

Schwerpunktprogramm

„Materialsynthese nahe Raumtemperatur“



Projektbeschreibung

Ionische Flüssigkeiten in der Synthese und Feinabstimmung von porösen Materialien: Wissensbasiertes Design von Eigenschaften durch einen kombinierten experimentellen und theoretischen Ansatz

Antragsteller	Prof. Dr. Barbara Kirchner
Institution	Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn Institut für Physikalische und Theoretische Chemie Mulliken Center for Theoretical Chemistry Beringstraße 4 53115 Bonn Telefon +49 228 73-60442 Fax +49 228 73-9064 E-Mail kirchner@thch.uni-bonn.de
Antragsteller	Prof. Dr. Annegret Stark
Institution	Technische Universität Darmstadt Eduard-Zintl-Institut Fachgebiet Physikalische Chemie Alarich-Weiss-Straße 8 64287 Darmstadt

Kurzfassung des Projektantrags

Dieses Projekt soll als bilaterales Projekt zwischen PD Dr. Annegret Stark (Leibniz-Institut für Oberflächenmodifizierung, Leipzig) und Prof. Dr. Barbara Kirchner (Universität Bonn) durchgeführt werden. Die Expertise einer experimentell und einer theoretisch arbeitenden Gruppe werden darin kombiniert.

Forschungsfokus 1 (FF1) des Projekts behandelt die Untersuchung von ionischen Flüssigkeiten (IF) als Lösungsmittel und strukturdirigierende Agenzien in der Synthese von Zeolithen. Es ist das Ziel, die vorherrschenden und steuernden Wechselwirkungen auf molekularer Ebene zu verstehen, um zu einem Verständnis der Solvations- und Kristallisationsmechanismen, und somit den Hintergründen der hohen Selektivitäten der resultierenden Netzwerke, beizutragen.

FF2 untersucht die Eigenschaften von IF in porösen Materialien. Das Ziel ist es, detailliertes Wissen über die Grenzflächenstruktur und Wechselwirkungen zwischen porösen anorganischen Materialien und IFs, welche zu Abweichungen von den Eigenschaften in der Bulk-Flüssigphase (Dichte, Schmelzpunkt etc.) führen, zu erlangen.

Systematische Studien, die homologe Reihen von IFs einschließen, in welchen das Kation, das Anion oder die Substituenten des Kations variiert werden, werden durchgeführt. In FF 1 werden dabei unsere bisherigen Untersuchungen von AIPOs auf SAPOS, MaPOs und

Aluminosilicate ausgeweitet, um die Grenzen der Ionothermalsynthese hinsichtlich der Präkursoren, der Wahl der IF sowie der resultierenden Netzwerke zu eruieren.

In FF2 werden die Eigenschaften, Orientierung der IFs in porösen Materialien in Abhängigkeit der IF-Struktur (homologe Reihen), der Art des Trägermaterials (Porengröße, -geometrie, chemische Zusammensetzung) und der Beladung untersucht.

Die folgenden Forschungsfragen sollen beantwortet werden.

1. Welche Strukturmerkmale der IF (Art des Kations, Kationssubstituent, Art des Anions) beeinflussen das resultierende Netzwerk? Welche Wechselwirkungsmodi herrschen vor?
2. Kann die IF so strukturell konzipiert werden, dass neue Netzwerkstrukturen herstellbar sind?
3. Was ist die Rolle des Mineralisierers und kann er durch eine IF-Funktion ersetzt werden?
4. Kann die (Niedrigdruck-)Ionothermalsynthese in einen kontinuierlichen Prozess transferiert werden?
5. Was ist der Einfluss der Pore auf die physikalisch-chemischen Eigenschaften der IF?
6. Wie beeinflusst die Pore die Orientierung der IF?
7. Wie beeinflusst die IF-Zusammensetzung (d. h. Anion, Kation, Kationssubstituent) die Orientierung in der Pore, verglichen mit der Bulk-Flüssigphase?
8. Ist der Porenfüllungsmechanismus abhängig von der IF?