بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه آزاد اسلامی

واحد مرودشت

دانشکده علوم پایه

گروه شیمی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد «M.Sc»

گرایش شیمی فیزیک

عنوان:

بررسی کارایی معادله حالت ارایه شده بر اساس تئوری اختلال ترمودینامیکی برای مایعات یونی

استاد راهنما:

دکترمریم بهادری

نگارش:

شکوفه راستگوجهرمی

تابستان ۱۳۹۳

معاونت پژوهش و فن‌آوری

به نام خدا

منشور اخلاق پژوهش

با یاری از خداوند به جان و اعتقاد به این که علم و تحصیل هر دو واره ناظر بر اعمال انسان و بایستگی مقام بلند دانش و پژوهش و نظر به اهمیت جایگاه دانشگاه در اعتلای فرهنگ و تمدن انسان و با احترام به شأن و منزلت علمی و اجتماعی استادان و دانشجویان، مادیریت علمی واحدهای دانشگاه آزاد اسلامی متعهد می گردیم اصول زیر را در انجام فعالیت های پژوهشی رعایت داده و از آن تخطی نکنیم:

۱- اصل شایستگی: اجتناب از هرگونه برخورد غیر حرفه ای و اعلام موضع در مورد به کسانی که حوزه علم و پژوهش را به شائبه های غیر علمی می آلایند.

۲- اصل صداقت: تعهد به اجتناب از هرگونه جانب داری غیر علمی و حفاظت از اموال، تجهیزات و منابع در اختیار.

۳- اصل رازداری: حفظ اسرار حرفه ای و خودداری از افشای اطلاعات محرمانه در جریان تحقیقات و انتقال آن به همکاران علمی و دانشجویان به غیر از مواردی که مجوز قانونی دارد.

۴- اصل احترام: تعهد به رعایت حریم ها و حرمت ها در انجام تحقیقات و رعایت جانب نقد و خودداری از هرگونه حرمت شکنی.

۵- اصل رعایت حقوق: رعایت کامل حقوق پژوهشگران و پژوهیدگان (انسان، حیوان و نبات) و سایر صاحبان حق.

۶- اصل تعهد به امانتداری: استفاده از ابزار، مواد و اطلاعات محوله فقط در راستای فعالیت های مجاز و مرتبط با تحقیق.

۷- اصل حقیقت جویی: تلاش در راستای پی جویی حقیقت و وفاداری به آن و دوری از هرگونه پنهان سازی حقیقت.

۸- اصل مالکیت مادی و معنوی: تعهد به رعایت کامل حقوق مادی و معنوی دانشگاه و کلیه همکاران پژوهش.

۹- اصل منافع ملی: تعهد به رعایت مصالح ملی و در نظر داشتن پیشبرد و توسعه کشور در کلیه مراحل پژوهش.

تعهدنامه اصالت رساله یا پایان نامه

اینجانب **شکوفه راستگو جهرمی** دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد ناپیوسته در رشته **شیمی فیزیک** که در تاریخ: **۱۳۹۳/۶/۱۷** از پایان نامه خود تحت عنوان: **" بررسی کارایی معادله حالت ارایه شده بر اساس تئوری اختلال ترمودینامیکی برای مایعات یونی "**با کسب نمره و درجه دفاع نموده ام بدینوسیله متعهد می شوم:

۱) این پایان نامه حاصل پژوهش و پژوهش انجام شده توسط اینجانب بوده و در مواردی که از دستاوردهای علمی و پژوهشی دیگران (اعم از پایان نامه، کتاب، مقاله و...) استفاده نموده ام. مطابق ضوابط و رویه موجود، نام منبع مورد استفاده و سایر مشخصات آن را در فهرست مربوطه ذکر و درج کرده ام.

۲) این پایان نامه قبلاً برای دریافت هیچ مدرک تحصیلی (هم سطح، پایین تر یا بالاتر) در سایر دانشگاهها و مؤسسات آموزشی عالی ارائه نشده است.

