M., *Nyul D.*, Bányai I.: Szén aerogélek NMR csőben
NMR Munkabizottsági Ülés, **2024.05.23-24.** Balatonszemes
- (3) M. Kéri, *D. Nyul*, I. Bányai: Carbon aerogels: morphology, surface properties
Alpine NMR Workshop, **2023.09.14-17.** Mátrafüred
- (4) M. Kéri, *D. Nyul*, V. Papp, L. Novák, I. Bányai: A novel way for the characterization of carbon aerogels by NMR relaxation methods
9th Carbon for Energy Storage and Environmental Protection (CESEP2023), **2023.09.24-28.** Budapest
- (5) Kéri M., *Nyul D.*, Papp V., Novák L., Bányai I.: Porózus anyagok jellemzése NMR relaxációs módszerekkel
MKE 4. Nemzeti Vegyészkonferencia, **2023.07.10-12.** Eger
- (6) Poszter: Papp V., Kertész T. P., *Nyul D.*, Janovics R., Bányai I., Kéri M.: Mit ad a kötőanyagok megismeréséhez a folyékony fázisú NMR?
MKE 4. Nemzeti Vegyészkonferencia, **2023.07.10-12.** Eger
- (7) M. Kéri, *D. Nyul*, V. Papp, L. Novák, I. Bányai: Application of NMR relaxation methods for aerogels and other porous materials
Workshop on Aerogels Characterization and Modelling, **2023.03.29-31.** Debrecen
- (8) Poszter: V. Papp, *D. Nyul*, L. Novák, I. Bányai, M. Kéri: What can liquid-phase NMR tell us about porous materials?
Workshop on Aerogels Characterization and Modelling, **2023.03.29-31.** Debrecen
- (9) Poszter: *D. Nyul*, M. Kéri, I. Bányai: The effect of ionic liquid on the morphology and surface properties of RF carbon aerogels by NMR
Workshop on Aerogels Characterization and Modelling, **2023.03.29-31.** Debrecen
- (10) M. Kéri, *D. Nyul*, V. Papp, L. Novák, I. Bányai: Structure and properties of carbon aerogels by NMR Alpine NMR Workshop, **2021.09.16-19.**, Bled, Szlovénia
- (11) Kéri M., *Nyul D.*, Papp V., Bányai I.: Porózus szilárd anyagok NMR jellemzése MTA NMR Munkabizottsági Ülés, **2020.10.13.**, online
- (12) Poszter: M. Kéri, *D. Nyul*, B. Nagy, K. László, I. Bányai: Parallel NMR cryoporometry, relaxometry and diffusometry studies of porous carbon aerogels
Magnetic Moments in Central Europe (MMCE), **2017.03.08-12,** 2017, Budapest



Nyilvántartási szám: DEENK/538/2026.PL
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Nyul Dávid

Doktori Iskola: Kémiai Tudományok Doktori Iskola

MTMT azonosító: 10076648

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (5)

1. **Nyul, D.**, László, K., Hollóczki, O., Kéri, M.: Tuning aerogel morphology using water-ionic liquid binary mixtures: a mechanistic journey from synthesis to carbon properties.
J. Mater. Chem. A. 14, 20415-20430, 2026. ISSN: 2050-7488.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/D5TA09939K>
2. **Nyul, D.**, Kéri, M., Novák, L., Szabó, H. J., Csík, A., Bányai, I.: NMR Characterization of Graphene Oxide-Doped Carbon Aerogel in a Liquid Environment.
Gels. 11 (2), 1-19, 2025. EISSN: 2310-2861.
DOI: <http://dx.doi.org/10.3390/gels11020129>
IF: 6.4
3. Novák, L., Miklósi, T. S., **Nyul, D.**, Shi, X., Bányai, I.: Synthesis and Characterization of Carboxymethylated Polyethylenimines.
ACS Appl. Polym. Mater. 5 (9), 7208-7219, 2023. ISSN: 2637-6105.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/acsapm.3c01090>
IF: 4.4
4. **Nyul, D.**, Novák, L., Kéri, M., Bányai, I.: A Simple Elimination of the Thermal Convection Effect in NMR Diffusiometry Experiments.
Molecules. 27 (19), 1-10, 2022. EISSN: 1420-3049.
DOI: <http://dx.doi.org/10.3390/molecules27196399>
IF: 4.6
5. Kéri, M., **Nyul, D.**, László, K., Novák, L., Bányai, I.: Interaction of resorcinol-formaldehyde carbon aerogels with water: A comprehensive NMR study.
Carbon. 189, 57-70, 2022. ISSN: 0008-6223.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.carbon.2021.12.045>
IF: 10.9





További közlemények

Magyar nyelvű tudományos közlemények hazai folyóiratban (1)

6. Kéri, M., Nagy, Z., Novák, L., **Nyul, D.**, Bányai, I.: A mágneses magrezonancia spektroszkópia (NMR) alkalmazásaa kolloidok fizikai kémiai jellemzésére.

