

Povzetek

Predmeti iz poli(vinil klorida) (PVC) predstavljajo pomemben del sodobnih zbirk kulturne dediščine. PVC je bil prepoznan kot eden od polimernih materialov, ki so najbolj podvrženi razgradnji, zato potrebujemo podrobnejše raziskave za razumevanje mehanizmov razgradnje. Predmeti iz PVC lahko postanejo del zbirk tudi po koncu svoje življenjske dobe, ki jo definirajo industrijski standardi. Cilj tega dela je bil najprej razviti analizne metode za podrobnejšo karakterizacijo predmetov iz PVC. Kemijska sestava predmetov (identiteta in vsebnost mehčal, molska masa polimera in razvejanost) v zbirkah kulturne dediščine je do sedaj še v veliki meri neznana. Zato sem razvila, validirala in nato uporabila analizne metode na številnih raznolikih predmetih iz PVC, ki se nahajajo v referenčni zbirki Fakultete za kemijo in kemijsko tehnologijo Univerze v Ljubljani. Za kvalitativno in kvantitativno določanje mehčal v več kot 100 predmetih je bila uporabljena plinska kromatografija z masnim detektorjem ali plamensko-ionizacijskim detektorjem (GC-MS in GC-FID). Za izdelavo klasifikacijskih in regresijskih modelov za hitrejšo karakterizacijo mehčal v dediščinskih zbirkah sem neporušno posnela spektre predmetov v bližnjem infrardečem in srednjem infrardečem območju. Za identifikacijo mehčal v predmetih smo uspešno uporabili klasifikacijske algoritme strojnega učenja (linearna diskriminantna analiza (LDA), naivna Bayesova klasifikacija (NBC), metoda podpornih vektorjev (SVM), k-najbližjih sosedov (kNN), odločitveno drevo (DT) in odločitveno drevo z ekstremnim gradientnim vzponom (XGBDT)). Za določitev vsebnosti di(2-etilheksil) ftalata in dioktil tereftalata v predmetih iz PVC smo uporabili parcialno regresijo po metodi najmanjših kvadratov. Za točno določitev molske mase PVC z velikostno-izključitveno kromatografijo z detektorjem na večkotno sipanje svetlobe (SEC-MALS) je bila potrebna optimizacija postopka priprave vzorca. Optimizirano tehniko sem uporabila za opis obsega in porazdelitve molske mase zgodovinskih in sodobnih predmetov iz PVC ter za preučevanje sprememb molske mase zaradi pospešene razgradnje. Glavni cilj moje raziskave je bil modelirati razgradnjo PVC z razvojem škodne funkcije, ki ovrednoti prispevek spremenljivk k porumenelosti predmetov iz PVC. Eliminacija HCl iz PVC vodi do nastanka poliena, ki povzroči porumenelost materiala. Predmete iz referenčne zbirke sem izpostavila poskusom pospešene razgradnje, jih karakterizirala z razvitimi analiznimi metodami, porumenelost pa sem izrazila kot hitrost naraščanja b^* -koordinate v barvnem prostoru CIEL*a*b*. Višja temperatura in relativna vlažnost sta povečali hitrost razgradnje, medtem ko sta jo višja vsebnost mehčal in molska masa polimera zmanjšali. Izračunana aktivacijska energija rumenjenja je bila (86 ± 3) kJ/mol. Življenjsko dobo predmeta iz PVC, ki temelji na opazni spremembi barve, je mogoče napovedati na podlagi njegovih lastnosti in okoljskih pogojev skladiščenja. Razumevanje prispevka spremenljivk k razgradnji lahko pomaga pri določanju prioritet za konservacijo in pri razporejanju virov v zbirkah modernih materialov kulturne dediščine.