

Doktori (PhD) értekezés tézisei

**Algoritmusok és neurális hálók alkalmazása
kopolimerek összetételének feltérképezésére**

Róth Gergő

Témavezető: Dr. Nagy Tibor



DEBRECENI EGYETEM

Kémia Tudományok Doktori Iskola

Debrecen, 2024

1. Bevezetés és célkitűzések

A mindennapi élet során szinte elengedhetlenné vált a kopolimerek felhasználása. Továbbá egyre nagyobb teret hódít a célzottan tervezett kopolimerek előállítás és alkalmazása az újabb és újabb problémák megoldására. Ez az igény nagy nyomást helyez a kopolimerek analitikai módszereinek fejlesztésére is.

A doktori kutatásom során célom volt a kopolimerek tömegspektrumának elemzéséhez egy új algoritmus fejlesztése, mely automatizálhatóvá teszi, ezt az igencsak bonyolult és időigényes műveletet. A módszer fejlesztéséhez a [poli-(etilén-oxid)]-[poli-(propilén-oxid)] kopolimer családot alkalmaztam mintavegyületekként, mivel felhasználásuk igen széleskörű. Céljaim közt szerepelt, hogy vizsgáljam, hogy a kopolimer összetételben való kis változás, befolyásolja-e a polimer fizikai tulajdonságait. Ezen felül a kinyert információt vizualizálása, melyre az összetétel sodródás (composition drift) diagramot kívántam alkalmazni.

A kutatás folytatásaként az előzőekben említett algoritmus egyszerűbb megvalósítása volt a célom, hogy egyszerű táblázatkezelő szoftverbe is implementálható legyen. Ennek megvalósítására a kutatócsoport által felfedezett tömegmaradék analízist (MARA) akartam alkalmazni. Mintavegyület családként ebben az esetben is az előbb említett [poli-(etilén-oxid)]-[poli-(propilén-oxid)] kopolimer családot alkalmaztam.

Ezekon felül a tömegspektrometriás mérésekből származó eredmények kinyerési lehetőségét kívántam vizsgálni más mérési módszerek által nyújtott eredményekből. Ehhez a gélpermeációs kromatográfias módszerből származó adatokat céloztam meg összekapcsolni az előzőekben említett tömegspektrometriás adatokkal. A probléma megoldásához neurális hálót terveztem alkalmazni, mivel ezek univerzálisan alkalmazhatóak empirikus modellekként. Az összekapcsolás nagy előnye, hogy olcsó rutinszerű mérésből, egyébként csak költségesen és nagy szakértelemmel kinyerhető paraméterek megállapítására lenne lehetőség.

2. Reakciókörülmények, alkalmazott készülékek és módszerek

A tömegspektrometriás méréseket Autoflex Speed MALDI-TOF-MS készülékkel végeztem el. Reflektron és lineáris mérési módszert is alkalmaztam. Reflektron mérések esetén az ionforrás első feszültsége 19 kV, a második feszültsége 16.65 kV, a reflektor első feszültsége 21 kV míg a második 9.55 kV volt. Lineáris módban az ionforráson az első feszültség 19.5 kV, míg a második 18.3 kV volt. A tömegspektrométer szilárd fázisú lézerrel volt felszerelve (355 nm). Mátrixként a kutatás során eleinte 2,5-dihidroxibenzoésavat (DHB), a későbbiekben transz-2-[3-(4-tert-butilfenil)-2-metil-2-propenilidén]malononitrilt (DCTB) használtam, az ionizáló ágens minden esetben nátrium-trifluoracetát (NaTFA) volt.

A gélpermeációs kromatográfiás mérésekhez Waters Alliance e2695 típusú készüléket alkalmaztam. A detektáláshoz Waters 2414 törésmutató index detektort használtam. A méréseket három különböző oldószer elegyben vagy tiszta oldószerben végeztem, mindegyik esetén más módszert alkalmaztam. Az első esetben DMF volt az eluens, a kolonnák Shodex KF-603 és Shodex KF-602.5 voltak, a térfogatáram 0.3 mL/perc, hőmérséklet 42 °C, futási idő 28 perc volt. A második esetben az eluens THF:DMSO:piperidin (94:5:1 V/V%) keveréke volt, a kolonnák Styragel HR 0.5, 1, 2 és 4 voltak, a térfogatáram 0.5 mL/perc, hőmérséklet 40 °C, futási idő 35 perc volt. A harmadik esetben az eluens ACN:H₂O (60:40 V/V%) keveréke volt, a kolonnák PolySep-GFC-P 3000 voltak, a térfogatáram 0.48 mL/perc, hőmérséklet 40 °C, futási idő 48 perc volt.

