

Tytuł polski: „Nowa generacja surfaktantów wieloładunkowych o dedykowanej funkcjonalności”

Tytuł angielski: “New generation of multi-charge surfactants of dedicated functionality”

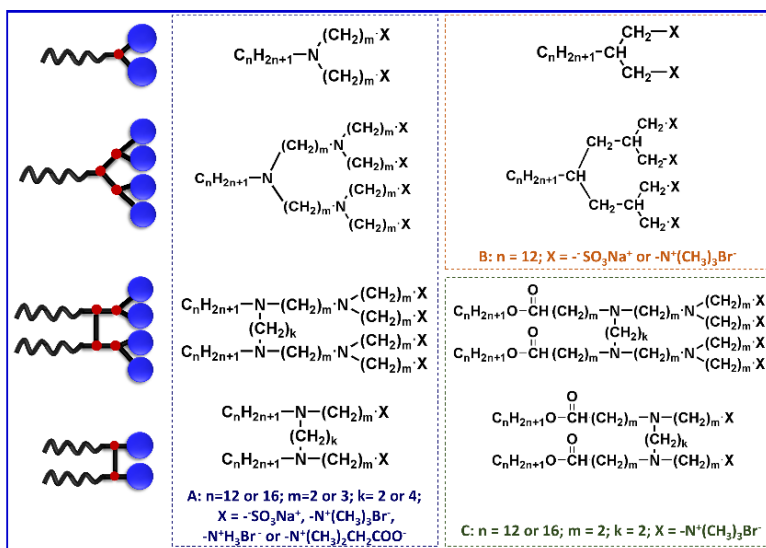
Kierownik projektu: prof. dr hab. inż. Kazimiera Wilk (PW) - lider

Partner: prof. dr hab. inż. Piotr Warszyński

Numer projektu: 2022/45/B/ST4/01184

Współczesne badania naukowe nad surfaktantami i związane z nimi opracowania technologiczne obejmują różnorodne wymagania dotyczące projektowania struktur o bardzo zróżnicowanej architekturze celem uzyskania dedykowanych funkcjonalności i właściwości fizykochemicznych. Takie podejście jest niezbędne, aby można je było zastosować w nowoczesnych technologiach, tj. inżynierii nanostruktur czy restrukturyzacji powierzchni, a także jako wysokowartościowe chemikalia (np. jako surfaktanty magnetyczne, stabilizatory nanocząstek czy czynniki reaktywne na granicy faz). Właściwości i działanie współczesnych związków powierzchniowo czynnych, tzw. surfaktantów specjalistycznych, można kontrolować poprzez pewne niewielkie modyfikacje strukturalne: funkcjonalizację struktury surfaktantu poprzez włączenie dodatkowego łańcucha alkilowego (np. struktury z dwoma ugrupowaniami hydrofobowymi i pojedynczą grupą hydrofilową) lub ugrupowania polarnego (np. struktury wieloładunkowe zawierające kilka ugrupowań hydrofilowych), a także poprzez dodanie łącznika, np. ugrupowania estrowego, łączącego części hydrofobowe i hydrofilowe. Takie modyfikacje mogą umożliwić wytworzenie szerokiej gamy unikatowych struktur funkcjonalnych, zawierających wiele ugrupowań jonowych o różnej architekturze i przeznaczeniu.

W niniejszym projekcie zostanie zsyntetyzowanych i scharakteryzowanych kilka grup nowych surfaktantów wieloładunkowych, zarówno o strukturze dwufunkcyjnej (typu dicephalic), jak i o strukturze dimerycznej (typu gemini), zawierających dendrytyczne ugrupowania hydrofilowe (standardowe G1 i nowe struktury G2, jak pokazano obok). Ogólnie rzecz biorąc, aby efektywnie zsyntetyzować zaprojektowane surfaktanty wieloładunkowe - w większości przypadków - będzie przeprowadzana synteza



modularna oparta na reakcjach krok po kroku z wykorzystaniem odpowiednich bloków budulcowych. Takie podejście obejmuje grupę ścieżek syntetycznych wykorzystujących inicjator (np. źródło ugrupowania hydrofobowego lub hydrofilowego) oraz odpowiednie bloki budulcowe umożliwiające wielokrotną reprodukcję poprzedniej grupy końcowej. W przypadku hydrofilowego inicjatora przeprowadzona będzie reakcja sprzęgania grupy hydrofobowej z modułem utworzonym fragmentem hydrofilowym o strukturze dendroniowej. Po syntezach zostaną przeprowadzone szeroko zakrojone badania eksperymentalne w celu ustalenia właściwości adsorpcyjnych i agregacyjnych syntetyzowanych surfaktantów wieloładunkowych oraz oceniony zostanie ich potencjał do tworzenia nanostruktur lub specjalistycznych produktów funkcjonalnych. Tym zadaniom towarzyszyć będą również badania teoretyczne, które dzięki zastosowaniu zaawansowanych modeli i dobrze zdefiniowanych parametrów fizycznych, pozwolą na gruntowne opisanie obserwowanych zjawisk.

Naszym celem jest zatem wytworzenie i ocena nowych, indywidualnie zaprojektowanych struktur wieloładunkowych, wychodząc z założenia, że ich unikatowe zależności: struktura chemiczna - właściwości samoorganizowania się na granicy faz i w roztworze, mogą pozwolić na otrzymanie szeregu cennych produktów o nowych funkcjonalnościach, np. powierzchniowo aktywne polielektrolitowo-surfaktantowe kompleksy (PSK) jako nowe nośniki leków, surfaktanty o właściwościach magnetycznych, biologicznie aktywne nanocząstki metali stabilizowane surfaktantami wieloładunkowymi oraz środki przeciwdrobnoustrojowe. Planowane jest zastosowanie zarówno dynamicznego rozpraszania światła (DLS), jak i uporządkowanego dyfuzyjnego rezonansu magnetycznego (DOSY NMR) do monitorowania powstawania PSK w różnych mediach (czysta woda, roztwory zasadowe lub kwaśne). Aby wywnioskować wymagane korelacje między strukturami surfaktantów a ich zachowaniem agregacyjnym w kierunku ustalenia ich potencjalnych zastosowań, w strukturach surfaktantów wyróżniono następujące cechy: długość łańcucha alkilowego, liczba generacji rozgałęzień (G0, G1 i G2), rodzaj jonowej grupy hydrofilowej. Zastosowanie metod dynamiki molekularnej w połączeniu z podejściem opartym o termodynamiczne modele adsorpcji wieloładunkowych surfaktantów umożliwi wyjaśnienie obserwowanych eksperymentalnie zjawisk. Może również stanowić podstawę do opracowania nowych produktów o cennych cechach użytkowych. Tego rodzaju zintegrowane podejście jest stosunkowo rzadko spotykane w literaturze. Uzyskane wyniki mogą poszerzyć naszą wiedzę i zwiększyć możliwości w projektowaniu materiałów funkcjonalnych dla różnorodnych zastosowań przemysłowych i akademickich.