

## Schwerpunktprogramm

### „Materialsynthese nahe Raumtemperatur“



#### Projektbeschreibung

### Löslichkeit von molekularen und ionischen Präkursoren in ionischen Flüssigkeiten

Antragsteller	<b>Dr.-Ing. Christoph Held</b>
Institution	Technische Universität Dortmund Fakultät Bio- und Chemieingenieurwesen Lehrstuhl für Thermodynamik Emil-Figge-Str. 70 44227 Dortmund Tel.: 0231/755-2086 E-Mail: Christoph.Held@bci.tu-dortmund.de
Antragsteller	<b>Prof. Dr. Sergey Verevkin</b>
Institution	Universität Rostock Institut für Chemie Lehrstuhl für Allgemeine Physikalische Chemie Dr.-Lorenz-Weg 2 18059 Rostock Tel.: 0381/498-6508 E-Mail: sergey.verevkin@uni-rostock.de

#### Kurzfassung des Projektantrags

Der Erfolg der ionothermalen Synthese ist entscheidend von der Auswahl geeigneter Precursors abhängig. Das Hauptziel dieses Forschungsvorhabens ist die Entwicklung eines allgemeinen thermodynamischen Verfahrens basierend auf der prädiktiven Zustandsgleichung electrolyte PC-SAFT (ePC-SAFT). Es wird eine Modellstrategie entwickelt und angewendet, die es erlaubt, die Löslichkeit von flüssigen oder festen Präkursoren in ionischen Flüssigkeiten (ILs), die als geeignete Lösungsmittel für ionothermale Synthesen verwendet werden, vorauszusagen. Als feste Präkursoren betrachten wir anorganische Salze; dies ist an die Synthese von Metallnanopartikeln in ILs angelehnt. Als flüssige Präkursoren werden homologe Reihen organischer Verbindungen (Alkane, Alkene, Aromaten, Alkohole, Ether, Ester) untersucht.

Die Entwicklung und Parametrisierung von ePC-SAFT wird mit Hilfe von zuverlässigen experimentellen Daten aus Literatur, aber auch anhand neuer Daten durchgeführt. In diesem Zusammenhang experimentelle Studien zu thermodynamischen Eigenschaften reiner ILs und Präkursoren sowie der Eigenschaften ihrer binären Mischungen durchgeführt. Die daraus entstandenen Daten dienen als Inputdatensätze der Entwicklung und Validierung des

zu entwickelnden Modellansatzes innerhalb ePC-SAFT. Dies ermöglicht Modellvorhersagen, um letztendlich ILs als Synthesemedium für feste und flüssige Präkursoren zu screenen. Um die Anwendung von thermodynamischen Parametern, die aus binären Mischungen Präkursor-IL zu Mehrkomponenten-Systemen erhalten werden, weiter voranzutreiben, wird eine zusätzliche Validierung des ePC-SAFT Modells durch experimentelle und theoretische Untersuchung von zwei reaktiven Systemen durchgeführt. Diese Systeme bestehen aus den Reaktionsteilnehmern sowie dem Lösungsmittel (auch ILs).

Die Erstellung von thermodynamischen Ergebnissen in Systemen Präkursor-IL ermöglicht die Entwicklung einer allgemeinen Löslichkeits-Skala mit dem Ziel ILs hinsichtlich ihrer Leistungsfähigkeit für die ionothermale Synthese und deren Verwendung als Lösungsmittel in reaktiven Systemen prädiktiv auszuwählen. Die so entwickelte Skala hat ein enormes Potenzial, die Anwendung von ILs auf eine breite Palette von molekularen und ionischen Präkursoren zu verbreitern und zu verbessern.