

Egyetemi doktori (PhD) értekezés tézisei

**Mono és dimer addukt ionok felhasználása apoláris
polimerek és királis molekulák MS
szerkezetvizsgálatára**

Nagy Tibor

Témavezető: Dr. Kéki Sándor



Debreceni Egyetem
Kémiai Tudományok Doktori Iskola
Debrecen, 2016.

Egyetemi doktori (PhD) értekezés tézisei

**Mono és dimer addukt ionok felhasználása apoláris
polimerek és királis molekulák MS
szerkezetvizsgálatára**

Nagy Tibor

Témavezető: Dr. Kéki Sándor



Debreceni Egyetem
Kémiai Tudományok Doktori Iskola
Debrecen, 2016.

I Bevezetés, célkitűzések

Az izomerek tömegspektrometriás megkülönböztetéséhez speciális módszerek szükségesek, mivel azok molekulatömege azonos. A konstitúciós izomerek tandem tömegspektrometriás vizsgálata sok esetben eredményre vezet, de a sztereoizomerek általában nem különböztethetők meg azok fragmentációs mechanizmusa alapján. Lágyszó ionizációs technikák alkalmazása során jellemző a dimer addukt ionok képződése, ami lehetőséget nyújt a diasztereomer addukt ionok létrehozására a különböző sztereoizomerekből. Ezeknek a diasztereomereknek a moláris tömegük azonos, viszont a disszociáció energiaszintjének tanulmányozása vagy izotópjelölés alkalmazása lehetőséget nyújt azok megkülönböztetésére.

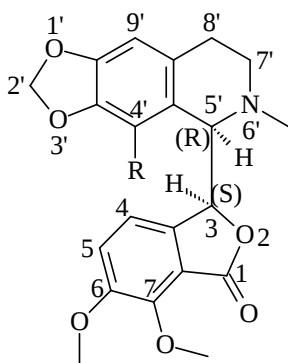
A lágyszó ionizációs módszerek használatával nagy molekulatömegű, nem illékony vegyületek ionizációja is megvalósítható, ezáltal új utat nyitva a makromolekulák szerkezetvizsgálatára. Polimerek elemzésére egyedi lehetőséget biztosít a tömegspektrometria, mivel a különböző polimerizáció fokú polimer láncokat külön-külön detektálhatjuk. Polimerek tömegspektrometriás analízisét elsősorban azok ionizációjának lehetősége határozza meg, amely a polimer polaritásától, a molekulatömegtől és a molekulatömeg eloszlástól függ. Nagy molekulatömegű vegyületek ($M > 5000$ g/mol) vizsgálatára a MALDI (mátrix segített lézer deszorpció, ionizáció) és az ESI (elektroporlasztásos ionizáció) a legalkalmasabb.

Munkám során célom volt a noszkapin és hidrasztin sztereoizomerek megkülönböztethetőségének vizsgálata tandem tömegspektrometriás módszerrel. Ezek a vegyületek két kiralitás centrumot tartalmaznak így négy lehetséges sztereoizomerük létezik. Ezeknek a sztereoizomereknek a fragmentációja azonos így azok nem különböztethetők meg egymástól. Ezeknek a vegyületeknek tömegspektrometriás módszerrel történő megkülönböztetésére az ESI ionforrásban keletkező dimer addukt $[2M+Kat]^+$ ionok vizsgálata ad lehetőséget. A vegyületek önmagukkal és királis segédreagenssel képzett dimereinek relatív stabilitása tandem tömegspektrometriás módszerrel meghatározható. Ennek számszerűsítésére a karakterisztikus ütközési energiák (CE_{50})

használhatóak. A tiszta anyagok CE_{50} értékeinek felhasználásával akár enantiomer tisztaság is meghatározható.

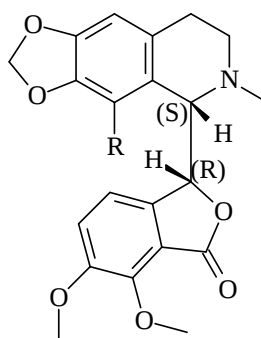
Disszertációm további részében célom volt, az ESI és a DART (valós idejű közvetlen analízis) lágy ionizációs technikák alkalmazhatóságának vizsgálata az apoláris poliizobutilén származékok karakterizálására.

Az irodalom alapján apoláris vegyületek és apoláris polimerek ionizációját még nem írták le DART és ESI ionforrások használatával. Ezek a származékok csak MALDI és APPI (atmoszférikus nyomású fotoionizáció) ionforrás alkalmazásával vizsgálhatóak. A DART és az ESI ionforrás további vizsgálati lehetőségeket is magában rejt. Ezért további célom volt, az ionképződés tanulmányozása mellett a keletkező ionok tandem tömegspektrometriás vizsgálata is. Ezek a vizsgálatok lehetőséget adnak a polimerek szerkezetvizsgálatára és a keletkező ionok stabilitásának vizsgálatával az ionképződés mechanizmusának tanulmányozására is. A vizsgált vegyületek szerkezeteit az **1. és 2. képletábra** mutatja be.



