

Badania NMR mikrostruktury kopolimerów akrylanów butylu z metakrylanami metylu i *tert*-butylu.

Autor: mgr inż. Maria Siołek

Promotor: dr hab. inż. Prof. UŚ Marek Matlengiewicz

Polimery akrylowe cechują się doskonałą trwałością, wytrzymałością, stabilnością UV, przezroczystością, łatwością barwienia oraz trwałością koloru. Ze względu na tak szerokie spektrum interesujących właściwości polimery akrylowe znalazły zastosowanie w optyce i medycynie oraz w wielu gałęziach przemysłu, głównie w produkcji farb i klejów, ale też np. w przemyśle tekstylnym. Mogą być stosowane w różnorodnej postaci począwszy od bardzo miękkich materiałów adhezyjnych takich jak kleje, przez sypkie proszki, aż po sztywne, twarde płyty i wyroby użytkowe. Makroskopowe właściwości gotowych materiałów polimerowych silnie zależą od subtelnych szczegółów budowy łańcucha polimerowego, czyli jego mikrostruktury. Za różnice w strukturze łańcucha polimerów akrylowych odpowiedzialna jest asymetryczna budowa jednostki monomerycznej oraz fakt, że w trakcie polimeryzacji monomerów akrylowych w łańcuchu głównym powstaje węgiel asymetryczny a względna konfiguracja kolejnych centrów asymetrycznych (taktyczność) ma znaczący wpływ na właściwości makroskopowe polimeru. Metodą analizy, która ma kluczowe znaczenie w badaniach struktury i właściwości związków wielkocząsteczkowych jest spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR). Oprócz typowych możliwości analitycznych, jak ustalenie struktury czy określenie składu, spektroskopia NMR jest jak do tej pory jedynym narzędziem, które umożliwia dokładne obserwacje zróżnicowania mikrostrukturalnego łańcuchów polimerowych.

W ramach pracy doktorskiej analizowano niebadane dotąd kopolimery metakrylowo-akrylowe, otrzymane z metakrylanu metylu i *tert*-butylu oraz czterech akrylanów butylowych. Badano również stereochemię łańcucha odpowiednich homopolimerów. Układy te są interesujące ze względu na potencjalne zastosowania począwszy od budownictwa (kleje, farby, lakiery) i przemysłu samochodowego po przemysł farmaceutyczny (np. w produkcji leków o przedłużonym uwalnianiu). Stosując spektroskopię ^{13}C NMR wykorzystano sygnały karbonylowe do określenia rozkładu sekwencji konfiguracyjno-kompozycyjnych w kopolimerach na poziomie pentad. W przypadku homopolimerów do ustalenia rozkładu stereosekwencji oprócz sygnału karbonylowego wykorzystano również sygnał metylenowy z głównego łańcucha ($\beta\text{-CH}_2$), przypisania dokonano na poziomie heptad dla sygnału karbonylowego i heksad dla sygnału metylenowego. Weryfikację poprawności analizy przeprowadzono za pomocą komputerowej symulacji widm NMR z wykorzystaniem statystyki Bernoulliego i/lub Markowa 1-go rzędu oraz inkrementalnego obliczania przesunięć chemicznych poszczególnych sekwencji konfiguracyjno-kompozycyjnych.