

Kopolimerek elemzése gél permeációs kromatográfiával

Analysis of copolymers by gel permeation chromatography

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

¹Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai Kar, Alkalmazott Kémiai Tanszék, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

²Debreceni Egyetem, Kémiai Doktori Iskola, 4032 Debrecen, Egyetem tér 1.

ABSTRACT

Gel permeation chromatography is a commonly used technique for molecular weight analysis of polymers and copolymers, but it cannot provide important information such as the composition of copolymers. However, we have established a method based on gel permeation chromatography and neural networks for the detailed characterization of copolymers. This was based on GPC measurements with eluents of different polarities. Artificial neural networks were developed to process the data obtained from parallel GPC measurements and to determine the molecular weight and chemical composition of the copolymers. The target values of the neural networks were obtained by MALDI-TOF mass spectrometry and NMR spectroscopy. The main advantage of our work is that the database containing our data obtained by GPC, MALDI-TOF MS and ¹H NMR can be accessed and extended at any time with additional experimental results, and the mass range and accuracy of the neural networks can be further improved. All measured data and Excel documents can be made public, allowing direct practical application of the developed neural networks, for example, a poloxamer measured by three GPC methods can be characterized without further injections and other measurements.

Keywords: poloxamer, characterization, neural network, MALDI-TOF MS, NMR spectroscopy

ÖSSZEFOGLALÓ

A gél permeációs kromatográfia egy általánosan használt eljárás polimerek és kopolimerek molekulatömegének analíziséhez, azonban olyan fontos információkat, mint például kopolimerek összetétele, nem tud szolgáltatni. Azonban létrehoztunk egy gél permeációs kromatográfián és neurális hálók alkalmazásán alapuló módszert a kopolimerek részletes karakterizálásra. Ennek alapját különböző polaritású eluensekkel végzett GPC-mérések jelentették. Mesterséges neurális hálókat fejlesztettünk ki a párhuzamos GPC-s mérések során kapott adatok feldolgozására, valamint a kopolimerek molekulatömegének és kémiai összetételének meghatározására. A neurális hálók célértékeit MALDI-TOF tömegspektrometriával és NMR spektroszkópiával kaptuk. Munkánk legfőbb előnye, hogy a GPC, MALDI-TOF MS és ¹H NMR által kapott adatainkat tartalmazó adatbázis bármikor elérhető és bővíthető további kísérleti eredményekkel, valamint a neurális hálók tömegtartománya és pontossága is tovább javítható. Az összes mért adat és Excel-dokumentum nyilvánossá tehető, ami lehetővé teszi a kifejlesztett neurális hálók közvetlen gyakorlati alkalmazását, például egy három GPC módszerrel lemért poloxamer további injektálások és egyéb mérések nélkül karakterizálható.

Kulcsszavak: poloxamer, karakterizálás, neurális háló, MALDI-TOF MS, NMR spektroszkópia

Köszönetnyilvánítás: A munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-2-II-DE-227 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült. Továbbá köszönet illeti a következő pályázatokat a munka során nyújtott anyagi támogatásért: TKP2020-NKA-04, BO/00212/20/7, ÚNKP-22-05-DE-426, illetve NKFI FK-132385 és GINOP 2.3.3-15-2016-00021, amelyek az Európai Unió támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósultak meg. Végül köszönetet mondunk a BASF-nek (Németország) az ajándékba kapott számos mintáért, valamint a MOL Petrolkémia Zrt.-nek az általuk nyújtott anyagi támogatásért is.