

Doktori (PhD) értekezés tézisei

**Nehézfém-komplexek katalitikus szerepének
mechanizmus-vizsgálata DFT módszerekkel**

Fehér Péter Pál

Témavezető: Dr. Purgel Mihály



DEBRECENI EGYETEM
Kémia Doktori Iskola

Debrecen, 2019

I. BEVEZETÉS ÉS CÉLKITŰZÉSEK

Az átmenetifém katalizált homogén katalízis mind kísérleti, mind elméleti kémiai szempontból igen érdekes és fontos kutatási terület. A H–H, illetve C–H kötések aktiválására képes komplexeket ma már nem csak hidrogénezési vagy kapcsolási reakciókban alkalmazzák, hanem a hidrogéntárolásra irányuló kutatások előtérbe kerülésével újra „felfedezik” ezeket a katalizátorokat. Részben ennek köszönhetően az évek során az alkalmazott komplexek, illetve az irodalomban megjelenő reakciókörülmények sokasága már-már átláthatatlan mennyiségű információt jelent. Az elméleti modellezés nemcsak a folyamatok megértéséhez jelent segítséget, hanem új katalizátorok kidolgozásának racionalizálásában is elengedhetetlennek tűnik. Különböző rendszerek összehasonlítására, illetve még elő nem állított komplexek tulajdonságainak becslésére a sűrűségfunkcionál-elmélet a legáltalánosabban használt eszköz, melynek alkalmazása különálló kutatási területté nőtte ki magát.

Nemesfém-foszfin komplexek kutatása a Fizikai Kémiai Tanszéken, illetve az ott működő Homogén Katalízis kutatócsoportban már komoly múltra tekint vissza. Ezen katalizátorok széleskörű oldhatósággal (főleg vízben), szelektivitással és kinetikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Például, ha egy α,β -telítetlen karbonil vegyületet szeretnénk hatékonyan és szelektíven hidrogénezní, akkor a megfelelő katalizátor

rendszer kiválasztása nem triviális. Továbbá az oldószer is fontos szerepet játszik, mivel a víz nemcsak „zöldddé” teszi a reakciót, hanem explicit módon részt vehet annak mechanizmusában új reakció utak megnyitásával. A pH pedig nemcsak az oldószer protondonor képességét jellemezheti, hanem a katalizátor aktív formáját is befolyásolhatja. A munkám során tehát már nagy mennyiségű kísérleti eredmény állt rendelkezésre, melyek elméleti értelmezése mechanizmusok kidolgozásának segítségével, illetve azokból való következtetések levonása volt a fő célom. Az értekezésben bemutatok az általam végzett DFT számításokon túl új mérési eredményeket is, azonban a kísérleteket nem én végeztem így tárgyalásuk során többes szám első személyt használok, és nem térek ki részletesen az ott alkalmazott módszerek, illetve a készülékek ismertetésére. Fontos még megjegyezni, hogy az új kísérletek mindegyikét a számolások által felvetett kérdések hatására, illetve magyarázatára végeztük, így szerves részét képezik a munkámnak.

II. ALKALMAZOTT MÓDSZEREK

Munkám során DFT számolásokat végeztem a Gaussian 09 programcsomag felhasználásával. A szoftver elérhető a magyarországi szuperszámítógép hálózaton, amin belül a legtöbb processzoridőt a Debrecen 2 (Leo) gépen vettem igénybe. A választott funkcionál a diszperzió korrigált B3LYP-D3 volt. A nemfémek atomokra a TZVP báziskészletet, míg a komplexek esetén a központi fématomra a CRENBL effektív magpotenciált és a hozzá tartozó, vegyértékelektronokat leíró báziskészletet alkalmaztam. Az oldószer figyelembevételére PCM módszert használtam. Az intermedierek és átmeneti állapotok felderítésére geometriaoptimalizálást végeztem, majd a minimumok és átmeneti állapotok azonosítására frekvencia számolásokat végeztem a geometriaoptimalizálás elméleti szintjén. Az értekezésben bemutatott energiaértékek relatív szabadentalpiák 298,15 Kelvin hőmérsékletre és 1 atm nyomásra vonatkoztatva. Munkám első részében a funkcionálok változtatásától eltekintve ugyanilyen módon jártam el.

