

Marcus Stuckenholz

Experimentelle Bestimmung und
theoretische Beschreibung von
gas-flüssig Gleichgewichten
ionischer Fluide mit kombinierten
Messmethoden

Experimentelle Bestimmung und theoretische Beschreibung
von gas-flüssig Gleichgewichten ionischer Fluide
mit kombinierten Messmethoden

Vom Fachbereich Produktionstechnik

der

UNIVERSITÄT BREMEN

zur Erlangung des Grades
Doktor-Ingenieur
genehmigte

Dissertation

von

M. Sc. Marcus Stuckenholtz

Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Johannes Kiefer
Prof. Dr.-Ing. Hans Hasse (TU Kaiserslautern)

Tag der mündlichen Prüfung: 18.06.2021

Berichte aus der Thermodynamik

Marcus Stuckenholz

**Experimentelle Bestimmung und theoretische
Beschreibung von gas-flüssig Gleichgewichten
ionischer Fluide mit kombinierten Messmethoden**

D 46 (Diss. Universität Bremen)

Shaker Verlag
Düren 2021

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Bremen, Univ., Diss., 2021

Copyright Shaker Verlag 2021

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-8200-5

ISSN 0946-0829

Shaker Verlag GmbH • Am Langen Graben 15a • 52353 Düren

Telefon: 02421 / 99 0 11 - 0 • Telefax: 02421 / 99 0 11 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Zusammenfassung

Bei ionischen Flüssigkeiten (engl. ionic liquids; ILs) handelt es sich um organische Salze, welche nach allgemeiner Definition aus molekularen organischen Kationen und organischen oder anorganischen Anionen bestehen. Außerdem weisen ILs eine Schmelztemperatur von $T_m < 100\text{ °C}$ auf und verfügen meistens über einen vernachlässigbar niedrigen Dampfdruck. Zudem sind einige ILs bis zu einer Temperatur von $T_d \approx 450\text{ °C}$ thermisch stabil. Die thermophysikalischen Eigenschaften werden von den Kationen und Anionen bestimmt und können durch die Wahl geeigneter Kombinationen über einen weiten Bereich eingestellt werden. Unter den vielen möglichen Kombinationen von ILs mit organischen Lösungsmitteln sind binäre Mischungen der 1-Alkyl-3-methylimidazolium Trifluormethylsulfonat ($C_x\text{mimTfO}$) ILs mit kurzkettigen n -Alkylalkoholen von besonderem Interesse. Beide Komponenten verfügen über einen großen Liquidusbereich, weisen eine hohe thermische Stabilität auf und sind bei Raumtemperatur vollständig miteinander mischbar. Zudem verfügen die $C_x\text{mimTfO}$ ILs über eine verhältnismäßig niedrige Viskosität. Aufgrund dessen sind diese Mischungen bspw. potentielle Kandidaten für Arbeitsfluide in Absorptionskältemaschinen oder im Falle der $C_x\text{mimTfO}$ ILs geeignete Schleppmittel zum Trennen azeotroper Gemische. Zur Auslegung dieser thermischen Prozesse ist ein fundiertes Verständnis des gas-flüssig Phasenverhaltens unabdingbar.

Um einen detaillierten Einblick in das gas-flüssig Phasenverhalten zu erhalten, werden in dieser Arbeit die isobaren gas-flüssig Gleichgewichte binärer Mischungen einer $C_x\text{mimTfO}$ ($x = 2, 4, 6, 8$) IL mit einem n -Alkylalkohol (Methanol, Ethanol, Propan-1-ol und Butan-1-ol; $C_n\text{OH}$; $n = 1-4$) bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar systematisch mit Hilfe der Methode der isobaren Ebulliometrie untersucht. Durch die Zugabe der IL wird die Siedetemperatur der binären Mischung systematisch erhöht. Eine Variation des Systemdrucks zu niedrigeren Drücken führt zu einer Verschiebung der Siedetemperatur zu niedrigeren Werten. Der Verlauf der gas-flüssig Gleichgewichte ist dabei druckunabhängig. Darüber hinaus zeigen alle Mischungen signifikante Abweichungen vom Raoult'schen Gesetz (ideales Verhalten), welches durch Aktivitätskoeffizienten $\gamma_i \neq 1$ beschrieben wird. Dabei werden die Abweichungen vom idealen Verhalten sowohl vom n -Alkylalkohol als auch von der Länge der Alkylseitenkette des $C_x\text{mim}^+$ Kations beeinflusst. Eine Verlängerung der n -Alkylalkohole resultiert in einer Abnahme der Wechselwirkungen zwischen den Molekülen beider Komponenten, wodurch der Einfluss auf die Erhöhung der Siedetemperatur der binären Mischung sinkt. Eine Variation der Alkylseitenkette des $C_x\text{mim}^+$ Kations übt hingegen den gegenteiligen Effekt aus.

Zur Beschreibung der experimentellen gas-flüssig Gleichgewichtsdaten der $C_x\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ Mischungen werden drei Modelle unterschiedlicher Komplexität (Wilson-Gleichung, NRTL-Modell und PC-SAFT-Zustandsgleichung) auf ihre Eignung untersucht. Zudem wird im Rahmen einer Parametervariation die Genauigkeit der Modelle abgeschätzt. Alle Modelle beschreiben die experimentellen Daten, wobei einzig das NRTL-Modell eine quantitative Beschreibung der untersuchten Mischungen ermöglicht. Die PC-SAFT-Zustandsgleichung eignet sich jedoch zur qualitativen Beschreibung und Vorhersage der gas-flüssig Gleichgewichte der untersuchten Mischungen. Eine Variation der PC-SAFT Reinstoffparameter zeigt, dass die Reinstoffparameter der *n*-Alkylalkohole einen signifikant größeren Einfluss auf die Güte der Anpassung haben als die der ILs.

Abstract

Ionic liquids (ILs) are organic salts, which consist by definition of molecular organic cations and organic or inorganic anions. They have a melting point of $T_m < 100$ °C and usually a negligible vapor pressure. Furthermore, some ILs are thermally stable up to a decomposition temperature of $T_d \approx 450$ °C. The thermophysical properties are set by the cations and anions and can be adjusted over a wide range by selecting suitable cation / anion combinations. Within the broad range of possible IL / organic solvent combinations, binary mixtures of 1-alkyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate ($C_x\text{mimTfO}$) ILs with short chain n -alkyl alcohols are of particular interest: both components have a wide liquidus range, show a high thermal stability, are fully miscible at room temperature, and the $C_x\text{mimTfO}$ ILs additionally have a relatively low viscosity compared with other ILs. Therefore, these mixtures are potential candidates e.g. as working pairs in absorption refrigeration cycles or in case of the $C_x\text{mimTfO}$ ILs suitable entrainers for separating azeotropic mixtures. For the design of these thermal processes a profound understanding of the phase behavior is required.

