Átfedések útvesztőjében: MALDI-TOF MS határa ko- és terpolimer rendszerekre

Lost in Overlap: Limits of MALDI-TOF MS for Co- and Terpolymer Systems

RÓTH Gergő, KUKI Ákos, NAGY Tibor, KÉKI Sándor

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

ABSTRACT

MALDI-TOF mass spectrometry is widely used for the characterization of synthetic polymers; however, for copolymers, increasing molecular weight leads to greater overlap between different compositions and their isotopic distributions, limiting spectral interpretation. We developed a predictive computational framework that identifies possible polymer compositions within a given m/z range, estimates their relative contributions, and accounts for isotopic distributions and instrumental resolving power. The method determines the Upper Measurable Mass Limit (UMML), below which neighboring composition-dependent peaks remain spectrally distinguishable. The approach was developed for copolymers and extended to terpolymers. The UMML is governed by monomer mass differences, composition distribution, isotopic overlap, and instrumental resolution. The method therefore provides an a priori estimate of the molecular-weight range suitable for meaningful compositional analysis and can support the planning of MALDI-TOF MS measurements.

Keywords: MALDI-TOF MS, copolymer, terpolymer, UMML, spectral overlap

ÖSSZEFOGLALÓ

A MALDI-TOF tömegspektrometria széles körben alkalmazott módszer szintetikus polimerek jellemzésére, azonban kopolimerek esetén a molekulatömeg növekedésével a különböző összetételű polimerláncok és izotópeloszlásaik átfedése egyre inkább korlátozza a spektrumok egyértelmű értelmezését. Munkánk során olyan prediktív számítási keretrendszert dolgoztunk ki, amely meghatározza az adott m/z tartományban lehetséges polimerkompozíciókat, becsüli azok relatív hozzájárulását, valamint figyelembe veszi az izotópeloszlást és a készülék felbontóképességét. A módszer segítségével meghatározható a felső mérhető tömeghatár (Upper Measurable Mass Limit, UMML), amely azt a molekulatömeg-tartományt jelöli, amely alatt a szomszédos összetételfüggő csúcsok még spektrálisan elkülöníthetők. A megközelítést kopolimerekre fejlesztettük és terpolimerekre egyaránt kiterjesztettük. Az eredmények alapján a mérhetőségi határt a monomerek tömegkülönbsége, az összetételi eloszlás, az izotópcsúcsok átfedése és a műszer felbontása együttesen határozza meg. A módszer így előzetes becslést adhat az értelmezhető molekulatömeg-tartományra, és támogatja a MALDI-TOF MS mérések tervezését.

Kulcsszavak: MALDI-TOF MS, kopolimer, terpolimer, UMML, spektrális átfedés

Köszönetnyilvánítás: Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-147503 és „A publikáció a 2025-1.2.1-HU-RIZONT-2025-00006 számú projekt keretében a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a 2025-1.2.1-HU-RIZONT pályázati program finanszírozásában valósult meg.”