Az ¹H-NMR méréseket Bruker Avance II 500 MHz spektrométerrel végeztem. A kvantitatív 1D ¹H-NMR mérési körülményei a következők, 300 K, 90°-os ¹H excitációs impulzus, 15 s relaxációs idő, spektrum szélesség 14.97 ppm, adatpontok száma 32768, scan-ek száma 1.

A dinamikus fényszórás mérőműszer Zetasizer Nano ZS volt a kritikus micellaképződési koncentráció és micellaméret meghatározásához. A készülék He-Ne lézerrel (633 nm) volt felszerelve. A méréseket 37 °C-on végeztem, a detektor szöge 173° volt.

3. Új tudományos eredmények

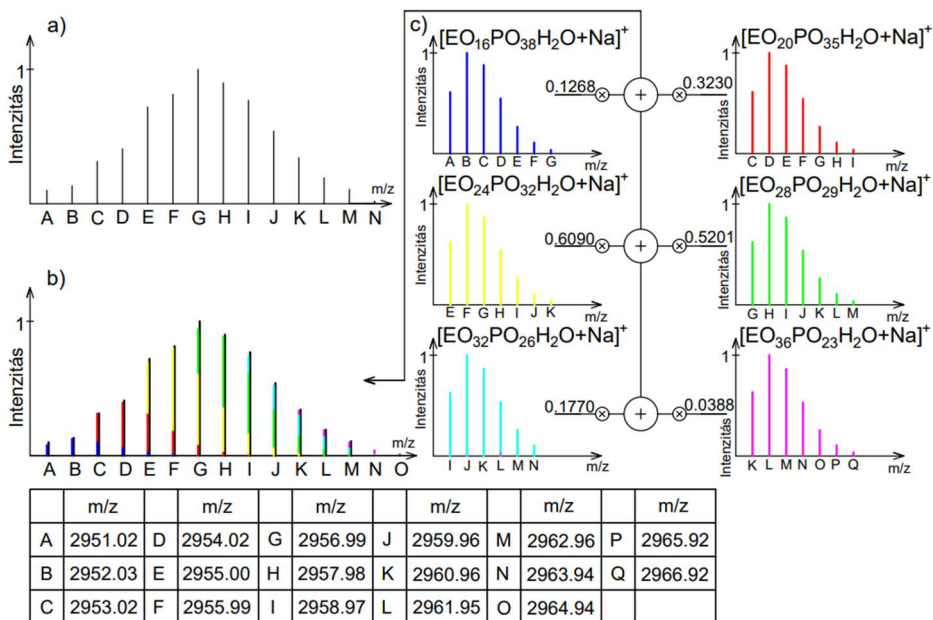
3.1. Kopolimerrek tömegspektrumának részletes elemzése

3.1.1. Kifejlesztettem egy tömegspektrum elemző algoritmust kopolimerrek részletes elemzésére, melyet [poli-(etilén-oxid)]-[poli-(propilén-oxid)] (PEO)-(PPO) kopolimer családon teszteltem

Munkám során fejlesztettem egy kopolimer tömegspektrum-elemző algoritmust, mely képes meghatározni a kopolimereket jellemző paramétereket. Az algoritmus lépései az alábbiak:

1. A kalibrált tömegspektrum importálása és normalizálása.
2. A lehetséges komponensek meghatározása.
3. A lehetséges komponensek izotópjainak és azok eloszlásának kalkulációja.
4. A komponensekhez azonosított izotópok meglétének ellenőrzése a tömegspektrumban, ezáltal a komponens, mint valós elem lehetőségnek vizsgálata.
5. Az összes komponens intenzitástörtjének meghatározása illesztéssel.

Az ötödik lépés működését szemlélteti az 1. ábra.