۳) چنانچه بعد از فراغت از تحصیل، قصد استفاده و هر گونه بهره برداری اعم از چاپ کتاب، ثبت اختراع و... از این پایان نامه داشته باشیم، از حوزه معاونت پژوهشی واحد مجوزهای مربوطه را اخذ نمایم.

۴) چنانچه در هر مقطع زمانی خلاف موارد فوق ثابت شود، عواقب ناشی از آن را می پذیرم و واحد دانشگاهی مجاز است با اینجانب مطابق وضوابط و مقررات رفتار نموده و در صورت ابطال مدرک تحصیلی ام هیچگونه ادعایی نخواهم داشت.

نام و نام خانوادگی: شکوفه راستگو جهرمی

تاریخ و امضاء:

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد (M.Sc)

نام و نام خانوادگی دانشجو : **شکوفه راستگو جهرمی** در تاریخ **۱۳۹۳/۶/۱۷** رشته : **شیمی فیزیک** از پایان نامه خود با عنوان : **بررسی کارایی معادله حالت ارایه شده بر اساس تئوری اختلال ترمودینامیکی برای مایعات یونی "**

با درجه و نمره دفاع نموده است.

نام و نام خانوادگی اعضاء هیات داوری	**سمت**	**امضاء اعضای هیات داوری**
۱ – دکتر مریم بهادری	استاد راهنما	
۲ –دکتر نرگس باقری	استاد داور	
۳ –دکتر زهرا عرب	استاد داور	

مراتب فوق مورد تایید است .

مدیر/معاونت پژوهشی

مهر و امضاء

سپاسگزاری

سپاس از استاد فرهیخته و فرزانه خانم دکترمریم بهادری ، که از ایشان بسیار آموختم و با راهنمایی هـای ارزشمندشان مرا یاری فرمودند.

سپاس خدای را که هر چه دارم از اوست !

تقدیم به:

پدر و مادر مهربانم به‌خاطر زحمات بی دریغشان!

همسر عزیزم به‌خاطر حمایت ها و دلگرمی هایش

و

میوه های زندگیم حمیدرضا ومحمدرضا

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

چکیده ۱

فصل اول: مقدمه

۱-۱ مایعات یونی ۳
۱-۱-۱ معرفی مایعات یونی ۳
۱-۱-۲ تاریخچه مایعات یونی ۵
۱-۱-۳ ساختار مایعات یونی ۵
۱-۱-۴ کاربردهای مایعات یونی ۷
۱-۱-۵ نسل‌هایی مختلف از مایعات یونی ۸
۱-۲ خواص فیزیکی و شیمیایی مایعات یونی ۹
۱-۲-۱ نقطه ذوب ۹
۱-۲-۲ چگالی ۹
۱-۲-۳ گرانروی ۹
۱-۲-۴ پنجره الکتروشیمیایی ۱۰
۱-۲-۵ نیروهای بین مولکولی ۱۰
۱-۳ انرژی بین مولکولی ۱۱
۱-۳-۱ منشا نیروهای بین مولکولی ۱۳
۱-۳-۲ انرژی پتانسیل جاذبه کل ۱۷
۱-۳-۳ انرژی پتانسیل دافعه مولکولی ۱۷
۱-۳-۴ پتانسیل بین مولکولی در مولکول‌های ساده ۱۷

عنوان **صفحه**

۱-۳-۵ مدل‌های پتانسیل سیستم‌های قطبی ۲۳
۱-۳-۶ پتانسیل بر هم‌کنش جفت موثر ۲۵
۱-۴ معادله حالت ۲۶
۱-۵ تئوری اختلال ترمودینامیکی ۲۸
۱-۶ هدف تحقیق ۳۲

