

Kopolimer MALDI-TOF-MS spektrumok elemzése

Analysis of copolymer MALDI-TOF-MS spectra

RÓTH Gergő^{1,2}, NAGY Tibor¹, KUKI Ákos¹, PARDI-TÓTH Veronika Csilla¹,
NYUL Dávid^{1,2}, KALDYBE Kyzy Zuura^{1,2}, PALACIOS Isaac Alexander Iglesias¹,
BENEDEK Máté^{1,2}, ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

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

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

ABSTRACT

The use of copolymers as smart materials is becoming increasingly common. For this reason, the analysis of the structure of copolymers and the development of related analytical methods and processing algorithms are essential for precise problem solving. Therefore, our research group has developed a completely new mass spectrometric method that is able to identify the components of the copolymer from MALDI-TOF-MS spectra measured in linear mode and to calculate the various polymer characteristics, such as the number average molecular weight (M_n), the number of monomers in the chains and their relative ratio and distribution, or the polydispersity ratio (PDR). We also performed a robustness test on the new method, where we simulated measurement noise and calibration deviations on the system, which showed that the procedure is able to filter out deviations and errors due to the redundant data set. In addition, our results were validated using the ¹H-NMR method. The upper evaluation limit of the method is 20,000 Da, which dramatically increases the measurement range of the MALDI-TOF MS method.

Keywords: copolymer, mass spectrometry, MALDI-TOF-MS, polydispersity ratio

ÖSSZEFOGLALÓ

A kopolimerek mint intelligens anyagok felhasználása napjainkban egyre elterjedtebbek. Ennek okán a kopolimerek szerkezetének analízise és a hozzá kapcsolódó analitikai módszerek és feldolgozási algoritmusok fejlesztése elengedhetetlen a precíziós problémamegoldás során. Emiatt kutatócsoportunk egy teljesen új tömegspektrum eljárást fejlesztett mely képes lineáris módban mért MALDI-TOF-MS spektrumokból a kopolimer komponenseit azonosítani és a különböző polimer jellemzőket, mint számátlag molekulatömeg (M_n), monomerek darabszáma a láncokban és ezek egymáshoz viszonyított aránya és eloszlása, vagy polidiszperzitás arány (PDR), kiszámítani. Az új módszeren robusztussági vizsgálatot is végeztünk, ahol mérési zajt, illetve kalibrációs eltérést szimuláltunk a rendszeren, melyben megmutatkozott, hogy a redundáns adathalmazból adódóan az eljárás képes kiszűrni az eltéréseket és hibákat. Továbbá eredményeinket ¹H NMR módszerrel validáltuk. A módszer felső értékelési határa 20 000 Da, mely drasztikusan növeli a MALDI-TOF MS módszer mérési tartományát.

Kulcsszavak: kopolimer, tömegspektrometria, MALDI-TOF-MS, polidiszperzitás arány

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) is támogatta, a munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-22-05-DE-426 (Nagy Tibor) kódszámú Új Nemzeti Kiválóság

Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával valamint az RRF-2.3.1-21-2022-00009, azonosítószámú, Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium megnevezésű projekt a Széchenyi Terv Plusz program keretében, az Európai Unió Helyreállítási és Ellenállóképességi Eszközének támogatásával valósult meg. Továbbá köszönet illeti a MOL Petrolkémia Zrt-t az általa nyújtott támogatásért.