

# Jan Marek

## Příprava a testování látek obsahujících kvarterní dusík

**Klíčová slova:** Kationické tenzidy, syntéza, analýza, kvarterní dusík, micelární katalýza, desinfekce, dekontaminace

### Souhrn:

Disertační práce se zabývá přípravou a testováním látek typu kationických tenzidů jako případných desinfekčních či dekontaminačních činidel. Jelikož kvarterní kationické tenzidy jsou látky široce užívané v mnoha odvětvích (farmacie, chemický průmysl, potravinářský průmysl atd.) jsou stále předmětem velkého zájmu. Bylo navrženo a připraveno více než 40 tenzidů na bázi kvarterního dusíku. Látky byly odvozeny od struktur dnes běžně používaných (benzalkonium, cetylpyridinium či cetyltrimethylammonium). Syntetická část plynule navazuje na mou diplomovou práci, kde jsem se zabýval přípravou podobných látek. Disertační práce však popisuje syntézu látek, které mohou mít do molekuly zavedenu i různou nukleofilní skupinu (hydroxylovou či oximovou). Bylo připraveno šest řad látek na bázi 6-hydroxychinolinu, 3-hydroxypyridinu, fenylethylmethylaminu, 3-hydroxiiminomethylpyridinu, 4-hydroxiiminomethylpyridinu a 4-(1-aminohydroxiiminomethyl)pyridinu. Každá řada obsahovala 7 homologů lišících se vždy o dvě metylenové jednotky ( $C_8-C_{20}$ ). Připravené struktury byly potvrzeny analýzami NMR, EA či MS. Rovněž byla vyvinuta HPLC metodika pro odlišení jednotlivých homologů ve směsi.

U většiny látek byla následně změřena kritická micelární koncentrace jako základní charakteristika povrchově aktivních látek, kde byla potvrzena platnost vztahu mezi hodnotou CMC a délkou lipofilního řetězce v molekule.

U několika vybraných látek byla následně otestována jejich očekávaná antimikrobiální aktivita. Některé látky významným způsobem ovlivňovaly růst několika kmenů bakterií či hub. Byly stanoveny minimální inhibiční či minimální mikrobicidní koncentrace.

Jelikož strukturálně podobné látky jsou rovněž známy jako tzv. micelární katalyzátory (urychlují reakce pomocí micelárního mikroprostředí) byly některé připravené tenzidy testovány na tuto vlastnost. Vzniklo ve spolupráci několik publikací popisujících vliv připravených kationických surfaktantů na rozklad nejrůznější esterů, které slouží jako modelové látky bojových chemických látek či pesticidů.

Na základě výše zmíněných vlastností bylo vybráno několik látek jako potenciálních dekontaminačně-desinfekčních komponent do případné směsi.

# Jan Marek

## Synthesis and evaluation of quaternary nitrogen compounds

**Keywords:** cationic surfactants, synthesis, analysis, quaternary nitrogen, micellar catalysts, disinfection, decontamination

### Summary:

The thesis deals with the preparation and testing of compounds of type cationic surfactants such as disinfection and decontamination agents. Since the quaternary cationic surfactants are substances widely used in many of applications (pharmaceuticals, chemical industry, food industry etc.) are still of great interest. It was designed and prepared more than 40 surfactants based on quaternary nitrogen. Substances derived from structures commonly used (benzalkonium, cetylpyridinium or cetyltrimethylammonium). Synthetic continuously builds on my diploma thesis, where I dealt with the preparation of similar compounds. However dissertation describes the synthesis of compounds that may have to include a various nucleophilic group (hydroxyl or oxime) into a structure. It was prepared six sets of substances based on 6-hydroxyquinoline, 3-hydroxypyridine, phenylethyldimethylamine, 3-hydroxiiminomethylpyridine, 4-hydroxiiminomethylpyridine and 4-(1-aminohydroxiiminomethyl)pyridine. Each set contain seven homologues differing in two methylene units (C8-C20). Prepared structures were confirmed with analyzes of NMR, MS and EA. Furthermore HPLC method was developed to distinguish the individual homologues in the mixture.

For most compounds was measured the critical micelle concentration as a fundamental characteristic of surfactants. It was confirmed the structure relationship between the value of CMC and lipophilic chain length in the molecule.

A few selected compounds were then evaluated for antimicrobial activity expected. Some compounds significantly influenced the growth of several strains of bacteria or fungi. The minimum inhibitory and minimum microbicidal concentrations were determined afterwards.

Since structurally similar compounds are also known as the micellar catalysts (acceleration or inhibition of some reactions using micellar microenvironment), several prepared compounds were tested for this property. In collaboration was several times published the effect of cationic surfactants as the accelerators of some ester cleavage. These esters serve as the model compounds of chemical warfare agents and pesticides.

At the end based on above-mentioned properties were chosen several compounds as potential decontamination, disinfection components.