



seit 1558

Friedrich-Schiller-Universität Jena · Postfach · D-07740 Jena

Chemisch-Geowissenschaftliche Fakultät

Institut
für Technische Chemie und
Umweltchemie

Lessingstr.12
D-07743 Jena

Telefon: 0 36 41 · 94 84 13
Telefax: 0 36 41 · 94 84 02

Dr. A. Stark

E-Mail:
annegret.stark@uni-jena.de

Jena, den 23.06.09

Workshop Protokoll

Kompatibilität der Methoden zur Ermittlung von Polaritäten Ionischer Flüssigkeiten

Am 11. und 12. Juni 2009 trafen sich 17 Teilnehmer des SPP 1191 sowie vier interessierte Gäste (Kollegen aus der FSU Jena) am Institut für Technische Chemie und Umweltchemie der Friedrich-Schiller Universität Jena zu einem Workshop zum Thema „Kompatibilität der Methoden zur Ermittlung von Polaritäten Ionischer Flüssigkeiten“.

Die Veranstaltung, die durch die Gruppen Spange (TU Chemnitz) und Stark (FSU Jena) organisiert war, hatte das Ziel, Strategien und Arbeitspakete zur Ermittlung der Polarität von ionischen Flüssigkeiten zu entwickeln, die Ergebnisse der einzelnen Gruppen zu vergleichen und zu einem konzeptionellen Verständnis zu gelangen.

Der Workshop begann nach der Begrüßung der Teilnehmer durch Prof. Spange und Dr. Stark um 13:30 Uhr. Prof. Spange gab einen einführenden Vortrag, in dem er herausarbeitete, dass die Polarität ein sehr allgemein gefasster Begriff ist und von unterschiedlichsten Interaktionen zwischen Molekülen bzw. Ionen bestimmt wird. Er stellte verschiedene empirische Methoden zur Quantifizierung solcher Interaktionen vor, und arbeitete besonders zwei Probleme empirischer Ansätze heraus, nämlich die Frage, ob die Koeffizienten von Multiparameteransätzen wirklich als unabhängig voneinander zu betrachten sind und welche Referenzsysteme zu verwenden seien.

Ralf Lungwitz (AK Spange, TU Chemnitz) berichtete anschließend über die Grundlagen solvatochromer Farbstoffe zur Bestimmung empirischer Polaritätsparameter. Er stellte seine Ergebnisse zur Ermittlung der Kamlet-Taft-Parameter (α , β und π^*) in Abhängigkeit von der Kettenlänge, dem Kation und dem Anion vor. Dabei wurde näher auf die linearen Korrelationen zwischen der Wasserstoffbrückenbindungsdonor und -akzeptor Fähigkeiten der ILs eingegangen. Ebenfalls wurde der linear Zusammenhang zwischen den Kamlet-Taft-Parametern und der $^1\text{H-NMR}$ chemischen Verschiebung der Protonen midazoliumbasierender Ionischer Flüssigkeiten aufgezeigt.

Prof. Weingärtner (Ruhr-Universität Bochum) arbeitete anschaulich heraus, dass umfassende komplementäre Expertise zur Beurteilung von Polarität im SPP 1911 zusammenkommt, sowohl im Bereich der Bestimmung von physikalischen-chemischen Parametern (Dielektrizität, solvatochrome Studien, IR, Raman, NMR und ESR Spektroskopie, zeitaufgelöste Laserspektroskopie) sowie bei der

Korrelation zu synthetischen Ergebnissen sowie rechen theoretischen Ansätzen. Er führte in die Messung der Dielektrizität ein und präsentierte Ergebnisse zu einer Reihe von konventionellen und protischen ionischen Flüssigkeiten. Er stellte heraus, dass die gemessenen Dielektrizitätskonstanten niedriger sind als die, die durch Korrelation mit anderen Polaritätsskalen erwartet würden. Im allgemeinen liegen die Dielektrizitätskonstanten von ionischen Flüssigkeiten relative nahe beieinander. Der Einfluss von Wasser auf die ermittelten Werte wurde als eher gering ermittelt. Ausnahmen sind ionische Flüssigkeiten, die auf dipolaren oder mehrfachvalenten Anionen basieren, sowie protische ionische Flüssigkeiten, die hohe Dielektrizitätskonstanten liefern.