فصل دوم:روش تحقیق

۲-۱ مقدمه ۳۴
۲-۲ مدل ترمودینامیک معادله حالت ۳۵

فصل سوم: بررسی نتایج

۳-۱ ترکیبات بررسی شده در تحقیق ۴۴
۳-۲ بررسی نتایج ۴۶
۳-۳ بحث درنتایج ۶۴

فهرست منابع ۶۵

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول ۱-۱ کاتیون ها و آنیون‌های متداول در مایعات یونی ۴
جدول ۱-۲ نام و ساختار تعدادی ازمایعات یونی مورد مطالعه ۶
جدول ۲-۱پارامترهای ثابت مربوط به روابط (۲-۱۹) و (۲-۲۰)..... ۳۸
جدول ۲-۲پارامترهای ثابت مربوط به روابط (۲-۲۲) و (۲-۲۳) ۳۹
جدول ۲-۳پارامترهای ثابت مربوط به روابط (۲-۲۶) تا (۲-۳۵) ۴۰
جدول ۲-۴پارامترهای ثابت مربوط به رابطه (۲-۴۳)..... ۴۱
جدول ۳-۱ نام ترکیب، فرمول شیمیایی و جرم مولکولی دسته اول ترکیبات مورد مطالعه ۴۴
جدول ۳-۲ نام ترکیب، فرمول شیمیایی و جرم مولکولی دسته دوم ترکیبات مورد مطالعه ۴۵
جدول ۳-۳ نام ترکیب، فرمول شیمیایی و جرم مولکولی دسته سوم ترکیبات مورد مطالعه ۴۵
جدول ۳-۴ نام ترکیب، فرمول شیمیایی و جرم مولکولی دسته چهارم ترکیبات مورد مطالعه ۴۵
جدول ۳-۵ پارامترهای پتانسیل لنارد جونز محاسبه شده از روابط (۳-۳) و (۳-۴) و کمیتهای بحرانی برای مایعات یونی مورد مطالعه ۴۷
جدول ۳-۶ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی و محاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bmim] [BF_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۳
جدول ۳-۷ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [emim] [BF_4]به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۳
جدول ۳-۸ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [hmim] [BF_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۳
جدول ۳-۹ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [N-bupy] [BF_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۴

عنوان **صفحه**

جدول ۳-۱۰ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [omim] [BF_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۴
جدول ۳-۱۱ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bmim] [bti] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۴
جدول ۳-۱۲ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [deim] [bti] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۵
جدول ۳-۱۳ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [emim] [bti] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۵
جدول ۳-۱۴ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [hmim] [bti] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۵
جدول ۳-۱۵ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bmim] [PF6] بهصورت تابعی از دما و چگالی ۵۶
جدول ۳-۱۶ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [emim] [PF_6] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۶
جدول ۳-۱۷ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [hmim] [PF_6] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۶
جدول ۳-۱۸ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bmim] [TfO] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۷
جدول ۳-۱۹ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [emim] [TfO] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۷
جدول ۳-۲۰ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [emim] [BEI] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۷
جدول ۳-۲۱ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bmpyr] [bti] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۸
جدول ۳-۲۲ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bmim] [dca] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۸

عنوان **صفحه**

جدول ۳-۲۳ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [emim][ESO_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۸
جدول ۳-۲۴ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bdmim][PF_6] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۹
جدول ۳-۲۵ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bmim][MSO_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۹
جدول ۳-۲۶ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [dmim][MSO_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۵۹
جدول ۳-۲۷ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [tibmp] [$pTSO_3$] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۶۰
جدول ۳-۲۸ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bdmim][BF_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۶۰
جدول ۳-۲۹ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bpyr] [BF_4] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۶۰
جدول ۳-۳۰ مقایسه انرژی آزاد هلمهولتز باقی مانده تجربی ومحاسبه شده وممان دو قطبی برای ترکیب [bmim][tca] به‌صورت تابعی از دما و چگالی ۶۱