The isobaric vapor-liquid equilibria of binary mixtures of the IL $C_x\text{mimTfO}$ ($x = 2, 4, 6, 8$) with a short chained n -alkyl alcohol (methanol, ethanol, propan-1-ol, and butan-1-ol; $C_n\text{OH}$; $n = 1-4$) at three different pressures $p = 1000, 700,$ and 500 mbar are systematically studied by applying the isobaric ebulliometry. The results show that an increase of the IL content in the binary mixtures results in an increase of the mixture's boiling temperature. A variation of the pressure to lower pressures leads to a shift of the boiling temperature to lower values. The shape of the curve can be observed to be pressure independent. Furthermore, all mixtures show significant deviations from Raoult's law (ideal behavior), which is described by activity coefficients $\gamma_i \neq 1$. The chain length of both, the n -alkyl alcohol and the ($C_x\text{mim}^+$) cation have an impact on the deviations from the ideal behavior. A length variation of the n -alkyl alcohols to longer alkyl chains results in a decrease of the molecular interactions between both components and thus to a lower impact on the increase of the boiling temperature of binary mixtures. In contrast, an extension of the alkyl side chain of the $C_x\text{mim}^+$ cation has the opposite effect.

In order to describe the experimental vapor-liquid equilibrium data, three models of different complexity (Wilson equation, NRTL model and PC-SAFT equation of state) are examined for their capability to describe the $C_x\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ mixtures. In addition, the accuracy of the models is estimated by parameter variation. All models describe the experimental data;

however, only the NRTL model allows a quantitative description. The PC-SAFT equation of state is suitable for the qualitative description and prediction of the vapor-liquid equilibria of the studied mixtures. A variation of the PC-SAFT pure component parameters shows that the parameters of the *n*-alkyl alcohols have a significantly stronger influence on the quality of the fit than those of the ILs.

Danksagung

Meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr.-Ing. Johannes Kiefer danke ich für die Beratung und die vielen zielführenden Gespräche. Außerdem bedanke ich mich für die Möglichkeit mein Promotionsvorhaben am Fachgebiet Technische Thermodynamik durchführen zu können.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Hans Hasse danke ich für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Zweitgutachtens.

Bei meinem Betreuer Herrn Dr. Bernd Rathke bedanke ich mich für die vielen konstruktiven Gespräche. Ich möchte mich auch für das mir entgegengebrachte Vertrauen und die aufgewendete Zeit bedanken. Darüber hinaus habe ich die Möglichkeit sehr geschätzt, bei Herrn Dr. Rathke jederzeit ein offenes Ohr für Diskussionen zu haben.

Herrn Prof. Dr. Wolfram Schröer danke ich für das Interesse an meinem Thema und die zielführenden Impulse.

Bei Herrn Prof. Dr. João A. P. Coutinho bedanke ich mich für die Einladung in die PATH-Arbeitsgruppe an die Universidade de Aveiro und den damit verbundenen Forschungsaufenthalt. Das dabei erworbene Wissen hat mir wertvolle Anregungen für meine weitere Promotionszeit gegeben. In diesem Zusammenhang möchte ich auch Herrn Dr. Pedro J. Carvalho meinen Dank für die Betreuung während meines Aufenthaltes in Aveiro aussprechen.

Herrn Dr. Kenneth Kroenlein danke ich für die Möglichkeit die TRC-Arbeitsgruppe am National Institute of Standards and Technology (NIST) in Boulder, Colorado zu besuchen. Die kritische Diskussion meiner experimentellen Datensätze hat mein Verständnis für die Handhabung und Beschreibung derartiger Informationen grundlegend erweitert.

Darüber hinaus bedanke ich mich bei meinen Kolleginnen und Kollegen am Fachgebiet Technische Thermodynamik für das angenehme kollegiale Umfeld. In diesem Zusammenhang bedanke ich mich besonders bei Frau Sabine Wagenfeld für die technische Unterstützung im Labor und Herrn Malte F. B. Stodt für die konstruktiven Anregungen zum Thema G^E -Modelle und PC-SAFT-Zustandsgleichung sowie für die gute Zusammenarbeit.

Einen besonderen Dank möchte ich auch Frau Dr. Daniela Kerlé und Frau Dr. Marisa A. Alves da Rocha für die zielführenden Anregungen, die hilfreichen Tipps und die freundschaftliche Verbundenheit aussprechen.

Ich bedanke mich für die finanzielle Förderung durch die COST Action CM1206-30741, EXIL – Exchange on Ionic Liquids. Mein Dank gilt ebenso der Forschungsförderung der Universität Bremen sowie dem MAPEX Center for Materials and Processes für den PhD research grant.

Auch bei meinen Freunden möchte ich mich für die tatkräftige Unterstützung während der Promotion bedanken. Während des Verfassens dieser Arbeit war die Zeit, die wir zusammen verbracht haben, ein positiver Ausgleich in meiner Freizeit. Ein besonderer Dank gilt in diesem Zusammenhang Herrn Marius Flaake, Herrn Christian M. Müller und Herrn Axel Schlomann für die vielen Gespräche und motivierenden Kommentare.

Meinem Bruder Torsten danke ich für die anregenden Kommentare. Außerdem möchte ich mich für die zusammen verbrachten Stunden bedanken, die einen überaus wohlthuenden Ausgleich während der Promotionszeit dargestellt haben.

Abschließend möchte ich nicht vergessen, mich ganz besonders bei meinen Eltern Birgit und Thomas zu bedanken. Diese haben mir mein Studium erst ermöglicht und haben mich während der gesamten Studienzeit stets unterstützt, gefördert und motiviert.

I. Inhalt

I.	INHALT	I
II.	ABBILDUNGSVERZEICHNIS	V
III.	TABELLENVERZEICHNIS	XVIII
IV.	NOMENKLATUR	XXIII
1.	EINLEITUNG	1
2.	GRUNDLAGEN	7
2.1	Ionische Flüssigkeiten.....	7
2.1.1	Thermophysikalische Eigenschaften ionischer Flüssigkeiten.....	8
2.1.2	Gas-flüssig Gleichgewichte von IL / Alkylalkoholmischungen.....	14
2.2	Grundlagen der Gleichgewichtsthermodynamik.....	21
2.2.1	Das chemische Potential idealer Fluide und Mischungen.....	22
2.2.2	Das chemische Potential Realer Fluide und Mischungen.....	23
2.2.3	Gas-flüssig Gleichgewichte.....	25
2.2.4	Dampfdruck eines Reinstoffs.....	26
2.2.5	Das Raoult'sche Gesetz.....	28
2.3	Modelle zur Berechnung der molaren freien Exzessenthalpie.....	29
2.3.1	Wilson-Gleichung.....	30
2.3.2	Nonrandom Two-Liquid (NRTL)-Modell.....	32
2.4	PC-SAFT-Zustandsgleichung.....	34
2.4.1	Allgemeine Modellbeschreibung.....	35
2.4.2	Beschreibung binärer IL / <i>n</i> -Alkylalkohol Mischungen.....	38
2.5	Experimentelle Methoden zur Bestimmung von gas-flüssig Gleichgewichten.....	40
2.5.1	Statische Methoden.....	41
2.5.2	Dynamische Methoden.....	42
3.	EXPERIMENTELLE METHODEN	49
3.1	Verwendete Substanzen.....	49
3.1.1	Ionische Flüssigkeiten.....	49