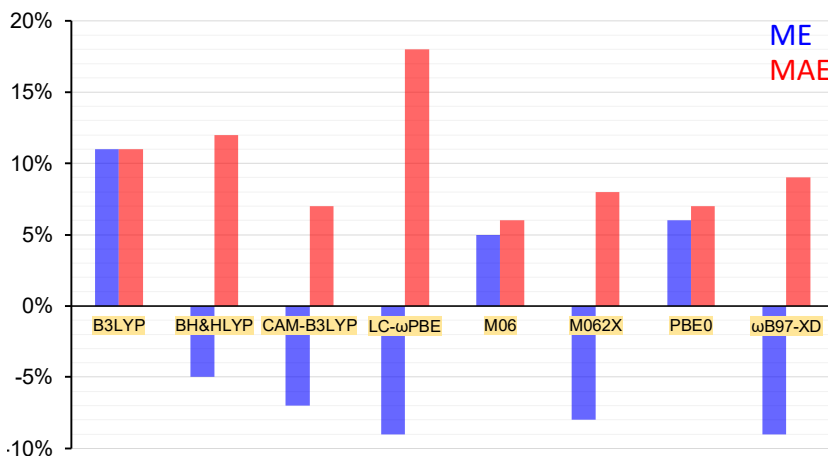
III. RÖVIDÍTÉSEK

DFT	<i>Density Functional Theory</i> , Sűrűségfunktcionál-elmélet
ARS	<i>Alizarin Red S</i> , szulfonált alizarin
TDDFT	<i>Time Dependent DFT</i> , Időfüggő sűrűségfunktcionál-elmélet
emim	1-etil-3-metimidazólium
COD	1,5-ciklooktadién
<i>mtppts</i>	monoszulfonált trifenilfoszfin
<i>mtpms</i>	trisulfonált trifenilfoszfin
„foszfin”, P	A munkám során a <i>mtpms</i> és <i>mtppts</i> ligandumokat a szulfo csoportok elagyásával PPh ₃ molekulává egyszerűsítettem. Az általános jelölés a kontextustól függően vonatkozhat az említett három részecske egyikére.
NHC	<i>N</i> -heterociklusos karbén
fahéjaldehid	(E)-3-fenil-2-propénal

IV. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

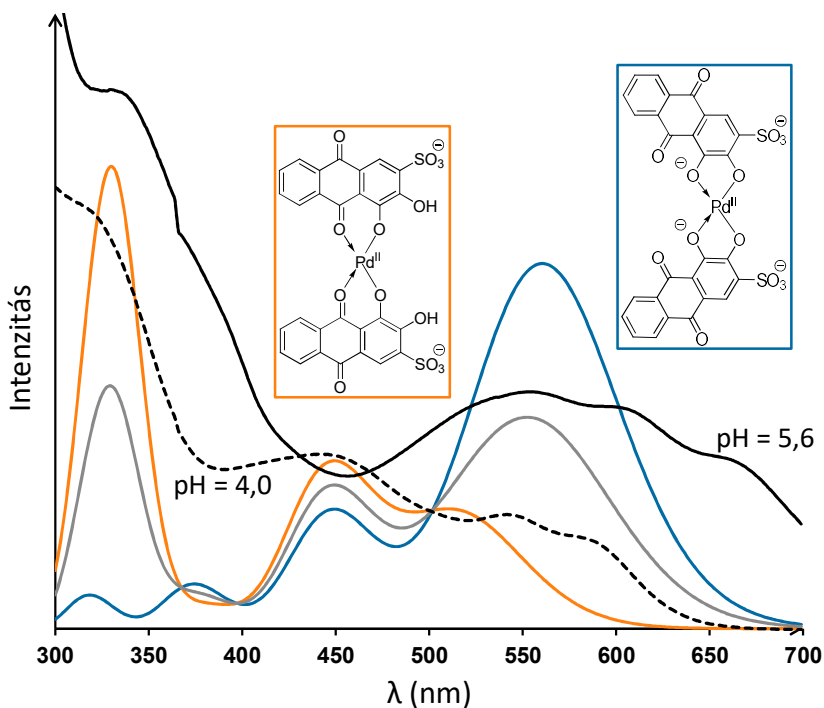
Az ARS és palládium komplexének vizsgálata

1. Funkcionálok tesztelésével megállapítottam, hogy az ARS vizsgálatára az M06 funkcionál a legalkalmasabb. A tesztelést az ARS mono-, di- és trianionos formáira végeztem el, melyek esetén rendelkezésre állnak irodalmi UV-látható spektrumok. Az M06 mellett a B3LYP, BH&HLYP, CAM-B3LYP, LC- ω PBE, M062X, PBE0 és ω B97-XD funkcionálokat alkalmazva konformációs analízist végeztem, szimuláltam UV-látható spektrumokat, majd a karakterisztikus elnyelési sávokat felhasználva megállapítottam a mért és számolt abszorpciós hullámhosszak közötti eltérést. Az eredményeket az 1. ábra foglalja össze.



1. ábra. A funkcionál tesztelés eredménye. ME és MAE jelentik az átlagos előjeles és abszolút hibákat.

2. Az ARS palládium komplexének protonált és deprotonált formáira elvégeztem az UV-látható spektrumokhoz történő szerkezetek hozzárendelését. Az eredményeim alapján a protonált formában hidroxi-keto kötismód, míg deprotonált formában katekol kötismód jelenléte feltételezhető. A javasolt szerkezeteket és az általunk újrámért spektrumokat a 2. ábra mutatja.