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل ۱-۱ رفتار نوعی تابع انرژی پتانسیل بین دو اتم با تقارن کروی ۱۳
شکل ۱-۲ پتانسیل گاز ایده آل ۱۸
شکل ۱-۳ پتانسیل کره سخت ۱۹
شکل ۱-۴ پتانسیل کره نرم ۱۹
شکل ۱-۵ پتانسیل چاه مربعی ۲۰
شکل ۱-۶ پتانسیل ساترلند ۲۰
شکل ۱-۷ پتانسیل لنارد جونز ۲۱
شکل ۳-۱ مقدار A_{LJ}/RT بر حسبρ برای دسته اول مایعات یونی مورد مطالعه ۴۸
شکل ۳-۲ مقدار A_{LJ}/RT بر حسبρ برای دسته دوم مایعات یونی مورد مطالعه ۴۹
شکل ۳-۳ مقدار A_{LJ}/RT بر حسبρ برای دسته سوم مایعات یونی مورد بررسی ۴۹
شکل ۳-۴ مقدار A_{LJ}/RT بر حسبρ برای دسته چهارم مایعات یونی مورد بررسی ۵۰
شکل ۳-۵ نمودار مقدار A_{LJ}/T بر حسب T برای دسته اول مایعات یونی مورد بررسی ۵۰
شکل ۳-۶ مقدار A_{LJ}/T بر حسب T برای دسته دوم مایعات یونی مورد بررسی ۵۱
شکل ۳-۷ مقدار A_{LJ}/T بر حسبT برای دسته سوم مایعات یونی مورد بررسی ۵۱
شکل ۳-۸ مقدار A_{LJ}/T بر حسب T برای دسته چهارم مایعات یونی مورد بررسی ۵۲
شکل ۳-۹ ممان دو قطبی کاهش‌یافته به‌صورت تابعی ρ^*/T^* برای دسته اول مایعات یونی
مورد بررسی ۶۲
شکل ۳-۱۰ ممان دو قطبی کاهش‌یافته به‌صورت تابعی ρ^*/T^*برای دسته دوم مایعات یونی
مورد بررسی ۶۲

عنوان **صفحه**

شکل ۳-۱۱ ممان دو قطبی کاهش‌یافته به‌صورت تابعی T^*/ ρ^*برای دسته سوم مایعات یونی مورد بررسی ۶۳
شکل ۳-۱۲ ممان دوقطبی کاهش‌یافته به‌صورت تابعی T^*/ ρ^*برای دسته چهارم مایعات‌یونی مورد بررسی ۶۳

چکیده

با توجه به خواص منحصر به فرد مایعات یونی کاربردهای گسترده‌ای برای آنها از جمله به‌عنوان حلال سبز در سنتز وجداسازی والکترولیت وجود دارد. خواص شیمیایی و فیزیکی مایعات یونی، توسط برهم‌کنش بین یون‌ها، متناسب با اندازه وپیچیدگی آنیون‌ها و کاتیون‌ها، کنترل می‌شود.بر اساس نظریه اختلال ترمودینامیکی، معادله حالتی برای سیالات قطبی پیشنهاد شده است که مبتنی بر سه پارامتراساسی شامل ممان دو قطبی و دو پارامترهای پتانسیل لنارد جونز می‌باشد. این معادله حالت در دماها و فشارهای بالا رفتارهای تقریبا مناسبی از خود نشان می‌دهد. برای استخراج این معادله حالت سهم اصلی برهم‌کنشهای بین مولکول ها با جمع کردن پتانسیل لنارد جونز، با برهم‌کنش های دوقطبی-دوقطبی و دوقطبی-القایی محاسبه می‌شود(مدل استوک مایر). ودر نهایت یک فرمول برای انرژی آزاد هلمهولتز به عنوان تابعی از دما ودانسیته مشتق می‌شود. در این تحقیق از فرمول فوق برای محاسبه‌ی ممان دوقطبی موثر برای۲۷ ترکیب مایع یونی استفاده شده است. ممان دوقطبی موثر با استفاده از روش تطبیق انرژی آزاد هلمهولتز باقی‌مانده با مقدار تجربی آن محاسبه شده است. مقادیر حاصل در این تحقیق با مقادیر گزارش شده در مقالات مطابقت خوبی دارد.

