

PŮVODNÍ A METODICKÉ PRÁCE

ŠTÚDIUM VPLYVU CHLORIDOV A BROMIDOV NA KRITICKÚ MICELOVÚ KONCENTRÁCIU A PARCIÁLNY MÓLOVÝ OBJEM KVARTÉRNEJ AMÓNIOVEJ SOLI

EVA SALANCI^a, FILS ANDRIAMAINTY^a,
DOMINIKA ADAMOVE^a a ROMAN MIKLÁŠ^b

^a Katedra farmaceutickej chémie, ^b Katedra chemickej teórie liečiv, Farmaceutická fakulta, Univerzita Komenského, Odbojárov 10, 832 32 Bratislava, Slovenská republika
salanci@fpharm.uniba.sk

Došlo 15.2.21, prijaté 5.10.21.

Kľúčové slová: kritická micelová koncentrácia, soli, hustota, parciálny mólový objem

• <https://doi.org/10.54779/chl20220042>

Úvod

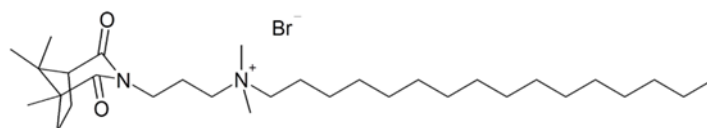
Kvartérne amóniové soli patria medzi látky, ktoré sa vyznačujú antimikrobiálnou aktivitou a preto sa zaraďujú medzi dezinfekčné látky. Cieľom štúdia kvartérnych amóniových solí je nájsť takú látku, ktorá bude mať nízku lokálnu dráždivosť a zároveň bude mať dobrú účinnosť^{1,2}. Keďže rezistencia baktérií na antimikrobiálne lieky sa naďalej zvyšuje, je potrebné syntetizovať a skúmať nové štruktúry. Zároveň je dôležité študovať a postupne kompletizovať fyzikálno-chemické, farmakokinetické a farmakodynamické vlastnosti týchto látok³. Keď koncentrácia povrchovo aktívnej látky vo vode dosiahne určitú hodnotu, ktorá sa označuje ako kritická micelová koncentrácia (CMC), nastane zhukovanie jej monomérov do micíel^{4,5}. Hodnota CMC je ovplyvňovaná rôznymi faktormi ako napr. samotná štruktúra tenzidov, prítomnosť aditív alebo zmena teploty⁶. Už aj nepatrné zmeny v podmienkach vedú k zmene schopnosti tvoriť micelové agregáty. Kritic-

kú micelovú koncentráciu je možné stanoviť rôznymi fyzikálnymi metódami, ako je napríklad meranie elektrickej vodivosti, povrchového napätia alebo meranie turbidity, pretože s formovaním micíel sa rapídne menia fyzikálne vlastnosti roztokov⁷⁻⁹. Pri kritickej micelovej koncentrácii sa v dôsledku tvorby micíel menia smernice koncentračných závislostí fyzikálnochemických vlastností roztokov povrchovo aktívnych látok. Hodnoty CMC získané z koncentračných závislostí jednotlivých veličín nemusia byť úplne totožné, pretože vlastnosti celého systému sú samotným vznikom agregátov rôznym spôsobom ovplyvnené¹⁰.

Vznik micely sa všeobecne vysvetľuje ako hydrofóbny účinok, ktorý je hlavnou hnacou silou. Aby sme pochopili interakcie, ktoré podmieňajú micelizáciu a predpovedajú zmeny vo vlastnostiach micelových roztokov v dôsledku pôsobenia rôznych faktorov, je tiež dôležité študovať vplyv elektrolytov (solí) na micelizáciu¹¹.

Z pomedzi rôznych fyzikálnych parametrov sú hustota a aj parciálny mólový objem V_A ukazovatele dostatočne citlivé na štrukturálne zmeny, ktoré vznikajú v roztokoch¹². Parciálny mólový objem predstavuje príspevok, ktorý tvorí zložka zmesi k celkovému objemu roztoku. Používa sa pri výpočtoch zmien objemu v dôsledku miešania neideálnych roztokov. Meniace sa molekulárne prostredie a následná zmena interakcií medzi molekulami vedú k zmenám termodynamických vlastností roztokov. Parciálny mólový objem látky v roztoku závisí od rôznych faktorov, ako je teplota, tlak a koncentrácia všetkých prítomných zložiek¹³⁻¹⁵. Je možné ho stanoviť experimentálne, napríklad meraním hustoty¹⁶.

