

# GPC módszerfejlesztés kopolimerek molekulatömegének meghatározására

## GPC method development for molecular weight determination of copolymers

BENEDEK Máté<sup>1</sup>, NAGY Tibor<sup>1</sup>, KUKI Ákos<sup>1</sup>, RÓTH Gergő<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

<sup>2</sup> 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) copolymers which are applied in many fields in the industry. Thus there is a high need for a simple method to identify their molecular weight. 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 identified the connection among the molecular weight determined by GPC, the absolute molecular weight and the composition.

### ÖSSZEFOGLALÓ

Kopolimerek molekulatömegének a 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 alkalmazna 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, amellyel kapcsolatot teremt a GPC –vel meghatározott molekulatömeg, az abszolút molekulatömeg és az összetétel között.

**Keywords/Kulcsszavak:** artificial intelligence, copolymers, gel permeation chromatography, MALDI, 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.

