

Munkánk legnagyobb eredményének azt tartjuk, hogy sikerült a pozitronannihilációs spektroszkópiát olyan területeken is bevezetni szerkezetvizsgáló módszerként, ahol eddig nem alkalmazták. Bár egyszerű polimerek esetében a pozitron-élettartam spektroszkópia széleskörűen alkalmazott módszer, polimerkeverékek, kopolimerek vizsgálatában nagyon ritkán alkalmazzák. Mivel a mindennapi életben alkalmazott polimerek nagy része keverék vagy kopolimer, fontosnak éreztük, hogy a módszer alkalmazhatóságát kiterjesszük ezekre a rendszerekre. Egyes rendszerek esetében sikerült azt is megmutatnunk, hogy a polimerek esetében rendkívül ritkán alkalmazott Doppler-spektroszkópia is szolgáltathat értékes eredményeket a polimerrendszer szerkezetére vonatkozóan.

Természetesen az ilyen komplex rendszerek esetében a pozitronannihilációs spektroszkópia önmagában nem elegendő a minta karakterizálására. Ezért egészítettük ki méréseinket *ab initio* számításokkal és hagyományos polimerszerkezet-vizsgáló módszerekkel.

Munkánk során behatóan vizsgáltuk a következő, gyógyszeriparban alkalmazott polimerrendszereket:

- polietilénoxid,
- metilcellulóz,
- metilcellulóz/polietilén glikol,
- polivinil pirrolidon,
- kitozán.

Vizsgáltuk a szabadterfogat változásait az öregedés hatására, a vízfelvétel szerepét, a lágyítószer koncentrációjának hatását, a lánchossz változásának következményeit. Több esetben a hatóanyag és a polimerhordozó kölcsönhatásait is sikerült megfigyelnünk. Ez utóbbi témában részt vettünk egy konkrét ipari megbízás teljesítésében is, mikor a famotidin nevű hatóanyag és különböző polimerhordozók kölcsönhatásait vizsgáltuk a Richter Gedeon cég megbízásából.

Amfifil kopolimereket és polimerkompozitokat is vizsgáltunk. A lánchossz és a szemcseméret, a nyomás és a hőmérséklet hatásait tanulmányoztuk ezeken a bonyolult rendszereken.

Sikerült megmutatnunk, hogy a pozitronannihilációs spektroszkópiák (élettartam, Doppler) fontos információkat szolgáltathatnak az olyan összetett polimerrendszerekről is, mint amilyen egy polimerkeverékbe ágyazott gyógyszerhatóanyag. Habár pusztán a pozitronos eredmények nem mindig mondják meg, mi történik a polimerben, de rendkívül érzékenyen jelzik a változásokat. Az élettartam-mérések a szabadterfogat változásait a Doppler-mérések pedig az elektronok impulzuseloszlásában bekövetkező változásokat. Példaként említjük a metilcellulóz/PEG rendszert, ahol a pozitronannihilációs mérések a hagyományos szerkezetvizsgáló módszereknél sokkal érzékenyebben jelezték a fázisseparatoráció megjelenését.

Azt gondoljuk, hogy a projekt keretében végzett munkánk bizonyítja, hogy a pozitronok sikerrel alkalmazhatók komplex polimerrendszerek vizsgálatára is. Természetesen nem önmagukban, hanem a hagyományos szerkezetvizsgáló módszerek és – egyes esetekben – *ab initio* számítások kiegészítése képpen. A Richter Gedeon cégnek végzett munkánk azt mutatja, hogy ezek a mérések iparilag is hasznosítható eredményeket szolgáltatnak.

A projekt keretében végzett munkát 14 referált folyóirat-cikkben, egy könyvfejezetben és 2 konferenciakiadványban megjelent cikkben foglaltuk össze. A megjelent cikkek összesített impaktja 20,7.