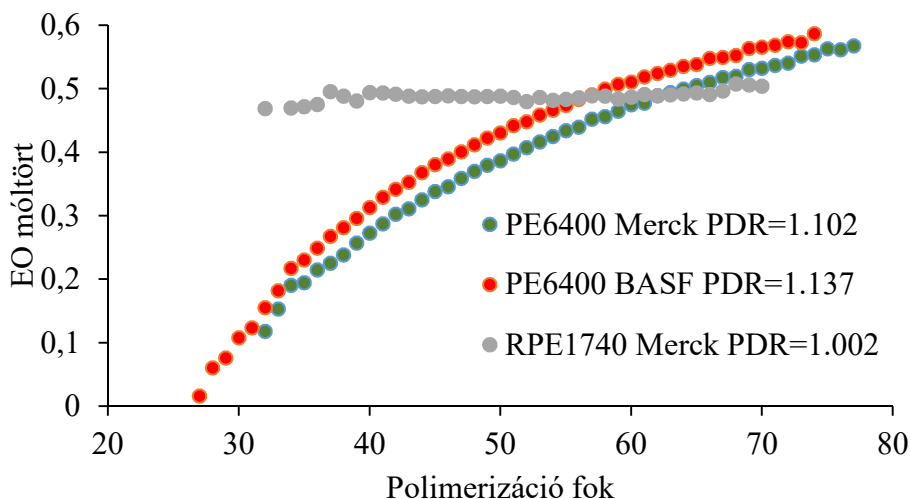


1. ábra: Kopolimer tömegspektrumában lévő csúcs csomagot felépítő komponensek azonosítása és azok illesztése

Az algoritmus eredménye, hogy minden kopolimert alkotó komponens részaránya megállapítható, és ezáltal a polimer jellemzők, mint a számátlag molekulatömeg (M_n), tömegátlag molekulatömeg (M_w), polidiszperzitás index (PDI) számolhatók. Ezen felül lehetőség van a láncokat alkotó monomerek darabszámának meghatározására minden lánc esetén, illetve az ezekre vonatkozó átlagok, mint a darabszám számátlag (n_n^A) és darabszám súlyozott számátlag (n_w^A) számítható. Továbbá ezekből az eredményekből a monomerek eloszlásáról is információt nyerünk (PDI^A). Az algoritmust ¹H-NMR által szolgáltatott adatokkal validáltam.

3.1.2. Bevezettem egy új kopolimerekre jellemző paramétert (polidiszperzitás arány, PDR), amivel értelmezhető az összetétel sodródás diagram alakja

A polimerek összetételének vizualizációjára az összetétel sodródás diagramot alkalmaztam, melynek segítségével ezek könnyen és gyorsan összevethetők. Továbbá a sodródás meredekségének jellemzésére bevezettem egy új kopolimer jellemzőt, ami a polidiszperzitás arány (PDR) és a monomerek polidiszperzitás indexének hányadosaként számolható ki (PDI^A/PDI^B). Ezt reprezentálja a 2. ábra.



2. ábra: PE6400 BASF (1. minta), PE6400 Merck (2. minta) és RPE1740 Merck (3. minta (17R4)) kopolimerek összetétel sodródás diagramja

A PEO-PPO-PEO összetételű triblokk kopolimerek esetén a PDR értéke mindig 1 feletti érték volt, tehát az EO polidiszperzitás indexe nagyobb mint a PO polidiszperzitás indexe. Ez annak a következménye, hogy az EO eloszlása szélesebb. Ezért ellenőriztem, hogy a széles eloszlás

abból fakad-e, hogy a polimerizáció során a PPO láncnak csak az egyik oldalán épült ki PEO blokk, azaz lehetséges-e a diblokk „szennyező” jelenléte. Az ^1H -NMR mérések alapján a primer hidroxilcsoportok mennyisége nem 100%, PE6400 BASF (1. minta) esetén 85.4% illetve PE6400 Merck (2. minta) esetén 84.9%, tehát diblokk kopolimer is jelen van a kopolimerekben.