3.1.2	<i>n</i> -Alkylalkohole.....	50
3.1.3	Wasser	51
3.1.4	Probenvorbereitung	51
3.2	Isobare Ebulliometrie.....	51
3.2.1	Dynamische Phasengleichgewichtsapparatur.....	52
3.2.2	Mikroebulliometer.....	57
4.	ERGEBNISSE DER EXPERIMENTELLEN BESTIMMUNG BINÄRER GAS-FLÜSSIG GLEICHGEWICHTE	67
4.1	Gas-flüssig Gleichgewichte binärer IL / <i>n</i> -Alkylalkohol bzw. Wasser Mischungen	67
4.1.1	$C_x\text{mimTfO}$ / $C_n\text{OH}$ Mischungen	69
4.1.2	$C_4\text{mimTfO}$ / H_2O Mischungen.....	73
4.2	Methodenvergleich.....	74
4.2.1	$C_4\text{mimTfO}$ / H_2O Mischungen.....	75
4.2.2	$C_4\text{mimTfO}$ / $C_4\text{OH}$ Mischungen	79
4.3	Analyse der Aktivitätskoeffizienten der $C_x\text{mimTfO}$ / <i>n</i> -Alkylalkohol Mischungen	83
4.4	Einfluss des Systemdrucks auf das gas-flüssig Gleichgewicht.....	92
4.5	Einfluss der Kettenlänge des <i>n</i> -Alkylalkohols auf das Siedeverhalten der IL / <i>n</i> - Alkylalkohol Mischungen.....	93
4.6	Einfluss der Länge der Alkylseitenkette am $C_x\text{mim}^+$ Kations auf das Siedeverhalten der IL / <i>n</i> -Alkylalkohol Mischungen.....	97
4.7	Literaturvergleich.....	100
5.	MODELLHAFTE BESCHREIBUNG DER GAS-FLÜSSIG GLEICHGEWICHTE.....	109
5.1	Allgemeiner Rechenalgorithmus.....	109
5.1.1	Rechenroutinen der Wilson-Gleichung und des NRTL-Modells.....	110
5.1.2	Rechenroutine der PC-SAFT-Zustandsgleichung	111
5.2	Beschreibung mit der Wilson-Gleichung.....	111
5.2.1	Parameteranpassung Wilson-Gleichung.....	111

5.2.2	Ergebnisdarstellung der Parameteranpassung mit der Wilson-Gleichung	112
5.3	Beschreibung mit dem NRTL-Modell	116
5.3.1	Parameteranpassung NRTL-Modell.....	116
5.3.2	Ergebnisdarstellung der Parameteranpassung mit dem NRTL-Modell.....	117
5.4	Beschreibung mit der PC-SAFT-Zustandsgleichung.....	121
5.4.1	Reinstoffparameter der PC-SAFT-Zustandsgleichung.....	121
5.4.2	Ergebnisdarstellung der PC-SAFT-Zustandsgleichung	122
5.5	Modellvergleich	126
5.6	Sensitivitätsanalyse	135
5.6.1	Parametervariation Wilson-Gleichung	136
5.6.2	Parametervariation NRTL-Modell	138
5.6.3	Parametervariation PC-SAFT-Zustandsgleichung.....	139
5.7	Resümee	142
6.	ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK	145
6.1	Zusammenfassung der bisherigen Forschungsergebnisse.....	145
6.2	Ausblick	147
7.	LITERATUR.....	153
ANHANG		177
A	Dichtebestimmung	177
B	IR-Spektroskopie	178
C	Kalibrierung der Sensoren und Analysemethoden.....	179
C.A	Kalibrierkurven zur Bestimmung der Zusammensetzung der flüssigen Proben .	179
C.B	Sensorkalibrierung.....	180

D	Verwendete Substanzen und Stoffdaten	183
E	Ergebnisse Konsistenztest.....	188
F	Messwerte $C_8\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ (n = 1-4) Mischungen, $C_2\text{mimTfO} / C_5\text{OH}$ Mischungen und Dichtedaten der IL $C_8\text{mimTfO}$	189
G	PC-SAFT Reinstoffparameter.....	208
H	Diagramme und Abbildungen.....	209
I	Veröffentlichungen	234
J	Studentische Abschlussarbeit.....	236

II. Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Strukturformeln ausgewählter Kationen und Anionen. Das R bei den Kationen repräsentiert einen Alkylrest. Kationen: a) 1-Alkyl-3-methylimidazolium, b) 1-Alkylpyridinium, c) Tetraalkylammonium, d) Tetraalkylphosphonium; Anorganische Anionen: e) Chlorid, f) Bromid, g) Iodid, h) Tetrafluorborat, i) Hexafluorosphat; Organische Anionen: j) Trifluormethylsulfonat, k) Bis[(trifluormethyl)sulfonyl]amid, l) Dicyanamid.	9
Abbildung 2:	Dichte flüssiger reiner ILs als Funktion der Temperatur bei Umgebungsdruck ($p \approx 1013$ mbar): a) Abhängigkeit vom Anion: C ₄ mimNTf ₂ , ¹³³ C ₄ mimPF ₆ , ¹³⁴ C ₄ mimTfO, ¹⁰⁹ C ₄ mimDCA; ¹³³ b) Abhängigkeit von der Alkylseitenkette am C _x mim ⁺ Kation (C _x mimTfO; x = 2, 4, 6), ¹⁰⁹ C ₈ mimTfO (diese Arbeit; Daten siehe Tabelle 20; Anhang F).	11
Abbildung 3:	Dynamische Viskosität reiner ILs als Funktion der Temperatur bei Umgebungsdruck ($p \approx 1013$ mbar): a) Abhängigkeit von der Alkylseitenkette am C _x mim ⁺ Kation: C ₂ mimTfO, ¹²⁹ C ₄ mimTfO, ¹³³ C ₆ mimTfO; ¹⁴³ b) Abhängigkeit vom Anion: C ₂ mimOAc, ¹²⁹ C ₂ mimTfO, ¹²⁹ C ₂ mimNTf ₂ , ¹⁴⁴ C ₂ mimSCN, ¹²⁹ C ₂ mimDCA. ¹²⁹	12
Abbildung 4:	Exemplarische Darstellung der Dampfdruckkurven ausgewählter <i>n</i> -Alkylalkohole (C _n OH, n = 1-5). Die Dampfdrücke wurden mit Gleichung (2-22) und auf Basis von Daten aus der Literatur 149 berechnet.	27
Abbildung 5:	Exemplarische Darstellung des Raoult'schen Gesetzes bei konstanter Temperatur anhand einer binären Mischung. Die gestrichelten Linien repräsentieren den Partialdruck der jeweiligen Komponenten <i>i</i> und <i>j</i> in Abhängigkeit vom Stoffmengenanteil der Komponente <i>i</i> ; die durchgezogene Linie den Gesamtdruck über der binären Mischung als Summe der beiden Partialdrücke. ²²⁶	28
Abbildung 6:	Schematische Darstellung von Scott's Two-Liquid Theorie ²⁴⁰ anhand eines Zweikomponentengemisches. ⁹²	33