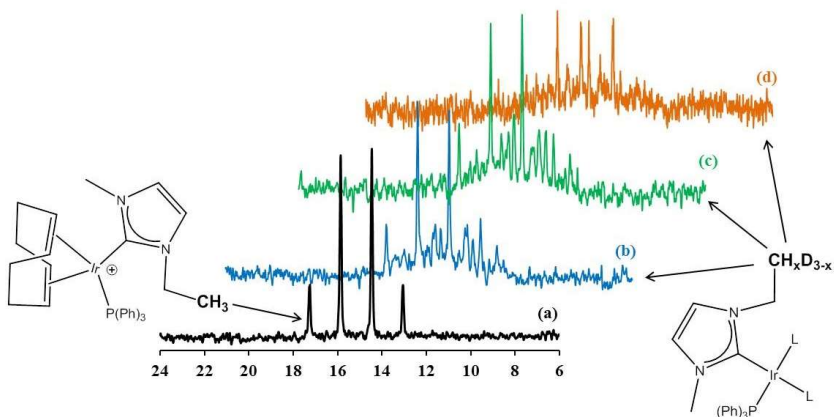
2. ábra. Az ARS palládium komplexének protonált és deprotonált formáinak javasolt formái együtt a mért (fekete) és számolt (színes) UV-látható spektrumokkal.

3. Megállapítottam, hogy az ARS ligandum szubsztrátként is viselkedhet. Termékeként képződhetnek gyűrűn telített formák, viszont a telítetlen hidrokinnon képződése nem várható.
4. Megállapítottam, hogy a redukált ARS mint ligandum esetén az L, ML és ML₂ részecskék UV-látható spektrumai gyakorlatilag azonosak, így az általam alkalmazott spektrum-hozzárendelés nem képes különbséget tenni közöttük.

A formiát-bikarbonát rendszer hidrogéntárolását katalizáló [Ir(emim)(η^4 -COD)(mtppts)]⁺ komplex vizsgálata

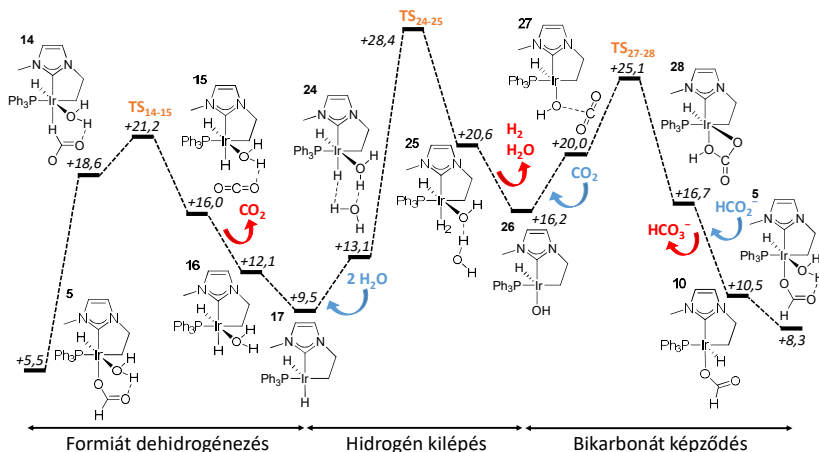
5. DFT számolások segítségével megmutattam, hogy a [Ir(emim)(η^4 -COD)(mtppts)]⁺ komplexből a katalitikusan aktív forma kialakulásához a leggyengébben kötődő COD ligandum disszociációja szükséges. Ezt ¹³C NMR segítségével kísérletes úton is igazoltuk.
6. DFT számolások segítségével megmutattam, hogy foszfin felesleg esetén a COD lecserélhető foszfínnra [IrP₂(NHC)(HCOO)] komplexet képezve, melyben az NHC ligandum intramolekuláris C–H aktiválása kinetikailag blokkolt. Ezzel összhangban vannak a munkámat megelőző mérési eredmények.
7. DFT számolások segítségével megmutattam, hogy hozzáadott foszfin nélkül a COD hidrogéneződése után kialakulhatnak monofoszfin komplexek, melyekben megvalósul az NHC ligandum *N*-etil oldalláncában történő C–H aktiválása. A monofoszfin komplex létezését és az aktív NHC ligandumot ¹³C NMR segítségével igazoltuk, a mért spektrumokat és az ez alapján lehetséges szerkezeteket a 3. ábra mutatja. A kísérlet során DMSO:D₂O = 1:5 elegyben feloldottuk a Na₂[Ir(COD)(emim)(mtppts)] komplexet. 5 ekvivalens

$\text{H}^{13}\text{COONa}$ hozzáadása után a metil végcsoportok kvartett jele az eltérő spinű deutérium megjelenésével magyarázható módon idővel összetettebbé kezd válni.