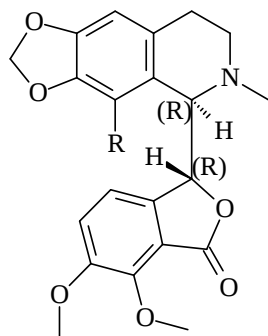
1

R: OMe (-)-alfa-noszkapin
R: H (-)-béta-hidrasztin



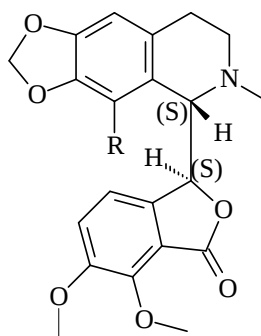
2

R: OMe (+)-alfa-noszkapin
R: H (+)-béta-hidrasztin



3

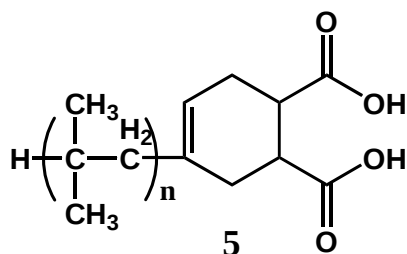
R: OMe (-)-béta-noszkapin
R: H (-)-alfa-hidrasztin



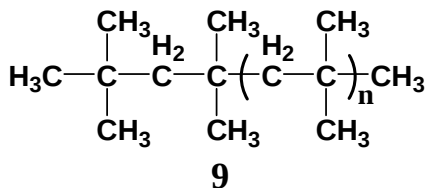
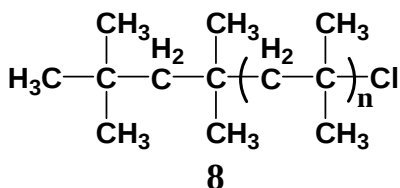
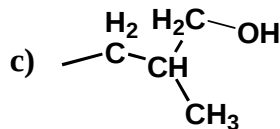
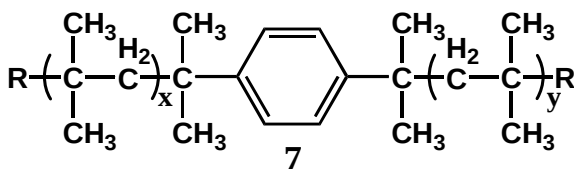
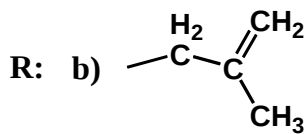
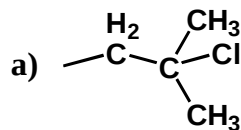
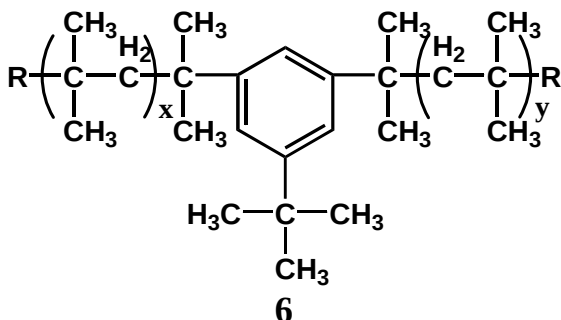
4

R: OMe (+)-béta-noszkapin
R: H (+)-alfa-hidrasztin

1. képletábra A noszkapin és hidrasztin sztereoiszomerek szerkezete



$$n=(x+y)$$



2. képletábra A vizsgált poliizobutilén származékok szerkezete

II A felhasznált módszerek

Az MS és MS/MS méréseket egy BrukerMicroTOF-Q típusú Qq-TOF készülékkel végeztem. Ütközési gázként nitrogént használtam, az ütközési cellában a nyomás $1,2 \times 10^{-2}$ mbar volt. Az eredmények kiértékeléséhez a Bruker DataAnalysis programját használtam. A felhasznált DART, APPI és ESI ionforrásokat is ezzel a készülékkel alkalmaztam.

Az ESI ionforrás (Bruker Daltonik, Bremen, Németország) esetében az alkalmazott feszültség 4 kV volt. Külső kalibrálóként ESI körülmények között képződő nátrium triflouracetát klaszterionjait használtam.