Prídavok elektrolytov do vodného roztoku spôsobuje zníženie hodnoty CMC väčšiny povrchovo aktívnych látok, najvýraznejší účinok sa prejavuje práve v prípade iónových povrchovo aktívnych látok^{17,18}. Anorganické soli (napr. chloridy, bromidy a i.) ovplyvňujú adsorpciu iónových povrchovo aktívnych látok na rozhraní vzduch – voda a následne aj ich agregáciu vo vodnom roztoku. Rozdiel v účinku chloridov a bromidov je spôsobený tým, že silne polarizované anióny ako Br^- sa zdajú byť viac „povrchovo aktívne“ ako menej polarizované Cl^- . Majú tendenciu hromadiť sa v povrchovej vrstve v dôsledku silnej interakcie s elektrickým poľom na rozhraní a táto tendencia sa zvyšuje v poradí $\text{Cl} < \text{Br}$ (cit.¹⁹).



Obr. 1. Chemická štruktúra študovanej zlúčeniny 1188-RM-13-16

Materiál a metódy

Na analýzu bola vybraná látka zo série kvartérnych amóniových solí s rôzne dlhým uhlíkovodíkovým reťazcom. Chemický názov tejto látky je *N,N*-dimetyl-*N*-(3-((1*R*,5*S*)-1,8,8-trimetyl-2,4-dioxo-3-azabicyklo[3.2.1]oktán-3-yl)propyl)hexadekán-1-amíniumbromid s pracovným označením 1188-RM-13-16 (obr. 1). Táto látka bola pripravená podľa práce²⁰. Identita a čistota analyzovanej látky bola potvrdená meraním a interpretáciou jej ¹H-NMR, ¹³C-NMR a IR spektier, stanovením teploty topenia, polarizáciou a elementárnou analýzou.

¹H-NMR (CDCl₃) δ: 0,88 (t, 3H, J = 7,03 Hz); 0,96 (s, 3H); 0,98 (s, 3H); 1,19 (s, 3H); 1,26–1,35 (m, 26H); 1,70 (s, 2H); 1,80–2,04 (m, 5H); 2,17–2,30 (m, 1H); 2,71 (d, 1H, J = 6,45 Hz); 3,45 (s, 6H); 3,52–3,58 (m, 4H); 3,77 (t, 2H, J = 7,03 Hz).

¹³C-NMR (CDCl₃) δ: 14,0; 14,1; 19,5; 21,6; 21,9; 22,7; 22,8; 25,3; 26,2; 29,2; 29,4; 29,5; 29,6; 29,7(2C); 31,9; 34,2; 36,4; 44,4; 51,3; 54,4; 56,3; 61,4; 64,0; 176,4; 178,4.

IR (ν/cm⁻¹): 2921, 2843, 1723, 1669, 1469, 1373, 1343, 1332, 1179, 1002, 929, 823, 724

Teplota topenia bola 100–101 °C, [α]_D²¹ = + 27,7° (0,5 g na 25 ml etanolu).

Elementárna analýza (CHN): Počítané pre C₃₁H₅₉BrN₂O₂: C 65,13; H 10,40; N 4,90; Nájdené: C 64,74; H 10,14; N 4,79.

Chemikálie ako chlorid sodný, chlorid draselný, bromid sodný a bromid draselný boli dodané z firmy Sigma-Aldrich BioXtra, ≥ 99,0 %. Tieto soli boli použité bez následného prečistenia.

Experimentálna časť

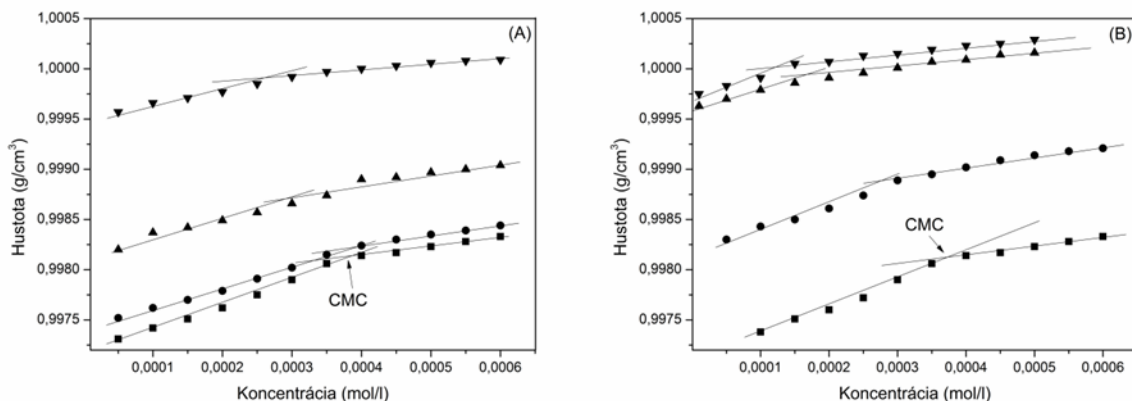
Pripravil sa zásobný roztok skúmanej látky 1188-RM-13-16 s koncentráciou 6,5·10⁻⁴ mol l⁻¹ v destilovanej vode.

