

Hiperelágazásos polisztirol előállítására sztírol és divinil-benzol karbokationos kopolimerizációjával környezetileg előnyös reakciókörülmények között

Németh Brigitta, II. évf. Vegyész MSc.

ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Dr. Iván Béla** egyetemi magántanár, tudományos osztályvezető
ELTE TTK Kémiai Intézet, Szerves Kémiai Tanszék és
MTA KK AKI, Polimer Kémiai és Anyagtudományi Osztály

Napjainkban a polimer kémiai kutatások jelentős része irányul a sok elágazást tartalmazó polimerek, mint a hiperelágazásos polimerek és a dendrimerek előállítására. Ugyanakkor a költséghatékonyság igénye és a szigorodó környezetvédelmi előírások is egyre jobban érvényesülnek a kutatásokban. Munkám során az egyik legnagyobb mennyiségben felhasznált monomert, a sztírolt kopolimerizáltam szobahőmérsékleten divinil-benzollal kvázielő karbokationos körülmények között. A polimerizációs reakciót két különböző oldószerben végeztem: a hagyományosnak számító diklórmetánban (DCM), valamint a környezetileg előnyös benzotrifluoridban (BTF). Mindkét oldószerben ugyanolyan reaktánsokat alkalmaztam (1-klór-1-fenil-etán iniciátor, TiCl_4 koiniciátor, TMEDA nukleofil adalék, sztírol és divinil-benzol monomerek) ugyanolyan koncentrációkban. Vizsgáltam mindkét oldószerben a koiniciátor valamint az iniciátor/bifunkciós monomer koncentrációjának hatását a keletkező polimer molekulatömegére illetve a konverzióra nézve. Az előállított polimerek szerkezetéről, elágazottságáról, valamint molekulatömeg-eloszlásáról gélpermeációs kromatográfiával (GPC) és $^1\text{H-NMR}$ vizsgálatokkal nyertem információt. Az optimális reakciókörülmények kiválasztásával méretnöveltem a reakciót úgy, további növekedésre alkalmas csoportokat tartalmazó makromolekulák keletkezzenek.

A kapott eredmények alapján megállapítható, hogy a koiniciátor koncentrációjának változtatása jelentősen befolyásolja a konverziót és a molekulatömegeket, valamint a molekulatömeg-eloszlásokat is. Nagyobb koncentrációkban alkalmazva a koiniciátort nagyobb átlag molekulatömegű polimerekhez juthatunk oldószerrel függetlenül. Megállapítható, hogy a DCM-hez képest a BTF oldószerben ugyanolyan koiniciátor koncentrációknál kisebbek az átlag molekulatömegek, ugyanakkor már kisebb TiCl_4 koncentrációnál is képződik polimer. A koiniciátor koncentráció-konverzió összefüggés nem lineáris. A kisebb TiCl_4 -koncentrációknál a DCM, míg nagyobb koncentrációknál a BTF oldószer mutatkozott hatékonyabbnak. A gélpermeációs kromatográfiai eredmények alapján egyértelműen bizonyítást nyert, hogy ténylegesen elágazó szerkezetű minden esetben a képződött termék.

Az iniciátor/bifunkciós monomer koncentráció növelésével az átlag molekulatömegek növekedtek, a molekulatömeg-eloszlás görbék pedig szélesedtek mindkét oldószer esetében. Ezzel egyidőben a reakcióidő előrehaladtával gélesedés lépett fel. Ezek alapján a méretnövelésre alkalmas körülmények kiválasztásával sikeresen állítottam elő nagyobb mennyiségben, el nem reagált vinil-csoportokat tartalmazó makromolekulákat.

Mindezek alapján összefoglalóan elmondható, hogy a sztírol és divinil-benzol karbokationos kopolimerizációja alkalmas környezetileg előnyös oldószerben, rövid reakcióidő alatt, további növekedésre képes csoportokat tartalmazó hiperelágazásos polisztirol előállítására a hagyományoshoz hasonló konverzióval. Fontosnak tartom még megemlíteni, hogy a polimerizáció a hagyományos, hűtést igénylő módszerekkel ellentétben külön energiabefektetés nélkül, szobahőmérsékleten játszódott le, így a későbbi felhasználás során jelentős energiamegtakarítás érhető el vele. A tovább módosítható vinil-csoportok miatt a termék alkalmas lehet peptidkémiai vagy gyógyszerkémiai felhasználásra, ugyanakkor további polimerizációk makroiniciátoraiként is használható.