3.1.3. Bizonyítottam, hogy a részletes karakterizálás által kimutatott eltérések a polimerek önszerveződő tulajdonságában is megjelennek, mint a kritikus micellaképződési koncentráció és a micellák hidrodinamikai átmérője

A fejlesztés során gyártói paraméterek szerint analóg kopolimereket (PE6400 BASF (1. minta) és PE6400 Merck (2. minta)) is elemeztem, és a jellemző paramétereikben eltérést tapasztaltam. Ezért megmértem a kopolimerekből képződő micellák méretét vizes oldatban, valamint a kritikus micellaképződési koncentrációt. PE6400 BASF (1. minta) esetén a micella z-átlag hidrodinamikai átmérője 65.3 nm, illetve a kritikus micellaképződési koncentráció 2.2 mmol/mL. PE6400 Merck (2. minta) esetén a z-átlag hidrodinamikai átmérő 18.2 nm, míg a kritikus micellaképződési koncentráció 1.2 mmol/mL volt. Mind a két paraméter esetén a két minta közt szignifikáns eltérés tapasztalható.

3.2. Kopolimerek tömegspektrumának adatredukciós elemzése

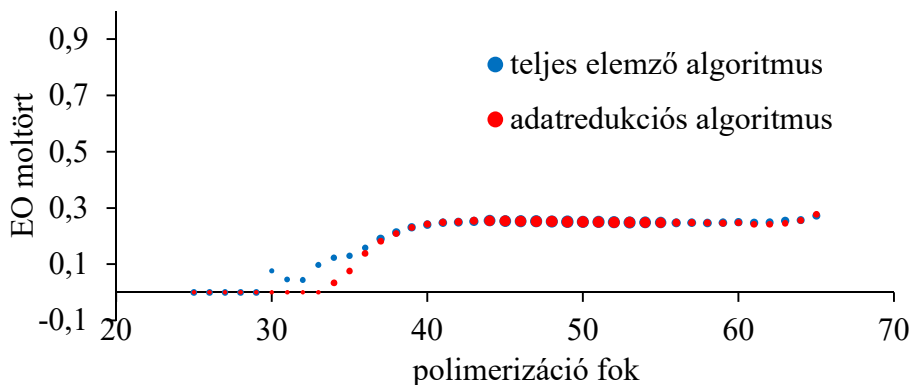
3.2.1. Bebizonyítottam, hogy kopolimerek összetétele meghatározható redukált adathalmazból is megfelelő intenzitáskorrektúrával

Az adatredukciós algoritmus a következő fő lépésekből áll:

1. A legintenzívebb csúcs kiválasztása

2. MARA módszer alkalmazása a sorozatok azonosítására és a csúcsok kiválasztása
3. Intenzitáskorrekció
4. Polimer paraméterek számítása

A tömegmaradék analízis esetén a kiválasztott osztó tényező a PO monomer molekulatömege volt, mely 58.042 g/mol. Ezt alkalmaztam, illetve egy visszafejtő kódtáblát az összetételek megállapítására. Ezen felül az átfedő csúcsok dekonvolúciójára egy intenzitáskorrekciós eljárást fejlesztettem, ami a monoizotópos csúcsból számítja ki az intenzitásokat. Ezáltal a kopolimert jellemző fő paraméterek kiszámítása lehetséges. Ezen felül az eredményeket összetétel sodródás diagramon ábrázoltam és hasonlítottam össze a részletes elemzésből származó görbével, melyek a 3. ábrán láthatók.



3. ábra: RPE2520 összetétel sodródás diagramja a teljes elemző algoritmus illetve az adatredukciós módszerrel

3.3. Mesterséges intelligencia támogatott gélpermeációs kromatográfiás (GPC) kopolimer analízis

3.3.1. Kifejlesztettem egy neurális háló alapú módszert, amely képes kiszámítani gél permeációs kromatográfiás (GPC) adatokból a kereskedelmi forgalomban kapható [poli-(etilén-oxid)]-[poli-(propilén-oxid)] kopolimerek pontos számátlag molekulatömeget és a monomerek arányát

A neurális háló bemeneti paraméterei a gélpermeációs kromatográfia (GPC) által megállapított M_p értékek voltak, míg a kimeneti paraméternek a MALDI-TOF-MS-el mért M_n érték, illetve $^1\text{H-NMR}$ mérési módszerrel meghatározott EO n/n% tartalom volt. A háló egy rejtett rétegű, előre csatolt, szigmoid átviteli függvényű neuronokat és rétegenként három neuront tartalmazott. A háló számolási teljesítményét az 1. táblázat mutatja be.