A DART SVP ionforrást az amerikai IonSense cég gyártotta (Saugus, MA, USA). A polimer mintákat manuálisan tartottam az ionforrásba. A gerjesztő gáz hélium volt (5.0, tisztaság > 99,999%), pozitív és negatív ionmódban egyaránt. A vizsgálatok elvégzéséhez az ionforrás hőmérsékletét 300°C és 450 °C között változtattam.

Az APPI ionforrás szintén Amerikából származik (Syagen Technology, Tustin, CA, USA). A minta áramlási sebessége 25 µL/perc, a segédáram áramlási sebessége 200 µL/perc volt. Az APPI ionforrás hőmérséklete 450°C volt. A tömegspektrumokat külső standard segítségével kalibráltam (APPI, APCI kalibrant)

III Új tudományos eredmények

III.1 Noszkapin és hidrasztin sztereoizomerek megkülönböztetése tandem tömegspektrometriás módszerrel

III.1.1 Meghatároztam a homodimerek disszociációjának karakterisztikus ütközési energiáit (CE_{50}), amelyek alapján megállapítottam, hogy egymástól a diasztereomerek megkülönböztethetők.

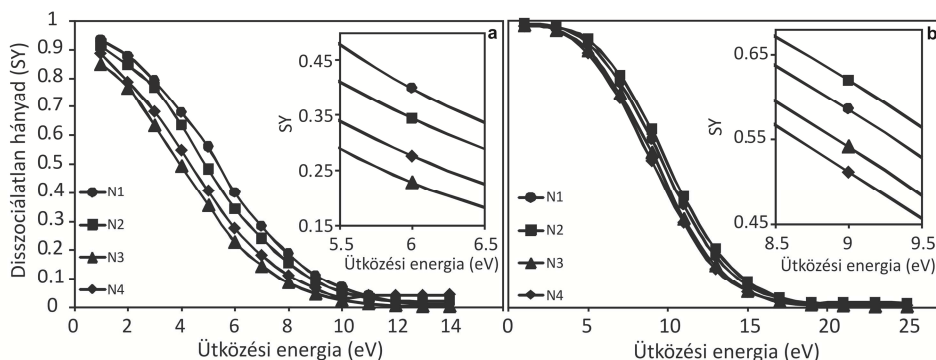
Munkám során a noszkapin és hidrasztin sztereoizomerek megkülönböztethetőségét vizsgáltam tandem tömegspektrometriás módszerrel.

Méréseimet pozitív ionmódban végeztem Li^+ , Na^+ , K^+ és Cs^+ ionok alkalmazásával. A dimer addukt ionok disszociációja során az egyetlen fragmentációs lépés azok disszociációja volt, a Li^+ ion kivételével. Ekkor a noszkapin és a hidrasztin kis mértékű fragmentációja is lejátszódott nagyobb ütközési energiák esetében.

Megállapítottam, hogy az enantiomer párok homodimereinek a CE_{50} értékei között nincs különbség az alkalmazott mérési körülmények között, viszont a diasztereomerek megkülönböztethetők. Az SY görbék alapján megállapítottam, hogy a sztereoizomerek megkülönböztetésére alkalmasabbak a Na^+ ionnal képzett addukt ionok, mint az $[M+Li]^+$ addukt ionok. A többi kation használatával és a hidrasztin esetében is hasonló SY görbéket kaptam, ebben az esetben is szignifikáns különbséget találtam a diasztereomerek CE_{50} értékei között. A CE_{50} értékek alapján meghatároztam, hogy a dimer addukt ionok stabilitása az alkalmazott kationok minőségével a következőképpen változik: $Li^+ > Na^+ > K^+ > Cs^+$. A dimerek fragmentációjához szükséges aktiválási energiát egy ütközési modell alkalmazásával számoltam ki. Ezeknek a számításoknak az eredményeit kvantumkémiai számításokkal is alátámasztottam.

III.1.2 Királis segédreagensek jelenlétében képződő heterodimerek segítségével kimutattam, hogy az enantiomer párok is megkülönböztethetők, és a diasztereomerek CE_{50} értékei között található különbségek is növelhetők

Megállapítottam, hogy királis segédreagens alkalmazásával keletkező dimer addukt ionok is alkalmasak a noszkapin és hidrasztin sztereoizomerek megkülönböztetésére, emellett ebben az esetben az enantiomer párok CE_{50} értékei között is szignifikáns különbséget találtam. Királis segédreagensként L-, D-tirozint és L-, D-lizint használtam. A noszkapin-L-tirozin Na^+ és Li^+ ionnal képzett heterodimereinek SY görbéi az **1. ábrán** láthatóak.



1. ábra A noszkapin-L-tirozin Na^+ (a) és Li^+ (b) ionnal képzett vegyes dimereinek az SY görbéi. A kiegészítő ábrákon a nagyított görbék láthatóak 5,5-6,5 és 8,5-9,5 eV ütközési energia tartományokban.