3. ábra. A $\text{Na}_2[\text{Ir}(\text{cod})(\text{emim})(\text{mtppts})]$ komplex $\text{DMSO}:\text{D}_2\text{O}$ (1:5) elegyben felvett ^{13}C NMR spektrumai. (a) formiát nélkül, (b, c, d) 5 ekvivalens $\text{H}^{13}\text{COONa}$ mellett. (b): $t = 24$ h; (c): $t = 48$ h; (d): $t = 168$ h

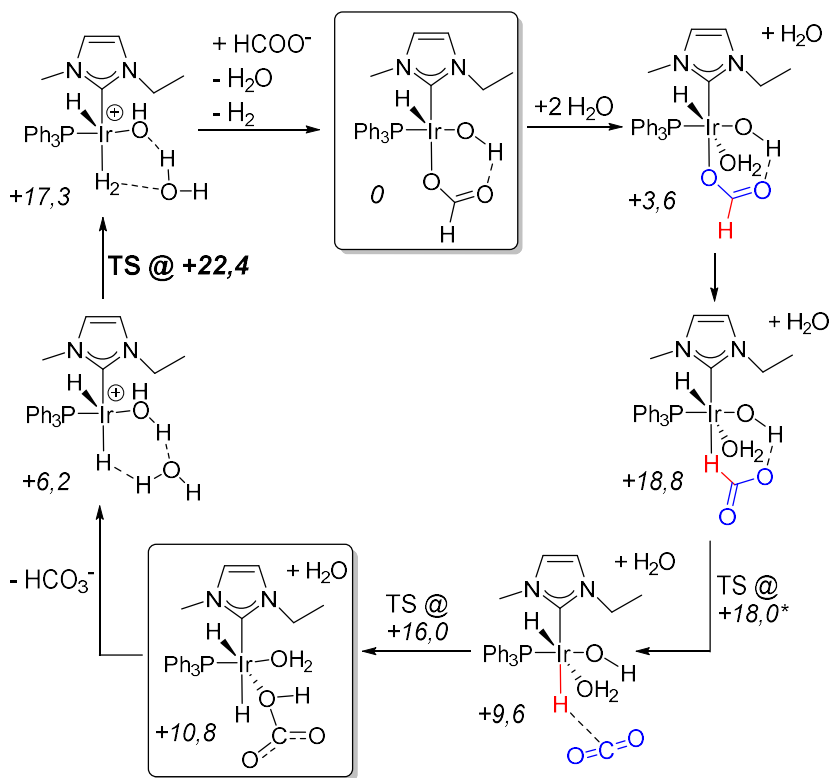
8. Kidolgoztam egy katalitikus ciklust a formiát-bikarbonát rendszer katalízisére, melyben a monofoszfín komplexből az NHC intramolekuláris C–H aktiválásával kialakuló iridaciklusok vesznek részt (4. ábra). Ez a mechanizmus lehet felelős a megfigyelt deutérium cseréért, viszont a további számítások azt mutatják, hogy nem ez a ciklus felelős a hidrogéntárolási folyamat katalíziséért.



4. ábra. A teljes iridaciklusos mechanizmus szabadentalpia-profilja.

9. Kidolgoztam egy lehetséges katalitikus ciklust, mely a monofoszfin katalizálta formiát-bikarbonát rendszerben történő hidrogéntárolásért lehet felelős. A mechanizmus az 5. ábrán látható módon a COD hidrogéneződése utáni állapotból indul, ahol a két felszabaduló koordinációs helyet egy víz és egy formiátion tölti fel. Első lépésben az oldószer molekula oxidatív addíciója következik be, mely során kialakul az aktív Ir(III) centrum. Következő lépésben a formiát C–H hasítása valósul meg, melynek kulcsa a formiát κ^1 O állapotból történő disszociációja, majd κ^1 H állapotba való koordinációja. A kialakuló CO_2 nem távozik a komplexből, hanem a következő lépésben a víz oxidatív addíciója során képződött koordinált OH^- részecskével bikarbonát ionná alakul, melynek disszociációja után kapjuk a $\text{cis-}[\text{IrH}_2\text{P}(\text{emim})(\text{H}_2\text{O})]$ komplexet. A következő lépésben az egyik hidrid ligandumot protonálja az oldószer, ami során kialakul egy koordinált H_2

molekula. Ennek disszociációjával, majd egy új formáció koordinációjával visszakapjuk a kiindulási komplexet. A katalitikus ciklus sebességmeghatározó lépése az oldószerrel való protonálódás, $+22,4$ kcal mol⁻¹ aktiválási gátat eredményezve. Ez összhangban van a fomiát-bikarbonát rendszerre levezethető irodalmi aktiválási gáttal, illetve azzal, hogy a monofoszfín komplex várhatóan kevésbé hatékony, mint a foszfínelesleg mellett kialakuló és kísérletes úton már alaposan vizsgált difoszfín komplex.