Magy. Kém. F. 125 (1), 11-18, 2019. ISSN: 1418-9933.

DOI: <http://dx.doi.org/10.24100/MKF.2019.01.11>

Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (7)

7. Róth, G., Nagy, T., Kuki, Á., Novák, L., **Nyul, D.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Detailed Compositional and Structure-Property Analysis of Ethylene Oxide-Propylene Oxide Triblock Copolymers.

Macromol. Mater. Eng. 310 (1), 1-9, 2025. ISSN: 1438-7492.

DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/mame.202400297>

IF: 5.2

8. Kordován, M. Á., Nagy, T., Róth, G., **Nyul, D.**, Nagy, L., Kuki, Á., Zsuga, M., Kéki, S.: Scale up of fully eco-friendly zinc-O₂ (ads) batteries from the lab scale to the prototype level.

RSC Adv. 15 (15), 11759-11769, 2025. ISSN: 2046-2069.

DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/D5RA01434D>

IF: 6.1

9. Nagy, L., Üneri, H. S., Kordován, M. Á., Nagy, T., Kuki, Á., **Nyul, D.**, Pál, P., Erdélyi, Z., Zsuga, M., Kéki, S.: Organic Solvent-Based Li-Air Batteries with Cotton and Charcoal Cathode.

J. Electrochem. Soc. 171 (4), 1-12, 2024. ISSN: 0013-4651.

DOI: <http://dx.doi.org/10.1149/1945-7111/ad3857>

IF: 3.3

10. Nagy, T., Róth, G., Kuki, Á., Pardi-Tóth, V. C., **Nyul, D.**, Kaldybek, K. Z., Palacios, I. A. I., Benedek, M., Nagy, L., Zsuga, M., Kéki, S.: The triumvirate of effective and rapid synthesis, analysis, and artificial intelligence to explore the structure-property relationship of copolymers.

Giant. 17, 100248-1002456, 2024. ISSN: 2666-5425.

DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.giant.2024.100248>

IF: 4.9

11. Nagy, T., Kuki, Á., Róth, G., Kaldybek, K. Z., Zatalini Balqis, A., **Nyul, D.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Characterization of polyacrylamide diblock copolymers by mass spectrometry combined with Mass-remainder analysis (MARA).

Polym. Test. 117, 1-7, 2023. ISSN: 0142-9418.

DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.polymertesting.2022.107834>

IF: 5





12. Szabó, L., Deák, G., **Nyul, D.**, Kéki, S.: Flexible Investment Casting Wax Patterns for 3D-Printing: Their Rheological and Mechanical Characterizations.
Polymers. 14 (21), 1-16, 2022. EISSN: 2073-4360.
DOI: <http://dx.doi.org/10.3390/polym14214744>
IF: 5
13. Udvardy, A., Szolnoki, C. T., Kovács, É., **Nyul, D.**, Gál, G. T., Papp, G., Joó, F., Kathó, Á.: Water-soluble Ag(I)-based coordination polymers obtained by anion-directed self-assembly of various AgX salts and a phosphobetaine derived from 1,3,5-triaza-7-phosphaadamantane.
Inorg. Chim. Acta. 520, 1-11, 2021. ISSN: 0020-1693.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ica.2021.120299>
IF: 3.118

Magyar nyelvű absztrakt kiadványok (7)

14. Kaldybek, K. Z., **Nyul, D.**, Kuki, Á., Zsuga, M., Kéki, S., Nagy, T.: Mark-Houwink paraméterek meghatározása diffúziometriával = Determination of Mark-Houwink parameters by NMR-DOSY.
In: XXXI. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 31th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Nagyszeben, 32, 2025, (ISSN 2734-7109)
15. Nagy, T., Róth, G., Kuki, Á., Pardi-Tóth, V. C., **Nyul, D.**, Kaldybek, K. Z., Benedek, M., Zsuga, M., Kéki, S.: 4-akriol-morfolin és N-izopropil-akrilamid blokk kopolimerek szerkezet-aggregációs hőmérséklet összefüggésének feltérképezése = Mapping the structure-aggregation temperature relationship of 4-acryloylmorpholine and Nisopropylacrylamide block copolymers.
In: XXX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 30th International Conference on Chemistry. Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 72, 2024, (ISSN 2734-7109)
16. Kordován, M. Á., Fonó, K., **Nyul, D.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Elektromosan vezető kompozitok előállítása és termisztorként való vizsgálata = Production and testing of electrically conductive composites as a thermistor.
In: XXX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 30th International Conference on Chemistry. Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 67, 2024, (ISSN 2734-7109)
17. Nagy, L., Üneri, H. S., Kordován, M. Á., Nagy, T., Kuki, Á., **Nyul, D.**, Pál, P., Zsuga, M., Kéki, S.: 3D nyomtatással készült Li-levegő cellák tanulmányozása különböző szerves oldószerrel készült elektrolitok jelenlétében = Study of 3D printed Li-Air battery using electrolyte containing various organic solvents.
In: XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 29th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 53, 2023, (ISSN 2734-7109)





