

## Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: Doc. Ing. Vladimír Lukeš, PhD.	Evidenčné číslo projektu: APVT-20-005004
Názov projektu: Štúdium stabilizátorov v polymérnych matriciach - vzťah medzi ich štruktúrou a stabilizačnými účinkami	

Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:	Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky FChPT STU v Bratislave
Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):	Ústav fyzikálny a užitkové chémie, VUT Brno, ČR
	Institut für theoretische Chemie, UNI WIEN, Rakúsko

Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uved'te i publikácie prijaté do tlače alebo pripravované):  <i>Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.</i>	Klein, E., Lukeš, V., Ilčin, M.: DFT/B3LYP study of tocopherols and chromans antioxidant action energetics. Chem. Phys. 336 (1), 51-57 (2007).
	Klein, E., Lukeš, V.: DFT/B3LYP study of the substituent effect on the reaction enthalpies of the individual steps of single electron transfer – proton transfer and sequential proton loss electron transfer mechanisms of phenols antioxidant action. J. Phys. Chem. A, 110, 12312-12320 (2006).
	Klein, E., Lukeš, V., Cibulková, Z., Polovková, J.: Study of N-H, O-H, and S-H bond dissociation enthalpies and ionization potentials of substituted anilines, phenols, and thiophenols. J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 758 (2-3), 149-159 (2006).
	Klein, E., Matis, M., Lukeš, V., Cibulková, Z.: The applicability of AM1 and PM3 semi-empirical methods for the study of N-H bond dissociation enthalpies and ionisation potentials of amine type antioxidants. Polym. Degrad. Stabil. 91 (2), 262-270 (2006).
	Klein, E., Cibulková, Z., Lukeš V.: A study of the energetics of antioxidant action of p-phenylenediamines. Polym. Degrad. Stabil., 88 (3), 548-554 (2005).
V čom vidíte uplatnenie výsledkov tohto projektu:	Výsledky výskumu možno použiť v základnom, aj v aplikovanom výskume pri vývoji ekologických polymérnych materiálov s riadenou životnosťou. Ukázali sme, že v biologických systémoch a v roztokoch je z termodynamického hľadiska preferovaný iný reakčný mechanizmus ako všeobecne akceptovaný radikálový mechanizmus transferu atómu vodíka, čo môže významne ovplyvniť vývoj nových fenolových antioxidantov.

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas ku zverejneniu údajov v nej uvedených.

Podpis riešiteľa: .....

Dátum: ..24. 1. 2008.....

# Charakteristika výsledkov

Evidenčné číslo: APVT-02-005004

## Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - slovensky:

Projekt sa zameriaval na štúdium antioxidantov a mechanizmov ich pôsobenia v polymérnych maticiach (polyizoprén, polyvinylalkohol, papier). Získané teoretické a experimentálne výsledky boli publikované v 13 CC a 2 CA vedeckých prácach. Hlavné výsledky možno zhrnúť takto:

- 1) Termodynamika antioxidačného účinku modelových antioxidantov na báze fenolu, tiofenolu, a anilínov bola študovaná prostriedkami výpočtovej chémie. Navyše, preskúmali sme aj termodynamiku antioxidačného pôsobenia 7 *N,N'*-substituovaných *p*-fenyléndiamínových antioxidantov, 4 tokoferolov a 7 chrómanov.
- 2) Vplyv rozpúšťadla na účinok fenolových antioxidantov bol študovaný s cieľom určiť mechanizmus preferovaný v jednotlivých rozpúšťadlách. Stabilita syntetických polymérov s testovanými aditívami bola experimentálne skúmaná metódami ATR FTIR a DSC, vybrali sme vhodné antioxidanty.
- 3) Materiály s potenciálnym využitím v medicíne, poľnohospodárstve a oblasti obalov pre potravinársky priemysel boli podrobené účinkom gama žiarenia. Preskúmal sa vplyv ožarovania na oxidačnú stabilitu týchto materiálov. Identifikovala sa maximálna dávka žiarenia, ktorá ešte nespôsobuje neakceptovateľnú degradáciu polyméru.
- 4) Zhodnotili sme použiteľnosť rôznych teoretických prístupov na výpočty efektov rozpúšťadla, simulácie viskozít a difúzných koeficientov ako aj izokonverznú metódu na určenie indukčnej periódy degradácie polymérov.

## Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu (max. 20 riadkov) - anglicky:

Project was oriented on the study of antioxidants and the mechanisms of their action in polymer matrices (polyisoprene, poly(vinyl alcohol), paper). Obtained theoretical and experimental results were subject of 13 CC and 2 CA publications. Main results can be summarized as follows:

- 1) The detailed computational characteristics of the thermodynamics of model antioxidants action based on the mono-substituted phenol, thiophenol and aniline molecules were obtained. Besides, thermodynamics of 7 *N,N'*-substituted *p*-phenylenediamine antioxidants, 4 tocopherols and 7 chromans action was studied.
- 2) The effect of the solvent on the phenolic antioxidants action was investigated in order to determine preferred mechanism of antioxidant action in solution-phase.
- 3) The stability of synthetic polymers with tested additives was experimentally investigated (ATR FTIR and DSC measurements) and the suitable antioxidants were found.
- 4) The materials suitable for applications in medicine, agriculture, and food packaging industry were subjected to the gamma irradiation. The irradiation effect on their oxidation stability was investigated. Maximum dose, which did not result in apparent oxidative degradation was determined.
- 5) Applicability of various theoretical models for solvent effects calculations, viscosity and diffusion coefficients simulations or isoconversional method for the determination of induction period of polymer oxidation were assessed.

Podpis riešiteľa: .....