Abbildung 7:	Schematische Darstellung der Funktion der einzelnen Terme in der PC-SAFT-Zustandsgleichung nach Referenz 254. Die Kugeln symbolisieren die einzelnen harten Kugeln (Segmente), die in dieser Darstellung zu Ketten zusammengesetzt werden: a) Ketten aus harten Kugeln, b) Wechselwirkung zwischen den Ketten auf Basis des Hartkugelpotentials, c) Wechselwirkung durch Wasserstoffbrückenbindungen zwischen den Ketten.	36
Abbildung 8:	Schematische Darstellung des Wechselwirkungspotentials (Hartkugelpotentials) als Funktion des radialen Abstandes r zwischen zwei Segmenten nach Chen und Kreglewski. ^{96, 251}	37
Abbildung 9:	Schematische Darstellung des einphasigen Umlaufs: Siedekolben (a), Kühler (b), Reservoir kondensierte Gasphase (c).	43
Abbildung 10:	Schematische Darstellung des zweiphasigen Umlaufs: Siedekolben (a), Reservoir flüssige Phase (b), Cottrell-Pumpe (c), Dampfraum mit Phasenteiler (d), Kühler (e), Reservoir kondensierte Gasphase (f).	46
Abbildung 11:	Molekülstruktur der verwendeten ionischen Flüssigkeiten des Typs 1-Alkyl-3-methylimidazolium Trifluormethylsulfonat ($C_x\text{mimTfO}$; $x = 2, 4, 6, 8$).	49
Abbildung 12:	Schematische Darstellung der verwendeten Phasengleichgewichtsapparatur nach den Referenzen 295, 297: Auslass (a), Magnetrührplatte (b), Magnetrührer (c), Probenentnahmestelle Mischkammer (d), Mischkammer (e), Cottrell-Pumpe (f), Vakuummantel (g), Tropfenzähler Rücklauf flüssige Phase (h), Probenentnahmestelle flüssige Phase (i), Kühlfallen (k), Thermometer (l), Befüllungsstutzen (m), Verbindung mit Vakuumlinie (n), Entnahmestelle für gasförmige Proben (o), Dampfraum (p), Kühler (q), Probenentnahmestelle kondensierte Gasphase (r), Tropfenzähler Rücklauf kondensierte Gasphase (s), Heizkammer (t), Tauchheizkörper (u).	53

Abbildung 13:	Schematischer Aufbau des Mikroebulliometers: Magnetrührplatte (a), Aluminiumblock (b), Kühler (c), Rotulex Kugelschliff-Verbindung (d), PTFE-Schläuche (e, f), Spritze (g), Dreiwegeventil (h), Stutzen mit GL-18 Gewinde (i), Stutzen mit GL-18 Gewinde (k), Pt-100 Widerstandsthermometer (l), Hochvakuumventil (m), Verbindung zur Vakuumlinie (n), Stutzen mit GL-14 Gewinde (o), Glashelix (p), Probenkammer (q), Magnetrührer (r), Glaskörper (I), Glaskörper (II).....	59
Abbildung 14:	Schematischer Aufbau der Vakuumlinie: Nadelventil (s), Vakuumrechen (t), Verbindung zum Mikroebulliometer (u), Druckmesskopf (v), Gaswaschflasche (w), Verbindung zur Vakuumpumpe (x), Ausgleichsvolumen (y), Luftzufuhr (z), Trockenrohr (aa), Trockenkolonne (ab).....	60
Abbildung 15:	Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_2mimTfO / C_nOH$ ($n = 1-4$) Mischungen. Die schwarzen Symbole repräsentieren die experimentellen Daten dieser Arbeit ($C_2mimTfO / C_nOH$; $n = 1-4$), welche zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind. Bei den weißen Symbolen handelt es sich um experimentelle Daten aus den Referenzen 199, 210, 217.	69
Abbildung 16:	Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_4mimTfO / C_nOH$ ($n = 1-4$) Mischungen.....	70
Abbildung 17:	Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_6mimTfO / C_nOH$ ($n = 1-4$) Mischungen.....	71
Abbildung 18:	Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_8mimTfO / C_nOH$ ($n = 1-4$) Mischungen.....	72
Abbildung 19:	Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_4mimTfO / H_2O$ Mischungen.	73

Abbildung 20:	Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der C ₄ mimTfO / H ₂ O Mischungen; Apparatur A1 (schwarze Symbole), Apparatur A2 (weiße Symbole), Apparatur A3 (rote Symbole), Literaturdaten 159 (grüne Symbole). a) isobare gas-flüssig Gleichgewichte, b) Streuung der experimentellen Datenpunkte um das NRTL-Modell ($\Delta T = T_{\text{exp}} - T_{\text{NRTL}}$) bei $p = 1000$ mbar, c) Streuung der experimentellen Datenpunkte um das NRTL-Modell bei $p = 700$ mbar, d) Streuung der experimentellen Datenpunkte um das NRTL-Modell bei $p = 500$ mbar. Die gestrichelten Linien repräsentieren die Anpassung des NRTL-Modells an die experimentellen Daten der Apparatur A1.....	77
Abbildung 21:	Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der C ₄ mimTfO / C ₄ OH Mischungen; Apparatur A1 (schwarze Symbole), Apparatur A2 (weiße Symbole): a) isobare gas-flüssig Gleichgewichte, b) Streuung der experimentellen Datenpunkte um das NRTL-Modell ($\Delta T = T_{\text{exp}} - T_{\text{NRTL}}$) bei $p = 1000$ mbar, c) Streuung der experimentellen Datenpunkte um das NRTL-Modell bei $p = 700$ mbar, d) Streuung der experimentellen Datenpunkte um das NRTL-Modell bei $p = 500$ mbar. Die gestrichelten Linien repräsentieren die Anpassung des NRTL-Modells an die experimentellen Daten der Apparatur A1.....	80
Abbildung 22:	Aktivitätskoeffizienten der <i>n</i> -Alkylalkohole binärer C ₂ mimTfO / C _n OH (n = 1-4) Mischungen berechnet mit Gleichung (4-2). Die schwarzen Symbole repräsentieren experimentelle Daten, ¹⁰⁹ welche zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind. Bei den weißen Symbolen handelt es sich um berechnete Daten auf Basis der experimentellen Daten aus den Referenzen 199, 210, 217.	85
Abbildung 23:	Aktivitätskoeffizienten der <i>n</i> -Alkylalkohole binärer C ₄ mimTfO / C _n OH (n = 1-4) Mischungen berechnet mit Gleichung (4-2). Die schwarzen Symbole repräsentieren experimentelle Daten, ⁵² welche zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind.	86