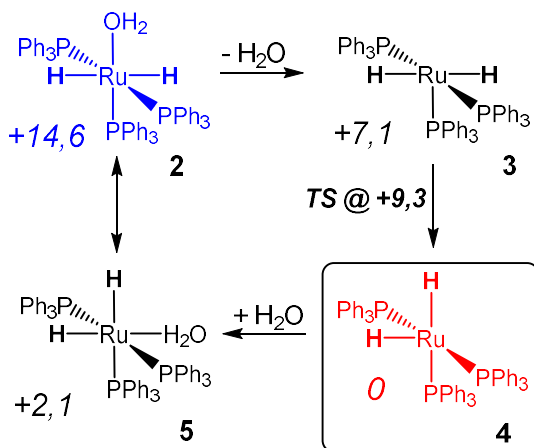


5. ábra. Három explicit vízmolekula által asszisztált katalitikus ciklus.
*Szabadenergia korrekció után néhány TS a gyenge kölcsönhatások miatt kialakuló közel sík potenciálfelület miatt a közeli minimumok energiaszintje alá esik. Az elektronenergiák és az IRC számítások valódi TS szerkezeteket mutatnak.

10. Megállapítottam, hogy az előző pontban tárgyalt fő ciklus kulcsa, hogy a kiindulási Ir(III) centrum nem vesz részt további redox lépésekben. Minden egyéb vizsgált útvonal tartalmaz egy Ir(I)-Ir(III) átmenetet, melynek gátja meghaladja az említett $+22,4 \text{ kcal mol}^{-1}$ értéket.

A *transz*-[Ru(II)H₂(mtpms)₄] katalizálta szelektív fahéjaldehid hidrogénezés vizsgálata

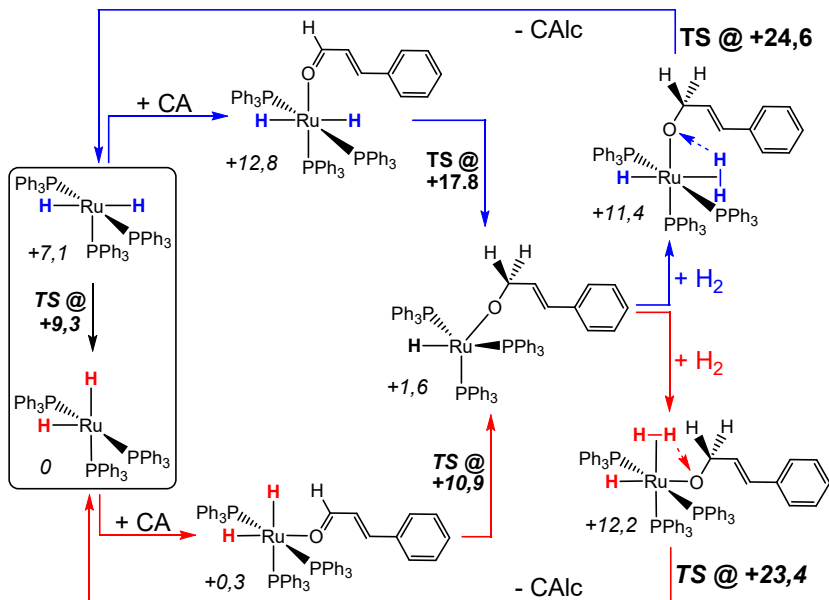
11. DFT segítségével megmutattam, hogy a *transz*-[RuH₂P₄] és *transz*-[RuH₂P₃(H₂O)] komplexek vízben rövid életűek, és átalakulnak a stabilabb pentakoordinált *cisz*-[RuH₂P₃] formába a 6. ábra szerint. Megmutattam továbbá, hogy az átrendeződést nem képesek koordinatív telítés útján blokkolni sem kismolekulák, mint a H₂O, iPr vagy a formiát, sem pedig a negyedik foszfin jelenléte. A *cisz* dihidridek stabilitása viszont nem zárja ki a *transz* izomerek esetleges kinetikai preferáltságát hidrogénezési reakciók során.



6. ábra. A *trans*-[Ru(II)(H₂O)H₂(PPh₃)₃] (2) komplex átrendeződéséből kapott szerkezetek.

