



národní  
úložiště  
šedé  
literatury

**Fyzikálně-chemický popis chirálních iontových kapalin, jejich využití a dopad na životní prostředí**

Andresová, Adéla  
2013

Dostupný z <http://www.nusl.cz/ntk/nusl-155862>

Dílo je chráněno podle autorského zákona č. 121/2000 Sb.

Tento dokument byl stažen z Národního úložiště šedé literatury (NUŠL).

Datum stažení: 18.05.2024

Další dokumenty můžete najít prostřednictvím vyhledávacího rozhraní [nusl.cz](http://nusl.cz) .

# Fyzikálně-chemický popis chirálních iontových kapalin, jejich využití a dopad na životní prostředí

*Doktorand: Ing. Adéla Andresová*  
*Školitel: Ing. Magdalena Bendová, Ph.D.*

Iontové kapaliny (ILs) mají v současné době využití v mnoha odvětvích chemie, ale také ve strojírenství, elektrotechnice a dalších oborech [1]. V oblasti chemie v poslední době roste zájem o povrchově aktivní iontové kapaliny (SAILs) s dlouhými řetězci, které vykazují lepší povrchovou aktivitu [2]. Tyto organické soli našly také uplatnění jako náhrada za klasická rozpouštědla nebo jako přímý katalyzátor v oblasti organické chemie [3], jako reakční systémy při enantioselektivních reakcích [4], anebo jako součást biokatalytických transformací a enzymatických reakcí [5]. Využívají se v celé řadě organických syntéz a rovněž se prosazují v různých analytických technikách, jako jsou např. extrakce, chromatografie a hmotnostní spektrometrie [6].

V poslední době se značně rozvíjí syntéza chirálních iontových kapalin (CILs) a jejich výsadní uplatnění v oblasti heterogenní katalýzy, Diels-Alderových reakcí, Michaelových adicí a Baylis-Hillmanovy syntézy [7]. CILs nabízí zásadní alternativu pro heterogenní katalýzu, především pro stereoselektivní hydrogenace. Jsou součástí moderních systémů, jež mají variabilní fázové chování, odhalují možnosti syntézy opticky čistých aktivních látek a podporují vývoj syntetických postupů šetrnějších k životnímu prostředí. Vlivem drobných změn v jejich struktuře je lze účinněji optimalizovat pro dané reakční systémy. Tyto látky jsou rovněž důležité pro vývoj, ověřování a predikci termodynamických modelů. Pro návrh účinné aplikace CILs je nezbytná znalost celé řady vlastností těchto čistých látek, ale i jejich směsí.

Studie je zaměřena na charakterizaci termodynamických vlastností čistých CILs s menthoxymethyl substituentem a jejich směsí, které by mohly být použity jako reakční média a zdroj chiralit ve stereoselektivních hydrogenacích, které jsou důležité pro farmaceutický průmysl. Jedna z předních vlastností chirálních iontových kapalin s menthoxymethyl substituentem jsou jejich antimikrobiální a antielektrostatické vlastnosti. Budou zkoumány termodynamické vlastnosti homologické řady 1-[(1*R*, 2*S*, 5*R*)-(–)-menthoxymethyl]-3-alkylimidazoliolových solí

s bis(trifluoromethanesulfonyl)imidovým aniontem, kde u kationtu bude navázaným alkylem methyl-, butyl-, nonyl-, decyl- a dodecyl-. Zejména se bude zjišťovat hydrofobní či hydrofilní charakter látek a vliv struktury a délky alkylového řetězce na jejich vlastnosti. Z termofyzikálních vlastností čistých CILs budou stanoveny tepelné kapacity a index lomu. U směsí budou popsány fázové rovnováhy CIL + voda a CIL + 1-oktanol, rovnováha kapalina-kapalina ve vícesložkových systémech má podstatný význam pro průmyslové aplikace. Fázová rovnováha ve vícesložkových systémech s CIL má také značný význam pro posouzení toxicity, biologické rozložitelnosti a tendence k bioakumulaci. Z tohoto hlediska je klíčová vlastnost rozpustnost CIL a rozdělovací koeficient 1-oktanol/voda KOW užívaný k odhadu lipofility látky. Současné studie ukazují, že některé dnes běžně používané ILs jsou toxické a jejich toxicita se značně liší napříč trofickou úrovní ekosystému. Soudobý výzkum toxicity těchto látek je nedostatečný a nepostačující k odhadu potencionálního vlivu na životní prostředí.

K popisu čistých CILs, měření izobarické tepelné kapacity, bylo použito diferenciální skenovací kalorimetrie (DSC). Rovnováha kapalina-kapalina v systému CIL + voda a CIL + 1-oktanol byla stanovena objemovou, zákalovou a přímou analytickou metodou s UV/VIS spektrofotometrickou detekcí.

První výsledky ukazují, že CIL1- s methylovou funkční skupinou je hydrofobní a lipofilní. Rozpustnost ve vodě při teplotě 293,15 K je  $2,1 \cdot 10^{-6}$  molárního zlomku, s rostoucí teplotou nepatrně stoupá a je přibližně pětkrát nižší, než rozpustnost v 1-oktanolu.

#### Literatura

1. Koddermann T., Wertz C., Heintz A., Ludwig R.: *Angewandte Chemie – International Edition*. 2006, 45 (22), 3697–3702.
2. Mahajan S., Sharma R., Mahajan R. K.: *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*. 2013, 424, 96–104.
3. Wong W.-L., Wong K.-Y.: *Canadian Journal of Chemistry*. 2012, 90 (1), 1–16.
4. Shariati A., Sheldon R. A., Witkamp G. J., Peters C. J.: *Green Chemistry*. 2008, 10 (3), 342–346.
5. Illanes A., Cauerrhff A., Wilson L., Guillermo R. C.: *Bioresource Technology*. 2012, 115, 48–57.
6. Joshi M. D., Anderson J. L.: *RSC Advances*. 2012, 2 (13), 5470–5484.
7. Schulz, P. S.; Schneiders, K.; Wasserscheid, P.: *Tetrahedron Asymmetry*. 2009, 20 (21), 2479–2481.