

## GPC/SEC mit Dreifachdetektion

### Tipps & Tricks Ausgabe Nr. 16

## Bedeutung und Berechnung von Molekulargewichtsmittelwerten

### Problemstellung

Wir verwenden eine GPC/SEC-Anlage mit Dreifachdetektion um die Molekulargewichte unserer Proben zu bestimmen. In der Ergebnistabelle werden mehrere Ergebnisse für das Molekulargewicht aufgeführt; ein Mn-Wert, ein Mw-Wert, ein Mz-Wert und ein Mp-Wert.

### Frage

Welcher Wert ist der richtige Molekulargewichtsmittelwert?

### Lösung

Es gibt keinen richtigen oder falschen Molekulargewichtsmittelwert; jeder der aufgeführten Werte (Mn, Mw, Mz und Mp) ist korrekt, nur wird er mathematisch auf eine andere Weise berechnet. Hintergrund dafür ist die Tatsache dass sich unter einem Peak in der GPC/SEC in aller Regel nicht ein einziges Molekulargewicht verbirgt (dies ist nur bei Proteinen der Fall) sondern dass eine Verteilung von Molekulargewichten vorliegt wobei die großen Moleküle vor den kleinen Molekülen eluieren. Die Software bestimmt also an jedem Punkt des Peaks ein Molekulargewicht und muss diese Vielzahl von einzelnen Molekulargewichten nun in ein mittleres Molekulargewicht umrechnen. Dies kann ein arithmetischer Mittelwert sein (Mn = Number Average Molecular Weight) oder ein nach dem Gewicht gemittelter Wert (Mw = Weight Average Molecular Weight) oder ein Mittelwert der das Gewicht der Moleküle überproportional berücksichtigt (Mz = Zentrifugenmittelwert). Oder man kann auf eine Mittelung der einzelnen Molekulargewichte verzichten und einfach das Molekulargewicht angeben welches an der Peakspitze vorliegt (Mp = Peak Molecular Weight). Dieser Mp-Wert ist aber der am wenigsten exakte und am wenigsten reproduzierbare Wert.

Der Quotient von Mw/Mn wird als Polydispersität einer Probe bezeichnet. Wichtig ist noch zu wissen dass die verschiedenen Molekulargewichtsmittelwerte auch physikalische Hintergründe haben: der Mn-Wert beispielsweise resultiert aus osmotischen Messungen oder Endgruppenanalysen, der Mw-Wert wird durch die Lichtstreuung ermittelt und den Mz-Wert erhält man bei Messungen mit der Ultrazentrifuge. Daher ist es immer sinnvoll und wichtig gleiche Molekulargewichtsmittelwerte miteinander zu vergleichen da zwischen den einzelnen Werten große Unterschiede bestehen können. Polydispersitätsfaktoren von 10 und mehr sind z. B. bei Naturstoffen keine Seltenheit.

### Schlussfolgerung

Nur Proteine sind monodisperse Makromoleküle mit einem einzigen, scharf definierten Molekulargewicht. Polymere und Biopolymere hingegen sind Stoffe die eine Molekulargewichtsverteilung aufweisen; hier können nur Molekulargewichtsmittelwerte angegeben werden. Diese können mathematisch auf verschiedene Arten berechnet werden (siehe Abb. 1). Es ist wichtig zu wissen wie diese Werte berechnet werden und welche physikalische Bedeutung Ihnen zukommt. Ebenso ist es wichtig dass man sich bei einem Vergleich von Molekulargewichtswerten oder von verschiedenen Proben auf dieselben Werte bezieht da zwischen den einzelnen Werten große Unterschiede bestehen können.

## GPC/SEC mit Dreifachdetektion

### Tipps & Tricks Ausgabe Nr. 16

**Abb.1:** Berechnung der verschiedenen Molekulargewichtsmittelwerte

**Number Average (Mn)**

$$M_n = \frac{\sum n_i M_i}{\sum n_i}$$

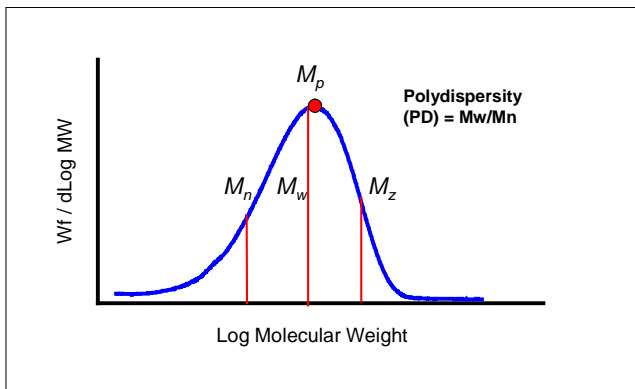
**Weight Average (Mw)**

$$M_w = \frac{\sum n_i M_i^2}{\sum n_i M_i}$$

**z-Average (Mz)**

$$M_z = \frac{\sum n_i M_i^3}{\sum n_i M_i^2}$$

**Peak maximum MW (Mp)**



**Author:** Dr. Gerhard Heinzmann, Viscotek GmbH

Für weitere Informationen können Sie jederzeit sehr gerne Kontakt zu uns aufnehmen