Abbildung 24:	Aktivitätskoeffizienten der <i>n</i> -Alkylalkohole binärer C ₆ mimTfO / C _n OH (n = 1-4) Mischungen berechnet mit Gleichung (4-2). Die schwarzen Symbole repräsentieren experimentelle Daten, ⁴¹ welche zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind.	87
Abbildung 25:	Aktivitätskoeffizienten der <i>n</i> -Alkylalkohole binärer C ₈ mimTfO / C _n OH (n = 1-4) Mischungen berechnet mit Gleichung (4-2). Die schwarzen Symbole repräsentieren experimentelle Daten, welche zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind.	88
Abbildung 26:	Auf die Siedetemperatur des reinen Alkohols T _{0,b} normalisierte gas-flüssig Gleichgewichte der C ₈ mimTfO / C _n OH (n = 1-4) Mischungen; a) C ₈ mimTfO / C ₁ OH, b) C ₈ mimTfO / C ₂ OH, c) C ₈ mimTfO / C ₃ OH, d) C ₈ mimTfO / C ₄ OH.	92
Abbildung 27:	Auf die relative normalisierte Siedetemperatur ΔT _r bezogene gas-flüssig Gleichgewichte der C _x mimTfO / C _n OH (x = 2, 4, 6, 8; n = 1-4) Mischungen bei einem Druck von p = 1000 mbar; a) C ₂ mimTfO / C _n OH, ¹⁰⁹ b) C ₄ mimTfO / C _n OH, ⁵² c) C ₆ mimTfO / C _n OH, ⁴¹ d) C ₈ mimTfO / C _n OH.....	94
Abbildung 28:	Auf die relative normalisierte Siedetemperatur ΔT _r bezogene gas-flüssig Gleichgewichte der C _x mimTfO / C _n OH (x = 2, 4, 6, 8; n = 1, 4) Mischungen als Funktion der Kettenlänge der <i>n</i> -Alkylalkohole für ausgewählte Stoffmengenanteile bei einem Druck von p = 1000 mbar: a) C ₂ mimTfO / C _n OH, ¹⁰⁹ b) C ₄ mimTfO / C _n OH, ⁵² c) C ₆ mimTfO / C _n OH, ⁴¹ d) C ₈ mimTfO / C _n OH. Die gepunkteten Linien dienen der Orientierung und haben keine physikalische Bedeutung.	96
Abbildung 29:	Einfluss der Alkylseitenkettenlänge des C _x mim ⁺ (x = 2, 4, 6, 8) Kations auf ΔT _r der IL / <i>n</i> -Alkylalkohol Mischungen bei einem Druck von p = 1000 mbar: a) C _x mimTfO / C ₁ OH, b) C _x mimTfO / C ₂ OH, C _x mimTfO / C ₃ OH, C _x mimTfO / C ₄ OH. Die experimentellen Daten der C _x mimTfO / C _n OH (x = 2, 4, 6; n = 1-4) Mischungen wurden in den Referenzen 41, 52, 109 vorveröffentlicht.	98

- Abbildung 30: ΔT_r binärer $C_x\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($x = 2, 4, 6, 8$; $n = 1-4$) Mischungen als Funktion der Länge der Alkylseitenkette der IL für ausgewählte Stoffmengenanteile des n -Alkylalkohols bei einem Druck von $p = 1000$ mbar: a) $C_x\text{mimTfO} / C_1\text{OH}$, b) $C_x\text{mimTfO} / C_2\text{OH}$, c) $C_x\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$ und d) $C_x\text{mimTfO} / C_4\text{OH}$. Die Linien haben keine physikalische Bedeutung und dienen der besseren Übersicht. Die experimentellen Daten der $C_x\text{mimTfO}$ ($x = 2, 4, 6$) wurden in den Referenzen 41, 52, 109 vorveröffentlicht. 99
- Abbildung 31: Auf die Siedetemperatur des reinen Alkohols $T_{0,b}$ normalisierte gasflüssig Gleichgewichte der $C_4\text{mimCl} / C_n\text{OH}$ ($n = 1, 4$) Mischungen mit experimentellen Daten aus Ref. 58; a) $C_4\text{mimCl} / C_1\text{OH}$, b) $C_4\text{mimCl} / C_4\text{OH}$ 101
- Abbildung 32: Auf die relative normalisierte Siedetemperatur ΔT_r bezogene gasflüssig Gleichgewichte bei einem Druck von $p = 1000$ mbar der: a) $C_2\text{mimDCA} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-3$),^{100, 173, 188} b) $C_4\text{mimCl} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$)^{40, 58} Mischungen. ΔT_r als Funktion der Kettenlänge der n -Alkylalkohole für ausgewählte Stoffmengenanteile: c) $C_2\text{mimDCA} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-3$),^{100, 173, 188} d) $C_4\text{mimCl} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$).^{40, 58} Die gepunkteten Linien dienen der Orientierung und haben keine physikalische Bedeutung 103
- Abbildung 33: a) Einfluss der Alkylseitenkette des $C_x\text{mim}^+$ ($x = 2, 4, 6$) Kations auf ΔT_r der $C_x\text{mimCl}$ ($x = 2, 4, 6$) / $C_2\text{OH}$ Mischungen. Die ausgefüllten Symbole repräsentieren Daten aus Referenz 40 bei einem Druck von $p = 1000$ mbar und die offenen Symbole Daten aus den Referenzen 184-185 bei einem Druck von $p = 1013$ mbar. ΔT_r binärer $C_x\text{mimCl} / C_2\text{OH}$ ($x = 2, 4, 6$) Mischungen als Funktion der Länge der Alkylseitenkette der IL für ausgewählte Stoffmengenanteile des n -Alkylalkohols: b) $C_x\text{mim}$ ($x = 2, 4, 6$) / $C_2\text{OH}$ Mischungen,⁴⁰ c) Gegenüberstellung der Daten für $C_x\text{mim}$ ($x = 2, 4, 6$) / $C_2\text{OH}$ Mischungen bei $p = 1000$ mbar⁴⁰ und $p = 1013$ mbar.¹⁸⁴⁻¹⁸⁵ Die gepunkteten Linien dienen der Orientierung und haben keine physikalische Bedeutung. 106

Abbildung 34:	Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{Wilson}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage der Wilson-Gleichung bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_1\text{OH}$, b) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_2\text{OH}$, c) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_3\text{OH}$, d) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_4\text{OH}$	114
Abbildung 35:	Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{NRTL}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage des NRTL-Modells bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_1\text{OH}$, b) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_2\text{OH}$, c) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_3\text{OH}$, d) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_4\text{OH}$	118
Abbildung 36:	Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{PC-SAFT}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage der PC-SAFT-Zustandsgleichung bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_1\text{OH}$, b) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_2\text{OH}$, c) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_3\text{OH}$, d) $\text{C}_8\text{mimTfO} / \text{C}_4\text{OH}$	124
Abbildung 37:	Mittlere Intervallbreite der maximalen Abweichungen auf Basis der berechneten Abweichungen aus Gleichung (5-5a) zwischen den berechneten Daten und den experimentell bestimmten gas-flüssig Gleichgewichten der $\text{C}_x\text{mimTfO} / \text{C}_n\text{OH}$ ($x = 2, 4, 6, 8; n = 1-4$) Mischungen für die Modelle: a) Wilson-Gleichung, b) NRTL-Modell, c) PC-SAFT-Zustandsgleichung.	129
Abbildung 38:	Direkter Vergleich der mittleren Intervallbreite der maximalen Abweichung nach Gleichung (5-5a) der drei Modelle für die untersuchten $\text{C}_x\text{mimTfO} / \text{C}_n\text{OH}$ Systeme: a) Wilson-Gleichung, b) NRTL-Modell, c) PC-SAFT-Zustandsgleichung.	131
Abbildung 39:	Mittlere Standardabweichung der Streuung der experimentellen Daten um das jeweilige Modell anhand der berechneten Abweichungen aus Gleichung (5-5a) in Intervallen von $\sigma = 0.25$ K: a) Wilson-Gleichung, b) NRTL-Modell, c) PC-SAFT-Zustandsgleichung.	133

