

Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών & Σύνθετων Υλικών

ΔΠΜΣ Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών και Σύνθετων Υλικών

Ονοματεπώνυμο: Γεώργιος Καλδίρης (Μηχανικός Περιβάλλοντος)

Τίτλος: **Μελέτη συμπεριφοράς & ενδεχόμενης αποδέσμευσης Spin-Crossover συμπλόκου Fe(II) από πολυμερικά σύνθετα υλικά για εφαρμογές συσκευασίας τροφίμων**

Τριμελής Επιτροπή: Γεώργιος Βογιατζής, (Επιβλέπων, Διευθυντής Ερευνών ΙΤΕ/ΙΕΧΜΗ), Ζωή Λαδά (Επ. Καθηγήτρια Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών), Κωνσταντίνος Ανδρικόπουλος (Αν. Καθηγητής Τμήμα Φυσικής Πανεπιστημίου Πατρών)

Ημ/μηνία: **Τρίτη 21 Οκτωβρίου 2025**

Ώρα: **16.00**

Τόπος: **Αίθουσα Σεμιναρίων Κτηρίου Α' ΙΤΕ/ΙΕΧΜΗ**

Περίληψη

Η παρούσα μεταπτυχιακή εργασία επικεντρώνεται στη μελέτη και ρύθμιση της θερμομαγνητικής συμπεριφοράς ενώσεων τύπου spin crossover (SCO), με στόχο την ανάπτυξη λειτουργικών, θερμοευαίσθητων φιλμ για εφαρμογές αισθητήρων. Κεντρική ιδέα αποτελεί ο διττός ρόλος της πολυμερικής μήτρας: αφενός, ως μέσο ενσωμάτωσης του SCO υλικού σε λειτουργικές διατάξεις και, αφετέρου και κυρίως, ως ενεργός ρυθμιστικός παράγοντας της SCO συμπεριφοράς μέσω των μοριακών αλληλεπιδράσεων που αναπτύσσονται μεταξύ των λειτουργικών ομάδων της ένωσης και του πολυμερούς. Έτσι, η μήτρα υπερβαίνει τον ρόλο του παθητικού φορέα, συμβάλλοντας στη ρύθμιση κρίσιμων παραμέτρων, όπως η θερμοκρασία εναλλαγής ($T_{1/2}$), το πλάτος υστέρησης και η κινητική της μετάβασης μεταξύ των καταστάσεων spin, καθορίζοντας τη συμπεριφορά του υλικού ως θερμοαισθητήρα.

Προς επίρρωση αυτών, η ένωση $\text{Fe}(\text{phen})_2(\text{NCS})_2$ ενσωματώθηκε σε τρεις πολυμερείς μήτρες, πολυστυρένιο (PS), πολυγαλακτικό οξύ (PLA) και πολυσουλφόνη (PSF), που επιλέχθηκαν βάσει της ικανότητάς τους να αναπτύσσουν διαφορετικού τύπου αλληλεπιδράσεις (δεσμοί H ή π-π) με το σύμπλοκο. Οι μετρήσεις έδειξαν ότι το $T_{1/2}$ διαφοροποιείται ανάλογα με τη μήτρα, ενώ το σύστημα PSF/SCO παρουσίασε τη χαμηλότερη ταχύτητα εναλλαγής, αποδεικνύοντας την πιο σταδιακή μετάβαση. Η μελέτη αποδέσμευσης πραγματοποιήθηκε τόσο για την αξιολόγηση της σταθερότητας των φιλμ, όσο και για την εκτίμηση της ισχύος των αλληλεπιδράσεων πολυμερούς-SCO. Τα αποτελέσματα αποκάλυψαν διαφοροποιήσεις στη συμπεριφορά των πολυμερών, με ορισμένες μήτρες να προσφέρουν υψηλό βαθμό συγκράτησης, ενισχύοντας τη βιωσιμότητά τους σε εφαρμογές που απαιτούν λειτουργική σταθερότητα και ασφάλεια.