Následne sa nariadili série roztokov s postupne klesajúcou koncentráciou až po hodnotu 1,0·10⁻⁴ mol l⁻¹. Použitím pyknometrickej metódy sa stanovili hustoty takto pripravených roztokov²¹. Obdobne sa postupovalo aj pri príprave roztoku skúmanej látky 1188-RM-13-16 v prítomnosti solí NaCl, KCl, NaBr a KBr, kedy sa z každej soli pripravili tri roztoky so stúpajúcimi koncentraciami 0,01; 0,025 a 0,05 mol l⁻¹. Pri týchto roztokoch sa taktiež zmerala hustota rovnakým spôsobom, ako to bolo v prípade vodného roztoku skúmanej látky 1188-RM-13-16. Celý proces merania sa vykonal v stabilnom teplotnom prostredí, aby sa predišlo možným odchýlkam v konečných výsledkoch. Hustota roztokov bola stanovená použitím Gay-Lussacovho pyknometra s objemom 10 ml kalibrovaným pri 20 °C, Simax (Česká republika). Roztok skúmanej látky 1188-RM-13-16 sa pomocou mikropipety preniesol do pyknometra. Hmotnosť pyknometra sa merala na analytických váhach a následne sa vypočítala hustota. Hustota roztokov skúmanej látky 1188-RM-13-16 sa merala v troch vyhotoveniach a použité boli priemerné hodnoty. Aby sa predišlo chybe, všetky výpočty boli vyhotovené pomocou počítačového programu Power Basic.

Výsledky a diskusia

Na základe získaných experimentálnych údajov boli hodnoty CMC jednotlivých roztokov skúmanej látky 1188-RM-13-16 stanovené v programe OriginPro 8.6 ako priesečník dvoch lineárnych funkcií, teda kriviek závislosti hustoty od koncentrácie roztoku skúmanej látky 1188-RM-13-16 vo vodnom prostredí a v prítomnosti solí NaCl, KCl, NaBr a KBr. Koncentrácie týchto solí boli 0,01; 0,025 a 0,05 mol l⁻¹. Celé meranie sa uskutočnilo pri laboratórnej teplote T = 296,15 K.

Hustoty a CMC skúmanej látky 1188-RM-13-16, ktoré boli analyzované v destilovanej vode a aj v prítomnosti solí NaCl a KCl, sú znázornené na obr. 2.



Obr. 2. Závislosť hustoty od koncentrácie látky 1188-RM-13-16. (A) ■ v prostredí destilovanej vody, ● v prostredí 0,01 mol l⁻¹ NaCl, ▲ v prostredí 0,025 mol l⁻¹ NaCl, ▼ v prostredí 0,05 mol l⁻¹ NaCl. (B) ■ v prostredí destilovanej vody, ● v prostredí 0,01 mol l⁻¹ KCl, ▲ v prostredí 0,025 mol l⁻¹ KCl, ▼ v prostredí 0,05 mol l⁻¹ KCl

Tabuľka I

CMC, stupeň ionizácie α a molová Gibbsova energia ΔG° skúmanej látky 1188-RM-13-16 v destilovanej vode a v roztokoch NaCl, KCl, NaBr a KBr s koncentráciou 0,01; 0,025 a 0,05 mol l⁻¹ pri teplote T = 296,15 K

