

Liquides Ioniques

Au cours du précédent contrat, notre équipe a saisi l'opportunité de développer une thématique basée sur les liquides ionique (LI) en raison de leurs applications nombreuses et incontournables dans les thématiques T1 (comme électrolytes ou additifs) et T2 (comme solvants pour les réactions de polymérisation de structures conjuguées par exemple). L'usage de nouveaux milieux comme les liquides ioniques requiert des études à caractère plus fondamental comprenant une approche de caractérisation physicochimique, thermodynamique, électrochimique ainsi qu'un volet modélisation faisant le lien structure - propriété. L'un des objectifs de ce thème de recherche transversal, est de favoriser le développement de solvants (électrolyte), ayant des applications dans le domaine des dispositifs électrochimiques (thèmes 1 et 2), plus respectueux de l'environnement tout en maintenant ou en améliorant leur efficacité et en réduisant leur coût. Par ailleurs, une approche fondamentale de l'étude des relations structure - propriétés est d'une grande importance pour les applications. En particulier, la détermination des propriétés physico-chimiques de nombreux LI et des équilibres entre phases doit permettre de développer des modèles adaptés à la prévision des propriétés de nouveaux composés issus de la synthèse.

Le but est d'étudier au sens large les propriétés suivantes :

- *thermodynamique* : propriétés volumétriques, thermiques, équilibres entre phases : solubilités mutuelles, équilibres liquide-liquide-vapeur de mélanges incluant des liquides ioniques, formation de phases dispersées (micelles).
- *Dynamique* : mesure des phénomènes de relaxation, mesures rhéologiques et conductimétriques.
- *électrochimique* : domaines d'électroactivité, phénomènes d'adsorption aux interfaces,
- *Modélisation moléculaire* : développer des outils informatiques qui permettraient de prévoir les propriétés des liquides ioniques à partir de leur structure, comme les modèles UNIFAC (UNiversal Functional Activity Coefficient method) ou COSMO-RS (CONductor like Screening MOdel for Realistic Solvents). Ces modèles, qui à l'origine ont été développés pour décrire les propriétés de composés moléculaires conventionnels, sont maintenant très étudiés dans le but de décrire les propriétés des liquides ioniques purs ou en mélanges avec d'autres fluides moléculaires. Pour cela, une très large connaissance de leurs propriétés physico-chimiques est primordiale.

L'intérêt et l'originalité de ce thème de recherche repose donc sur une étude physico-chimique multi échelle des liquides ioniques purs et en mélanges avec d'autres fluides afin de mettre en adéquation la relation propriété - structure de ces mélanges complexes et d'alimenter, de part sa transversalité, les thèmes de recherches 1 et 2 du Laboratoire.