

Powody, dla których podjęto ten temat badawczy

Badanie nowych substancji i zrozumienie natury zjawisk fizycznych, które w nich zachodzą umożliwi projektowanie nowych materiałów o potencjalnym zastosowaniu w urządzeniach energetycznych. Jedną z szeroko badanych w ostatnich czasach grupą substancji są przewodniki protonowe. Oczekuje się, że mogłyby one znaleźć zastosowanie jako elektrolity w ogniwach paliwowych, w których jedynymi produktami ubocznymi reakcji są woda oraz ciepło. Ogniwa takie można byłoby uznać za bezpieczne dla środowiska czyli spełniające wszystkie wymagania zielonej chemii. Zaprojektowanie przewodników protonowych odznaczających się wysokim przewodnictwem i stabilnością termiczną otwiera drogę do ich zastosowania w konstrukcji ogniw paliwowych. W projektowaniu substancji spełniających powyższe warunki, kluczowym etapem jest wybór związków, które nie zawierają w swojej strukturze wody. Wymóg ten jest podyktowany niską stabilnością termiczną uwodnionych soli, które pod wpływem podwyższonej temperatury eliminują cząsteczki wody. Przewodniki protonowe są to zazwyczaj polimery lub materiały ceramiczne, a najnowsze przewodniki protonowe są solami kwasów i zasad organicznych, do których należą między innymi sole imidazolu i kwasu metanosulfonowego. Dotychczas badane były sole imidazolu i alifatycznych kwasów dikarboksylovych o różnej długości łańcucha alifatycznego. Tak otrzymane materiały charakteryzowały się jednak niskim przewodnictwem (10^{-4} - 10^{-2} S·m⁻¹). Zaletą tych materiałów była ich wysoka stabilność termiczna aż do temperatury 373 K.

Na podstawie powyższych obserwacji zaproponowaliśmy nową grupę przewodników protonowych, w których anion kwasu alifatycznego zastąpiono anionem kwasu aromatycznego. Otrzymano nowe sole imidazolu i kwasów aromatycznych: orto-ftalowego i tere-ftalowego. Badania DSC potwierdziły, że sole kwasów aromatycznych wykazują dobrą stabilność termiczną: orto-ftalan imidazoliowy topi się w temperaturze 422 K a tere-ftalan imidazoliowy w 464 K. Ponadto orto-ftalan imidazoliowy odznaczał się wysokim przewodnictwem wynoszącym $2 \cdot 10^{-1}$ S·m⁻¹. Analiza ścieżek przewodzenia pokazała, że transport protonów odbywa się po ścieżkach helikoidalnych. Taki motyw strukturalny ścieżki przewodzenia zaobserwowany został po raz pierwszy i jest unikalny dla tej grupy soli kwasów aromatycznych i zasad heterocyklicznych.

Cel projektu

Celem prowadzonych badań będzie analiza wpływu charakteru chemicznego anionów na sieć wiązań wodorowych powstających soli. Przeprowadzona zostanie analiza trwałości wiązań wodorowych w funkcji temperatury oraz ciśnienia przy zastosowaniu metod spektroskopii oscylacyjnej. Dodatkowo przeprowadzona zostanie analiza przejść fazowych indukowanych temperaturą oraz ciśnieniem. Dokonana zostanie również analiza zmian parametrów wiązań wodorowych pod wpływem zmiany parametrów termodynamicznych. Dla układów, które będą cechowały się przejściami fazowymi wyznaczone zostaną diagramy fazowe.

Opis prowadzonych badań w ramach projektu

W ramach projektu przeprowadzone zostaną pomiary spektroskopowe w podczerwieni oraz badania strukturalne w funkcji temperatury oraz ciśnienia. W celu identyfikacji przemian fazowych przeprowadzone zostaną również pomiary za pomocą skaningowej kalorymetrii różnicowej w funkcji temperatury oraz ciśnienia. Dodatkowo przeprowadzone zostaną obliczenia kwantowo-mechaniczne dla cząsteczek izolowanych w odpowiednich warunkach temperatury i ciśnienia. Dane eksperymentalne w połączeniu z wynikami obliczeń teoretycznych pozwolą na scharakteryzowanie sieci wiązań wodorowych tworzących się w nowych solach przewodzących.

Najważniejsze oczekiwane wyniki

Spodziewamy się, że wyniki przeprowadzonych badań pozwolą stwierdzić w jaki sposób parametry termodynamiczne, takie jak temperatura oraz ciśnienie, wpływają na parametry wiązań wodorowych oraz powiązanie ich z przewodnictwem protonowym. Poznanie fizyko-chemicznych cech wiązań wodorowych pozwoli wnioskować o przewodnictwie elektrycznym i stabilności termicznej uzyskanych nowych substancji. Wyniki badań wytyczą drogę do efektywnego projektowania nowych materiałów odznaczających się dużym przewodnictwem jonowym. Przeprowadzone badania dadzą również odpowiedź na pytanie jak ścieżki przewodzenia będą ulegały zmianie pod wpływem temperatury i ciśnienia.