

Sebastian Lages

„Untersuchungen zum Kollabierungs- und Aggregationsverhalten von gelösten Polyacrylaten in Gegenwart zweiwertiger Kationen“

Polyacrylsäure-Natriumsalze gehören zu der Gruppe der Polyelektrolyte. Sie werden in technischen Anwendungen als Wasserenthärter, Superabsorber oder als Fällungsmittel für Schwermetalle aus Abwässern eingesetzt. Zudem dienen sie in der Grundlagenforschung als Modellpolyelektrolyte. In der vorliegenden Arbeit werden verdünnte, wässrige Salzlösungen von Polyacrylsäure-Natriumsalzen mittels Streumethoden untersucht um Informationen über den Kollabierungs- und Aggregationsprozess zu erhalten. Durch den Zusatz von Calcium-, Kupfer- oder Bleiionen wird der Kollabierungs- bzw. der Aggregationsprozess gestartet. Die zweiwertigen Kationen werden von den Carboxylgruppen der Polyacrylsäure komplexiert. Dadurch wird die Polyelektrolytkette hydrophober und kollabiert. Das Ausmaß der Kollabierung steigt mit der Menge der komplexierten Kationen. In Gegenwart von Calciumionen bewirkt eine Temperaturerhöhung eine Verstärkung der Kollabierung. Die globalen Dimensionen der Polyelektrolytketten werden mittels kombinierter statischer und dynamischer Lichtstreuung (SLS und DLS) ermittelt. Anhand der Datensätze aus den kombinierten SLS- und DLS-Experimenten werden Phasendiagramme der Polyacrylsäure-Natriumsalze in Gegenwart von Calcium- und Kupferionen erstellt. An ausgewählten Proben von Polyacrylsäure-Natriumsalzen in Gegenwart von Calciumionen werden temperaturabhängige Neutronenkleinwinkelstreuexperimente (SANS-Experimente) durchgeführt um Informationen über die interne Struktur der kollabierten Polyelektrolytketten zu erhalten. An die experimentellen Streukurven der SANS-Experimente werden theoretische Streukurven von literaturbekannten Modellen mit Hilfe von *non linear least squares* Rechnungen (NLS-Rechnungen) angepasst. An Polyacrylsäure-Natriumsalzen in Gegenwart von Bleiionen werden Röntgenkleinwinkelstreuexperimente (SAXS-Experimente) durchgeführt. Zur Interpretation dieser Daten wird im Rahmen der vorliegenden Arbeit ein neues Modell vorgestellt. An die experimentellen SAXS-Streukurven werden sowohl das neu vorgestellte Modell als auch ein literaturbekanntes Modell mit Hilfe von NLS-Rechnungen angepasst. Die Unterschiede zwischen den Modellen und den Ergebnissen der NLS-Anpassungen werden ausführlich diskutiert. Anhand resonanter SAXS-Experimente (ASAXS) kann die räumliche Verteilung der komplexierten Bleiionen experimentell ermittelt werden. Zudem ist es möglich die Anzahl der komplexierten Bleiionen aus den ASAXS-Experimenten zu ermitteln. Mit zeitaufgelöster SLS (TR-SLS) wird das Aggregationsverhalten der Polyacrylsäure-Natriumsalze in Gegenwart von Calcium- und Kupferionen nach dem Überschreiten der Phasengrenze untersucht. Die Streukurven der aggregierenden Polyelektrolytketten werden mit theoretischen Streukurven literaturbekannter Modelle verglichen. Anhand von Skalierungsgesetzen, die die Größe der Aggregate in Abhängigkeit von deren Masse angeben, wird der Aggregationsmechanismus analysiert.