

Tytuł polski: „Precyzyjne dostrajanie właściwości kompleksów polielektrolitów poprzez trójskładnikową kompozycję„

Tytuł angielski: "Fine-tuning of polyelectrolyte complexes properties via ternary composition"

Kierownik Projektu: dr hab. inż. Piotr Batys

Numer projektu: 2023/50/O/ST5/00249

Kompleksy polielektrolitów powstają w wyniku rozdzielania faz, gdy mieszane zostają ze sobą dwa roztwory przeciwnie naładowanych polielektrolitów. Tworzą się dwie fazy: faza rozcieńczona oraz faza bogata w polimer, zawierająca kompleksy polielektrolitów. Tworzenie się kompleksów jest napędzane przyciąganiem elektrostatycznym pomiędzy przeciwnie naładowanymi polielektrolitami oraz efektami entropowymi związanymi z uwalnianiem do roztworu przeciwnionów i cząsteczek wody. W zależności od składu i warunków syntezy, kompleksy polielektrolitów mogą występować w postaci kompleksów stałych lub koacerwatów przypominających ciecz.

Z kompleksów stałych można formować materiały polimerowe, których właściwości silnie zależą od warunków syntezy, takich jak pH, rodzaj i stężenie elektrolitu, rodzaj rozpuszczalnika, a także skład chemiczny. Ze względu na możliwość dostrajania ich właściwości oraz wszechstronność, materiały na bazie kompleksów polielektrolitów znajdują szerokie zastosowanie w dziedzinach dostarczania leków, inżynierii tkankowej, elektrochemii, produkcji membran separacyjnych, klejów kontaktowych, a także wielu innych.

Dotychczas w literaturze, badane były głównie dwuskładnikowe kompleksy polielektrolitów, tj. złożone z jednego dodatnio naładowanego i jednego ujemnie naładowanego polielektrolitu. Zmiana jednego z polielektrolitów skutkuje jednak znaczną, skokową zmianą właściwości wytworzonego materiału, co ogranicza możliwości jego kontroli. Aby umożliwić lepsze dostrajanie właściwości tych materiałów, niniejszy projekt ma na celu obszerne badania teoretyczne i eksperymentalne nad otrzymywaniem trójskładnikowych kompleksów polielektrolitów, które określą związek pomiędzy stechiometrią a właściwościami makroskopowymi wytworzonych materiałów.

W pierwszym etapie projektu, wykorzystane zostanie modelowanie metodą dynamiki molekularnej z rozdzielczością atomową oraz techniki eksperymentalne oparte na rozpraszaniu światła. Badania dostarczą informacji o postaci kompleksów polielektrolitów w zależności od dobranego składu oraz o ich właściwościach, a także umożliwią wyznaczenie diagramów fazowych trójskładnikowych mieszanin polielektrolitów.

Drugim etapem będzie wytworzenie i charakterystyka materiałów polimerowych na bazie trójskładnikowych kompleksów polielektrolitów. Badania mają na celu określenie zmian we właściwościach mechanicznych i termicznych wytworzonych materiałów związanych z różnym składem kompleksu. Dodatkowo, modelowanie teoretyczne pozwoli zrozumieć mechanizm tych zmian na poziomie molekularnym, a także będzie stanowić niezwykle przydatne narzędzie predykcyjne.

Powyższe badania, łączące w sobie modelowanie teoretyczne oraz badania eksperymentalne, pozwolą przewidywać właściwości materiałów na bazie trójskładnikowych kompleksów polielektrolitów oraz kontrolować je w sposób ciągły. Projekt zostanie zrealizowany we współpracy międzynarodowej (Texas A&M University, USA) z wiodącą grupą w dziedzinie syntezy materiałów polimerowych. Otrzymane wyniki pozwolą również na lepsze zrozumienie tych niezwykle interesujących i obiecujących materiałów.