

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Z polimerami stykamy się na co dzień. Są one stosowane we wszystkich dziedzinach gospodarki, a także w nowoczesnej medycynie, na przykład w postaci składników systemów do kontrolowanego uwalniania leków oraz biomateriałów (m.in. implantów). Wiele produktów, od opon samochodowych do opatrunków hydrożelowych, zawiera polimery w formie usieciowanej, co oznacza, że długie, liniowe łańcuchy polimerów są połączone ze sobą tworząc trójwymiarową, nierozpuszczalną i elastyczną sieć. Mimo że przemysł obecnie wytwarza wiele rozmaitych polimerów w różnorodnych formach, wciąż nie znamy odpowiedzi na wszystkie pytania dotyczące mechanizmów reakcji chemicznych i procesów fizycznych zachodzących podczas wytwarzania i modyfikacji polimerów. Pogłębienie naszej wiedzy na temat tych zjawisk pozwoli dokładniej sterować procesami syntezy i modyfikacji polimerów, przez co stanie się możliwe otrzymywanie produktów o lepszych lub zupełnie nowych właściwościach.

W naszym projekcie zbadamy wybrane, istotne procesy będące podstawą wytwarzania i modyfikacji polimerów, by lepiej zrozumieć dynamikę i mechanizm tych reakcji. Nasze podejście do tego zagadnienia różni się od poprzednich prac w tej dziedzinie co najmniej dwoma istotnymi elementami. Po pierwsze, badania będziemy prowadzić wykorzystując równoległe prace doświadczalne i symulacje komputerowe. Po drugie, zarówno symulacje jak i doświadczenia będą prowadzone nowymi metodami, które nie były jeszcze szeroko stosowane do badania podstawowych procesów w chemii i fizyce polimerów. Zastosowanie symulacji wykonywanych nowatorską metodą DLL (Dynamic Lattice Liquid) to nie tylko oszczędność czasu i kosztów w porównaniu do eksperymentu. Symulacje pozwolą przeanalizować również takie problemy, których doświadczalne zbadanie jest bardzo trudne lub wręcz niemożliwe. W symulacjach możemy badać wyizolowane, pojedyncze zjawiska, mamy pełną kontrolę nad warunkami prowadzenia testów, możemy wyeliminować niepożądane efekty uboczne, zakłócenia pomiarowe, a także ograniczenia techniczne. Stosowanie danej techniki symulacyjnej musi być poprzedzone testami wykazującymi, że symulacje dobrze odtwarzają rzeczywistość tam, gdzie możliwe jest porównanie z eksperymentem. Wówczas możemy poszerzyć zastosowanie symulacji na obszary niedostępne dla badań doświadczalnych. W doświadczeniach będziemy inicjować reakcje za pomocą promieniowania jonizującego, co pozwala dostarczać do badanego układu znaną ilość energii w określonym czasie i prowadzić badania bez konieczności dodawania jakichkolwiek środków chemicznych. Promieniowanie jonizujące powoduje powstawanie wolnych rodników, które inicjują procesy polimeryzacji i sieciowania. Ich przebieg będziemy badać stosując szybką detekcję spektrofotometryczną (czyli śledząc w czasach rzędu mikro- i milisekund pochłanianie światła przez próbkę).

Wykonując równoległe doświadczenia i symulacje będziemy badać różne wersje reakcji polimeryzacji (klasyczną i połączoną z sieciowaniem), a dalszych etapach różne warianty samego procesu sieciowania. Będzie to sieciowanie międzycząsteczkowe – z utworzeniem trójwymiarowej sieci polimerowej lub wewnątrzcząsteczkowe, czyli wzajemna reakcja rodników w obrębie jednego łańcucha polimeru. Ta ostatnia reakcja prowadzi do powstawania nanożeli – molekularnych klatek testowanych obecnie jako nośniki leków i genów dla medycyny. Będziemy dążyli do zrozumienia dynamiki i mechanizmu obserwowanych procesów. Zbadamy, w jaki sposób właściwości wyjściowych materiałów i warunki doświadczalne wpływają zarówno na przebieg samych reakcji, jak i na strukturę końcowych produktów. Realizacja naszego projektu przyczyni się nie tylko do jakościowego i ilościowego opisu badanych reakcji i procesów, ale również do uzyskania informacji praktycznych, które w przyszłości pozwolą otrzymywać złożone, funkcjonalne materiały polimerowe o z góry zadanych właściwościach.