

Neurális hálóval támogatott gélpermeációs kromatográfias kopolimer analízis

Neural-network assisted copolymer analysis with gelpermeation chromatography

RÓTH Gergő^{1,2}, NAGY Tibor¹, BENEDEK Máté¹, KUKI Ákos¹,
TIMÁRI István³, ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹Alkalmazott Kémiai Tanszék, Természettudományi és Technológiai kar, Debreceni Egyetem,
Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország, +36 52 512 900/22454

²Kémiai Doktori Iskola, Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen,
Magyarország, +36 52 512 900/22454

³Szerves Kémiai Tanszék, Természettudományi és Technológiai kar, Debreceni Egyetem,
Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország, +36 52 512 900/22454

ABSTRACT

Copolymer analysis with gel permeation chromatography (GPC) involves a challenging problem since the hydrodynamic radius of copolymers depends on both the composition and molecular weight. The shape of copolymers in solution depends on the polarity of the copolymer and the applied solution or solution mixtures. Thus different eluents ((DMF, ACN-H₂O (60:40), THF-DMSO-piperidine (94:5:1)) were applied for the GPC analysis of poloxamers. Based on the GPC measurements the characteristic parameters (M_n , M_w , M_p) of poloxamers were determined. Simultaneously, the detailed characterization of the copolymers was carried out by MALDI-TOF MS, applying our recently developed algorithm. In addition, the analysis was validated by NMR measurements. In order to find the connection between the GPC chromatograms and copolymer quantities the data was evaluated by a neural network. We showed that the three GPC runs are capable of characterizing copolymers. Furthermore, we also found that the presence of diblock copolymer contamination is possible to identify in PEO-PPO triblock copolymers.

Keywords: neural network, copolymer analysis, GPC, gel permeation chromatography, poloxamer

KIVONAT

A kopolimer analízis gélpermeációs kromatográfiával (GPC) egy igen nehéz problémakört foglal magába, mivel a kopolimerek vizsgálatára korlátozottan alkalmazható, azok hidrodinamikai átmérője az összetétel és a méret függvénye. A kopolimerek oldatban felvett alakját meghatározza a kopolimer és az oldószer/oldószer elegy polaritása. Ezért különböző oldószerekben (DMF, ACN-H₂O (60:40), THF-DMSO-piperidin (94:5:1)) vettük fel poloxamerek GPC kromatogramját. Meghatároztuk a GPC-vel kinyerhető jellemző paramétereket (M_n , M_w , M_p). Párhuzamosan elvégeztük a kopolimerek részletes elemzését MALDI-TOF MS módszerrel, amelyre saját szoftveres analízist alkalmaztunk. Továbbá NMR mérésekkel validáltuk a kapott adatokat. Az eredmények értékeléséhez neurális hálót alkalmaztunk. Bizonyítottuk, hogy a kidolgozott módszer alkalmas a kopolimerek részletes elemzésére a három különböző oldószerben felvett GPC kromatogramok alapján. Továbbá meghatároztuk, hogy akár a diblokk kopolimer szennyezők jelenléte is azonosítható PEO-PPO triblokk kopolimer rendszerekben.

Kulcsszavak: neurális háló, kopolimer analízis, GPC, gélpermeáció, polidiszperzitás arány, PDR, poloxamer

Köszönetnyilvánítás: Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: NKFI FK-132385, valamint a GINOP-2.3.2-15-2016-00021 pályázatnak, amelyek az Európai Unió támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósultak meg. Továbbá munkánkat az MTA Bolyai János Kutatói Ösztöndíj BO/00212/20/7 (Nagy Tibor) és BO/00372/20/7 (Timári István) is támogatta, a munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-22-05-DE-426 (Nagy Tibor), ÚNKP-22-5-DE-424 (Timári István) és ÚNKP-21-2-II-DE-227 (Benedek Máté) kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült, valamint a TKP2020-NKA-04 számú projekt a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból biztosított támogatással, a 2020-4.1.1-TKP2020 pályázati program finanszírozásában valósult meg.