12. Kidolgoztam egy asszociatív hidrogénezési mechanizmust, mely *transz* dihidrid részecskéket tartalmaz. Ezt összevetettem az analóg *cisz* dihidrid úttal, és megállapítottam, hogy a két út kinetikailag ekvivalens. A mechanizmus a 7. ábrán látható módon a fahéjaldehid szubsztrát aldehid oxigénjén keresztül történő koordinációjával indul, majd a szomszédos hidrid ligandum karbonil szénatomra történő migrációjával kialakul egy alkoxi komplex. Ez az intermedier közös pontja a *cisz* és *transz* utaknak, mivel rendelkezik egy üres koordinációs hellyel az ekvatoriális síkban, mely tartalmaz egy-egy alkoxi, hidrid és foszfin ligandumot. A következő lépésben egy hidrogén molekula érkezik ebbe az ekvatoriális síkba, a hidrid ligandummal szembe (*transz*) vagy mellé (*cisz*). A kapott *transz* szerkezet energetikailag kedvezőbb, viszont a következő

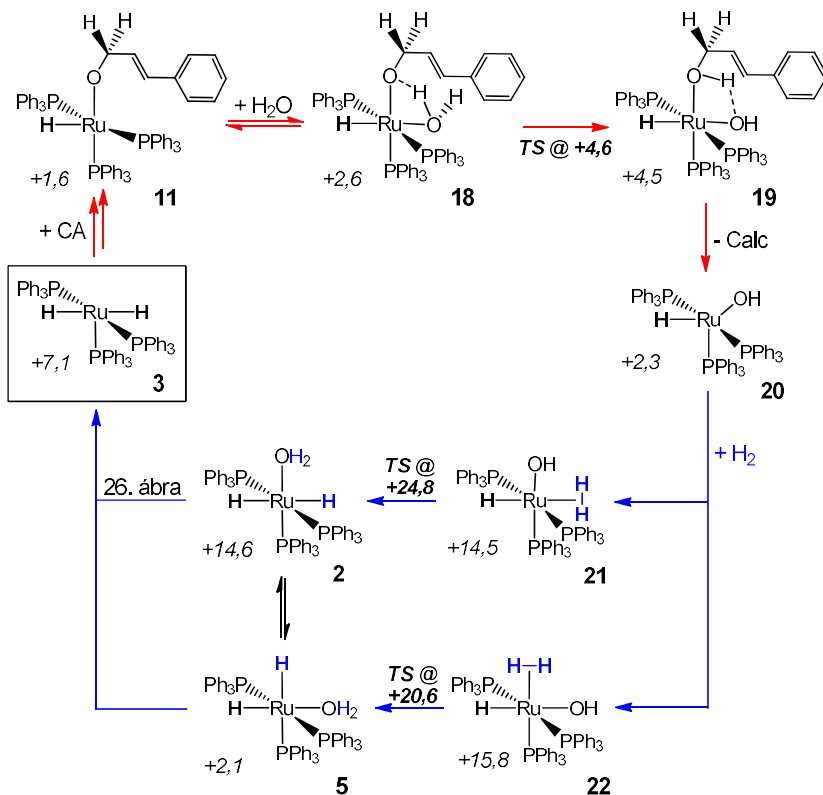
lépésben megvalósuló H–H kötés hasítása a *cis*z izomerben valamivel alacsonyabb gáton keresztül történik. A folyamat sebességmeghatározó lépése ez a heterolitikus H–H hasítás, amivel megkapjuk a termék fahéjalkoholt és a kiindulási *cis*z vagy *transz* komplexet.



7. ábra. Az egyszerűsített asszociatív mechanizmus.

13. DFT segítségével megvizsgáltam az oldószer hatását, melynek figyelembevétele az előző pontban említett mechanizmushoz képest egy kedvezőbb utat eredményez, ahogy az a 8. ábrán látható. Különbőség, hogy az alkoxidot az oldószer protonálja fahéjalkohol terméket eredményezve, és a visszamaradó hidroxidion veszi át az alkoxid helyét. A katalizátor regenerációja így az előző mechanizmus utolsó lépésével analóg, viszont a *cis*z dihidridbe történő regenerációja

kinetikailag preferált (+20,6 kcal mol⁻¹) a *transz* útvonallal (+24,8 kcal mol⁻¹) szemben.



8. ábra. Az asszociatív mechanizmus oldószere segítetté kulcslépései.

14. Megállapítottam, hogy a C=O hidrogenezés szelektivitása betudható a C=C kötés koordináció szterikus gátoltságának. Kidolgoztam egy disszociatív mechanizmust, ahol a szterikus gátlás csökkentése érdekében a szubsztrát koordinációja helyett egy foszfin ligandum disszociációja a kezdeti lépés. Azt tapasztaltam, hogy ilyenkor a C=O és C=C kötés telítése közel

azonos gáton keresztül történik, viszont a kezdeti foszfin disszociáció magas energiaigénye miatt ez a mechanizmus nem kompetitív az asszociatív mechanizmussal.

