

Povzetek

V tej disertaciji smo sintetizirali 13 površinsko aktivnih ionskih tekočin, surface active ionic liquids, SAILs, in njihove micelizacijske lastnosti preučevali z izotermično titracijsko kalorimetrijo, ITC. Eksperimentalne podatke smo analizirali s pomočjo modela, ki predpostavlja ravnotežje med monomeri in micelami s konstantnim agregacijskim številom. Za potrditev doblejnih rezultatov smo za vse sisteme izvedli simulacije molekularne dinamike, MD. Raziskave smo zaključili s testiranjem toksičnosti preučevanih sistemov na kulturo pšenice, da bi preučili vpliv strukturnih sprememb SAIL na stopnjo toksičnosti.

Pridobljeni termodinamski parametri za micelizacijo kažejo, da se preiskovani sistemi obnašajo podobno kot večina običajnih ionskih površinsko aktivnih snovi in že preučevanih SAILs: pri nizkih temperaturah je micelizacija entropijsko voden proces (zaradi hidrofobnega efekta), medtem ko pri višjih temperaturah entalpijski prispevek postane enako pomemben (možno zaradi vezave protiionov). Ugotovili smo, da izomerija protiionov in najbolj vpliva na proces micelizacije, potem sledi podaljšanje dolžine krajše alkilne verige na imidazolijskem obroču, najmanjši efekt pa ima izomerija kationov. Simulacije MD so pokazale, da imajo sterična ovira poleg hidracije in ionsko-ionskih interakcij zelo pomembno vlogo v procesu samoagregacije. Dodatno smo s testi toksičnosti na pšenici pokazali, da podaljšanje krajše alkilne verige na kationu in izomerija aniona in/ali kationa nimata pomembne vloge pri povečanju ali zmanjšanju toksičnosti. Očitno je hidrofobni karakter spojine ključna lastnost, ki narekuje stopnjo toksičnosti, zato lahko sklepamo, da ima najdaljši substituent na kationu največji vpliv na celotno toksičnost SAILs.

Ključne besede: termodinamika, površinsko aktivne ionske tekočine, micelizacija