



# ITE / ΕΙΧΗΜΥΘ

## ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ Μ.Υ. ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ Μ.Υ.

**ΟΜΙΛΗΤΗΣ:** κα Αναστασία Μόσχοβη

Υπεύθυνοι Διατριβής: *Dr. Βλαδίμηρος Νικολάκης, Dr. Βασίλης Δρακόπουλος*

**ΘΕΜΑ:** Χαρακτηρισμός της δομής του πρωτομενιομένου ιονικού υγρού 1-H-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (HMINTf<sub>2</sub>) με χρήση δονητικής φασματοσκοπίας.

**Structural characterization of protic ionic liquid 1-H-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (HMINTf<sub>2</sub>) by using vibrational spectroscopy.**

**ΤΟΠΟΣ:** Αίθουσα Σεμιναρίων ITE/ΕΙΧΗΜΥΘ

**ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ:** Τετάρτη, 27 Ιουλίου 2011

**ΩΡΑ:** 12:00

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Τα ιονικά υγρά είναι ιοντικές ενώσεις που αποτελούνται από ένα οργανικό κατιόν και ένα οργανικό/ανόργανο ανιόν. Κύριο χαρακτηριστικό τους είναι το χαμηλό σημείο τήξης τους ( $T_m < 100^\circ\text{C}$ ). Άλλες ιδιότητες που τα καθιστούν ελκυστικά για μια πληθώρα εφαρμογών είναι η χαμηλή τάση ατμών, η μη αναφλεξιμότητα, η υψηλή αγωγιμότητα αλλά και η υψηλή και χημική σταθερότητα.

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε η δομή του πρωτομενιομένου ιονικού υγρού 1-H-3-methylimidazolium bis(trifluoromethanesulfonyl)imide (HMINTf<sub>2</sub>) στη στερεή και την υγρή φάση με χρήση φασματοσκοπίας FT-RAMAN.

Κατά την τήξη του ιονικού υγρού παρατηρήθηκαν μεταβολές στα φάσματα Raman, στις περιοχές που σχετίζονται με τη διαμόρφωση του ανιόντος NTf<sub>2</sub><sup>-</sup>. Στη στερεή φάση, το ανιόν στον κρύσταλλο βρίσκεται στην trans διαμόρφωση, ενώ κατά την τήξη εμφανίζεται μια νέα κορυφή στους  $\sim 330\text{cm}^{-1}$ . Η κορυφή αυτή οφείλεται στις δονήσεις τύπου αιώρησης-(rocking) του SO<sub>2</sub> του ανιόντος NTf<sub>2</sub><sup>-</sup> και αποδίδεται στην cis διαμόρφωση, υποδηλώνοντας την ύπαρξη ισορροπίας των δύο διαμορφώσεων στη υγρή φάση.

Κατά τη μεταβολή της θερμοκρασίας παρατηρήθηκαν συστηματικές αλλαγές στις φασματικές περιοχές που συσχετίζονται με την ύπαρξη των cis και trans διαμορφώσεων του ανιόντος NTf<sub>2</sub><sup>-</sup>. Πιο συγκεκριμένα, με αύξηση της θερμοκρασίας, η διαμόρφωση τύπου cis είναι επικρατέστερη για το ανιόν έναντι της διαμόρφωσης τύπου trans. Η ενθαλπία ισορροπίας μεταξύ των δύο διαμορφώσεων που υπολογίστηκε συναρτήσεως της θερμοκρασίας, μέσω των φασμάτων Raman 3,2kJ/mol, και είναι συγκρίσιμη με αυτή που έχει υπολογιστεί για παραπλήσια συστήματα στη βιβλιογραφία.