A felhősödési ponton túl: Termoreszponzív polimerek fázisátmenetének kvantitatív elemzése

Beyond the Cloud Point: Quantitative Analysis of Thermoresponsive Polymer Phase Transitions

NAGY Tibor[1], ROP Aron Kipyegon[1,2], KUKI Ákos[1], RÓTH Gergő[1], NYUL Dávid[1], KÉKI Sándor[1]

[1] Debreceni Egyetem, Természettudományi és Technológiai kar, Alkalmazott Kémiai Tanszék, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország, +36 52 512 900/22454

[2]Kémiai Doktori Iskola, Debreceni Egyetem, Egyetem tér 1, H-4032 Debrecen, Magyarország, +36 52 512 900/22454

ABSTRACT

The phase transition of thermoresponsive polymers is often described by a single characteristic temperature, the cloud-point temperature T_{cp}. However, this approach does not account for the additional information contained in the shape of the phase-transition profile. In this work, the Richards function, a generalized logistic model, was applied for the quantitative analysis of the complete transmittance–temperature profile. Poly(N-isopropylacrylamide) (PNIPAM) and poly(N,N-diethylacrylamide) (PDEAAm) homopolymers with different molecular weights were investigated as model systems. The fitted function and its derivative enable the consistent determination of the phase-transition temperature, as well as the quantitative characterization of transition width and asymmetry. The transition width was characterized by the full width at half maximum (FWHM) of the derivative curve. The method clearly distinguished the markedly different transition profiles of PNIPAM and PDEAM, even when their cloud-point temperatures were similar.

Keywords: Richards function, thermoresponsive copolymers, turbidimetry, LCST-type polymer

ÖSSZEFOGLALÓ

A termoreszponzív polimerek fázisátmenetét gyakran egyetlen jellemző hőmérséklettel, a felhősödési ponttal T_{cp} írják le. Ez a megközelítés azonban nem veszi figyelembe a fázisátmeneti görbe alakjában rejlő további információkat. Munkánkban a teljes transzmittancia–hőmérséklet profil kvantitatív értékelésére a Richards-függvényt, azaz egy általánosított logisztikus modellt alkalmaztunk. Modellrendszerként különböző molekulatömegű poli(N-izopropil-akrilamid) (PNIPAM) és poli(N,N-dietil-akrilamid) (PDEAAm) homopolimereket vizsgáltunk. Az illesztett függvény és annak deriváltja lehetővé teszi a fázisátmeneti hőmérséklet egységes meghatározását, valamint az átmenet szélességének és aszimmetriájának számszerű jellemzését. Az átmenet szélességét a derivált görbe félértékszélességével (FWHM) jellemeztük. A módszer jól elkülönítette a PNIPAM és PDEAM jelentősen eltérő átmeneti profilját, még hasonló felhősödési hőmérséklet esetén is

Kulcsszavak: Richards függvény, thermoreszponzív kopolimerek, turbidimetria, LCST-típusú polimerek

Köszönetnyilvánítás: Köszönjük a következő pályázatoknak a munka során nyújtott anyagi segítséget: Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal (NKFIH) K-147503 és „A publikáció a 2025-1.2.1-HU-RIZONT-2025-00006 számú projekt keretében a Kulturális és Innovációs Minisztérium Nemzeti Kutatási Fejlesztési és Innovációs Alapból nyújtott támogatásával, a 2025-1.2.1-HU-RIZONT pályázati program finanszírozásában valósult meg.”