

# Kopolimer tömegspektrumok automatikus kiértékelése

## Automatic evaluation of copolymer mass spectra

RÓTH Gergő, NAGY Tibor, Ákos KUKI, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem Alkalmazott Kémiai Tanszék, Debrecen 4032 Egyetem tér 1

Tel.: (36)-52-512900/22454

### ABSTRACT

In our work, the primary goal was to develop an appropriately flexible automated algorithm for mass spectrometric analysis of copolymer systems. To solve the problem, it was necessary to model the appropriate isotope distribution, to develop a stable method to find non-isotope peaks and to solve the original mass spectrum as well as to identify the unknown peaks. After identification, the correct subroutines to calculate additional information parameters was programmed. All mass spectra were tested using the theoretical spectra and our measured *b*-ethylene-glycol-*b*-propylene glycol copolymer systems.

**Keywords:** copolymer, mass spectrometry, polymer characterization

### KIVONAT

Munkánk során az elsődleges cél az volt, hogy egy megfelelően rugalmas automata algoritmust dolgozzunk ki kopolimer rendszerek tömegspektrumának analízisére. A feladat megoldásához szükség volt a megfelelő izotóp eloszlás modellezésére, egy stabil módszer fejlesztésére a nem izotóp csúcsok azonosításához, az eredeti tömegspektrum és az azonosított csúcsok kezelésének megoldására. Ezt követően alkalmas szubrutinok állítottunk elő a további információt hordozó paraméterek kiszámításához. Mindezt elméleti és általunk mért *b*-etilén-glikol-*b*-propilén-glikol kopolimer rendszerekkel teszteltük.

**Kulcsszavak:** kopolimer, tömegspektrometria, polimer karakterizálás

### Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: NKFI FK-132385, valamint a GINOP-2.3.2-15-2016-00041 és a GINOP 2.3.3-15-2016-00021 pályázatoknak, amelyek az Európai Unió támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósultak meg. Továbbá munkánkat az MTA Bolyai János Kutatói Ösztöndíj is támogatta (Nagy Tibor), a munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-5 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült (Nagy Tibor).