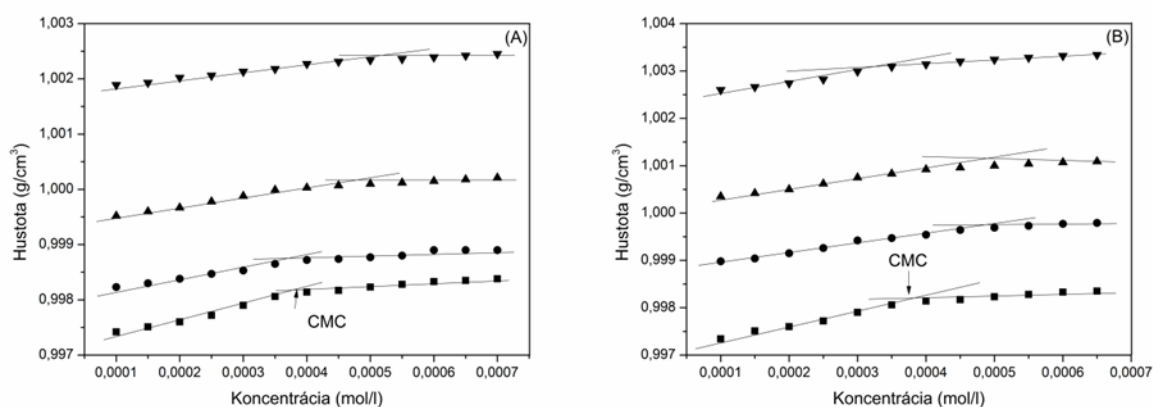
Koncentrácia soli [mol l ⁻¹]	CMC 10 ⁻⁴ [mol l ⁻¹]		α	ΔG° [kJ mol ⁻¹]
		H ₂ O		
0,0	3,92		0,520	-18,92
		NaCl		
0,01	3,63		0,648	-16,61
0,025	2,53		0,604	-18,27
0,05	1,92		0,568	-19,63
		KCl		
0,01	2,64		0,668	-16,88
0,025	1,98		0,620	-18,47
0,05	1,10		0,596	-20,28
		NaBr		
0,01	5,56		0,522	-17,31
0,025	4,71		0,465	-19,52
0,05	3,27		0,401	-21,71
		KBr		
0,01	4,84		0,588	-17,14
0,025	4,20		0,498	-19,37
0,05	3,09		0,486	-20,63

Z tabuľky I vyplýva, že pre vodný roztok látky 1188-RM-13-16 bola stanovená hodnota CMC $3,92 \cdot 10^{-4}$ mol l⁻¹, ktorá sa po pridaní soli NaCl v koncentračnom rozmedzí 0,01 až 0,05 mol l⁻¹ znížila. Hodnoty CMC klesli ešte výraznejšie po pridaní soli KCl do vodného roztoku látky 1188-RM-13-16 v jednotlivých koncentráciách 0,01; 0,025 a 0,05 mol l⁻¹. Elektrolyty NaCl a KCl v celom koncentračnom rozsahu (0,001–0,005 mol l⁻¹) hodnotu CMC znižovali a teda podporovali tvorbu micel. Z týchto hodnôt ďalej vyplýva, že soľ KCl hodnotu CMC znižovala

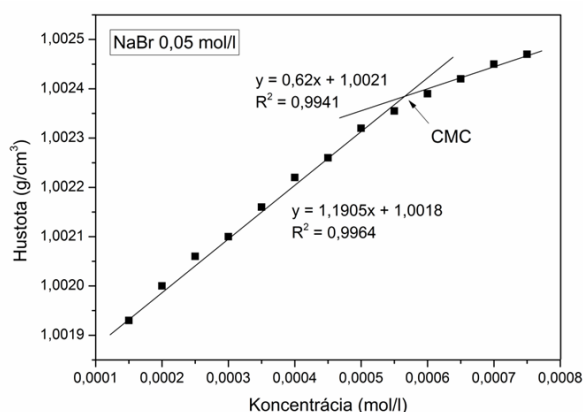
efektívnejšie ako NaCl. K podobnému záveru dospeli aj v iných prácach^{21–24}.

V ďalšej časti práce sa sledoval aj vplyv solí NaBr a KBr na hodnotu CMC analyzovanej látky. Hustoty a CMC skúmanej látky 1188-RM-13-16, ktoré boli analyzované v destilovanej vode a aj v prítomnosti solí NaBr a KBr, sú znázornené na obr. 3.

V predchádzajúcej časti práce sa spomínalo, že pre vodný roztok študovanej látky 1188-RM-13-16 bola stanovená hodnota CMC na $3,92 \cdot 10^{-4}$ mol l⁻¹. Hodnota CMC po



Obr. 3. Závislosť hustoty od koncentrácie látky 1188-RM-13-16. (A) ■ v prostredí destilovanej vody, ● v prostredí 0,01 mol l⁻¹ NaBr, ▲ v prostredí 0,025 mol l⁻¹ NaBr, ▼ v prostredí 0,05 mol l⁻¹ NaBr. (B) ■ v prostredí destilovanej vody, ● v prostredí 0,01 mol l⁻¹ KBr, ▲ v prostredí 0,025 mol l⁻¹ KBr, ▼ v prostredí 0,05 mol l⁻¹ KBr



