

Formulár ZK - Záverečná karta projektu

Riešiteľ: RNDr. Marián Sedlák, DrSc.	Evidenčné číslo projektu: 51-037905
Názov projektu: Vodorozpuštné polyméry: od fundamentálnych poznatkov o interakciách, štruktúre a dynamike roztoku ku kontrole mechanizmu ich syntézy a samo-usporiadania	

Na ktorých pracoviskách bol projekt riešený:	Ústav experimentálnej fyziky SAV
	Ústav polymérov SAV
	Medzinárodné laserové centrum
Ktoré zahraničné pracoviská spolupracovali pri riešení (názov, štát):	Georg-August University Göttingen, Nemecko, BASF SE Ludwigshafen, Nemecko
	Queens University Kingston, Kanada
	Ústav makromolekulárnej chémie AV ČR Praha, ČR

Udelené patenty alebo podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory vychádzajúce z výsledkov projektu:	M. Sedlák, Č. Koňák: Polymérne nanočastice na báze homopolyméru poly(etylakrylovej kyseliny) a spôsob ich prípravy, patentová prihláška vynálezu, PP 5007-2008
	M. Sedlák, Č. Koňák: Polymérne nanočastice na báze homopolyméru poly(propylakrylovej kyseliny), patentová prihláška vynálezu, ÚPV SR, PP 5003-2009
Publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu (uveďte i publikácie prijaté do tlače):	M. Stach, I. Lacík, D. Chorvát Jr., M. Buback, P. Hesse, R. A. Hutchinson, L. Tang „Propagation Rate Coefficient for Radical Polymerization of <i>N</i> -Vinyl Pyrrolidone in Aqueous Solution Obtained by PLP-SEC“, <i>Macromolecules</i> 2008 , <i>41</i> , 5174–5185
	M. Buback, P. Hesse, R. A. Hutchinson, P. Kasák, I. Lacík, M. Stach, I. Utz „Kinetics and modeling of free-radical batch polymerization of nonionized methacrylic acid in aqueous solution“, <i>Ind. Eng. Chem. Res.</i> , 2008 , <i>47</i> (21), 8197–8204
Uvádzajte maximálne päť najvýznamnejších publikácií.	I. Lacík, D. Chorvát Jr. „Visualisation Techniques in the Characterization of Polymer Microcapsules: Confocal Laser Scanning Microscopy and Atomic Force Microscopy.“ In: Hallé J.P., de Vos P., Rosenberg L. (Eds): The Bioartificial Pancreas and other Biohybrid Therapies, Transworld Research Network, Kerala 2009 , Chapter 8, p. 137–175, ISBN: 978-81-7895-415-8
	I. Lacík, L. Učňová, S. Kukučková, M. Buback, P. Hesse, S. Beuermann „Propagation Rate Coefficient of Free-Radical Polymerization of Partially and Fully Ionized Methacrylic Acid in Aqueous Solution“, <i>Macromolecules</i> 2009 , <i>42</i> , 7753–7761
	M. Sedlák, Č. Koňák: A New Approach to Polymer Self-assembly into Stable Nanoparticles: Poly(ethylacrylic acid) Homopolymers, <i>Macromolecules</i> 2009 , <i>42</i> , 7430–7438.
V čom vidíte uplatnenie výsledkov projektu:	Pochopenie mechanizmu a kinetiky polymerizácie vodorozpuštných monomérov je nevyhnutné pre zlepšenie kontroly syntézy a vlastností polymérnych produktov. Z tohoto pohľadu je významné uplatnenie výsledkov projektu akademickou a aj priemyselnou komunitou. Pozvané prednášky a spolupráce so zahraničnými partnermi z oboch oblastí, potvrdzujú túto skutočnosť. V rámci projektu bola vyvinutá a detailne rozpracovaná nová filozofia k tvorbe polymérnych nanočastíc. V tejto súvislosti boli podané dve patentové prihlášky vynálezov. Tento koncept zároveň vytvára ďalšie možnosti pre chemické inžinierstvo v oblasti tvorby nanočastíc z iných príbuzných polymérov alebo modifikovaných nanočastíc šitých na mieru pre konkrétne aplikácie. Publikácie v časopise s impakt faktorom (IF) na úrovni 4.5-násobku mediánu IF v oblasti <i>polymer science</i> naznačujú tiež významné uplatnenie získaných poznatkov v základnom výskume.

