

Czwartorzędowe sole amoniowe (CSA) to organiczne związki azotu występujące powszechnie w przyrodzie, co przyczynia się do bogatego spektrum ich właściwości. Obszerne badania nad tymi substancjami przez dziesięciolecia zaowocowały różnymi istotnymi odkryciami, które umożliwiły ich skuteczne zastosowanie w wielu produktach, jako środki lecznicze, agrochemikalia lub biocydy. Te, które posiadają strukturę amfifilową, wykazują zdolność do obniżania napięcia powierzchniowego wody i w konsekwencji są klasyfikowane jako surfaktanty kationowe. Co interesujące, unikalne elementy w strukturze CSA pozwalają na ich skuteczne wykorzystanie jako środki dezynfekujące o działaniu przeciwbakteryjnym i przeciwgrzybicznym. Najczęściej spotykane CSA w aktualnie dostępnych na rynku środkach dezynfekcyjnych to chlorki alkilodimetylobenzyloamoniowe (BAC), chlorki dialkilodimetyloamoniowe (DDAC) i chlorki alkilotrimetyloamoniowe (ATMAC). Ich szerokie stosowanie w przemyśle prowadzi do obecności w ściekach, a następnie do potencjalnego zanieczyszczenia wód gruntowych i gleby. Ponadto, kolejnym rosnącym problemem związanym z dezynfekantami jest rozwój odporności organizmów, na które są skierowane. Ostatnie lata, zwłaszcza pandemia, przyciągnęły uwagę naukowców i przemysłu do konieczności opracowania nowych, bezpiecznych dla środowiska i ludzi, a także skutecznych formułacji, które umożliwią zwalczanie szkodliwych mikroorganizmów. W ramach realizacji projektu pt. „Esterquaty na bazie surowca pochodzenia naturalnego - karnityny jako obiecująca alternatywa dla w pełni syntetycznych biologicznie aktywnych czwartorzędowych soli amoniowych” zostaną opracowane efektywne metody otrzymywania nowych CSA zaprojektowanych jako proekologiczne, wielofunkcyjne środki antymikrobowe. Synteza będzie realizowana w sposób pozwalający wprowadzić komercyjne związki o aktywności przeciwmikrobowej (kwas 2-furanokarboksylowy, kliokwinol, penicylina G, ftalocyjanina cynkowa) jako anion (ścieżka A) lub jako fragment kationu (ścieżka B), przyłączony poprzez wiązanie estrowe i odpowiedni łańcuch alkilowy. Kluczowym reagentem będzie występująca w środowisku naturalnym karnityna, która zostanie alkilowana przy pomocy odpowiednich bromoalkanów (A) lub funkcjonalizowanych czynników alkilujących (B), stworzonych z wcześniej wspomnianych środków przeciwmikrobowych. W pierwszym etapie karnityna zostanie poddana reakcji *O*-alkilowania odpowiednim czynnikiem alkilującym wprowadzającym określoną funkcję/właściwość do kationu. Następnie, dla otrzymanych estryfikowanych form karnityny zostaną przeprowadzone reakcje wymiany anionu halogenkowego na aniony wykazujące aktywność przeciwmikrobową. W nawiązaniu do doniesień literaturowych opisujących znaczący wpływ długości łańcucha węglowego w cząsteczce CSA na jej aktywność biologiczną, zakłada się zsyntezowanie kilku związków, różniących się długością grup alkilowych zarówno w kationie. Struktury uzyskanych produktów zostaną potwierdzone m.in. za pomocą spektroskopii ultrafioletu (UV), podczerwieni (IR), magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR). W kolejnym etapie, dla otrzymanych związków zostaną wyznaczone podstawowe właściwości fizykochemiczne 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. Następnie zbadane zostaną właściwości powierzchniowe otrzymanych związków, takie jak minimalne stężenie micelizacji (CMC) oraz napięcie powierzchniowe w tym stężeniu, które są podstawowymi parametrami charakteryzującymi środki myjąco-czyszczące. W celu sprawdzenia aktywności antymikrobowej, zbadane zostaną właściwości biobójcze badanych związków wobec dwóch modelowych bakterii powodujących zakażenia wewnątrzszpitalne oraz dwóch modelowych grzybów, powodujących choroby osób o osłabionym systemie odpornościowym. Aby sprawdzić profil ekotoksykologiczny otrzymanych związków, zbadana zostanie ich toksyczność wobec modelowych skorupiaków (*Daphnie*, *Artemie*) czy alg zielonych (*Chlorella Vulgaris*) oraz podatność na biodegradację. 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 i biodegradacji. 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 CSA. Podsumowując, zaprojektowane sole zawierające w kationie estryfikowane formy karnityny, to wielofunkcyjne biocydy o potencjalnie zmniejszonym wpływie na środowisk naturalne.