

GPC módszerfejlesztés kopolimerek molekulatömegének meghatározására

GPC method development for molecular weight determination of copolymers

BENEDEK Máté¹, NAGY Tibor¹, KUKI Ákos¹, RÓTH Gergő^{1,2},
ZSUGA Miklós¹, KÉKI Sándor¹

¹ Alkalmazott Kémiai Tanszék, Természettudományi és Technológiai Kar, Debreceni Egyetem,
Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország

² Kémiai Tudományok Doktori Iskola,
Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország

ABSTRACT

The molecular weight determination of copolymers is challenging due to the high variety in structure and composition. One of the most important relatively low molecular weight compounds is the ethylene-oxide – propylene-oxide (EO-PO) copolymer which is applied in many fields of the industry. Thus, there is a need for a simple method to identify their molecular weights. To address this problem, the absolute molecular weight, composition and many additional parameters of different (EO-PO) copolymers were determined by MALDI-TOF MS method. The connection between the polymer quantities and their measured GPC chromatogram was determined based on neural networks. The result of this research is a neural network system, which establishes a connection between the molecular weight determined by GPC, the absolute molecular weight and the composition of EO-PO copolymers.

ÖSSZEFOGLALÓ

Kopolimerek molekulatömegének meghatározása komoly kihívást jelent, mivel nagy változatosságot mutatnak szerkezetükben és összetételükben is. Az egyik legfontosabb kis molekulatömegű kopolimerek az etilén-oxid – propilén-oxid kopolimerek, melyeket széles körben alkalmaznak az iparban is. Ezért szükség van egy olyan egyszerű módszerre, amivel a molekulatömege meghatározható ezeknek a kopolimereknek. A probléma felderítéséhez különböző etilén-oxid–propilén-oxid kopolimerek abszolút molekulatömegét, összetételét és további polimer jellemzőket határoztunk meg MALDI–TOF MS módszerrel. A tömegspektrometriás eredmények és a GPC kromatogramok közötti kapcsolat feltérképezésére neurális hálót alkalmaztunk. A kutatás eredményeként egy olyan neurális hálót kaptunk, amely kapcsolatot teremt GPC-vel meghatározott molekulatömeg, az abszolút molekulatömeg és az összetétel között.

Kulcsszavak: mesterséges intelligencia, kopolimerek, gél permeációs kromatográfia, MALDI-TOF MS, Pluronic

Köszönetnyilvánítás

Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: NKFI FK-132385, valamint 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 ((BO/00212/20/7, Nagy Tibor), a munka az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-05-DE-476 és ÚNKP-21-2-II-DE-227 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült. A TKP2020-NKA-04 számú projekt a Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból biztosított támogatással, a 2020-4.1.1-TKP2020 pályázati program finanszírozásában valósult meg.