Charakteristika výsledkov

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

Získali sa cenné informácie o kinetike a mechanizme polymerizácie vodorozpusťných monomérov metódou pulznej laserovej polymerizácie prepojenej na gélovú permeačnú chromatografiu. Určili sa rýchlostné konštanty propagácie, k_p , pre kyselinu metakrylovú (ako modelový monomér) a tiež pre *N*-vinylformamid a monoméry zwitteriónového typu vo vodnej fáze ako aj pre *N*-vinylpyrrolidónu vo vodnej aj organickej fáze. Zo získaných experimentálnych dát sa určili všeobecné rovnice pre výpočet rýchlostných konštánt propagácie v závislosti od koncentrácie monoméru, teploty, konverzie, prípadne stupňa ionizácie pre širokú oblasť experimentálnych podmienok. Bolo možné postulovať moderný zovšeobecnený mechanizmus polymerizácie tejto kategórie monomérov, čo predstavuje významný krok pre radikálovú polymerizáciu v celosvetovom meradle. Je možné tiež konštatovať, že sa podarilo naplniť cieľ týkajúci sa získania komplexných informácií o chovaní hydrofóbných iónových vodorozpusťných polymérov v roztoku a hlavne pretavenia týchto informácií typu základného výskumu do aplikačnej oblasti. Na základe detailného štúdia hlavných prítomných interakcií (elektrostatické, hydrofóbné, vodíkové väzby) sa podarilo navrhnúť a úspešne realizovať novú filozofiu k tvorbe polymérnych nanočastíc, ktoré majú v súčasnosti veľký aplikačný potenciál. Táto filozofia umožňuje prípravu nanočastíc hydrofóbnou asociáciou homopolymérov (nie ako obvykle kopolymérov), ktorá je vyvolaná zmenou teploty a následnou stabilizáciou nanočastíc vodíkovými väzbami. Elektrostatická interakcia má dve zásadné úlohy v tomto procese: (i) zabraňuje makroskopickej fázovej separácii a (ii) stabilizuje vzniknuté nanočastice pomocou povrchového náboja. V tejto súvislosti boli okrem publikačnej aktivity podané i dve patentové prihlášky vynálezov týkajúce sa nanočastíc na báze poly(etylakrylovej kyseliny), poly(propylakrylovej kyseliny) a spôsobu ich prípravy. Tento nový koncept zároveň vytvára ďalšie možnosti pre chemické inžinierstvo v oblasti tvorby nanočastíc z iných príbuzných polymérov alebo modifikovaných nanočastíc šitých na mieru pre konkrétne aplikácie.

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

A new and useful information was obtained regarding both the kinetics and the mechanisms of polymerization of water-soluble monomers by using pulsed-laser initiated polymerization in conjunction with size-exclusion chromatography. Propagation rate coefficients, k_p , for methacrylic acid, *N*-vinylformamide, *N*-vinylpyrrolidone and zwitterions were obtained for polymerization in aqueous phase and for *N*-vinylpyrrolidone also in the organic phase. Based on obtained experimental data, general equations for calculation of rate coefficients were established for wide ranges of monomer concentration, temperature, conversion and degree of ionization. A modern and generalized mechanism of polymerization in aqueous solutions was postulated, which represents an important step for radical polymerization worldwide. It is possible to conclude that we succeeded in reaching the goal of the project concerning obtaining a complex information about the solution behavior of hydrophobic ion-containing water soluble polymers and transforming this information into the application area. On the basis of the study of main interactions in such systems, i.e. electrostatic, hydrophobic, and hydrogen bonding, we have successfully proposed and realized a new approach to self-assembly of water soluble polymers into stable nanoparticles, which have in general a high application potential. This approach enables the formation of nanoparticles by association of homopolymers (not copolymers as usually) triggered by decreasing the solvent quality upon heating and subsequent stabilization by hydrogen bonds. The role of electrostatic interactions is twofold: (i) prevention of macroscopic phase separation upon heating and (ii) stabilization of resulting nanoparticles upon cooling down by surface charge. In addition to the publication of research papers, two patents are pending related to the nanoparticles based on poly(ethylacrylic acid) and poly(propylacrylic acid) and their methods of preparation. This new approach opens also new possibilities for chemical engineering towards the formation of nanoparticles from similar related polymers and towards the modification of such nanoparticles for custom purposes.

Podpisom záverečnej karty riešiteľ vyjadruje svoj súhlas so zverejnením údajov v nej uvedených.

Podpis zodp. riešiteľa:

Dátum:

Podpis štatutárneho zástupcu:

Pečiatka: