

# Többlépéses tömegmaradék analízis alkalmazása kopolimerek tandem tömegspektrumainak elemzésére

## Application of Multistep Mass-Remainder Analysis for the evaluation copolymer tandem mass spectra

Mahir HASHIMOV, Ákos KUKI, NAGY Tibor, ZSUGA Miklós, KÉKI Sándor

Debreceni Egyetem Alkalmazott Kémiai Tanszék, Debrecen 4032 Egyetem tér 1  
Tel.: (36)-52-512900/454

### ABSTRACT

Polyalkylene oxide polyether polyols are widely used in polymer industry as high-performance coating, wetting, crosslinking agents. Therefore, their characterization plays a very important role in quality management. We applied the recently invented three-step MARA method in order to evaluate complex tandem mass spectra of polyether polyols. The obtained peak series were distinguished and further structural information was gained on multi-arm copolymers. M-MARA (Multistep Mass-remainder analysis) yields an ultra-simplified graphical representation of the MS/MS spectra and sorts the product ions based on their double bond equivalent (DBE) values, where six-arm, three-arm and linear diol polyether polyols demonstrates 0-4, 0-2 and 0-1 DBE values, respectively.

**Keywords:** copolymer, tandem mass spectrometry, Multistep Mass-Remainder Analysis

### KIVONAT

A poliéter polioloikat az iparban széles körben alkalmazzák, mint bevonatok, nedvesítő vagy térhálósító szerek. Ezért, ezek karakterizálása, kiemelt jelentőségű minőség-ellenőrzés szempontjából. Munkánk során a több lépéses Tömegmaradék Analízist alkalmaztuk poliéterek komplex tandem tömegspektrumainak értékelésére. Az M-MARA (Több lépéses Tömegmaradék Analízis) módszerrel a detektált csúcs sorozatokat megkülönböztettük és további szerkezeti információkat kaptunk. A mérésekből előállított ábrák egyszerű reprezentációi a tandem tömegspektrumoknak, melyen a termék ionok a kettőskötések száma alapján rendeződnek. A hatkarú, háromkarú és lineáris polimerek 0-4, 0-2, 0-1 DBE értékű sorozatokkal jellemezhetők.

**Kulcsszavak:** kopolimer, tandem tömegspektrometria, több lépéses Tömegmaradék Analízis

### Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: NKFI FK-132385, valamint a GINOP-2.3.2-15-2016-00041 és a GINOP 2.3.3-15-2016-00021 pályázatoknak, amelyek az Európai Unió támogatásával és az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával valósultak meg. Továbbá munkánkat az MTA Bolyai János Kutatói Ösztöndíj is támogatta (Nagy Tibor), a munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-20-5 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült (Nagy Tibor).