1. táblázat: a számolt és mért eredmények korrelációs elemzése

	M_n	EO%
r	0.988	0.990
<i>pontosság %</i>	4.9	2.3
p	0.95	0.51

3.3.2. Feltanítottam egy neurális hálót, amely alkalmazható [poli-(etilén-oxid)]-[poli-(propilén-oxid)] kopolimerek ($M_n < 5000$ g/mol) részletes elemzésére GPC mérések felhasználásával

A második neurális háló bemeneti paraméterei ebben az esetben is a GPC által megállapított M_p értékek, illetve a blokk szekvencia voltak. A kimeneti paraméterek pedig a számátlag darabszámok (n_n^{EO} , n_n^{PO}),

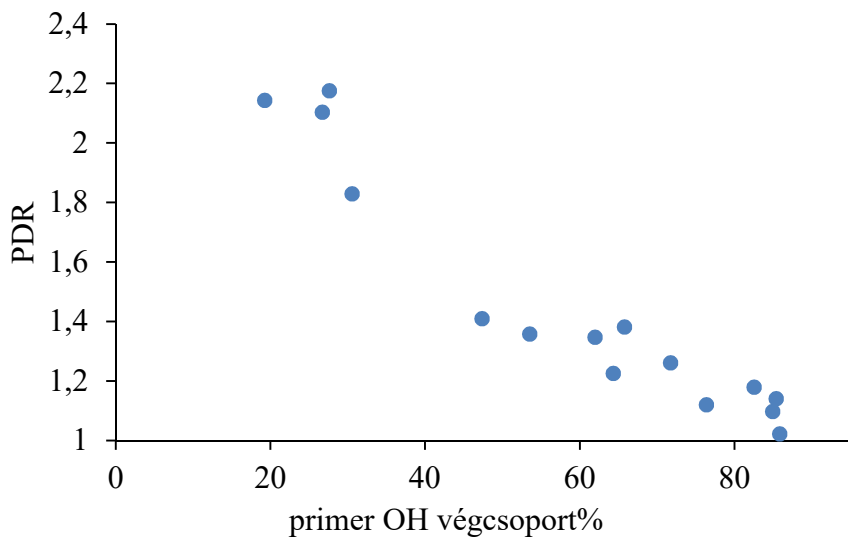
illetve darabszámmal súlyozott számátlag darabszámok (n_w^{EO} , n_w^{PO}) voltak. A háló topológiáját tekintve egy rejtett rétegű, előre csatolt, a rétegben öt neuront tartalmazó, szigmoid átviteli függvényű neuront tartalmazott. A neurális háló számolási pontosságát a 2. táblázat mutatja be.

2. táblázat: a számolt és mért eredmények korrelációs elemzése

	n_n^{EO}	n_w^{EO}	n_n^{PO}	n_w^{PO}
r	0.996	0.995	0.983	0.983
<i>pontosság %</i>	1.6	1.6	2.2	2.2
p	0.09	0.08	0.34	0.35

3.3.3. [poli-(etilén-oxid)]- [poli-(propilén-oxid)] kopolimerek esetében kimutattam, hogy a PDR és a primer hidroxilvégcsoport, normál blokk szekvencia esetén, korrelációt mutatnak egymással

Az adatok elemzése során korrelációt találtam az ^1H -NMR-rel mért primer hidroxilvégcsoport százaléka és a PDR közt, ami, mint ahogy az 3.1.2. fejezetben is bemutattam, diblokk „szennyező” jelenlétét támasztja alá.



