

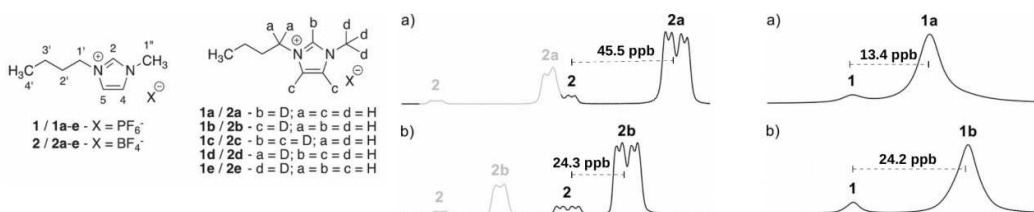
Estudio de la fuerza relativa de enlaces de hidrógeno en líquidos iónicos por medio de efectos isotópicos H/D

Gualberto Bottini, Guillermo Moyna.

Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Uruguay
gbottini@fq.edu.uy

Los líquidos iónicos (LIs) tienen incontables aplicaciones tanto en el ámbito académico como industrial. La versatilidad de los LIs se asocia con la posibilidad de afinar sus propiedades mediante la selección juiciosa de los iones que los constituyen, un proceso que requiere una comprensión detallada de las fuerzas no-covalentes que actúan entre aniones y cationes. Además de interacciones electrostáticas y de tipo π , los enlaces de hidrógeno (enlaces-H) han sido reconocidos como una de las principales fuerzas interiónicas en juego en los LIs.^[1-2] En sistemas basados en cationes *N,N*-dialquilimidazolio se han identificado dos tipos de enlaces-H.^[2] Uno involucra al anión como el aceptor de enlaces-H y los grupos C-H en el anillo de imidazolio como donantes y se les denomina a menudo como enlaces-H aromáticos o primarios, mientras que el otro, conocido como enlaces-H alifáticos o secundarios, se forma entre el anión y los grupos C-H de las cadenas laterales *N*-alquilo.

En el presente trabajo se estudiaron las fuerzas relativas de los enlaces-H aromáticos y alifáticos en líquidos iónicos imidazólicos mediante medidas de efecto isotópico H/D sobre el apantallamiento nuclear de ^{19}F , o $\Delta^{19}\text{F}(\text{H,D})$, en isotopólogos deuterados del hexafluorofosfato y tetrafluoroborato de 1-*n*-butil-3-metilimidazolio ($[\text{C}_4\text{mim}]\text{PF}_6$ y $[\text{C}_4\text{mim}]\text{BF}_4$). Se observaron valores de $\Delta^{19}\text{F}(\text{H,D})$ de 9,7 a 49,7 ppb para los isotopólogos de $[\text{C}_4\text{mim}]\text{PF}_6$, mientras que para la serie $[\text{C}_4\text{mim}]\text{BF}_4$ los valores fueron de 26,2 a 83,8 ppb. Nuestros resultados indican que las interacciones entre los aniones fluorados y los protones en la posición C-1' y C-1'' de las cadenas *N*-alquilo son comparables a, y en algunos casos más fuertes que, las que involucran protones en el anillo aromático. A su vez, estos hallazgos destacan el papel que estas fuerzas interiónicas débiles tienen en el ordenamiento local de las sales de imidazolio en el estado líquido.^[3]



[1] Referencias: R. Hayes, G. C. Warr, R. Atkin. *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 6357–6426. [2] P. A. Hunt, C. R. Ashworth, R. P. Matthews. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, *44*, 1257–1288. [3] G. Bottini, G. Moyna. *Magn. Reson. Chem.* DOI: 10.1002/mrc.4615.