

Surfaktanty, czyli związki powierzchniowo czynne (ZPC), są nieodłącznym elementem życia codziennego każdego człowieka, świadczy o tym choćby wielkość globalnej produkcji, jak i mnogość zastosowań. ZPC skrywają w sobie wiele niezwykłych właściwości, takich jak zdolność do obniżania napięcia powierzchniowego oraz tworzenia micel. Oprócz najbardziej znanych micel kulistych, mogą powstawać również agregaty o różnorodnym kształcie, w tym długie micelle nazwane robaczkowymi.. Te tak zwane „żywe polimery” nadają wielu płynom charakterystyczną, żelową konsystencję. To właśnie one odpowiadają za łatwość rozprowadzania i przyjemną teksturę szamponów i żeli pod prysznic. Nazwa „żywe polimery” oznacza, że płyny, w których powstały micelle robaczkowe mają podobne właściwości reologiczne do roztworów polimerów. Jakkolwiek występuje jedna zasadnicza różnica. Między merami polimeru występują wiązania kowalencyjne, natomiast między cząsteczkami surfaktantów, z których zbudowana jest micela oddziaływania natury fizycznej, które ulegają ciągłemu rozpadowi i odbudowie.

Jednym z kluczowych parametrów opisujących micelle robaczkowe jest energia rozpadu, czyli energia potrzebna do przerwania miceli na dwie części. Tradycyjne metody jej wyznaczania, takie jak kriomikroskopia (Cryo-EM) czy rozpraszanie neutronów (SANS), są czasochłonne, kosztowne i wymagają specjalistycznej infrastruktury. Nawet bardziej dostępne pomiary reologiczne wymagają precyzyjnej optymalizacji stężeń i składu mieszaniny, aby umożliwić utworzenie micel robaczkowych, co również wiąże się z długotrwałymi pomiarami. W tym kontekście obiecującym kierunkiem badań podstawowych stają się modelowanie molekularne i teoria termodynamiczna (MTT), które pozwalają zgłębić mechanizmy samoorganizacji.

Głębsze zrozumienie procesów samoorganizacji jest kluczowe dla opracowania modeli predykcyjnych opisujących tworzenie i transformację miceli. Celem niniejszego projektu jest ilościowy opis procesów asocjacji micelarnej z wykorzystaniem MTT oraz weryfikacja jej przewidywań za pomocą pomiarów reologicznych. W efekcie powstaną predykcyjne ramy teoretyczne możliwe do zastosowania w złożonych wieloskładnikowych układach surfaktantów. Badaniami objęte zostaną zarówno klasyczne układy (np. SDS/NaBr, TTAB/NaBr), jak i nowe mieszaniny surfaktantów niejonowych i anionowych z dodatkiem soli.

Energia rozpadu zostanie wyznaczona zarówno na podstawie oscylacyjnych pomiarów reologicznych, jak i danych dotyczących napięcia międzyfazowego, z wykorzystaniem MTT. Dodatkowo zostaną przeprowadzone symulacje komputerowe w celu sprawdzenia zdolności predykcyjnych MTT w zastosowaniu do nowych układów. Model ten, opierając się na podstawowych parametrach, takich jak napięcie międzyfazowe i stężenia składników, umożliwi oszacowanie energii rozpadu miceli oraz liczby agregacji. Następnie uzyskane wyniki zostaną zintegrowane z reologicznym modelem Catesa, co pozwoli na przewidywanie właściwości lepkosprężystych tych płynów. Dzięki tym parametrom model umożliwi ocenę, na ile przewidywania teoretyczne odzwierciedlają obserwowane eksperymentalnie zachowanie miceli oraz ich właściwości reologiczne. Projekt wprowadza **dwie innowacje**:

- 1) **Zastosowanie MTT do mieszanin surfaktantów niejonowych i anionowych.** Dotychczas MTT stosowano głównie do układów jonowych z dodatkiem soli lub mieszanin surfaktantów niejonowych. Projekt ten jako pierwszy zaadaptuje i zastosuje MTT do mieszanin surfaktantów niejonowych i anionowych, umożliwiając analizę teoretyczną formulacji, które nie były dotąd opisywane w literaturze. Wsparcie w postaci pomiarów napięcia międzyfazowego pozwoli na lepsze zrozumienie zachowania micel w bardziej złożonych układach.
- 2) **Analiza porównawcza danych reologicznych i predykcji MTT.** W ramach projektu po raz pierwszy zostanie przeprowadzone bezpośrednie porównanie wyników MTT z danymi reologicznymi, co pozwoli ocenić dokładność modelu oraz opracować predykcyjne, oparte na symulacjach podejście do charakterystyki micel robaczkowych.

Razem, te innowacje tworzą zintegrowane podejście do opisu miceli robaczkowych, łącząc dane reologiczne z napięciem międzyfazowym za pomocą modelowania termodynamicznego. Takie podejście przyczyni się do rozwoju podstawowej wiedzy o surfaktantach i może umożliwić prognozowanie właściwości płynów na podstawie prostych parametrów układu, stanowiąc cenne narzędzie dla przyszłych badań nad układami koloidalnymi opartymi na samoorganizacji.