

# FTIR spektroskopiske undersøgelser af iods kompleksdannelse med thiocyanat

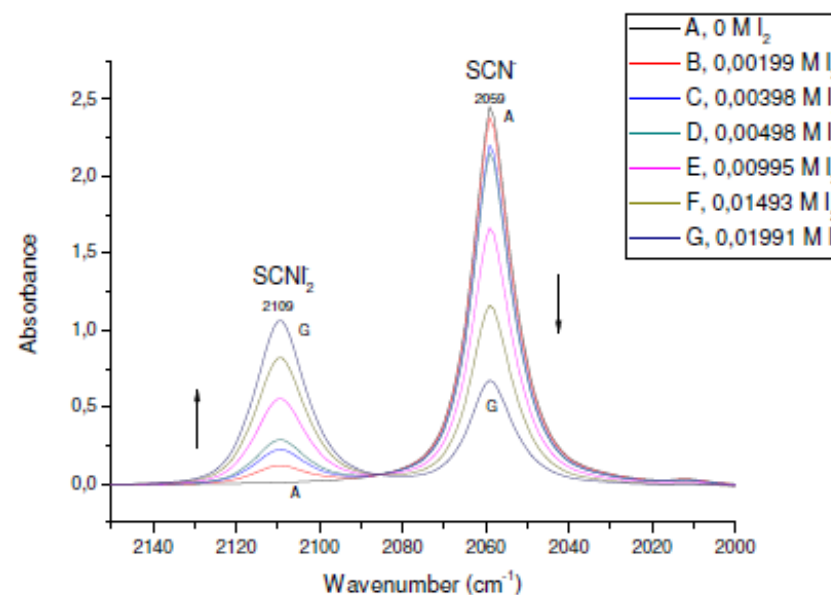
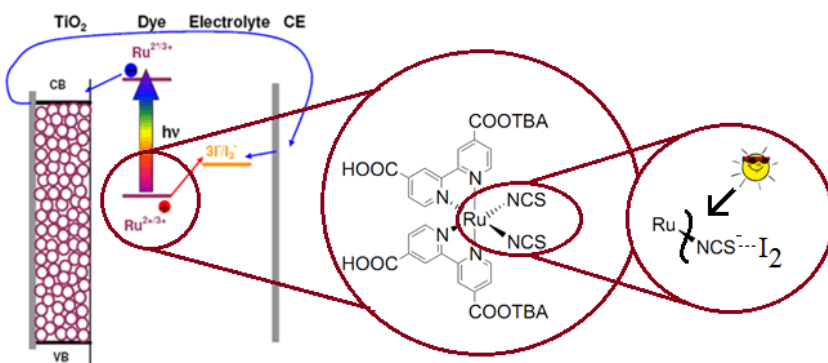
Jordens samlede befolkning forbruger i dag i omegnen af 15 TW energi årligt. Vores energiforbrug er imidlertid voksende; allerede i 2050 forventes et årligt forbrug på omkring 30 TW, mens dette tal om blot hundrede år vil være vokset til omegnen af 50 TW. Samtidig er prisen på vores primære energikilde, olie, eksploderet de sidste år i takt med efterspørgslen, og energiforskere frygter sågar, at vi kan ende i en situation, hvor vi vil have malket vores planet tør for netop olie. Derfor er det relevant at skue mod nye horisonter, udforske og udvide alternative og vedvarende energikilder. En mulighed kunne bl.a. være at skue opad, op mod himlen. Der finder vi den ultimative energikilde, solen, der dagligt sender omkring 120.000 TW energi mod Jorden. Denne energi kan udnyttes ved hjælp af solceller. En ny solcelle, der udvikles i øjeblikket, er den farvestofs sensibiliserede solcelle (DSC). Denne bruger et farvestof, N719, til at omdanne solenergien til strøm.

## Problemformulering

Kan der ved FTIR spektroskopi observeres en kompleksdannelse mellem thiocyanat ( $\text{SCN}^-$ ) og iod ( $\text{I}_2$ ) i acetonitrilopløsning (MeCN) – og i så fald, hvad er stabiliteten for et sådan kompleks, bestemt ved ligevægtskonstanten (K)?

En DSC er baseret på absorption af lysenergi i et farvestof. I farvestoffet findes  $\text{SCN}^-$  som en ligand til ruthenium(II), og  $\text{I}_2$  i MeCN opløsning bruges som elektrontransportør ved et redox system. Da disse stoffer indgår som komponenter i DSC kan de derved i teorien reagere med hidtil ukendt konsekvens for f.eks. DSC's holdbarhed.

På figuren herunder kan man se en DSC, og det aktive farvestof. Mens der bliver dannet strøm, sker dog også det, at  $\text{SCN}^-$  bliver erstattet af  $\text{I}_3^-$  i farvestoffet, hvorved dette mister sin funktion, og dermed flyder  $\text{SCN}^-$  rundt i solcellen og kan reagere med  $\text{I}_2$ .



Afbilledet er absorbansen for opløsninger af  $\text{I}_2$  og KSCN i MeCN, i celle E-1, som funktion af bølgetal. De respektive koncentrationer af  $\text{I}_2$  for en given kurve er angivet i tekstboksen, mens koncentrationen af KSCN holdtes konstant på 0,02496 M. Toppen ved 2059  $\text{cm}^{-1}$  er  $\text{SCN}^-$ , mens toppen ved 2109  $\text{cm}^{-1}$  antages at skyldes komplekset  $\text{I}_2\text{SCN}^-$ , eftersom absorbansen for denne top tiltager ved øget  $\text{I}_2$  koncentration mens absorbansen for  $\text{SCN}^-$  toppen aftager, illustreret ved pilene. Ved omkring 2085  $\text{cm}^{-1}$  findes det isobestiske punkt, hvor alle kurverne krydser hinanden og de molære absorbanser er ens, dermed er den samlede absorbans af opløsningen i dette punkt uafhængig af respektive koncentrationer af  $\text{I}_2$  og  $\text{SCN}^-$ . Spektrene er fratrukket spektret for MeCN, figuren er blevet beskåret for at forstørre det relevante område og nulstillet ved 2150  $\text{cm}^{-1}$ .

## Konklusion

Ved FTIR spektroskopiske undersøgelser af KSCN og  $\text{I}_2$  i MeCN fandt vi, at den karakteristiske  $\text{SCN}^-$  top ved bølgetal 2059  $\text{cm}^{-1}$  aftog med stigende koncentration af  $\text{I}_2$ , samtidig med at en ny top fremkom ved bølgetal 2109  $\text{cm}^{-1}$ . Denne top tilordnede vi komplekset  $\text{I}_2\text{SCN}^-$ . På baggrund af spektrene, antog vi, at  $\text{I}_2$  bindes til svovl i  $\text{SCN}^-$ , da komplekset absorberede ved et højere bølgetal end  $\text{SCN}^-$ . Ved en numerisk procedure, STEP, bestemte vi ligevægtskonstanten for til  $2200 \pm 450 \text{ M}^{-1}$ . Dette resultat modstrider et tidligere studie [Ashour, 2000], som bestemte ligevægtskonstanten til  $10^{6,6} \text{ M}^{-1}$ .

I relation til DSC forventer vi, at  $\text{SCN}^-$  stabiliseres af  $\text{I}_2$  i elektrolytopløsningen under dannelse af  $\text{I}_2\text{SCN}^-$ , hvilket øger muligheden for at  $\text{SCN}^-$  fraspaltes fra farvestoffet. Tabet af  $\text{SCN}^-$  påvirker muligvis farvestoffets evne til at exciteres af solen, hvorved solcellens levetid formentlig forkortes.