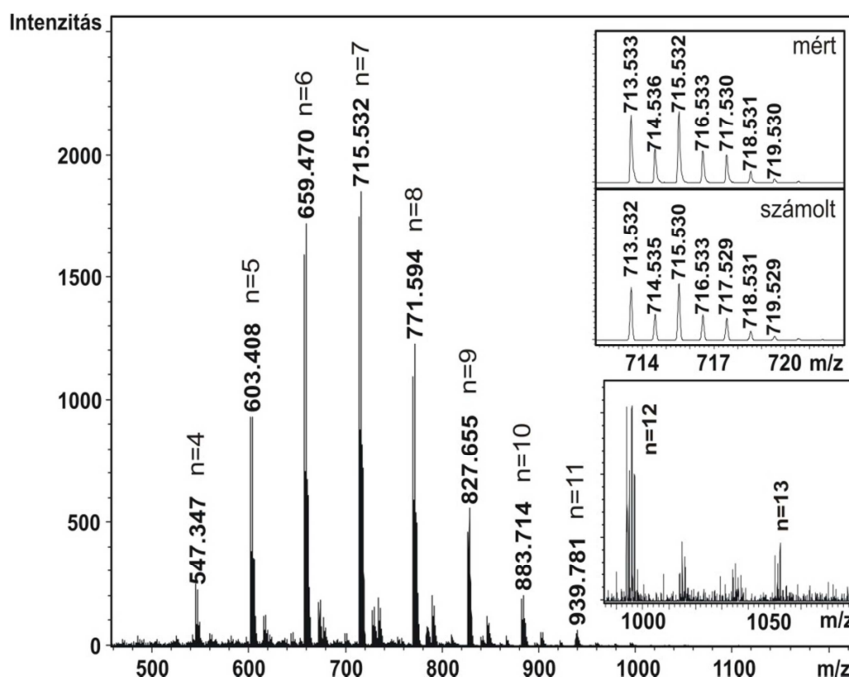
III.1.3 Kétkomponensű minták esetében módszert dolgoztam ki a sztereoizomer tisztaság meghatározására a CE_{50} értékek felhasználásával.

Megállapítottam, hogy lineáris összefüggés található kétkomponensű minták CE_{50} értékei és azok összetételei között, így azok alkalmazhatóak sztereoizomer tisztaság meghatározására is. Ennek vizsgálatára ismert összetételű kalibráló sorozatot készítettem, majd ismert összetételű mintákkal teszteltem azt. Ezek alapján megállapítottam, hogy a sztereoizomer tisztaság jó pontossággal meghatározható.

III.2 DART ionizáció alkalmazása apoláris poliizobutilén származékok ionizációjára

III.2.1 Megállapítottam, hogy negatív ionmódban (DART-(-)MS) az intakt polimerek ionizálhatóak $[M+Cl]^-$ addukt ionok képződésével, vagy deprotonálódással.

Bizonyítottam, hogy a DART ionforrás használata lehetőséget nyújt poliizobutilén származékok gyors karakterizálására. Negatív ionmódban $[M+Cl]^-$ típusú addukt ionok keletkeztek elsősorban, de a szukcinsav végcsoporttal rendelkező poliizobutilén származék (PIBSA, 5.) esetében csak a deprotonált ionok $[5-H]^-$ jelentek meg. Ebben az ionmódban akár az 1000 Da tömegű polimerek is ionizálhatóak. A 2. ábrán a klór telekelikus poliizobutilén (6a) DART-(-)MS spektruma látható.



2. ábra A klór telekelikus poliizobutilén (6a) DART-(-)MS tömegspektruma.

A spektrumon a m/z értékek felett feltüntetett számok (n) a megfelelő polymerizáció fokot jelölik. A megjelenő csúcsok közötti különbség és a pontos tömeg alapján egyértelműen azonosítható a klór telekelikus

