

Ciecze jonowe to unikalna grupa związków chemicznych, która od ponad dwóch dekad stanowi przedmiot intensywnych badań wielu ośrodków naukowych i przemysłowych. W najprostszy sposób można je zdefiniować jako substancje organiczne o charakterze jonowym, które charakteryzują się ciekłym stanem skupienia w temperaturze poniżej 100°C. Popularność cieczy jonowych wynika z ich nietypowych, często wielofunkcyjnych właściwości, dzięki którym znalazły one zastosowanie m. in. jako elektrolity w układach do magazynowania energii, media reakcji chemicznych oraz enzymatycznych, substancje dezynfekcyjne, antyelektrostatyczne, zmiękczejące czy związki powierzchniowo czynne. Nowe możliwości zastosowania cieczy jonowych dało wprowadzenie w ich strukturę jonu o działaniu pestycydowym. W ten sposób wprowadzono do literatury światowej nowe substancje aktywne, zdolne do zwalczania organizmów szkodliwych lub niepożądanych zarówno w roślinach uprawnych jak i magazynowanym zbożu. W ciągu ostatnich lat opisano udane próby syntezy cieczy jonowych: o właściwościach chwastobójczych (herbicydowe ciecze jonowe); o właściwościach grzybobójczych (fungicydowe ciecze jonowe), o właściwościach antyżywniowych (detergentne ciecze jonowe).

W ramach realizacji projektu pt. „*Badania nad syntezą, charakterystyką fizykochemiczną oraz aktywnością biologiczną estryfikowanych form betainy jako wielofunkcyjnych cieczy jonowych do efektywnego zwalczania agrofagów*” zostaną opracowane efektywne metody otrzymywania nowych cieczy jonowych zaprojektowanych jako proekologiczne, wielofunkcyjne środki ochrony roślin oraz plodów rolnych. Synteza będzie miała charakter dwuetapowy, gdzie kluczowym reagentem będzie betaina – występująca w środowisku naturalnym pochodna aminokwasu glicyny, która stanowi jeden z głównych produktów ubocznych przemysłu cukrowniczego. W pierwszym etapie betaina zostanie poddana reakcji O-alkilowania odpowiednim czynnikiem alkilującym wprowadzającym określoną funkcję/właściwość do kationu. Następnie, dla otrzymanych estryfikowanych form betainy zostaną przeprowadzone reakcje wymiany anionu halogenkowego na aniony wykazujące określoną aktywność biologiczną (herbicydową, fungicydową oraz detergentną). W nawiązaniu do doniesień literaturowych opisujących znaczący wpływ długości łańcucha węglowego w cząsteczce cieczy jonowej na jej aktywność biologiczną, zakłada się zsyntezowanie szeregów homologicznych, różniących się długością grup alkilowych zarówno w kationie jak i w anionie. Struktury uzyskanych produktów zostaną potwierdzone m.in. za pomocą spektroskopii ultrafioletu (UV), podczerwieni (IR), magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR). Ponadto zostanie określony wpływ struktury jonów budujących nowe sole na położenie sygnałów pochodzących od odpowiednich atomów/grup funkcyjnych na skolekjonowanych widmach.

W kolejnym etapie, dla otrzymanych cieczy jonowych zostaną wyznaczone podstawowe właściwości fizykochemiczne, takie jak lepkość, współczynnik załamania światła, gęstość oraz rozpuszczalność w wytypowanych popularnych rozpuszczalnikach charakteryzujących się różną polarnością mierzoną w skali Snydera. Skaningowa kalorymetria różnicowa posłuży do wyznaczenia temperatur trzech przemian fazowych: zeszklenia, topnienia oraz krystalizacji dla otrzymanych produktów. Natomiast za pomocą analizy termogravimetrycznej zostanie określona ich stabilność termiczna w porównaniu wyjściowych reagentów.

Dla wybranych estryfikowanych form betainy zostanie zbadana aktywność biologiczna (herbicydowa, fungicydowa oraz detergentna), a uzyskane wyniki zostaną porównane ze stosowanymi obecnie preparatami komercyjnymi. Doświadczenia będą miały na celu potwierdzenie faktu zachowania aktywności biologicznej przez testowane związki oraz wytypowanie układów o najwyższej skuteczności, przewyższającej preparaty referencyjne. Bardzo ważnym aspektem projektu będzie określenie wpływu nowych związków na środowisko poprzez badania toksyczności, biodegradacji, lotności oraz ryzyka przenikania do wód gruntowych. Z uwagi na fakt, że ciecze jonowe oferują możliwość dostosowania właściwości poprzez zmianę struktury chemicznej zarówno kationów jak i anionów, końcowym etapem będzie ustalenie korelacji między różnymi właściwościami fizykochemicznymi lub biologicznymi a strukturą chemiczną produktów otrzymanych w trakcie projektu. Wszystkie te odkrycia pozwolą na znaczną poprawę wiedzy z zakresu projektowalności cieczy jonowych.

Podsumowując, zaprojektowane ciecze jonowe zawierające w kationie estryfikowane formy betainy, to substancje o potencjalnie zmniejszonym wpływie na środowisk naturalne. Będą one również tanie w produkcji, co wynika z dostępności i niskiej ceny źródeł kationu jak i anionu. Ze względu na obecność wiązania jonowego w cząsteczce związki te charakteryzują się znikomą prężnością par, co eliminuje zagrożenie zatrucia parami pestycydów i czyni je atrakcyjnymi substancjami aktywnymi do efektywnego zwalczania agrofagów.