

Etilén-oxid - propilén-oxid kopolimer szerkezet-fizikai tulajdonságok kapcsolatának felderítése

Structure-physical property relationship analysis of ethylene oxide-propylene oxide

RÓTH Gergő¹, NAGY Tibor¹, NAGY Lajos¹, KUKI Ákos¹, 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

ABSTRACT

One of the most significant challenges currently facing the scientific community is to elucidate the relationship between the structure and physical properties of copolymers. In order to achieve this, it is imperative to ascertain the precise structure and composition. The copolymer mass spectra analysis algorithm developed by our research group represents a highly efficacious method for this purpose, as it is capable of assigning the composition to each peak of the MALDI-TOF-MS copolymer mass spectrum, thereby enabling the calculation of copolymer characterisation parameters. Furthermore, it is capable of identifying homopolymers. Validation of the method was conducted through the utilization of ¹H-NMR measurements. This information was employed to ascertain the precise composition of the copolymers and the ratio of homo- di- tri-blocks. Subsequently, the extracted data were employed to calculate the precise HLB value, which was then used to establish a relationship with the foaming inhibition. In the latter tests, the correlation was found to be slightly low. Therefore, an additional log-log linear combination model based on composition and structure was used to determine the physical properties. Thus, the measured properties and those calculated by the model showed a high correlation. Our results highlight that the structure of even seemingly simple copolymers is highly diverse and that property assignment requires accurate and thorough structural identification.

Keywords: PEO-PPO block copolymers, poloxamers, antifoaming, diblock impurity, detailed copolymer analysis

ÖSSZEFOGLALÓ

A polimerkémia egyik legnagyobb kihívása a kopolimerek szerkezet-fizikai tulajdonság kapcsolatának felderítése. Ehhez elengedhetetlen a pontos szerkezet és összetétel ismerete. A kutatócsoportunk által fejlesztett kopolimer tömegspektrum elemző algoritmus ebben nyújt segítséget, mivel képes a MALDI-TOF-MS kopolimer tömegspektrum minden egyes csúcsához hozzárendelni az összetételt és ezáltal a kopolimer jellemző paramétereit kiszámítani. Ezen felül képes a homopolimerek azonosítására. A kutatás során a módszert ¹H-NMR mérésekkel validáltuk. Ezen információkkal meghatároztuk a kopolimerek pontos összetételét, illetve a homo-di-tri-blokk arányt. Ezután a kinyert adatok segítségével kiszámítottuk a pontos HLB értéket, mellyel kapcsolatot teremtettünk a habzsgátlással. Utóbbi vizsgálatok során a korreláció kissé alacsonynak mutatkozott ezért további, összetételen és szerkezeten alapuló log-log lineáris kombinációjú modellt alkalmaztunk a fizikai tulajdonságok meghatározására. Így a mért és a modellel számolt tulajdonságok magas korrelációt mutattak. Eredményeink rávilágítanak, hogy az egyszerűnek tűnő kopolimerek szerkezete is igen változatos és a tulajdonság hozzárendelés pontos és alapos szerkezeti azonosítást igényel.

Kulcsszavak: PEO-PPO blokk kopolimerek, poloxamerek, habzsgátlás, diblokk szennyező, részletes kopolimer karakterizálás

Köszönetnyilvánítás:

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: **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. Köszönjük továbbá a MOL Petrolkémia Zrt által nyújtott anyagi támogatást.