15. Megvizsgáltam, hogy az asszociatív mechanizmus alkalmazható-e Ru(II) analóg Ir(III) és Rh(III) komplexekre. Mivel a fém centrum cseréje jóval magasabb aktiválási gátakat eredményezett a meglévő mechanizmusok esetén, kijelenthető, hogy ezekkel a fémekkel más mechanizmus szerint történik a hidrogénezés. Ennek felderítésére megvizsgáltam lehetséges redukzív eliminációs lépéseket (az asszociatív mechanizmus nem tartalmaz redox lépéseket, a központi ion végig Ru(II) marad), melyek kedvezőnek bizonyultak, tehát feltehetőleg ezeknél a fémeknél történik oxidációs szám átmenet.

V. AZ EREDMÉNYEK HASZNOSÍTÁSI LEHETŐSÉGEI

A munkám során célom volt három átmenetifém komplex működési mechanizmusának megértése. Az első esetben magának az ARS ligandumnak vizsgálata tekinthető befejezettnek, a palládium komplexe esetén több nyitott kérdés maradt, melyek megértéséhez további kísérletes munka elvégzésére van szükség. Az új mérések értelmezéséhez várhatóan az általam optimalizált számítási módszerek nagyban hozzá fognak tudni járulni.

A másik két komplex vizsgálata alapján javaslatot tettem lehetséges mechanizmusokra, melyek minden bizonnyal segítik az adott katalitikus folyamatok megértését. A ciklusokban szereplő szerkezeteket, aktív formákat ezután célzottan, akár a reakció körülmények változtatásával kísérletes úton is ki lehetne mutatni. Másik lehetőség a komplexek ligandumainak vagy a szubsztrátok kisebb módosításával a reakciókat modellezni *in silico*. Ki lehetne zárni nem megvalósítható folyamatokat vagy hatékonyabb katalizátorokat fejleszteni minimális idő- és pénzbefektetéssel.

VI. TUDOMÁNYOS PUBLIKÁCIÓK

Az értekezés témájához kapcsolódó közlemények

- [1] **Fehér, P. P.**; Horváth, H.; Joó, F.; Purgel, M. DFT Study on the Mechanism of Hydrogen Storage Based on the Formate-Bicarbonate Equilibrium Catalyzed by an Ir-NHC Complex: An Elusive Intramolecular C–H Activation. *Inorganic Chemistry* **2018**, *57*, 5903–5914.
- [2] **Fehér, P. P.**; Purgel, M.; Joó, F. Performance of Exchange–correlation Functionals on Describing Ground State Geometries and Excitations of Alizarin Red S: Effect of Complexation and Degree of Deprotonation. *Computational and Theoretical Chemistry* **2014**, *1045*, 113–122.
- [3] **Fehér, P. P.**; Purgel, M.; Joó, F.; Calhorda, M. Phosphine containing noble metal complexes in catalytic hydrogenation reactions: A DFT study on the selectivity and viability of trans-dihydride pathways. *Organometallics*, bírálat alatt

További közlemények

- [1] Nagy, M.; Rácz, D.; Nagy, Z. L.; **Fehér, P. P.**; Kalmár, J.; Fábíán, I.; Kiss, A.; Zsuga, M.; Kéki, S. Solvatochromic Isocyanonaphthalene Dyes as Ligands for silver(I) Complexes, Their Applicability in silver(I) Detection and Background Reduction in Biolabelling. *Sensors and Actuators B: Chemical* **2018**, 255, 2555–2567.
- [2] Nagy, M.; Rácz, D.; Nagy, Z. L.; Nagy, T.; **Fehér, P. P.**; Purgel, M.; Zsuga, M.; Kéki, S. An Acrylated Isocyanonaphthalene Based Solvatochromic Click Reagent: Optical and Biolabeling Properties and Quantum Chemical Modeling. *Dyes and Pigments* **2016**, 133, 445–457.
- [3] Nagy, M.; Rácz, D.; Kovács, S. L.; Lázár, L.; **Fehér, P. P.**; Purgel, M.; Zsuga, M.; Kéki, S. New Blue Light-Emitting Isocyanobiphenyl Based Fluorophores: Their Solvatochromic and Biolabeling Properties. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry* **2016**, 318, 124–134.
- [4] Józsa, É.; Purgel, M.; Bihari, M.; **Fehér, P. P.**; Sustyák, G.; Várnagy, B.; Kiss, V.; Ladó, E.; Ósz, K. Kinetic Studies of Hydroxyquinone Formation from Water Soluble Benzoquinones. *New Journal of Chemistry* **2014**, 38, 588–597.