کلید واژه: مایعات یونی، ممان دوقطبی، معادله حالت

فصل اول

مقدمه

۱-۱ مایعات یونی

استفاده گسترده از حلال‌های سمی و فرار در صنایع شیمیایی منجر به آسیب دیدگی جدی محیط زیست می‌شود. لذا یافتن جایگزین مناسبی برای این حلال‌ها که از نظر زیست محیطی سالم بوده و در عین حال خواص حلال‌های متداول را داشته باشند، به شدت در صنایع دارویی و شیمیایی حس می‌شود. یکی از حلال‌های جدیدی که به عنوان حلال و همچنین کاتالیست سبز شناخته می‌شوند، مایعات یونی هستند. مایعات یونی عبارتند از ترکیباتی آلی، که تماما از یون ها تشکیل شده اند. معمولا این ترکیبات در دمای زیر ۱۰۰ درجه سانتیگراد مایع هستند و مهمترین مزیت آنها این است که فشار بخار قابل ملاحظه‌ای ندارند به همین دلیل غیر فرار بوده و مشکلی برای محیط زیست ایجاد نمی‌کنند. البته این بدین معنی نمی باشد که همه مایعات یونی جزء حلال‌های سبز محسوب می‌شوند، حتی بعضی از آنها شدیدا سمی هستند. مایعات یونی خواص مختلفی دارند و می‌توانند کایرال، آب‌گریز ویا آب دوست باشند. مایعات یونی کایرال، که در دمای اتاق مایع باشند کاربرد بسیار گسترده‌ایی در شیمی مایعات یونی دارند[۱].

۱-۱-۱ معرفی مایعات یونی[1]

قابلیت های منحصر به فرد وکاربردهای فراوان و متنوع مایعات یونی باعث شده است که در چند سال اخیر این دسته از ترکیبات شدیدا مورد توجه محققین قرار بگیرند.

طبیعت غیر فرار مایعات یونی باعث کاهش ورود مواد سمی وآلاینده های محیط زیست به جو شده که خود مزایای زیست محیطی فراوانی به همراه دارد. در سنتز وکاتالیست، از مایعات یونی به عنوان حلال (یا حلال وکاتالیست) به عنوان جایگزین حلال‌های آلی فرار استفاده می‌شود. در مطالعات الکتروشیمی از ویژگی مایع بودن این ترکیبات، که منجر به تولید الکترولیت های مایع شده استفاده می‌شود و نیازی به اضافه کردن حلال نیست.

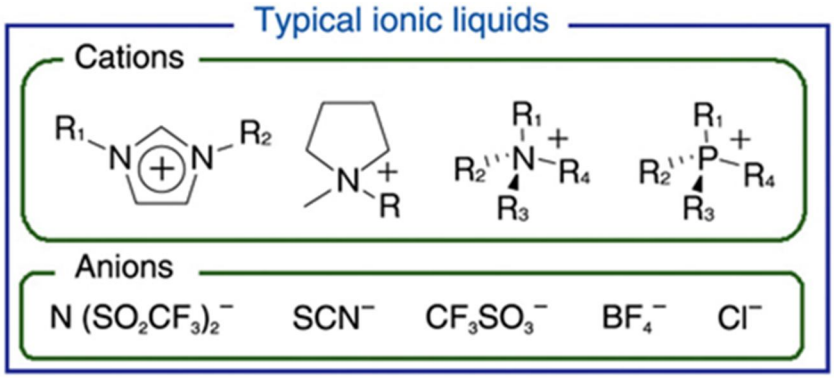
مایعات یونی همچنین به عنوان جایگزین حلال های فرار در جداسازی استفاده می‌گردند. گرچه مایعات یونی به عنوان حلال های سبز [2]شناخته شده اند، اما این موضوع همواره درست نبوده و می توانند سمی، قابل اشتعال یا خورنده باشند. به‌خاطر طبیعت غیرفرارشان عموما تصور می‌شود که اثر کمی

[1] Liquid ionic
[2] Green solvent

برمحیط زیست وسلامت انسان داشته باشند.