Obr. 4. Grafické znázornenie závislosti koncentrácie látky 1188-RM-13-16 s prídavkom elektrolytu NaBr (0,05 mol l⁻¹) od hustoty

pridaní soli NaBr začala stúpať nad túto hodnotu, ale len v prípade roztokov, kde bola koncentrácia tejto soli 0,025 a 0,01 mol l⁻¹. Pri vyššej koncentrácii soli NaBr (0,05 mol l⁻¹) sa hodnota CMC znížila pod hodnotu, ktorá bola stanovená v destilovanej vode. Po pridaní soli KBr do vodného roztoku látky 1188-RM-13-16 hodnoty CMC vzrástli ešte efektívnejšie a rovnako ako v prípade NaBr, rovnako len po koncentraciu 0,025 mol l⁻¹ (tab. I). Oba tieto elektrolyty pri koncentrácii ≤ 0,025 mol l⁻¹ micelizáciu nepodporili. Zvýšením ich koncentrácie nad 0,05 mol l⁻¹ sa hodnota CMC znížila rovnako ako pri elektrolytoch NaCl a KCl a nastala podpora micelizácie. Z týchto dosiahnutých parametrov ďalej vyplýva, že soľ KBr hodnotu CMC zvyšuje viac ako soľ NaBr.

Rozdiel v účinku všetkých použitých solí (chloridov aj bromidov) je pravdepodobne zapríčinený väčším van der Waalsovým polomerom bromidového aniónu v porovnaní s chloridovým aniónom ako uvádza v práci aj Andriamainty a spol.^{22,25}.

Výpočet ionizačného stupňa α

Z pomeru sklonu dvoch pretínajúcich sa kriviek závislosti nad a pod bodom zlomu hodnoty kritickej micelovej koncentrácie bol vypočítaný ionizačný stupeň (α) podľa rovnice (1):

$$\alpha = S_2 / S_1 \quad (1)$$

Kde S_1 je sklon krivky pod hodnotou CMC a S_2 je sklon krivky nad hodnotou CMC²¹. Pre ilustráciu uvádzame aj príklad grafu závislosti koncentrácie látky s prídavkom elektrolytu NaBr (0,05 mol l⁻¹) od hustoty s vyznačenými priesečníkmi a prislúchajúcimi rovnicami s hodnotami spoľahlivosti R^2 . Hodnoty spoľahlivosti R^2 boli pre všetky ostatné elektrolyty podobné (obr. 4).

Molová Gibbsova energia ΔG°

Molová Gibbsova energia ΔG° , ktorá je zodpovedná za tvorbu micel skúmanej látky 1188-RM-13-16 v destilo-

vanej vode a v prostredí NaCl, KCl, NaBr a KBr je uvedená v tab. I a počítaná podľa nasledujúcej rovnice (2):

$$\Delta G^\circ = RT(1,5 - \alpha) \ln CMC \quad (2)$$

kde R je plynová konštanta a T absolútna teplota.

Pri všetkých roztokoch skúmanej látky 1188-RM-13-16 záporné hodnoty ΔG° naznačujú, že proces micelizácie prebieha spontánne²⁶. Molová Gibbsova energia ΔG° najprv stúpa so zväčšujúcou sa koncentraciou solí NaCl, KCl, NaBr a KBr a vo všetkých prípadoch vykazuje maximum pri koncentrácii 0,01 mol l⁻¹. So zvyšujúcou sa koncentraciou solí potom klesá až po koncentraciu 0,05 mol l⁻¹ (obr. 5). Tento jav pravdepodobne naznačuje, že so zvyšujúcou sa koncentraciou anorganických solí nastáva tvorba stabilnejších micel. Podobné výsledky zaznamenal aj Ren vo svojej práci²⁷.

Výpočet parciálneho mólového objemu

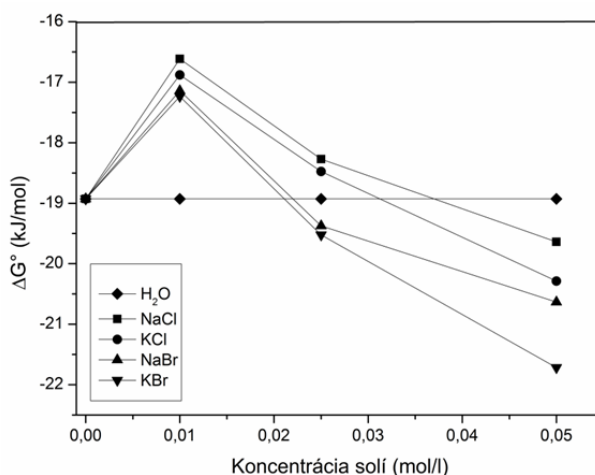
Parciálny mólový objem V_A je možné definovať pomocou rovnice (3):

