Wiązania wodorowe w kopolimerach poliuretanowych z pamięcią kształtu – badania metodami chemii kwantowej.

Streszczenie popularnonaukowe

Co łączy opakowanie na żywność, szwy medyczne i samoloty? Wszystkie te przykłady zawierają lub są całkowicie wykonane z materiałów polimerowych. Tak szerokie porównanie wyraźnie pokazuje, jak wiele różnych możliwych aplikacji mają polimery. W rzeczywistości ogromna liczba już opracowanych i potencjalnych zastosowań powstała dzięki różnym kombinacjom polimerów zwanych kopolimerami. Kopolimery to materiały, które zawierają fragmenty kilku różnych polimerów, dzięki czemu można je wykorzystać na jeszcze większą liczbę sposobów. Oczywistym jest, że zastosowania kopolimerów są bezpośrednio związane z ich właściwościami. Cechy polimeru użytego jako główny materiał w opakowaniu do żywności to na przykład sztywność, nietoksyczność i odporność termiczna. Jednak właściwości kopolimeru nie ograniczają się do wymienionych przykładów.

Czasami można zaobserwować nawet nieco „magiczną" naturę kopolimeru, jak w przypadku kopolimerów, które potrafią zapamiętywać kształt, jaki uzyskały po wyprodukowaniu. W określonych warunkach można zmienić ich kształt, który będzie stabilny. Natomiast w przypadku gdy ponownie zastosuje się te same warunki, można zauważyć że polimer odzyskuje swój pierwotny kształt. Właściwość ta daje możliwość manipulowania kształtem polimeru poprzez manipulację warunkami zewnętrznymi. Jest to niezwykle ważne na przykład w medycynie czy przemyśle kosmonautycznym, gdzie tymczasowy kształt pozwala na wprowadzenie narzędzia na bazie kopolimeru w odpowiednie miejsce, a następnie „aktywację" poprzez wymuszenie odzyskania pierwotnego kształtu. Najbardziej imponujące zastosowania kopolimerów z pamięcią kształtu i właściwościami samo-naprawy można znaleźć w medycynie jako „inteligentne rusztowania", stenty naczyniowe, inteligentne przewody nerwowe oraz w przemyśle lotniczym i kosmonautycznym jako materiał na samo-rozkładające się panele słoneczne lub osłony przeciwsłoneczne, a nawet potencjalne samoloty ze zdolnością skrzydeł do dostosowywania swojego kształtu do aktualnych warunków ("morphing aircrafts").

Problem polega na tym, że dokładny mechanizm tych właściwości nie jest do końca wyjaśniony. Natomiast istnieją przepuszczenia co do pewnych strukturalnych kryteriów niezbędnych dla właściwości pamięci kształtu polimeru. Po pierwsze, układy te musza zawierać „przełączniki" – specyficznych fragmentach chemicznych wewnątrz struktury polimeru, oddziałujące w pewien sposób. Po drugie, struktura chemiczna polimeru ma składać się z dwóch segmentów, dlatego właśnie w większości przypadków interesujące nas układy są kopolimerami. Poza tym, segmenty polimerów z pamięcią kształtu muszą być rozdzielone na poziomie mikro, innymi słowy, musi zachodzić zjawisko separacji mikrofazowej. Stopień tej separacji zwykle zależy od oddziaływań pomiędzy segmentami: im silniejsze są oddziaływania, tym wyższy jest stopień separacji międzyfazowej. Z uwagi na to, że charakter tych oddziaływań silnie zależy od struktury chemicznej, konieczne są obszerne badania ustalające korelacje pomiędzy strukturą chemiczną polimeru z pamięcią kształtu a stopniem separacji mikrofazowej.

Eksperymentalne prace badawcze są niewątpliwie bardzo informacyjne: wyniki pomiarów i obserwacji eksperymentalnych dostarczają niezbędnej wiedzy o badanych kopolimerach. Związek między strukturą i składem chemicznym kopolimerów a ich właściwościami opisuje się głównie na podstawie eksperymentów. Jednak nie zawsze takie metody są skuteczne w wyjaśnianiu uzyskanych obserwacji w mniejszej skali, biorąc pod uwagę interesującą nas chemię i fizykę oddziaływań. W tym przypadku metody obliczeniowe, wykorzystujące teoretyczną wiedzę i podejścia do obliczania właściwości układu, wchodzą do gry.

Biorąc pod uwagę potrzebę zbadania oddziaływań między segmentami o różnej strukturze chemicznej oraz moc metod obliczeniowych, projekt ten ma na celu opisanie szczególnego typu oddziaływań, a mianowicie wiązań wodorowych, w polimerach z pamięcią kształtu za pomocą metod teoretycznych. Stworzone układy modelowe zostaną podzielone na trzy grupy, a w ramach każdej z nich skład chemiczny fragmentów modeli będzie się różnił. Metody chemii obliczeniowej zostaną dalej zastosowane aby przeanalizować siłę i reorganizację oddziaływań pomiędzy poszczególnymi segmentami. Ta informacja pozwoli oszacować stopień separacji mikrofazowej badanych układów. Zarówno układy modelowe zadań projektowych są połączone w większy układ w ostatnim zadaniu projektowym, jak i metodologia użyta w pierwszej fazie projektu, pozwala na użycie metod modelowania wielkoskalowego w ostatniej fazie. Dokładna analiza uzyskanych wyników doprowadzi do kompleksowego wyjaśnienia głównych aspektów rozdzielenia mikrofazowego pod kątem oddziaływań międzyłańcuchowych i składu chemicznego polimerów z pamięcią kształtu.

Podsumowując, analiza kopolimerów z pamięcią kształtu przeprowadzona w ramach niniejszych badań dostarczy cennych informacji o oddziaływaniach w tych kopolimerach, poszerzając dotychczasową wiedzę na temat kluczowych aspektów mechanizmu pamięci kształtu.