- Abbildung 40: Direkter Vergleich der mittleren Standardabweichung der experimentellen Daten um das jeweilige Modell anhand der berechneten Abweichungen aus Gleichung (5-5a) für die untersuchten $C_x\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($x = 2, 4, 6, 8$; $n = 1-4$) Mischungen: a) Wilson-Gleichung, b) NRTL-Modell, c) PC-SAFT-Zustandsgleichung..... 134
- Abbildung 41: Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_8\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$ Mischungen. Die Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung mit einer Variation der binären Wechselwirkungsparameter $\Delta\lambda_{ij}$ und $\Delta\lambda_{ji}$: ursprüngliche Parameter (durchgezogene Linie); höchste negative Abweichung der Parameter (gestrichelte Linie); höchste positive Abweichung der Parameter (Strich-Punkt-Punkt Linie). 137
- Abbildung 42: Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_8\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$ Mischungen. Die Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis des NRTL-Modells mit einer Variation der binären Wechselwirkungsparameter Δg_{ij} und Δg_{ji} : ursprüngliche Parameter (durchgezogene Linie); höchste negative Abweichung der Parameter (gestrichelte Linie); höchste positive Abweichung der Parameter (Strich-Punkt-Punkt Linie). 139
- Abbildung 43: Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_8\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$ Mischungen. Die Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der PC-SAFT-Zustandsgleichung mit einer Variation des binären Wechselwirkungsparameters k_{ij} : ursprünglicher Parameter (durchgezogene Linie); größte negative Abweichung des Parameters (gestrichelte Linie); größte positive Abweichung des Parameters (Strich-Punkt-Punkt Linie). 141
- Abbildung 44: Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der: a) $C_4\text{mimTfO} / C_4\text{OH}$ Mischungen; neuer Aufbau (schwarze Symbole), alter Aufbau (weiße Symbole; vorveröffentlicht in Referenz 52); die schwarzen Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis des NRTL-Modells anhand der binären Wechselwirkungsparametern aus Tabelle 3, b) $C_2\text{mimTfO} / C_5\text{OH}$ Mischungen (Daten siehe Tabelle 19; Anhang F); neuer Aufbau; die schwarzen Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis des NRTL-Modells..... 149

Abbildung 45:	Schematischer Aufbau zur Trocknung ionischer Flüssigkeiten im Schlenkkolben: Schlenkkolben (a), Magnetrührer (b), Aluminiumblock (c), Magnetrührplatte (d), Verbindung zur Vakuumlinie (e), ionische Flüssigkeit (f).	209
Abbildung 46:	Schematische Darstellung der Vakuumdestillation zur Aufreinigung der <i>n</i> -Alkylalkohole: Magnetrührplatte (a), Heizpilz (b), Magnetrührer (c), Siedekolben (d), Thermometer (e), Befüllungsstutzen (f), Liebigkühler (g), Vakuumvorstoß (h), Destillatverteiler nach Bredt (i), Destillatkolben (k).	210
Abbildung 47:	Rechenroutine zur Anpassung der binären Wechselwirkungsparameter $\Delta\lambda_{ij}$ und $\Delta\lambda_{ji}$ der Wilson-Gleichung an experimentelle gas-flüssig Gleichgewichtsdaten.	211
Abbildung 48:	Rechenroutine zur Anpassung der binären Wechselwirkungsparameter Δg_{ij} und Δg_{ji} des NRTL-Modells an experimentelle gas-flüssig Gleichgewichtsdaten.	212
Abbildung 49:	Rechenroutine zur Anpassung des binären Wechselwirkungsparameters k_{ij} der PC-SAFT-Zustandsgleichung an experimentelle gas-flüssig Gleichgewichtsdaten.	213
Abbildung 50:	Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der C ₂ mimTfO / C _n OH (n = 1-4) Mischungen: a) C ₂ mimTfO / C ₁ OH, b) C ₂ mimTfO / C ₂ OH, c) C ₂ mimTfO / C ₃ OH, d) C ₂ mimTfO / C ₄ OH. Die gepunkteten Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung. Die korrespondierenden Ergebnisse des NRTL-Modells werden durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse der PC-SAFT-Zustandsgleichung anhand der durchgezogenen Linien dargestellt.	214

- Abbildung 51: Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_4\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen: a) $C_4\text{mimTfO} / C_1\text{OH}$, b) $C_4\text{mimTfO} / C_2\text{OH}$, c) $C_4\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$, d) $C_4\text{mimTfO} / C_4\text{OH}$. Die gepunkteten Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung. Die korrespondierenden Ergebnisse des NRTL-Modells werden durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse der PC-SAFT-Zustandsgleichung anhand der durchgezogenen Linien dargestellt. 215
- Abbildung 52: Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_6\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen: a) $C_6\text{mimTfO} / C_1\text{OH}$, b) $C_6\text{mimTfO} / C_2\text{OH}$, c) $C_6\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$, d) $C_6\text{mimTfO} / C_4\text{OH}$. Die gepunkteten Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung. Die korrespondierenden Ergebnisse des NRTL-Modells werden durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse der PC-SAFT-Zustandsgleichung anhand der durchgezogenen Linien dargestellt. 216
- Abbildung 53: Isobare gas-flüssig Gleichgewichte der $C_8\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen: a) $C_8\text{mimTfO} / C_1\text{OH}$, b) $C_8\text{mimTfO} / C_2\text{OH}$, c) $C_8\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$, d) $C_8\text{mimTfO} / C_4\text{OH}$. Die gepunkteten Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung. Die korrespondierenden Ergebnisse des NRTL-Modells werden durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse der PC-SAFT-Zustandsgleichung anhand der durchgezogenen Linien dargestellt. 217
- Abbildung 54: Auf die Siedetemperatur des reinen Alkohols $T_{0,b}$ normalisierte gas-flüssig Gleichgewichte der $C_2\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen; a) $C_2\text{mimTfO} / C_1\text{OH}$, b) $C_2\text{mimTfO} / C_2\text{OH}$, c) $C_2\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$, d) $C_2\text{mimTfO} / C_4\text{OH}$ 218
- Abbildung 55: Auf die Siedetemperatur des reinen Alkohols $T_{0,b}$ normalisierte gas-flüssig Gleichgewichte der $C_4\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen; a) $C_4\text{mimTfO} / C_1\text{OH}$, b) $C_4\text{mimTfO} / C_2\text{OH}$, c) $C_4\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$, d) $C_4\text{mimTfO} / C_4\text{OH}$ 219