Előadások

- [1] Fehér Péter Pál: Kvantumkémiai módszerek tesztelése a szulfonált alizarinvörös és palládium-komplexének izomereire, *XXXVII. Kémiai Előadói Napok*, Szeged, 2014, november 3-5.
- [2] Fehér P.P., Purgel M.: A monoklóramin bomlása vizes közegben, *Szervetlen és Fémorganikus Kémiai Munkabizottság ülése*, Pécs, 2015. november 6-7.
- [3] Purgel M., Fehér P.P.: M(III)EDTA komplexek intramolekuláris átrendeződései, *Szervetlen és Fémorganikus Kémiai Munkabizottság ülése*, Pécs, 2015. november 6-7.
- [4] Péter Pál Fehér: Quantum chemical modeling of an acrylated isocyanonaphthalene based solvatochromic click reagent, *Graduate Conference on Theoretical Chemistry*; 1-3 September 2016, Keszthely, Hungary
- [5] Fehér Péter Pál, Stirling András: A monoklóramin diszproporciójának modellezése, *KeMoMo-QSAR szimpózium*, Szeged, 2018. május 24-25.

Poszterek

- [1] P. P. Fehér, M. Purgel and F. Joó: Performance of exchange-correlation functionals on describing ground state geometries and excitations of Alizarin Red S and its Palladium(II) complexes, *European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms*, 17-20 June 2014, Debrecen, Hungary
- [2] M. Purgel, P. P. Fehér; Hydro(Dehalo)genation Reactions by Semi- and Hydroquinones, *3rd CARISMA Meeting - Catalytic Routines for Small Molecule Activation*, Tarragona, 18-20 March 2015.
- [3] P. P. Fehér, M. Purgel; A DFT study on the selectivity of phosphine and carbene containing noble metal complexes in hydrogenation reactions, *5th CARISMA Meeting - Catalytic Routines for Small Molecule Activation*, Lisszabon, Portugália, 2017. március 6-8.
- [4] Péter Pál Fehér, Henrietta Horváth, Ferenc Joó and Mihály Purgel; DFT Study on the Mechanism of Hydrogen Storage Based on the Formate-Bicarbonate Equilibrium, *COST CHAOS Working Group Meeting*, Alcalá, Spanyolország, 2018. március 22-23.



Nyilvántartási szám: DEENK/4/2019.PL
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Fehér Péter Pál
Neptun kód: R31XZ4
Doktori Iskola: Kémiai Tudományok Doktori Iskola
MTMT azonosító: 10048002

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (2)

1. **Fehér, P. P.**, Horváth, H., Joó, F., Purgel, M.: DFT Study on the Mechanism of Hydrogen Storage Based on the Formate-Bicarbonate Equilibrium Catalyzed by an Ir-NHC Complex: An Elusive Intramolecular C-H Activation.
Inorg. Chem. 57 (10), 5903-5914, 2018. ISSN: 0020-1669.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b00382>
IF: 4.7 (2017)
2. **Fehér, P. P.**, Purgel, M., Joó, F.: Performance of exchange-correlation functionals on describing ground state geometries and excitations of Alizarin Red S: Effect of complexation and degree of deprotonation.
Computational and Theoretical Chemistry. 1045, 113-122, 2014. ISSN: 2210-271X.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2014.06.025>
IF: 1.545

További közlemények

Idegen nyelvű tudományos közlemények külföldi folyóiratban (4)

3. Nagy, M., Rácz, D., Nagy, Z. L., **Fehér, P. P.**, Kalmár, J., Fábíán, I., Kiss, A., Zsuga, M., Kéki, S.: Solvatochromic isocyanonaphthalene dyes as ligands for silver(I) complexes, their applicability in silver(I) detection and background reduction in biolabelling.
Sens. Actuator B. Chem. 255 (3), 2555-2567, 2018. ISSN: 0925-4005.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.snb.2017.09.061>
IF: 5.667 (2017)





4. Nagy, M., Rácz, D., Nagy, Z. L., Nagy, T., **Fehér, P. P.**, Purgel, M., Zsuga, M., Kéki, S.: An acrylated isocyanonaphthalene based solvatochromic click reagent: Optical and biolabeling properties and quantum chemical modeling.
Dyes Pigment. 133, 445-457, 2016. ISSN: 0143-7208.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.dyepig.2016.06.036>
IF: 3.473
5. Nagy, M., Rácz, D., Kovács, S. L., Lázár, L., **Fehér, P. P.**, Purgel, M., Zsuga, M., Kéki, S.: New blue light-emitting isocyanobiphenyl based fluorophores: Their solvatochromic and biolabeling properties.
J. Photochem. Photobiol. A-Chem. 318, 124-134, 2016. ISSN: 1010-6030.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jphotochem.2015.12.006>
IF: 2.625
6. Józsa, É., Purgel, M., Bihari, M., **Fehér, P. P.**, Sustyák, G., Várnagy, B., Kiss, V., Ladó, E., Ósz, K.: Kinetic studies of hydroxyquinone formation from water soluble benzoquinones.
New J. Chem. 38 (2), 588-597, 2014. ISSN: 1144-0546.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/c3nj01274c>
IF: 3.086

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 21,096

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapjául szolgáló közleményekre): 6,245

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

Debrecen, 2019.01.07.