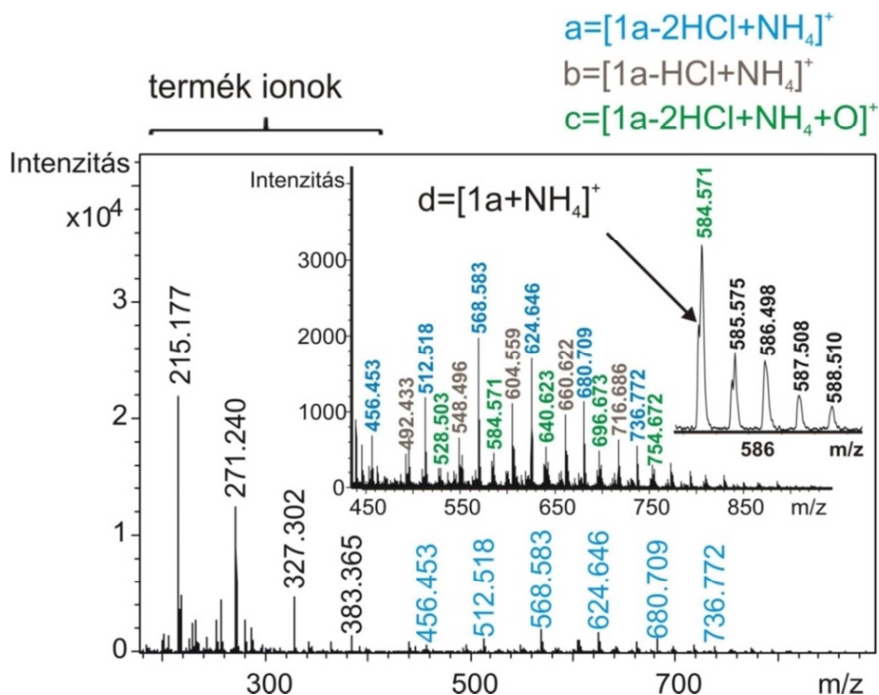
poliizobutilén (**6a**). Kimutattam, hogy negatív ionmódban a vizsgált polimerek fragmentáció nélkül tanulmányozhatóak.

III.2.2 Megállapítottam, hogy a negatív ionmódban keletkező addukt ionok nem alkalmasak fragmentációs vizsgálatok elvégzésére

Kimutattam, hogy a klorid ionnal képzett addukt ionok fragmentációjának első és egyetlen lépése a klorid ion lehasadása volt a polimer láncról. Ezzel szemben a PIBSA polimer (**5**) esetében kis mértékű fragmentációt tapasztaltam, amely során a polimer CO₂ molekulát veszített. Meghatároztam, hogy további fragmentáció nem játszódik le. Megállapítottam, hogy a negatív ionmódban képzett ionok nem alkalmasak fragmentációs vizsgálatok elvégzésére.

III.2.3 Kimutattam, hogy pozitív ionmódban a poliizobutilén származékok ammónium ionnal alkotnak addukt ionokat NH₄Cl hozzáadásával.

Megállapítottam, hogy pozitív ionmódban NH₄⁺ ionnal képzett addukt ionok detektálhatók. Kimutattam, hogy pozitív ionmódban nem játszódott le a PIBSA (**5**) polimer ionizációja. Ebben az esetben a polimer sorozatok mellett termék ionok is megjelentek, amelyekből megállapítottam, hogy ezek az addukt ionok alkalmasak fragmentációs vizsgálatokra. A keletkező termék ionok mellett további sorozatok is keletkeztek az ionizáció során, ahogy az a **3. ábrán**, a klór telekelikus poliizobutilén (**6a**) DART-(+)MS spektrumán látható.



3. ábra A klór telekelikus poliizobutilén (6a) DART-(+)MS spektruma.

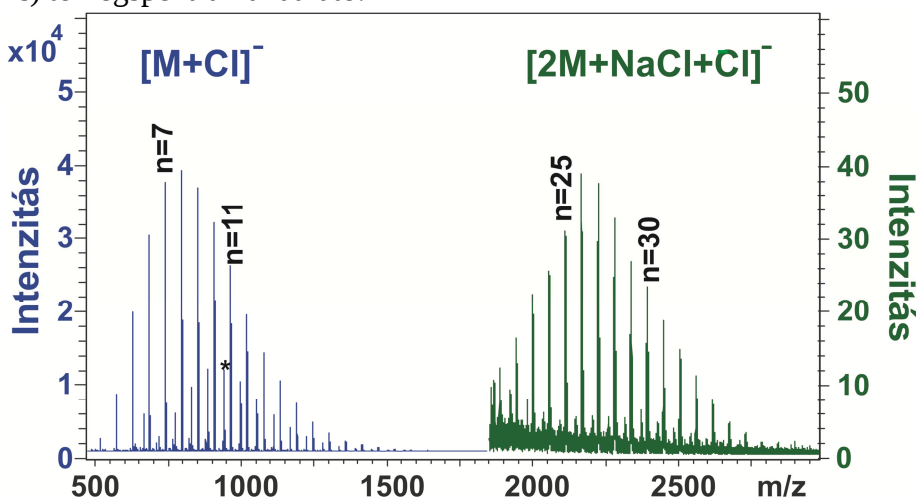
A klór telekelikus poliizobutilén (6a) spektrumán 4 sorozatot azonosítottam. Az egyik a klór telekelikus poliizobutilén ($[6a+NH_4]^+$), további két sorozat HCl veszteséssel keletkezik ($[6a-HCl+NH_4]^+$, $[6a-2HCl+NH_4]^+$) és az ionforrásban lejátszódó oxidációs folyamatok következtében az $[6a-2HCl+O+NH_4]^+$ sorozatot is detektáltam. Az olefin telekelikus poliizobutilén (6b) esetében az $[6b+2O+NH_4]^+$ sorozat is megjelent. Az azonosított sorozatoknak tanulmányoztam a tandem tömegspektrometriás viselkedését. Kimutattam, hogy a fő fragmentációs lépés a poliizobutilén karok lehasadása a polimerekről stabil benzil-kation képződése mellett. A fragmentáció alapján meghatároztam, hogy az oxidáció minden esetben az olefin végcsoportokon játszódtott le. Ezt igazolja, hogy az polimerekből nem keletkezik olyan termékion, ami az oxidált kumil egységhez tartozna. Az izobutilén láncok lehasadásával információ nyerhető azok hosszúság szerinti eloszlásáról is. Megállapítottam, hogy az általam vizsgált kétkarú poliizobutilén származékok nem szimmetrikusak, tehát a polimerizáció kezdeti szakaszán a láncok növekedési sebessége nem azonos.