18. **Nyul, D.**, Nagy, L., Kuki, Á., Nagy, T., Bányai, I., Zsuga, M., Kéki, S.: 7Li-NMR relaxációs módszerek alkalmazása lítium-levegő akkumulátorok határfelületeinek vizsgálatára = Application of 7Li-NMR relaxation methods to study the interfaces of lithium-air batteries. In: XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 29th International Conference on Chemistry. Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 57, 2023, (ISSN 2734-7109)
19. Róth, G., Nagy, T., Kuki, Á., Pardi-Tóth, V. C., **Nyul, D.**, Kaldybek, K. Z., Palacios, I. A. I., Benedek, M., Zsuga, M., Kéki, S.: Kopolimer MALDI-TOF-MS spektrumok elemzése = Analysis of copolymer MALDI-TOF-MS spectra. In: XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 29th International Conference on Chemistry. Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 59, 2023, (ISSN 2734-7109)
20. Nagy, T., Kuki, Á., Róth, G., Kaldybek, K. Z., Zatalini Balqis, A., **Nyul, D.**, Zsuga, M., Kéki, S.: 4-akrioi-morfolin és N-izopropil-akrilamid blokk kopolimerenek előállítása és karakterizálása. In: XXVIII. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 28th International Conference on Chemistry. Szerk.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT), Kolozsvár, 35, 2022, (ISSN 2734-7109)

Ideggen nyelvű absztrakt kiadványok (8)

21. Benedek, M., **Nyul, D.**, Kuki, Á., Fatoye, E. O., Rácz, T., Zsuga, M., Kéki, S., Nagy, T.: Cink-levegő akkumulátorokban alkalmazható hidrogélek előállítása és vizsgálata = Preparation and investigation of hydrogels for use in zinc-air batteries. In: XXXI. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 31th International Conference on Chemistry. Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Nagyszeben, 24, 2025, (ISSN 2734-7109)
22. **Nyul, D.**, Kéri, M., Bányai, I., Kéki, S., Nagy, L.: Grafén tartalmú porózus katódok előállítása és jellemzése = Preparation and characterization of graphene-containing porous cathodes. In: XXXI. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 31th International Conference on Chemistry. Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Nagyszeben, 42, 2025, (ISSN 2734-7109)
23. Benedek, M., Fatoye, E. O., **Nyul, D.**, Kéki, S., Nagy, T.: Synthesis and electrochemical testing of polyacrylic acid based hydrogel electrolyte for Zn-air battery. In: Young Researchers' International Conference on Chemistry and Chemical Engineering: Program and Abstracts, Babes-Bolyai University, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, Cluj-Napoca, 33, 2025.





24. Nagy, L., **Nyul, D.**, Kuki, Á., Nagy, T., Lakatos, C., Erdélyi, Z., Tócsik, I., Kéki, S.: Termikusan redukált grafén-oxid tartalmú rezorcin-formaldehid széngél katódok tanulmányozása Li-levegő cellákban = Study of resorcinol-formaldehyde carbon gel cathodes containing thermally reduced graphene oxide in Li-air battery cells.
In: XXXI. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 31th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Nagyszében, 38, 2025, (ISSN 2734-7109)
25. Nagy, T., Kuki, Á., Róth, G., Kordován, M. Á., **Nyul, D.**, Nagy, L., Zsuga, M., Kéki, S.: Zn-levegő akkumulátorok fejlesztése és vizsgálata impedancia spektroszkópiával = Impedance spectroscopy for the development and testing of Zn-air batteries.
In: XXXI. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 31th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Nagyszében, 39, 2025, (ISSN 2734-7109)
26. Róth, G., Kuki, Á., Pardi-Tóth, V. C., **Nyul, D.**, Kaldybek, K. Z., Palacios, I. A. I., Benedek, M., Nagy, L., Zsuga, M., Kéki, S., Nagy, T.: Advanced copolymer analysis by MALDI-TOF MS up to 15 kg/mol.
In: ESOPS 24: 22nd European Symposium on Polymer Spectroscopy: Program Book of Abstracts, BAM, Berlin, 48, 2024.
27. **Nyul, D.**, Kéri, M., Bányai, I., Nagy, T., Kuki, Á., Kéki, S., Nagy, L.: Grafén dópolt szén aerogélek előállítása és jellemzése = Synthesis and characterization of carbon aerogels doped with graphene.
In: XXX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 30th International Conference on Chemistry. Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 74, 2024, (ISSN 2734-7109)
28. Nagy, L., **Nyul, D.**, Kordován, M. Á., Nagy, T., Kuki, Á., Kéki, S.: Grafén-oxid tartalmú szénkatódok alkalmazása Li-levegő akkumulátorokban = Application of carbon cathodes containing graphene oxide in Lithium-air batteries.
In: XXX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 30th International Conference on Chemistry. Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 71, 2024, (ISSN 2734-7109)

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 58,918

**A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapján szolgáló közleményekre):
26,3**

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

Debrecen, 2026.08.19.

