

Povzetek

Raziskovali smo proces micelizacije alkalijskih karboksliatov in kvarternih amonijevih kloridov v vodi, ki veljajo za predstavnike najpogostejših klasičnih surfaktantov. Uporabljali smo predvsem metodo izotermne titracijske kalorimetrije (ITC), izvedene pa so bile tudi meritve gostote, električne prevodnosti ter zeta potenciala vodnih raztopin. Dodatno smo z metodo dielektrične relaksacijske spektroskopije (DRS) preučevali hidratacijo prostih monomerov in micel kvarternih amonijevih surfaktantov v vodnih raztopinah.

Modele, ki se sicer večinoma uporabljajo za interpretacijo eksperimentalnih ITC podatkov, smo najprej izpopolnili z odpravo običajno uporabljenih predpostavk, ki so bile bodisi napačne bodisi je bila uporaba modela v širokem temperaturnem območju problematična. Vendar pa tudi v izboljšanih modelih še vedno privzamemo, da lahko micelizacijo obravnavamo kot ravnotežje med monomeri in micelami ene velikosti oziroma kot enostopenjski model s konstantnim agregacijskim številom. Ugotovili smo, da to za surfaktante z majhnimi agregacijskimi števili v širokem temperaturnem območju slabo velja. Zato smo uvedli dvostopenjski model micelizacije, s pomočjo katerega vsako stopnjo procesa opišemo s svojo ravnotežno konstanto, agregacijskim številom in termodinamskimi parametri.

Za preučevane klasične ionske surfaktante je bilo potrjeno, da je proces micelizacije entropijsko voden proces, torej je hidrofobni efekt gonilna sila tvorbe micel v vodnih raztopinah. Izkazalo se je, da je za surfaktante z manj kot 12 ogljikovimi atomi v alkilni verigi, povprečno agregacijsko število precej odvisno od temperature in koncentracije. Medtem pa so bila agregacijska števila za katanionske surfaktante s primerljivima dolžinama alkilnih verig klasičnim ionskim surfaktantom precej večja in bi micelizacijo lahko opisali kot enostopenjski proces. Vendar pa smo z uporabo dvostopenjskega modela, pri katerem smo za eno izmed stopenj predpostavili tvorbo nevtralnih za drugo pa nabitih micel, dosegli veliko boljše ujemanje z eksperimentalnimi podatki. Torej lahko privzamemo, da se v prvi stopnji tvorijo manjše, nevtralne micidele, ki imajo še vedno delno hidratirane alkilne verige, medtem ko v drugi stopnji nastajajo večje, nabite micidele, ki imajo popolnoma dehidratirane alkilne verige. Predpostavko skoraj nevtralnih micel smo potrdili tudi z dobljenimi vrednostmi zeta potenciala in električne prevodnosti.