Abbildung 56:	Auf die Siedetemperatur des reinen Alkohols $T_{0,b}$ normalisierte gasflüssig Gleichgewichte der $C_6\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen; a) $C_6\text{mimTfO} / C_1\text{OH}$, b) $C_6\text{mimTfO} / C_2\text{OH}$, c) $C_6\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$, d) $C_6\text{mimTfO} / C_4\text{OH}$	220
Abbildung 57:	Aktivitätskoeffizienten der n -Alkylalkohole binärer $C_2\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen berechnet mit Gleichung (4-2). Die schwarzen Symbole repräsentieren experimentelle Daten, welche in Referenz 109 vorveröffentlicht und hier zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind. Die gepunkteten Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung. Die korrespondierenden Ergebnisse des NRTL-Modells werden durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse der PC-SAFT-Zustandsgleichung anhand der durchgezogenen Linien dargestellt.	221
Abbildung 58:	Aktivitätskoeffizienten der n -Alkylalkohole binärer $C_4\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen berechnet mit Gleichung (4-2). Die schwarzen Symbole repräsentieren experimentelle Daten, welche in Referenz 52 vorveröffentlicht und hier zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind. Die gepunkteten Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung. Die korrespondierenden Ergebnisse des NRTL-Modells werden durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse der PC-SAFT-Zustandsgleichung anhand der durchgezogenen Linien dargestellt.	222
Abbildung 59:	Aktivitätskoeffizienten der n -Alkylalkohole binärer $C_6\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($n = 1-4$) Mischungen berechnet mit Gleichung (4-2). Die schwarzen Symbole repräsentieren experimentelle Daten, welche in Referenz 41 vorveröffentlicht und hier zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind. Die gepunkteten Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung. Die korrespondierenden Ergebnisse des NRTL-Modells werden durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse der PC-SAFT-Zustandsgleichung anhand der durchgezogenen Linien dargestellt.	223

- Abbildung 60: Aktivitätskoeffizienten der *n*-Alkylalkohole binärer C₈mimTfO / C_nOH (n = 1-4) Mischungen berechnet mit Gleichung (4-2). Die schwarzen Symbole repräsentieren experimentelle Daten, welche zusammen mit den Fehlerbalken aufgetragen sind. Die gepunkteten Linien repräsentieren die Anpassungen auf Basis der Wilson-Gleichung. Die korrespondierenden Ergebnisse des NRTL-Modells werden durch die gestrichelten Linien und die Ergebnisse der PC-SAFT-Zustandsgleichung anhand der durchgezogenen Linien dargestellt. 224
- Abbildung 61: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{Wilson}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage der Wilson-Gleichung bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₂mimTfO / C₁OH, b) C₂mimTfO / C₂OH, c) C₂mimTfO / C₃OH, d) C₂mimTfO / C₄OH. 225
- Abbildung 62: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{Wilson}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage der Wilson-Gleichung bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₄mimTfO / C₁OH, b) C₄mimTfO / C₂OH, c) C₄mimTfO / C₃OH, d) C₄mimTfO / C₄OH. 226
- Abbildung 63: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{Wilson}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage der Wilson-Gleichung bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₆mimTfO / C₁OH, b) C₆mimTfO / C₂OH, c) C₆mimTfO / C₃OH, d) C₆mimTfO / C₄OH. 227
- Abbildung 64: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{NRTL}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage des NRTL-Modells bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₂mimTfO / C₁OH, b) C₂mimTfO / C₂OH, c) C₂mimTfO / C₃OH, d) C₂mimTfO / C₄OH. 228

- Abbildung 65: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{NRTL}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage des NRTL-Modells bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₄mimTfO / C₁OH, b) C₄mimTfO / C₂OH, c) C₄mimTfO / C₃OH, d) C₄mimTfO / C₄OH. 229
- Abbildung 66: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{NRTL}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage des NRTL-Modells bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₆mimTfO / C₁OH, b) C₆mimTfO / C₂OH, c) C₆mimTfO / C₃OH, d) C₆mimTfO / C₄OH. 230
- Abbildung 67: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{PC-SAFT}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage der PC-SAFT-Zustandsgleichung bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₂mimTfO / C₁OH, b) C₂mimTfO / C₂OH, c) C₂mimTfO / C₃OH, d) C₂mimTfO / C₄OH. 231
- Abbildung 68: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{PC-SAFT}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage der PC-SAFT-Zustandsgleichung bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₄mimTfO / C₁OH, b) C₄mimTfO / C₂OH, c) C₄mimTfO / C₃OH, d) C₄mimTfO / C₄OH. 232
- Abbildung 69: Abweichungsdiagramme $\Delta T_{\text{PC-SAFT}} = T_{\text{calc}} - T_{\text{exp}}$ der experimentellen Siedetemperaturen von den berechneten Siedetemperaturen auf Grundlage der PC-SAFT-Zustandsgleichung bei Drücken von $p = 1000, 700$ und 500 mbar: a) C₆mimTfO / C₁OH, b) C₆mimTfO / C₂OH, c) C₆mimTfO / C₃OH, d) C₆mimTfO / C₄OH. 233

III. Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Übersicht über die im Rahmen dieser Arbeit charakterisierten gas-flüssig Gleichgewichte bei Drücken von $p = 500, 700$ und 1000 mbar sowie der untersuchten Temperatur- und Zusammensetzungsbereiche (Stoffmengenanteil des n -Alkylalkohols oder Wassers)..... 68

Tabelle 2: Binäre Wechselwirkungsparameter $\Delta\lambda_{ij}$ und $\Delta\lambda_{ji}$ der $C_x\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($x = 2, 4, 6, 8; n = 1-4$) Mischungen bestimmt aus der Wilson-Gleichung zusammen mit den AARD-Werten der einzelnen Druckniveaus $p = 500, 700$ und 1000 mbar sowie dem arithmetischen Mittelwert der AARD_θ -Werte der drei Druckniveaus. 113

Tabelle 3: Binäre Wechselwirkungsparameter Δg_{ij} und Δg_{ji} der $C_x\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($x = 2, 4, 6, 8; n = 1-4$) Mischungen bestimmt aus dem NRTL- Modell zusammen mit den AARD-Werten der einzelnen Druckniveaus $p = 500, 700$ und 1000 mbar sowie dem arithmetischen Mittelwert der AARD_θ -Werte der drei Druckniveaus. 120

Tabelle 4: Binäre Wechselwirkungsparameter k_{ij} der $C_x\text{mimTfO} / C_n\text{OH}$ ($x = 2, 4, 6, 8; n = 1-4$) Mischungen bestimmt aus der PC-SAFT-Zustandsgleichung zusammen mit den AARD-Werten der einzelnen Druckniveaus $p = 500, 700$ und 1000 mbar sowie dem arithmetischen Mittelwert der AARD_θ -Werte der drei Druckniveaus..... 125

Tabelle 5: Berechnete binäre Wechselwirkungsparameter $\Delta\lambda_{ij}$ und $\Delta\lambda_{ji}$ aus der Wilson-Gleichung bei Variation der experimentellen Daten der $C_8\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$ Mischungen um den Temperaturfehler $u(T) = 0.51$ K sowie der arithmetische Mittelwert der AARD-Werte der drei Druckniveaus. 136

Tabelle 6: Berechnete binäre Wechselwirkungsparameter Δg_{ij} und Δg_{ji} aus dem NRTL-Modell bei Variation der experimentellen Daten der $C_8\text{mimTfO} / C_3\text{OH}$ Mischungen um den Temperaturfehler $u(T) = 0.51$ K sowie der arithmetische Mittelwert der AARD-Werte der drei Druckniveaus. 138

