



ITE / IΕΧΜΗ

ΤΕΧΝΙΚΟ ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ ΤΕΧΝΙΚΟ ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ

ΟΜΙΛΗΤΗΣ: Dr. Βασίλης Δρακόπουλος
Κύριος Ε.Λ.Ε. ΙΤΕ/ΙΕΧΜΗ

ΘΕΜΑ: Μελέτη της δομής ιοντικών υγρών.
Structural characterization of ionic liquids.

ΤΟΠΟΣ: Αίθουσα Σεμιναρίων ΙΤΕ/ΙΕΧΜΗ

ΗΜΕΡΟΜΗΝΙΑ: Τετάρτη, 23 Μαΐου 2012

ΩΡΑ: 12:00

ΠΕΡΙΛΗΨΗ:

Τα ιοντικά υγρά είναι άλατα τα οποία αποτελούνται από οργανικά κατιόντα και οργανικά /ανόργανα ανιόντα με σημείο τήξης χαμηλότερο των 100°C. Η χαμηλή τάση ατμών, η μη αναφλεξιμότητα, η υψηλή ιοντική τους αγωγιμότητα, η υψηλή θερμική και χημική σταθερότητα είναι μερικές από τις ιδιότητες που τα καθιστούν χρήσιμα σε ένα ευρύ πεδίο εφαρμογών όπως οι μέθοδοι διαχωρισμού, η αντικατάσταση οργανικών διαλυτών, η κατάλυση και η ηλεκτροχημεία.

Με τον κατάλληλο συνδυασμό ανιόντος (Cl^- , Br^- , I^- , $[\text{BF}_4]^-$, $[\text{AlCl}_4]^-$, $[\text{PF}_6]^-$, $[(\text{CF}_3\text{SO}_2)_2\text{N}]^-$ κ.α.) και κατιόντος (NH_4^+ , PH_4^+ , ιμιδαζόλια, πυριδίνες κ.α.) είναι δυνατόν να επιτευχθούν φυσικοχημικές ιδιότητες κατάλληλες για πληθώρα εφαρμογών. Για να χρησιμοποιηθούν ως διαλύτες σε καταλυτικές αντιδράσεις, ως ηλεκτρολύτες σε μπαταρίες, ως εκκινητές σε αντιδράσεις, απαιτείται σε βάθος κατανόηση των φυσικοχημικών ιδιοτήτων τους.

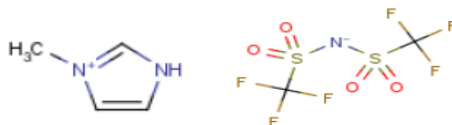
Η μεγάλη αυτή ποικιλία των εφαρμογών τους στηρίζεται στο γεγονός ότι λόγω του ελέγχου των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ανιόντων και των κατιόντων (Coulomb, Van der Waals & hydrogen bonding) μεταξύ τους μπορούμε να κατασκευάζουμε το κατάλληλο ιοντικό σύστημα για κάποια αντίδραση. Έτσι λοιπόν η μελέτη των φυσικοχημικών ιδιοτήτων και η συσχέτισή τους με τη μοριακή τους δομή, αυτών των νέων διαλυτών, αποκτά μεγάλη σημασία για τις όποιες εφαρμογές τους.

Η συγκεκριμένη ομιλία θα εστιαστεί στην επίδραση αυτών των αλληλεπιδράσεων στη δομή πρωτονιωμένων ιοντικών υγρών (protic ionic liquids). Ένα τέτοιο είναι το 1-Η-3-μέθυλιμιδαζόλο-δι-(τριφθόρομεθανο-σουλφόλυο)ιμίδιο $[\text{HMI}^+][\text{TFSI}^-]$ όπως φαίνεται και από το Σχήμα 1, αποτελείται από ένα οργανικό κατιόν (HMI^+) και ένα οργανικό ανιόν (TFSI^-).



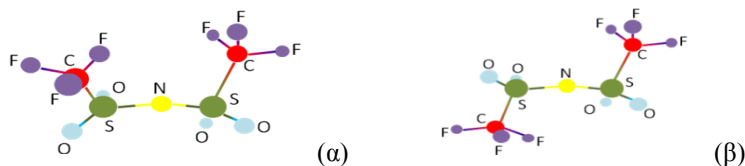
ΙΤΕ/ΙΕΧΜΗ

ΤΕΧΝΙΚΟ ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ ΤΕΧΝΙΚΟ ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ



Σχήμα 1. Δομή του ιονικού υγρού 1-Η-3-μέθυλιμιδαζόλο-δι-(τριφθόρομεθανο-σουλφόνυλο)ιμίδιο.

Το ανιόν είναι δυνατόν να υφίσταται σε δύο διαφορετικές διαμορφώσεις cis και trans όπως φαίνονται στο Σχήμα 2.



Θα δειχθεί ότι η ισορροπία μεταξύ αυτών των διαμορφώσεων του ανιόντος επηρεάζεται σε μεγάλο βαθμό από το είδος των αλληλεπιδράσεων με το κατιόν όπως η παρουσία ή/και απουσία δεσμών υδρογόνου αλλά και η αύξηση των αλληλεπιδράσεων τύπου Van der Waals. Η τεχνική η οποία επιλέχθηκε για την ανάλυση της δομής στην υγρή φάση ήταν η δονητική φασματοσκοπία (Raman, FTIR/ATR). Τα ιονικά συστήματα τα οποία μελετήθηκαν για το σκοπό αυτό είναι τα 1-C_nIm-TFSI (C:1-12, αριθμός ανθράκων στην πλευρική υποκατάσταση του ιμιδαζολικού δακτυλίου) και τα ATFSI (A:Li-Cs) ενώ οι μετρήσεις έγιναν σε ένα εύρος θερμοκρασιών από 25°C-300°C.