عموما مایعات یونی[1]، یا مایعات یونی در دمای اتاق[2] مایعاتی هستند که کاملا از یون تشکیل شده ودر دمای زیر ۱۰۰ درجه سانتیگراد سیال باشند[۴]. گرمادهی به نمک‌های معمولی مانند کلراید سدیم (NaCl, M.P:801° C) تا دماهای بالا نیز مایع مذابی تولید می کند که کاملا از یون تشکیل شده است ولی این نمک مذاب به عنوان مایع یونی در نظر گرفته نمی شود. مایعات یونی نمک های آلی هستند که در دماهای پایین (<100°C) مایع بوده واز کاتیون های آلی متقارن وحجیم بر پایه n-بوتیل پیریدینیوم[3] ومتیل ایمیدازولیوم[4] و آمونیوم نوع چهارم[5] وn متیل n-آلکیل پیریدینیوم[6] با شاخه های مختلف هیدروکربنی وآنیونهایی مانند هگزا فولوئورو فسفات[7] وتترا فولوئوروبورات[8] وآلکیل سولفات[9] وهالیدهایی مانند کلرید وبرمید یا یدید ونیترات وسولفات، کلرید آلومینیوم و...ساخته شده‌اند. . در جدول(۱-۱) ساختار تعدادی از کاتیون‌ها و آنیون‌های متداول آورده شده است.

جدول ۱-۱کاتیون ها و آنیون‌های متداول در مایعات یونی



[1] Ionic liquids
[2] Room Temprature Ionic Liquids(RTIL)
[3] N-butyl pyridinium
[4] Methyl imidazolium
[5] Quaternary ammonium
[6] N-methyl n-alkyl pyridinium
[7] Hexafluoro phosphate
[8] Tetrafluoro borate
[9] Alkyl sulfate

۱-۱-۲ تاریخچه مایعات یونی

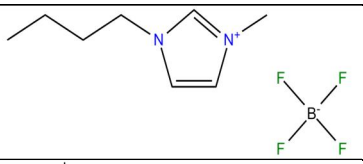
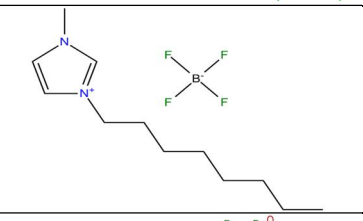
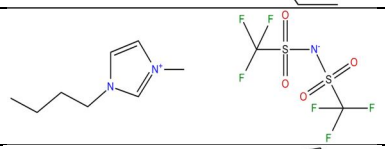
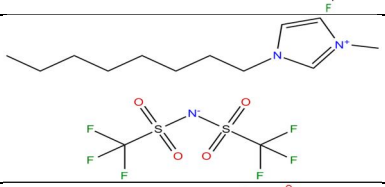
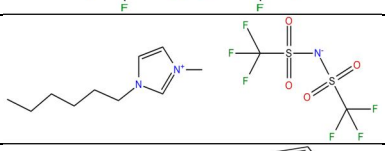
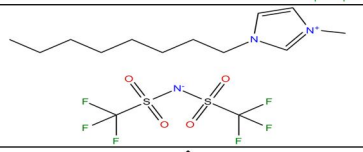
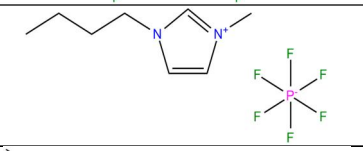
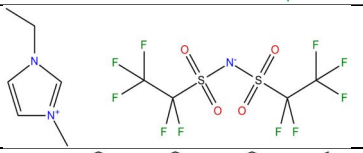
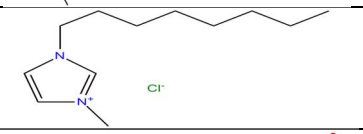
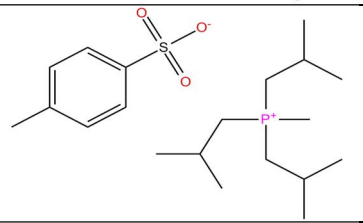
مایعات یونی اولین بار در سال ۱۹۱۴ با سنتز اتیل آمونیوم نیترات (نقطه ذوب $12^{o}c$) شناخته شدند [۲]. اما تا سال ۱۹۵۱ کاربرد گسترده‌ای نداشتند. با این توصیف همچنان به این دسته از ترکیبات فقط با کنجکاوی نگاه می‌شد تا اینکه در چند دهه اخیر به عنوان جایگزین مناسبی برای حلال‌های آلی متداول واکنش‌های شیمیایی مطرح شده‌اند. لذا تحقیقات وسیعی جهت استفاده از مایعات یونی به عنوان حلال در استخراج های مایع-مایع [1] آغاز شد. نکته اصلی که باعث این توجه شده است دمای ذوب پایین این ترکیبات می‌باشد که این موضوع باعث پایین آمدن یک محیط آلی مایع غیرآبی می‌شود که امکان انجام واکنش‌های متعدد آلی را می‌دهد[۳].