III.3 Poliizobutilén származékok ionizálása ESI-MS módszerrel

III.3.1 Megállapítottam, hogy ESI körülmények között a különböző poliizobutilén származékok klorid és nitrát ionokkal alkotnak addukt ionokat.

Bebizonyítottam, hogy apoláris polimerek ESI ionforrásban negatív ionmódban addukt ionokat képeznek Cl^- és NO_3^- ionokkal.

Megállapítottam, hogy az ESI ionforrásban lejátszódó ionizációs folyamatokat nagy mértékben befolyásolja az alkalmazott oldószer vagy oldószer elegy minősége. Az ionizációhoz ebben az esetben szükség volt poláris oldószer jelenlétére, de a vizsgált poliizobutilén származékok oldhatósága korlátozott az ESI mérésekhez leggyakrabban alkalmazott oldószerekben. Ezért vizsgálataim során aceton:diklórmétán oldószer elegyet használtam a megfelelő mértékű ionizáció eléréséhez. Emellett megvizsgáltam egyéb oldószert, mint az etanol és 2-propanol alkalmazhatóságát is. A 4. ábrán a hidroxil telekelikus poliizobutilén (7c) tömegspektruma látható.



4. ábra A hidroxil telekelikus poliizobutilén (7c) tömegspektruma etanolban

A 4. ábrán megfigyelhető, hogy a hidroxil telekelikus polimer (7c) ionizációjakor két sorozat jelenik meg. A Cl^- ionnal képzett addukt ionok mellett megjelennek az $[\text{7c}+\text{NO}_3]^-$ addukt ionok is. Emellett egy másik sorozatot is azonosítottam 1800-2700 m/z tartományban. A mért m/z értékek alapján ezek az ionok a $[2\cdot\text{7c}+\text{NaCl}+\text{Cl}]^-$ összetételnek felelnek

meg. Az ESI ionforrásban jellemző a dimer addukt ionok megjelenése, de ilyen típusú és tömegű vegyületek esetében az irodalomban nem található a dimer képződésre utalás, tehát elsőként igazoltam ezeknek a típusú addukt ionoknak a képződését ESI körülmények között.

III.3.2 Megállapítottam, hogy addukt ionok képződésénél használt oldószer elegyben szükség van poláris oldószer jelenlétére is.

Vizsgáltam az aceton:dilkórmétán oldószer elegy összetételének hatását az ionizációra 0-90 (V/V%) aceton tartalom esetében. Azt tapasztaltam, hogy kis mennyiségű aceton mellett (<20 V/V%) csak kis intenzitású jel detektálható, viszont az aceton mennyiségének növelésekor a megjelenő sorozatok intenzitása is növekszik. Például a hidroxil telekelikus poliizobutilén (**7c**) intenzitása az aceton mennyiségével folyamatosan nő, viszont a klór telekelikus poliizobutilén (**7a**) intenzitása 60 V/V% aceton tartalomnál maximumot ér el. Ez a jelenség annak köszönhető, hogy a két polimer oldhatósága különböző az alkalmazott oldószer elegyekben.

III.3.3 Meghatároztam a klorid és nitrát ionokkal képzett addukt ionok relatív stabilitását.