$$V_A = (\partial V / \partial n)_{T,p} \quad (3)$$

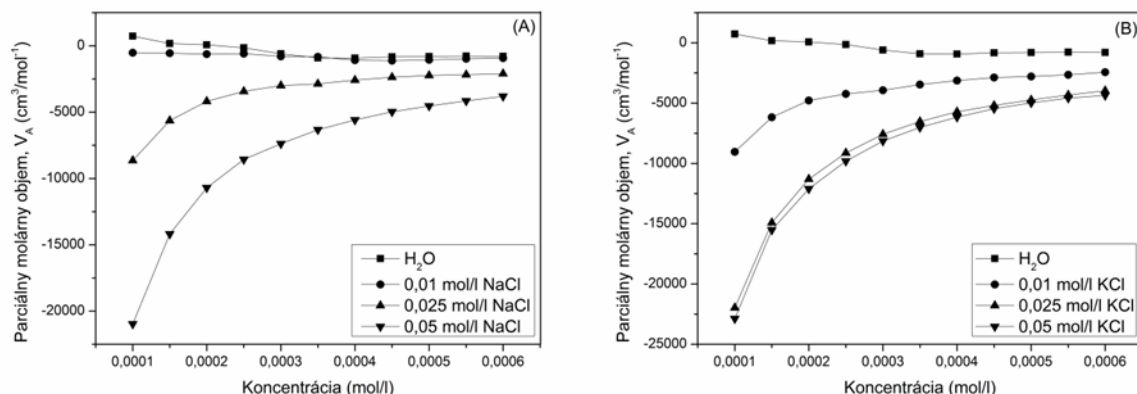
kde ∂V predstavuje zmenu celkového objemu a n je počet molov látky. Parciálny mólový objem dvoch zlúčením je potom možné vyjadriť ako ich zmes pri známej teplote T . Z predošlej rovnice potom možno po extrapolácii definovať nasledovný vzťah (4):

$$V_A = \frac{M}{\rho_0} - \frac{10^3}{c} \left(\frac{\rho}{\rho_0} - 1 \right) \quad (4)$$

kde M je molekulová hmotnosť skúmanej látky, ρ_0 hustota rozpúšťadla, ρ hustota roztoku a c je ekvivalentná koncentrácia roztoku v mol l⁻¹ (cit.^{28,29}). Molekulová hmotnosť kvartérnej amóniovej soli bola 571,7 g mol⁻¹. Hustota vo-



Obr. 5. Závislosť molovej Gibbsovej energie ΔG° od solí NaCl, KCl, NaBr a KBr. Koncentrácia solí je 0,01; 0,025 a 0,05 mol l⁻¹ pri teplote $T = 296,15$ K



Obr. 6. Závislosť parciálneho mólového objemu od koncentrácie látky 1188-RM-13-16. (A) ■ v prostredí destilovanej vody, ● v prostredí 0,01 mol l⁻¹ NaCl, ▲ v prostredí 0,025 mol l⁻¹ NaCl, ▼ v prostredí 0,05 mol l⁻¹ NaCl. (B) ■ v prostredí destilovanej vody, ● v prostredí 0,01 mol l⁻¹ KCl, ▲ v prostredí 0,025 mol l⁻¹ KCl, ▼ v prostredí 0,05 mol l⁻¹ KCl

dy pri teplote $T = 296,15$ K bola 0,99754. Táto hodnota bola odčítaná z tabuľky pripravenej podľa danej práce³⁰.

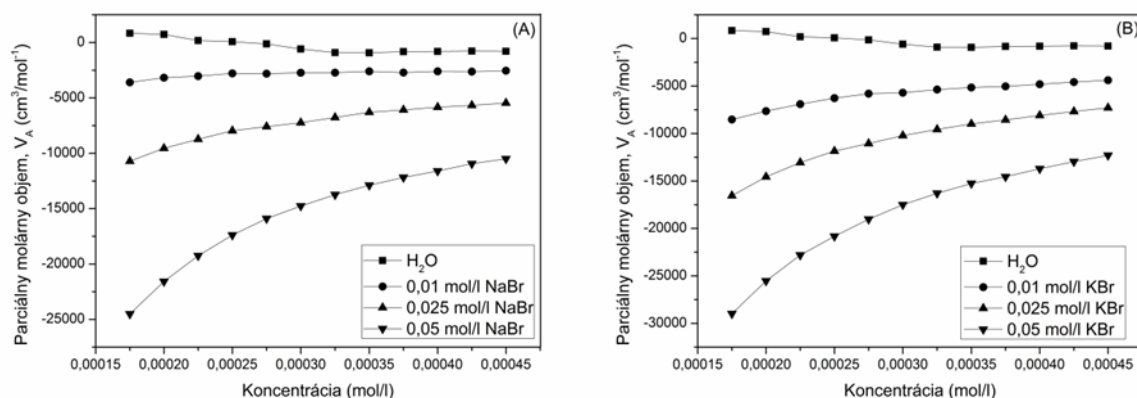
Parciálny mólový objem bol vypočítaný podľa rovnice (4) a to pre všetky roztoky skúmanej látky, či už vo vode alebo v prítomnosti solí NaCl, KCl, NaBr a KBr. Grafické znázornenie závislosti parciálneho mólového objemu od koncentrácie roztoku skúmanej látky v prostredí jednotlivých solí pri rôznych koncentráciách je uvedené na obr. 6. a 7.