Prof. Buchner (Universität Regensburg) führte in die physikalischen Grundlagen der frequenzabhängigen Dielektrizität ein. Er legte dar, welche Interaktionen zur Dielektrizität beitragen und in welchem Maße. Des Weiteren referierte er über Relaxationsprozesse und den Einfluss weiterer dynamischer Prozesse in Ionischen Flüssigkeiten auf die Dielektrizitätskonstante.

Dr. Stark (Friedrich-Schiller Universität Jena) berichtete über ihre Ergebnisse im Bereich der Veresterungsreaktion in ionischen Flüssigkeiten, und korrelierte die synthetischen Ergebnisse mit ^1H NMR spektroskopischen Messungen, die darauf hinweisen, dass die Basizität des Anions für das Auftreten von pufferähnlichen Effekten verantwortlich ist, wodurch die Aktivität des Katalysators gemindert wird.

Frau Bartosik (AK Mudring, Ruhr-Universität Bochum) stellte den solvatochromen Nickelkomplex $[\text{Ni}(\text{tmen})(\text{acac})]\text{BPh}_4$ vor, welcher zur Bestimmung der Polarität von ionischen Flüssigkeiten verwendet werden kann. Dieser verhält sich vor allem im Bezug auf die Anionen sehr selektiv.

Den Vorträgen schloss sich eine einstündige Postersession an, bei der auch die Kollegen der FSU themenspezifische Posterbeiträge vorstellten.

Der Tag klang anschließend bei einem gemeinsamen Abendessen aus.

Am Freitag stellte Herr Lohse (AK Oum, Georg-August Universität Göttingen) einen organischen Farbstoff zur Messung der Polarisierbarkeit von ionischen Flüssigkeiten und deren Mischungen mit Cosolventien mittels *ultra fast* Laserspektroskopie, sowie die Korrelation der Daten mit Brechungsindices vor. Diese Untersuchungen dienen dem Ziel, die Solvatationseigenschaften von ionischen Flüssigkeiten mit unterschiedlichen Soluten zu untersuchen.

Schließlich fand eine weitere Postersession statt, in deren Anschluss eine ausführliche Diskussionsrunde zu zukünftigen Kooperationen und die Auswertung des Workshops durchgeführt wurde.

Es wurde vorgeschlagen eine wichtige binäre Mischung zu definieren und die Ergebnisse verschiedener Methoden zu korrelieren. Außerdem soll über den Stand der Dinge bzgl. der Referenz-ILs beim Koordinator nachgefragt werden.

Die Veranstaltung endete nach einer Zusammenfassung und der Verabschiedung durch Prof. Spange um 12 Uhr.

Protokollanten:

A. Stark

R. Lungwitz

Teilnehmerliste:

Spange	Stefan	TU Chemnitz
Lungwitz	Ralf	TU Chemnitz
Kahle	Ingolf	TU Chemnitz
Bartosik	Joanna	RU Bochum
Richter	Kai	RU Bochum
Huang	Mian-Mian	Uni Bochum
Weingärtner	Hermann	Uni Bochum
Krischok	Stefan	TU Ilmenau
Beenken	Wichard	TU Ilmenau
Buchner	Richard	Uni Regensburg
Oum	Kawon	Uni Göttingen
Lenzer	Thomas	Uni Göttingen
Lohse	Peter W.	Uni Göttingen
Bartels	Nils	Uni Göttingen
Biletzki	Tobias	FSU Jena
Zimmermann	Johannes	FSU Jena
Miloslavina	Alesia	FSU Jena
Mohr	Gerhard	FSU Jena
Stark	Annegret	FSU Jena
Sellin	Martin	FSU Jena
Imhof	Wolfgang	FSU Jena