Meghatároztam a keletkező addukt ionok relatív stabilitását. Ehhez megvizsgáltam az ionok ütközés indukált disszociációját (CID) MS és MS/MS módban is. Normál MS módban az ütközési energia növelésével változott a mért számátlag molekulatömeg, mivel a megjelenő sorozat egyre nagyobb m/z tartományba tolódik el. Ennek magyarázata, hogy a kisebb polimereknek kisebb a rezgési szabadsági fokok száma, így ezekről az addukt ionokról már kisebb ütközési energia alkalmazása mellett is lehasadt az anion. Megállapítottam, hogy Cl^- ionnal képzett addukt ionok esetében kisebb mértékű a számátlag molekulatömeg változás egységnyi ütközési energia mellett, mint a $[\text{M}+\text{NO}_3]^-$ addukt ionoknak. Ebből arra következtettem, hogy a Cl^- ionnal képzett addukt ionok disszociációs energiája nagyobb, mint a megfelelő $[\text{M}+\text{NO}_3]^-$ ionoké. Ezeket az eredményeket további kvantumkémiiai számításokkal is alátámasztottam.

IV Az eredmények alkalmazásainak lehetőségei

A noszkapin és hidrasztin sztereoizomerek megkülönböztetésére kidolgozott tömegspektrometriás módszer új szemszögből közelíti meg a tömegspektrometria alkalmazhatóságát királis vegyületek megkülönböztetésére. A módszer egyéb királis vegyületek esetében is alkalmazható. A karakterisztikus ütközési energia és az enantiomer tisztaság között megállapított lineáris kapcsolat lehetőséget nyújthat különböző vegyületek gyors enantiomer tisztaság ellenőrzésére is.

Az apoláris polimerek ionizálásával bizonyítottam, hogy belőlük DART és ESI körülmények között is képződhetnek addukt ionok. Ezek a vizsgálatok új lehetőséget nyitnak az apoláris polimerek tömegspektrometriás vizsgálatában. A sorozatok karakterizálása mellett a keletkező addukt ionok további tandem tömegspektrometriás mérések elvégzésére is alkalmasak. Ezáltal ezekről a polimerekről szerkezeti információk is nyerhetők. Tömegspektrometriás szempontból további jelentősége is van ezeknek a vizsgálatoknak, mivel bebizonyítottam, hogy adott körülmények között képződnek a megfelelő addukt ionok apoláris komponensek esetében is, ezáltal a poliizobutilén származékokkal kibővítve a DART és ESI ionforrással vizsgálható vegyületek sorát.

Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani az alábbi pályázatoknak a dolgozat elkészítéséhez nyújtott anyagi támogatást: OTKA K-101850 számú pályázatok, valamint a TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0036 és TÁMOP-4.2.2.C-11/1/KONV-2012-0010 számú pályázatoknak, amelyek az Európai Unió támogatásával és az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósultak meg.



DEBRECENI EGYETEM
EGYETEMI ÉS NEMZETI KÖNYVTÁR



Nyilvántartási szám: DEENK/163/2016.PL
Tárgy: PhD Publikációs Lista

Jelölt: Nagy Tibor
Neptun kód: V3BX4M
Doktori Iskola: Kémiai Tudományok Doktori Iskola

A PhD értekezés alapjául szolgáló közlemények

Idegen nyelvű tudományos közlemény(ek) külföldi folyóiratban (3)

1. Nagy, L., **Nagy, T.**, Deák, G., Kuki, Á., Purgel, M., Narmandakh, M., Iván, B., Zsuga, M., Kéki, S.:
Can Nonpolar Polyisobutylenes be Measured by Electrospray Ionization Mass Spectrometry?
Anion-Attachment Proved to be an Appropriate Method.
J. Am. Soc. Mass Spectrom. 27 (3), 432-442, 2016. ISSN: 1044-0305.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/s13361-015-1307-7>
IF:2.945 (2014)
2. Nagy, L., **Nagy, T.**, Deák, G., Kuki, Á., Antal, B., Zsuga, M., Kéki, S.: Direct analysis in real time
mass spectrometry (DART-MS) of highly non-polar low molecular weight polyisobutylenes.
J. Mass Spectrom. 50 (9), 1071-1078, 2015. ISSN: 1076-5174.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/jms.3621>
IF:2.379 (2014)
3. **Nagy, T.**, Kuki, Á., Antal, B., Nagy, L., Purgel, M., Sipos, A., Nagy, M., Zsuga, M., Kéki, S.: Chiral
differentiation of the noscapine and hydrastine stereoisomers by electrospray ionization
tandem mass spectrometry.
J. Mass Spectrom. 50 (1), 240-246, 2015. ISSN: 1076-5174
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/jms.3527>
IF:2.379 (2014)





DEBRECENI EGYETEM
EGYETEMI ÉS NEMZETI KÖNYVTÁR



További közlemények

Idegen nyelvű közlemény(ek) külföldi folyóiratban (10)