۱-۱-۳ ساختار مایعات یونی

ساختار مولکولی مایعات یونی متشکل از کاتیون‌ها و آنیون‌های مختلف است. معمولا نقش کاتیون را یک ترکیب آلی حجیم (با بار مثبت) بازی می‌کند اما آنیون‌ها از لحاظ حجم بسیار کوچک تر از کاتیون ها هستند (با بار منفی) و ساختار آنها معدنی است. به دلیل تفاوت اندازه بین آنیون‌ها و کاتیون‌ها، پیوند میان دو جزء تشکیل‌دهنده مایعات یونی ضعیف است و این ترکیبات در دمای زیر ۱۰۰ درجه سانتی گراد به صورت مایع هستند. ساختار مایع یونی مانند ساختار نمک طعام است ولی نمک طعام به علت پیوند قوی بین کاتیون و آنیون آن (شباهت بالای آنیون و کاتیون از نظر اندازه، بار و ماهیت) ساختار بلورین مستحکم دارد و در دمای ۸۰۰ درجه سانتی گراد به صورت مذاب در می‌آید. برای دسته‌بندی مایعات یونی دمای ۱۰۰ درجه سانتی‌گراد در نظر گرفته شده است. به آن دسته که در دمایی بالاتر از ۱۰۰ درجه سانتی-گراد مایع هستند، مایعات مذاب و دسته‌ای که در پایین‌تر از این دما حالت مایع دارند، مایعات یونی گویند. در جدول(۱-۲) ساختار تعدادی ازمایعات یونی مورد مطالعه آورده شده است.

[1] Liquid-Liquid exteration

جدول ۱-۲ نام و ساختار تعدادی ازمایعات یونی مورد مطالعه[۵]

نام کاتیون	نام آنیون	ساختار
1-butyl-3-methylimidazolium	tetrafluoroborate	
1-n-octyl-3-ethylimidazolium	tetrafluoroborate	
1-butyl-3-methylimidazolium	bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	
1-octyl-3-methylimidazolium	bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	
1-hexyl-3-ethylimidazolium	bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	
1-octyl-3-methylimidazolium	bis(trifluoromethylsulfonyl)imide	
1-n-butyl-3-ethylimidazolium	Hexafluorophosphate	
1-ethyl-3-methylimidazolium	bis(pentafluoroethylsulfonyl) imide	
1-octyl-3-methylimidazolium	Chloride	
1-butyl-3-methylimidazolium	Methylsulfate	
Triisobutylmethyl phosphonium	p-toluenesulfonate	
1-butyl-3-methylimidazolium	Thiocyanate