

مطالعه تئوری مایعات یونی

فربا عظیمی

www.ketab.ir

سرشناسه	:	عظیمی، فریبا، ۱۳۷۲-
عنوان و نام پدیدآور	:	مطالعات تئوری مایعات یونی / فریبا عظیمی.
مشخصات نشر	:	بجنورد: زبان علم، ۱۴۰۰.
مشخصات ظاهری	:	۱۱۸ص: مصور (بخشی رنگی)، جدول، نمودار.
شابک	:	۹۰۰۰۰ ریال: ۷-۵۵-۷۴۵۵-۶۲۲-۹۷۸
وضعیت فهرست نویسی	:	فیپا
یادداشت	:	کتابنامه: ص. ۸۴-۸۹.
موضوع	:	حلال‌ها Solvents مایعات یونی Ionic Liquids
رده بندی کنگره	:	QD۵۴۴
رده بندی دیویی	:	۳۴۸۲/۵۴۱
شماره کتابشناسی ملی	:	۸۷۵۷۹۰۳
اطلاعات رکورد کتابشناسی	:	فیپا

مطالعه تئوری مایعات یونی

نویسنده : فریبا عظیمی

ویراستار : میلاد نامجو

صفحه آرای: تیم طراحی انتشارات زبان علم

طراح جلد: هادی صانمی

ناشر : زبان علم

شابک : ۷-۵۵-۷۴۵۵-۶۲۲-۹۷۸

نوبت چاپ : اول

تاریخ چاپ : ۱۴۰۰

تیراژ : ۱۰۰۰

قیمت : ۹۰۰۰۰ تومان



فهرست مطالب

مقدمه.....*	۱
فصل اول: معرفی مایعات یونی	
۱-۱ مقدمه.....	۱
۱-۲ مایعات یونی و اصول شیمی سبز.....	۴
۱-۳ نام‌گذاری مایعات یونی.....	۶
۱-۳-۱ اختصارنویسی مایعات یونی.....	۶
۱-۴ خواص فیزیکی و شیمیایی مایعات یونی.....	۸
۱-۴-۱ نقطه ذوب.....	۹
۱-۴-۲ چگالی.....	۹
۱-۴-۳ ویسکوزیته.....	۱۰
۱-۴-۴ رسانایی الکتریکی.....	۱۰
۱-۵ کاربردهای مایعات یونی.....	۱۰
۱-۶ سمیت مایعات یونی.....	۱۱
۱-۶-۱ ایمنی و خوردندگی.....	۱۱
۱-۷ خواص الکتروشیمیایی مایعات یونی.....	۱۲
۱-۷-۱ کاربردهای الکتروشیمیایی مایعات یونی.....	۱۵
۱-۸ مایعات یونی دو کاتیونی (DIL).....	۱۵
۱-۹ روش‌های تجربی سنتز مایعات یونی.....	۱۹
فصل دوم: مروری بر شیمی محاسباتی.....	۲۰

۲۱	۲-۱ مقدمه
۲۳	۲-۲ روش مبتنی بر مکانیک مولکولی (MMM)
۲۳	۲-۲-۱ محدودیت‌های روش مکانیک مولکولی
۲۴	۲-۳ روش مبتنی بر ساختار الکترونی (ESM)
۲۵	۲-۴ تقریب بورن-اینهایمر
۲۶	۲-۵ روش‌های نیمه تجربی
۲۷	۲-۶ روش آغازین ساختار الکترونی یا ab initio
۲۹	۲-۷ تقریب هارتری-فاک
۳۰	۲-۸ روش‌های تابعیت چگالی (DFT)
۳۱	۲-۹ تفاوت روش هارتری-فاک و روش تابعیت چگالی
۳۲	۲-۱۰ مجموعه‌های پایه
۳۳	۲-۱۰-۱ اوربیتال‌های اسلیتری
۳۳	۲-۱۰-۲ اوربیتال‌های گوسینی
۳۴	۲-۱۱ توابع قطبیده
۳۶	۲-۱۲ توابع پخشیده
۳۶	۲-۱۳ نرم افزار گوسین
۳۹	فصل سوم: مروری بر مطالعات انجام شده
۳۹	۳-۱ مطالعات انجام شده
۴۳	فصل چهارم: بحث و نتایج

بخش اول: مطالعه تئوری مایع یونی دی کاتیونی بیس- $2,3,4,6,7,8,9,10$ اکتا هیدرو پیریمیدو-

[۱,۲a] آزینیوم متیل دی سولفات ۴۳

۴-۱-۱ مقدمه ۴۳

۴-۱-۲ ساختار بهینه شده ۴۶

۴-۱-۳ اوربیتال های مولکولی ۴۷

۴-۱-۴ ممان دوقطبی ۴۹

۴-۱-۵ طیف FT-IR ۴۹

۴-۱-۶ طیف های $^1\text{H NMR}$, $^{13}\text{C NMR}$ ۵۱

بخش دوم: بررسی و مقایسه مایعات یونی تک کاتیونی و دی کاتیونی هالیدها ۵۵

۴-۲-۱ ساختارهای بهینه شده ۵۶

۴-۲-۲ طول پیوند و زوایا پیوندی ۵۹

۴-۲-۳ پیوند هیدروژنی ۶۱

۴-۲-۴ اوربیتال های مولکولی ۶۳

۴-۲-۵ ممان دوقطبی ۶۵

۴-۲-۶ طیف ها $^1\text{H NMR}$, $^{13}\text{C NMR}$ و FT-IR مایعات یونی تک کاتیونی و دی کاتیونی

..... ۶۶

بخش سوم: بررسی اثر طول زنجیره آلکیلی بر خواص مایعات یونی دیکاتیونی ۷۱

۴-۳-۱ مقدمه ۷۱

۴-۳-۲ ساختارهای بهینه شده ۷۳

۴-۳-۳ طول پیوند و زوایا پیوندی ۷۴

در سال‌های اخیر، پژوهش‌های زیادی جهت بهینه کردن واکنش‌های شیمیایی انجام شده است. در این بین مایعات یونی به عنوان حلال‌های جدید و یا کاتالیست‌های سبز معروف شده‌اند؛ و به عنوان حلال‌های قدرتمند و خواص مفیدشان کاربردهای فراوانی در صنایع و تحقیقات علمی و آزمایشگاهی دارند. پیرو بررسی‌های انجام شده، مایع یونی دی کاتیونی بیس- $10,9,8,7,6,4,3,2$ اکتا هیدرو پیریدیمو [a- $10,2$] آزینیوم متیل دی سولفات را که قبلاً به عنوان یک مایع یونی جدید ساخته شده بود مورد تحقیق قرار دادیم تا به خواص این مایع یونی بیشتر آشنا شویم. در این محاسبات از نرم افزار Gaussian 09w و با استفاده از روش تئوری تابعیت چگالی و تابعیت B3LYP از مجموعه پایه 6-311G(d,p) استفاده شد.

در مرحله بعدی سایر مایعات یونی تک کاتیونی و دی کاتیونی بر پایه کاتیون $8-10$ دی آزو بیسیکلو [5,4,0,0] را با یکدیگر مقایسه کردیم و خواص ساختاری و الکترونیکی آنها را با روش‌ها و مجموعه پایه‌های مناسب تحقیق کردیم؛ و در آخرین فصل نتایج اثر طول زنجیر آلکیلی بر خواص مایعات یونی بررسی کردیم.