4. Antal, B., Kuki, Á., Nagy, L., **Nagy, T.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Rapid detection of hazardous chemicals in textiles by direct analysis in real-time mass spectrometry (DART-MS). *Anal. Bioanal. Chem. Epub*, 1-10, 2016. ISSN: 1618-2642.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1007/s00216-016-9603-z>
IF:3.436 (2014)
5. **Nagy, T.**, Antal, B., Dékány-Adamoczky, A., Karger-Kocsis, J., Zsuga, M., Kéki, S.: Uncatalyzed reactions of 4,4'-diphenylmethane-diisocyanate with polymer polyols as revealed by matrix-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry. *RSC Adv.* 6 (52), 47023-47032, 2016. ISSN: 2046-2069.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/C6RA06671B>
IF:3.84 (2014)
6. Hermenean, A., Damache, G., Albu, P., Ardelean, A., Ardelean, G., Puiu Ardelean, D., Horge, M., **Nagy, T.**, Braun, M., Zsuga, M., Kéki, S., Costache, M., Dinischiotu, A.: Histopathological alterations and oxidative stress in liver and kidney of *Leuciscus cephalus* following exposure to heavy metals in the Tur River, North Western Romania. *Ecotox. Environ. Safe.* 119, 198-205, 2015. ISSN: 0147-6513.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ecoenv.2015.05.029>
IF:2.762 (2014)
7. **Nagy, T.**, Antal, B., Czifrák, K., Papp, I., Karger-Kocsis, J., Zsuga, M., Kéki, S.: New insight into the kinetics of diisocyanate-alcohol reactions by high-performance liquid chromatography and mass spectrometry. *J. Appl. Polym. Sci.* 132 (2015), 42127 (9), 9. ISSN: 0021-8995.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/app.42127>
IF:1.768 (2014)
8. Kuki, Á., Nagy, L., **Nagy, T.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Detection of nicotine as an indicator of tobacco smoke by direct analysis in real time (DART) tandem mass spectrometry. *Atmos. Environ.* 100, 74-77, 2015. ISSN: 1352-2310.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2014.10.046>
IF:3.281 (2014)

Cím: 4032 Debrecen, Egyetem tér 1. □ Postacím: 4010 Debrecen, Pf. 39. □ Tel.: (52) 410-443
E-mail: publikaciok@lib.unideb.hu □ Honlap: www.lib.unideb.hu



DEBRECENI EGYETEM
EGYETEMI ÉS NEMZETI KÖNYVTÁR



9. Banerjee, S., Tripathy, R., Cozzens, D., **Nagy, T.**, Kéki, S., Zsuga, M., Faust, R.: Photoinduced Smart, Self-Healing Polymer Sealant for Photovoltaics.
ACS Appl. Mater. Interfaces. 7 (3), 2064-2072, 2015. ISSN: 1944-8244.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1021/am508096c>
IF: 6.723 (2014)
10. Shemirani, G., Kuki, Á., Nagy, L., **Nagy, T.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Electrospray ionization tandem mass spectrometry of the star-shaped propoxylated diethylenetriamine polyols.
J. Mass Spectrom. 50 (7), 914-917, 2015. ISSN: 1076-5174.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/jms.3601>
IF: 2.379 (2014)
11. Nagy, D., **Nagy, T.**, Balogh, A., Falussy, C., Posta, J.: Atomization of Cadmium Compounds Under Reactive and Inert High-Temperature Environment with Stationary Sample Introduction.
Appl. Spectrosc. 68 (3), 272-279, 2014. ISSN: 0003-7028.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1366/13-07151>
IF: 1.875
12. Kuki, Á., Nagy, L., **Nagy, T.**, Zsuga, M., Kéki, S.: Arm-length distribution in four-arm star-propoxylated ethylenediamine polyol by tandem mass spectrometry.
J. Mass Spectrom. 48 (10), 1125-1127, 2013. ISSN: 1076-5174.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/jms.3259>
IF: 2.709
13. Nagy, L., Kuki, Á., **Nagy, T.**, Mándi, A., Deák, G., Nagy, M., Batta, G., Zsuga, M., Kéki, S.: Collision-induced dissociation study of isosilychristin, a constituent of Silymarin.
Rapid Commun. Mass Spectrom. 27 (12), 1413-1416, 2013. ISSN: 0951-4198.
DOI: <http://dx.doi.org/10.1002/rcm.6581>
IF: 2.642

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora: 39,118

A közlő folyóiratok összesített impakt faktora (az értekezés alapján szolgáló közleményekre): 7,703

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

Debrecen, 2016.06.16.

Cím: 4032 Debrecen, Egyetem tér 1. □ Postacím: 4010 Debrecen, Pf. 39. □ Tel.: (52) 410-443
E-mail: publikaciok@lib.unideb.hu □ Honlap: www.lib.unideb.hu