Z výsledkov vyplynulo, že spolu so stúpajúcou koncentráciou látky 1188-RM-13-16 stúpali aj hodnoty parciálneho mólového objemu, pričom pri nižších koncentráciách bol nárast hodnôt výraznejší ako pri vyšších koncentráciách roztoku. Z obr. 6 je zrejmé, že hodnoty parciálneho mólového objemu roztoku látky 1188-RM-13-16

v destilovanej vode boli vyššie ako hodnoty dosiahnuté v roztokoch anorganických solí. Podobné výsledky boli dosiahnuté aj v iných prácach^{21,29}. Parciálny mólový objem roztoku látky 1188-RM-13-16 v prítomnosti NaCl bol nižší ako vo vodnom roztoku, ale vyšší ako v roztoku látky 1188-RM-13-16 s KCl (obr. 6).

Ďalej sa určil parciálny mólový objem skúmanej látky 1188-RM-13-16 aj v prítomnosti solí NaBr a KBr (obr. 7).

Podobné výsledky ako pri roztokoch s prítomnosťou solí NaCl a KCl boli zaznamenané aj u solí NaBr a KBr. Roztok skúmanej látky 1188-RM-13-16 v prítomnosti soli NaBr mal hodnoty parciálneho mólového objemu nižšie ako vodný roztok, ale vyššie ako roztok s obsahom KBr (obr. 7).



Obr. 7. Závislosť parciálneho mólového objemu od koncentrácie látky 1188-RM-13-16. (A) ■ v prostredí destilovanej vody, ● v prostredí 0,01 mol l⁻¹ NaBr, ▲ v prostredí 0,025 mol l⁻¹ NaBr, ▼ v prostredí 0,05 mol l⁻¹ NaBr. (B) ■ v prostredí destilovanej vody, ● v prostredí 0,01 mol l⁻¹ KBr, ▲ v prostredí 0,025 mol l⁻¹ KBr, ▼ v prostredí 0,05 mol l⁻¹ KBr

Záver

Hodnota kritickej micelovej koncentrácie klesala v prítomnosti solí NaCl a KCl, pričom soľ KCl bola v znižovaní CMC efektívnejšia. Hodnoty kritickej micelovej koncentrácie zvýšili soli NaBr a KBr. Soľ NaBr podporuje micelizáciu menej ako KBr. Vypočítaním parciálneho mólového objemu V_A pre vodný roztok a roztoky solí a porovnaním získaných hodnôt sa zistilo, že hodnoty parciálneho mólového objemu v destilovanej vode boli vyššie ako v roztokoch solí. Molová Gibbsova energia ΔG° je negatívna a klesá so zvyšujúcou sa koncentráciou solí NaCl, KCl, NaBr a KBr v roztoku.