4. ábra: Polidiszperzitás arány a primer hidroxilcsoportok függvényében

4. Az eredmények hasznosításának lehetőségei

A mai világban a precíziós termelés egyik elengedhetetlen eszköze a megfelelő analitikai eljárások alkalmazása. A kutatásomban polimerkémiail analitikai eljárásokat fejlesztettem tovább. Elsőként készítettem egy kopolimer tömegspektrum-elemző algoritmust, mellyel a tömegspektrum kiértékelése gyorsrá, automatikussá tehető, és meghatározhatóak a jellemző paraméterek (M_n , M_w , PDI, n_n^A , n_w^A , PDI^A). Továbbá bevezettem egy új kopolimerre jellemző paramétert, a polidiszperzitás arányt (PDR). A PDR felhasználásával értelmezhető az összetétel sodródás görbék alakja. Ezen felül [poli-(etilén-oxid)]- [poli-(propilén-oxid)]- [poli-(etilén-oxid)] blokk kopolimerek esetén ezzel a paraméterrel diblokk „szennyező” jelenléte mutatható ki a kopolimerben. Továbbá fejlesztettem egy egyszerűbb, programozás nélküli tömegspektrum-elemző algoritmust, ami táblázatkezelő szoftverekbe könnyen implementálható, és szinte ugyan olyan pontossággal nyújtja az első algoritmus által szolgáltatott eredményeket. Így egyszerűsítve az elemzést, továbbá az eljárás egyszerűen implementálható más kopolimerek esetében is. A gélpermeációs kromatográfiás (GPC) módszerből kinyerhető információk halmazát bővítettem ki, egyszerű neurális hálókka. Ezáltal lehetőség nyílik eddig csak drága és nagy szaktudást igénylő módszerekkel meghatározható eredmények kinyerése, pusztán egyszerű és olcsó GPC módszerrel. Kijelenthető, hogy az iparban rutinszerűen használt GPC módszer alkalmazhatósága ezáltal sokkal szélesebb vált.

Köszönetnyilvánítás

A dolgozatom elkészítéséhez köszönöm a támogatást a GINOP-2.3.3-15-2016-00021, TKP2020-NKA-04, GINOP-2.3.3-15-2016- 00004 és NKFI FK-132385 pályázatoknak és projekteknek, amelyek az Európai Unió támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósultak meg.



Nyilvántartási szám: DEENK/8/2024.PL
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Róth Gergő
Doktori Iskola: Kémiai Tudományok Doktori Iskola
MTMT azonosító: 10078039

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

Idegem nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (3)

1. Nagy, T., **Róth, G.**, Benedek, M., Kuki, Á., Timári, I., Zsuga, M., Kéki, S.: Enhanced Copolymer Characterization for Polyethers Using Gel Permeation Chromatography Combined with Artificial Neural Networks.
Anal. Chem. 95 (28), 10504-10511, 2023. ISSN: 1520-6882.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.analchem.2c02913>
IF: 7.4 (2022)
2. Kuki, Á., **Róth, G.**, Nagy, A., Zsuga, M., Kéki, S., Nagy, T.: A Short-Cut Data Mining Method for the Mass Spectrometric Characterization of Block Copolymers.
Processes. 10 (1), 42-50, 2021. EISSN: 2227-9717.
DOI: <http://dx.doi.org/10.3390/pr10010042>
IF: 3.352
3. **Róth, G.**, Nagy, T., Kuki, Á., Hashimov, M., Vonza, Z., Timári, I., Zsuga, M., Kéki, S.: Polydispersity Ratio and Its Application for the Characterization of Poloxamers.
Macromolecules. 54 (21), 9984-9991, 2021. ISSN: 0024-9297.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.macromol.1c01552>
IF: 6.057

További közlemények

Idegem nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (3)

4. Nagy, T., Kuki, Á., **Róth, G.**, Kzyz, 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. 117, 1-7, 2023. ISSN: 0142-9418.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.polymertesting.2022.107834>
IF: 5.1 (2022)





5. Pardi-Tóth, V. C., Kuki, Á., Kordován, M. Á., **Róth, G.**, Nagy, L., Zsuga, M., Nagy, T., Kéki, S.:
Molecular data storage using direct analysis in real time (DART) ionization mass
spectrometry for decoding.
Sci. Rep. 13 (1), 1-7, 2023. EISSN: 2045-2322.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1038/s41598-023-43658-x>
IF: 4.6 (2022)
6. Nagy, T., **Róth, G.**, Kuki, Á., Zsuga, M., Kéki, S.: Mass Spectral Filtering by Mass-Remainder
Analysis (MARA) at High Resolution and Its Application to Metabolite Profiling of Flavonoids.
Int. J. Mol. Sci. 22 (2), 1-12, 2021. ISSN: 1661-6596.
DOI: <http://dx.doi.org/10.3390/ijms22020864>
IF: 6.208

Magyar nyelvű absztrakt kiadványok (13)