Η εργασία αυτή μπορεί να συμβάλει ουσιαστικά στην κατανόηση και ανάπτυξη μεθόδων ελέγχου της SCO μετάβασης, ενός πεδίου ιδιαίτερης τεχνολογικής σημασίας. Η δυνατότητα αξιοποίησης της πολυμερικής μήτρας ως μοριακού εργαλείου ρύθμισης διευρύνει τις προοπτικές σχεδιασμού πολύ-λειτουργικών, ασφαλών και ελεγχόμενων υλικών για αισθητήρες θερμοκρασίας σε συσκευασίες τροφίμων και άλλες εφαρμογές.

Λέξεις Κλειδιά: Ενώσεις Spin Crossover, Πολυμερικά σύνθετα φιλμ, Θερμοευαίσθητοι αισθητήρες, Μελέτη αποδέσμευσης

Επιστήμη και Τεχνολογία Πολυμερών & Σύνθετων Υλικών

Abstract

This Master's thesis focuses on the study and modulation of the thermomagnetic behavior of spin crossover (SCO) compounds, with the aim of developing functional, thermoresponsive films for applications in sensors and smart packaging. The central hypothesis explored is the dual role of the polymeric matrix: on the one hand, as a practical means for integrating the SCO material into functional devices, and on the other—and more importantly—as an active agent capable of controlling SCO behavior through molecular interactions between the functional groups of the SCO complex and those of the polymer. In this way, the matrix is not merely a passive host but plays a decisive role in modulating key parameters of the transition, such as the switching temperature ($T_{1/2}$), hysteresis width, and the kinetics of the spin-state interconversion. These parameters are directly linked to the material's performance as a thermal sensor.

To support this objective, the $\text{Fe(phen)}_2(\text{NCS})_2$ complex was incorporated into three different polymeric matrices: polystyrene (PS), polylactic acid (PLA), and polysulfone (PSF), selected based on their ability to engage in different types of molecular interactions with the complex (e.g., hydrogen bonding or π - π stacking). Thermomagnetic measurements revealed that $T_{1/2}$ varies depending on the matrix, with the PSF/SCO system exhibiting the slowest switching kinetics, indicative of a more gradual transition. Release studies were also conducted, both to assess the stability of the films and to evaluate the strength of polymer-SCO interactions. The results highlighted distinct behaviors among the matrices, demonstrating that certain polymers offer enhanced retention capabilities, which is a critical parameter for the functional stability and safety required in sensor-based applications. This work contributes to the growing field of SCO control strategies—a field of considerable technological relevance and scientific interest. The concept that the polymeric matrix can act as a molecular “tuning” tool for SCO properties opens up new perspectives for the design of multifunctional, safe, and controllable materials suitable for temperature sensors in food packaging and beyond.

Keywords: Spin Crossover Compounds, Polymer Composite Films, Thermoresponsive Sensors, Migration Release Study

Σύντομο Βιογραφικό Ομιλητή: Ο κος Γεώργιος Καλδίρης είναι απόφοιτος του Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος (2016-2022) του Πανεπιστημίου Πατρών. Από το 2023 είναι μεταπτυχιακός φοιτητής του Τμήματος Χημικών Μηχανικών πραγματοποιώντας την έρευνα της Μεταπτυχιακής του Εργασίας στο Ινστιτούτο Επιστημών Χημικής Μηχανικής (ITE/ΙΕΧΜΗ) με τίτλο “Μελέτη συμπεριφοράς & ενδεχόμενης αποδέσμευσης Spin-Crossover συμπλόκου Fe(II) από πολυμερικά σύνθετα υλικά για εφαρμογές συσκευασίας τροφίμων”. Μέρος των αποτελεσμάτων της μεταπτυχιακής εργασίας του έχουν παρουσιαστεί σε διεθνή συνέδρια.

Short CV of Speaker: Mr. Georgios Kaldiris is a graduate of the Department of Environmental Engineering (2016–2022) at the University of Patras. Since 2023, he has been a postgraduate student at the Department of Chemical Engineering, conducting his Master's research at the Institute of Chemical Engineering Sciences (FORTH/ICE-HT). His thesis focuses on the “*Tuning the Spin-Crossover Behaviour in Fe(II) Polymeric Composites for Food Packaging Applications and migration release studies.*” Part of the results of his postgraduate research have been presented at international conferences.