LITERATÚRA

1. Andreica B.-I., Cheng X., Marin L.: Eur. Polym. J. 139, 110016 (2020).
2. Li R., Wang Z., Xu Q., Yao S., Li Z., Song H.: J. Mol. Struct. 1209, 127918 (2020).
3. Morrison K. R., Allen R. A., Minbirole K. P. C., Wuest W. M.: Tetrahedron Lett. 60, 150935 (2019).
4. Le T., Hussain S., Shi-Yow L.: J. Mol. Liq. 294, 111582 (2019).
5. Ghosh K. K., Baghel V.: Indian J. Chem. 47A, 1230 (2008).
6. Batıgöç Ç., Akbaş H., Boz M.: J. Chem. Thermodyn. 43, 1349 (2011).
7. Scholz N., Behnke T., Resch-Genger U.: J. Fluoresc. 28, 465 (2018).
8. Zhou R., Jin Y., Shen Y., Lai S., Zhou Y., Zhao, P.: J. Dispers. Sci. Technol. 42, 152 (2020).
9. Bahraminejad H., Manshad A. B., Keshavarz A.: Energy Fuels 35, 1259 (2021).
10. MacDonald S., MacLennan S., Marangoni D. G.: J. Mol. Liq. 302, 112531 (2020).
11. Salem J. K., El-Nahal I. M., Salama S. F.: Chem. Phys. Lett. 730, 445 (2019).
12. Vilseck J. Z., Tirado-Rives J., Jorgensen W. L.: Phys. Chem. 17, 8407 (2015).
13. Romero C. M., Rodríguez D. M., Ribeiro A. C. F., Estes M. A.: J. Chem. Thermodyn. 104, 274 (2017).
14. Bai Y., Schaberg M. S., Hamrock S. J., Tang Z., Goenaga G., Papandrew A. B., Zawodzinski T. A.: Electrochim. Acta 242, 307 (2017).
15. Holovko M., Kovalenko A., Hirata F.: J. Mol. Liq. 217, 103 (2016).
16. Schiel J. E., Hage D. S.: Talanta 65, 495 (2005).
17. Sharma S., Kumar K., Chauhan S., Chauhan M. S.: J. Mol. Liq. 297, 111782 (2020).
18. Xu Q., Nakajima M., Ichikawa S., Nakamura N., Roy P., Okadome H., Shiina T.: J. Colloid Interface Sci. 332, 208 (2009).
19. Kumar B., Tikariha D., Ghosh K. K.: J. Dispersion Sci. Technol. 33, 265 (2012).
20. Bukvay M.: *Syntéza a štúdiu agregáčnych a anti-mikróbných vlastností opticky aktívnych amfifílných amóniových solí. Rigorózna práca.* Univerzita Komenského, Bratislava 2014.
21. Bhattarai A., Chatterjee S. K., Jha K.: Phys. Chem. 5, 1 (2015).
22. Andriamainty F., Čižmárik J., Holíková M.: Sci. Pharm. 72, 221 (2004).
23. Andriamainty F., Čižmárik J., Malík I.: Acta Fac. Pharm. Univ. Comenianae 56, 31 (2009).
24. Jha K., Bhattarai A., Chatterjee S. K.: Bibechana 11, 131 (2014).
25. Andriamainty F., Čižmárik J., Malík I.: Čes. Slov. Farm. 57, 260 (2008).
26. Tennouga L., Mansri A., Medjahed K., Chetouani A., Warad I.: J. Mater. Environ. Sci. 6, 2711 (2015).
27. Ren Z. H.: Ind. Eng. Chem. Res. 54, 9683 (2015).
28. Wandrey C., Bartkowiak A., Hunkeler D.: Langmuir 15, 4062 (1999).
29. Shah S. K., Bhattarai A., Chatterjee S. K.: Am. J. Chem. Eng. 2, 76 (2014).
30. Tanaka M., Girard G., Davis R., Peuto A., Bignell N.: Metrologia 38, 301 (2003).

E. Salanci^a, F. Andriamainty^a, D. Adamove^a, and R. Mikláš^b (^a Department of Pharmaceutical Chemistry, ^b Department of Chemical Theory of Drugs, Faculty of Pharmacy, Comenius University, Bratislava, Slovak Republic): **Study of the Effect of Chlorides and Bromides on Critical Micelle Concentration and Partial Molar Volume of Quaternary Ammonium Salt**

The critical micelle concentration (CMC) of the selected surfactant belonging to quaternary ammonium salts with chemical designation *N,N*-dimethyl-*N*-(3-((1*R*,5*S*)-1,8,8-trimethyl-2,4-dioxo-3-azabicyclo[3.2.1]octane-3-yl)propyl)hexadecane-1-amine bromide was determined. Simultaneously, the effect of the addition of various concentrations of NaCl, KCl, NaBr, and KBr salts on the CMC value of the substance was observed and compared with those obtained in an aqueous solution at $T = 296,15$ K. Based on the results obtained, it was concluded that NaCl and KCl salts decreased the critical micelle concentration, while NaBr and KBr salts did not support micellization and CMC values therefore increased. In the case of solutions of a substance in the salt environment, when compared to the substance's solution in distilled water, a decrease in partial molar volume was observed. From the concentration density dependencies of the substance, an ionization degree of α was determined. Finally, the molar Gibbs energy ΔG° was also calculated and found negative for all salt solutions, while increase with their increasing concentration.

Keywords: critical micelle concentration, salts, density, partial molar volume

• Salanci E., Andriamainty F., Adamove D., Mikláš R.: Chem. Listy 116, 42–47 (2022).

• <https://doi.org/10.54779/chl20220042>