7. Pardi-Tóth, V. C., Nagy, T., Kordován, M. Á., **Róth, G.**, Nagy, L., Kuki, Á., Zsuga, M., Kéki, S.:
Anyagba integrált adatok dekódolása DART-MS ionforrással = Decoding material-integrated
data with DART-MS ion source.
In: XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 29th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 58, 2023,
(ISSN 2734-7109)
8. Kaldybek, K. Z., Nagy, T., **Róth, G.**, Kuki, Á., Zsuga, M., Kéki, S.: Blokk kopolimerek előállítása és
karakterizálása = Synthesis and characterization of block copolymer.
In: XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 29th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 48, 2023,
(ISSN 2734-7109)
9. Kordován, M. Á., Nagy, T., Nagy, L., Kuki, Á., **Róth, G.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Fém-levegő
akkumulátorok formatervezése és 3D nyomtatása = Design and 3D printing of metal-air
secondary batteries.
In: XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 29th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 49, 2023,
(ISSN 2734-7109)
10. Benedek, M., Kuki, Á., **Róth, G.**, Nagy, T., Zsuga, M., Kéki, S.: Kopolimerek elemzése gél
permeációs kromatográfiával = Kopolimerek elemzése gél permeációs kromatográfiával
Analysis of copolymers by gel permeation chromatography.
In: XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 29th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 45, 2023,
(ISSN 2734-7109)





11. **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)
12. Nagy, T., Kuki, Á., **Róth, G.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Tömegspektrometriával a kopolimerek nyomában = Chasing copolymers by mass spectrometry.
In: XXIX. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 29th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság, Kolozsvár, 4, 2023, (ISSN 2734-7109)
13. Nagy, T., Kuki, Á., **Róth, G.**, Kaldybek, K. Z., Zatalini, A. B., Nyul, D., Zsuga, M., Kéki, S.: 4-akriol-morfolin és N-izopropil-akrilamid blokk kopolimerének 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)
14. **Róth, G.**, Nagy, T., Benedek, M., Kuki, Á., Timári, I., Zsuga, M., Kéki, S.: Neurális hálózattal támogatott géppermeációs kromatográfiás kopolimer analízis.
In: XXVIII. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 28th International Conference on Chemistry.
Szerk.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT), Kolozsvár, 40, 2022, (ISSN 2734-7109)
15. Kuki, Á., Nagy, T., Nagy, L., Deák, G., Kordován, M. Á., **Róth, G.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Új irányok a környezetbarát fém-levegő akkumulátorok fejlesztésében = Development of novel environmentally friendly metal-air batteries.
In: XXVIII. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 28th International Conference on Chemistry.
Szerk.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT), Kolozsvár, 30, 2022, (ISSN 2734-7109)
16. **Róth, G.**, Nagy, T., Kuki, Á., Zsuga, M., Kéki, S.: Biológiai eredetű minták flavonoid tartalmának profilozása tömegmaradék analízissel.
In: XXVII. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 27th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT), Kolozsvár, 43, 2021, (ISSN 2734-7109)
17. Nagy, T., **Róth, G.**, Kuki, Á., Hashimov, M., Timári, I., Vonzá, Z., Zsuga, M., Kéki, S.: Polidiszperzitás arány alkalmazása kopolimerek elemzésére.
In: XXVII. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 27th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT), online [Kolozsvár], 47, 2021, (ISSN 2734-7109)





18. **Róth, G.**, Nagy, T., Kuki, Á., Zsuga, M., Kéki, S.: Tömegmaradék analízis (MARA) alkalmazása flavonoidok profilozásra nagy felbontású tömegspektrumok esetén.
In: II. FKF Szimpózium : Absztraktfüzet. Szerk.: Ádám Anna Adél, Ziegenheim Szilveszter, Magyar Kémikusok Egyesülete, Budapest, 15, 2021.
19. **Róth, G.**, Nagy, T., Kuki, Á., Zsuga, M., Kéki, S.: Kopolimer tömegspektrumok automatikus kiértékelése.
In: XXVI. Nemzetközi Vegyészkonferencia = 26th International Conference on Chemistry.
Ed.: Majdik Kornélia, Erdélyi Magyar Műszaki Tudományos Társaság (EMT) Kémia Szakosztálya, Kolozsvár, 28, 2020, (ISSN 2734-7109)

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 32,717

**A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapján szolgáló közleményekre):
16,809**

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, 2024.01.11.

