

# 4-akriol-morfolin és N-izopropil-akrilamid blokk kopolimerek szerkezet-aggregációs hőmérséklet összefüggésének feltérképezése

## Mapping the structure-aggregation temperature relationship of 4-acryloylmorpholine and N-isopropylacrylamide block copolymers

NAGY Tibor<sup>1</sup>, RÓTH Gergő<sup>1</sup>, KUKI Ákos<sup>1</sup>, PARDI-TÓTH Veronika<sup>1,2</sup>, NYUL Dávid<sup>1,2</sup>, KALDYBEK KYZY Zuura<sup>1,2</sup>, BENEDEK Máté<sup>1,2</sup>, ZSUGA Miklós<sup>1</sup>, KÉKI Sándor<sup>1</sup>

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

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

### ABSTRACT

Block copolymers represent a significant class of smart polymers. The block structure enables the integration of properties of distinct polymer chains and tuning of the properties. In our research, we prepared 58 4-acryloylmorpholine and N-isopropyl acrylamide homo- and block copolymers (PNAM, PNIPAM, and PNAM-*b*-PNIPAM) with a range of number-average molecular weights between 1400 and 16000 g/mol. An algorithm capable of processing MALDI-TOF MS spectra was developed for the detailed analysis of the copolymers, thus creating the possibility to get detailed insight into copolymer properties. This method can also be used to determine the composition of copolymers and the distribution of monomers. The investigated copolymers undergo phase transformation in aqueous solutions in response to a temperature increase. The phase transition was monitored by dynamic light scattering, and the temperature associated with the phase transition was determined. The large number of samples allowed us to map the polymer property-aggregation temperature relationship using an artificial neural network. The developed model allows the design of copolymers with well-defined aggregation temperatures.

**Keywords:** MALDI-TOF MS, N-isopropyl acrylamide, block copolymer, structure-property relationships, artificial neural network

### ÖSSZEFOGLALÓ

Az intelligens polimerek egyik fő csoportját a blokk kopolimerek adják. A blokk szerkezet lehetőséget teremt arra, hogy a különböző polimer láncok tulajdonságait kombináljuk és hangoljuk. Munkánk során 58 db 4-akriolmorfolin és N-izopropil akrilamid homo és blokk kopolimereket (PNAM, PNIPAM és PNAM-*b*-PNIPAM) állítottunk elő 1400 és 16000 g/mol számtlag molekulatömeg tartományban. A kopolimerek részletes elemzésére olyan algoritmust fejlesztettünk, mely képes a MALDI-TOF MS spektrumok feldolgozására, így teremtve lehetőséget azok részletes elemzésére. Ezzel a módszerrel meghatározhatjuk a kopolimerek összetételét és a monomerek eloszlását is. Ezen kopolimerek a hőmérséklet emelkedésére fázisátalakulással reagálnak vizes oldatokban. A fázisátalakulást dinamikus fényszórással követtük, meghatároztuk a fázisátalakuláshoz rendelhető hőmérsékletet. A nagyszámú minta lehetővé tette, hogy mesterséges neurális hálózattal feltérképezzük a polimerjellemzők-aggregációs hőmérséklet kapcsolatát. A létrehozott modellel lehetőséget nyújt jól definiált aggregációs hőmérséklettel rendelkező kopolimerek tervezésére.

**Kulcsszavak:** MALDI-TOF MS, N-izopropil akrilamid, blokk kopolimer, szerkezet-tulajdonság összefüggés, mesterséges neurális hálózat

**Köszönetnyilvánítás:** Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget:

Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-147503 és RRF-2.3.1-21-2022-00009, azonosítószámú, Megújuló Energiák Nemzeti Laboratórium megnevezésű projekt, mely a Széchenyi Terv Plusz program keretében, az Európai Unió Helyreállítási és Ellenállóképességi Eszközének támogatásával valósult meg. Köszönjük továbbá a MOL Petrolkémia Zrt által nyújtott anyagi támogatást.