Tabelle 7:	Berechneter binärer Wechselwirkungsparameter k_{ij} aus der PC-SAFT-Zustandsgleichung bei Variation der experimentellen Daten der C ₈ mimTfO / C ₃ OH Mischungen um den Temperaturfehler $u(T) = 0.51$ K sowie der arithmetische Mittelwert der AARD-Werte der drei Druckniveaus.	140
Tabelle 8:	Kalibrierkonstanten für die Dichtekorrektur experimenteller Daten des Anton Paar DMA 5000 Biegeschwingers.	178
Tabelle 9:	Übersicht über die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Substanzen: Substanz, Abkürzung, Summenformel, CAS - Nummer, Reinheit, Produktnummer, Batch / Lot und Hersteller.	183
Tabelle 10:	Berechnete molare Massen der verwendeten Substanzen auf Basis der molaren Massen der reinen chemischen Elemente (H, C, N, O, S) ³¹⁹ und (F) ³²⁰ mit Fehlern.	185
Tabelle 11:	Koeffizienten zur Dampfdruckberechnung mit Hilfe von Gleichung (2-22) bzw. (A-2); die Koeffizienten entstammen der DIPPR-Datenbank. ¹⁴⁹ Der Korrektorkoeffizient u_c wird aus der größten relativen Abweichung zwischen den Daten der Referenzen 127, 302-307 und den berechneten Werten mittels Gleichung (4-3) bzw. (A-3) bestimmt.	186
Tabelle 12:	Berechnete Antoine Parameter ionischer Flüssigkeiten des Typs C _x mimTfO (x = 2, 4, 6, 8) anhand experimenteller Daten der Referenz 124.	187
Tabelle 13:	Koeffizienten zur Berechnung der molaren Dichten (ρ / mol·dm ⁻³) der reinen <i>n</i> -Alkylalkohole mit Hilfe von Gleichung (A-5). Die Koeffizienten entstammen der DIPPR- Datenbank. ¹⁴⁹	187
Tabelle 14:	Ergebnisse des Konsistenztests (Lösung des Integrals) nach Redlich und Kister ²³¹ mit Hilfe von Gleichung (A-6) für die untersuchten gas-flüssig Gleichgewichte der IL / <i>n</i> -Alkylalkohol- oder Wassermischungen bei Drücken von $p = 500, 700$ und 1000 mbar.	188

Tabelle 15: Experimentelle gas-flüssig Gleichgewichtsdaten und Aktivitätskoeffizienten binärer C₈mimTfO / C₁OH Mischungen bei Drücken von $p = 1000$ mbar, 700 mbar und 500 mbar. $x(\text{C}_1\text{OH})$: Stoffmengenanteil des Lösungsmittels C₁OH in der binären Mischung; $u(x)(\text{C}_1\text{OH})$: Fehler des Stoffmengenanteils des Lösungsmittels C₁OH in der binären Mischung; T : Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u_{\text{therm}}(T)$: Fehler der Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u(T)$: Fehler der Temperatur der flüssigen Phase inklusiv des Temperaturfehlers des Mikrobullimeters; p : Systemdruck; $u(p)$: Fehler des Systemdrucks; $\gamma(\text{C}_1\text{OH})$: berechneter Aktivitätskoeffizient des Lösungsmittels C₁OH; $u(\gamma)(\text{C}_1\text{OH})$: Fehler des berechneten Aktivitätskoeffizienten des Lösungsmittels C₁OH. 189

Tabelle 16: Experimentelle gas-flüssig Gleichgewichtsdaten und Aktivitätskoeffizienten binärer C₈mimTfO / C₂OH Mischungen bei Drücken von $p = 1000$ mbar, 700 mbar und 500 mbar. $x(\text{C}_2\text{OH})$: Stoffmengenanteil des Lösungsmittels C₂OH in der binären Mischung; $u(x)(\text{C}_2\text{OH})$: Fehler des Stoffmengenanteils des Lösungsmittels C₂OH in der binären Mischung; T : Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u_{\text{therm}}(T)$: Fehler der Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u(T)$: Fehler der Temperatur der flüssigen Phase inklusiv des Temperaturfehlers des Mikrobullimeters; p : Systemdruck; $u(p)$: Fehler des Systemdrucks; $\gamma(\text{C}_2\text{OH})$: berechneter Aktivitätskoeffizient des Lösungsmittels C₂OH; $u(\gamma)(\text{C}_2\text{OH})$: Fehler des berechneten Aktivitätskoeffizienten des Lösungsmittels C₂OH. 193

Tabelle 17: Experimentelle gas-flüssig Gleichgewichtsdaten und Aktivitätskoeffizienten binärer C₈mimTfO / C₃OH Mischungen bei Drücken von $p = 1000$ mbar, 700 mbar und 500 mbar. $x(\text{C}_3\text{OH})$: Stoffmengenanteil des Lösungsmittels C₃OH in der binären Mischung; $u(x)(\text{C}_3\text{OH})$: Fehler des Stoffmengenanteils des Lösungsmittels C₃OH in der binären Mischung; T : Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u_{\text{therm}}(T)$: Fehler der Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u(T)$: Fehler der Temperatur der flüssigen Phase inklusiv des Temperaturfehlers des Mikrobullimeters; p : Systemdruck; $u(p)$: Fehler des Systemdrucks; $\gamma(\text{C}_3\text{OH})$: berechneter Aktivitätskoeffizient des Lösungsmittels C₃OH; $u(\gamma)(\text{C}_3\text{OH})$: Fehler des berechneten Aktivitätskoeffizienten des Lösungsmittels C₃OH. 198

Tabelle 18: Experimentelle gas-flüssig Gleichgewichtsdaten und Aktivitätskoeffizienten binärer C₈mimTfO / C₄OH Mischungen bei Drücken von $p = 1000$ mbar, 700 mbar und 500 mbar. $x(\text{C}_4\text{OH})$: Stoffmengenanteil des Lösungsmittels C₄OH in der binären Mischung; $u(x)(\text{C}_4\text{OH})$: Fehler des Stoffmengenanteils des Lösungsmittels C₄OH in der binären Mischung; T : Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u_{\text{therm}}(T)$: Fehler der Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u(T)$: Fehler der Temperatur der flüssigen Phase inklusiv des Temperaturfehlers des Mikrobullimeters; p : Systemdruck; $u(p)$: Fehler des Systemdrucks; $\gamma(\text{C}_4\text{OH})$: berechneter Aktivitätskoeffizient des Lösungsmittels C₄OH; $u(\gamma)(\text{C}_4\text{OH})$: Fehler des berechneten Aktivitätskoeffizienten des Lösungsmittels C₄OH. 201

Tabelle 19:	<p>Experimentelle gas-flüssig Gleichgewichtsdaten und Aktivitätskoeffizienten binärer C₂mimTfO / C₅OH Mischungen bei Drücken von $p = 1000$ mbar, 700 mbar und 500 mbar. $x(\text{C}_5\text{OH})$: Stoffmengenanteil des Lösungsmittels C₅OH in der binären Mischung; $u(x)(\text{C}_5\text{OH})$: Fehler des Stoffmengenanteils des Lösungsmittels C₅OH in der binären Mischung; T: Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u_{\text{therm}}(T)$: Fehler der Temperatur der siedenden flüssigen Phase; $u(T)$: Fehler der Temperatur der flüssigen Phase inklusiv des Temperaturfehlers des Mikroebullimeters; p: Systemdruck; $u(p)$: Fehler des Systemdrucks; $\gamma(\text{C}_5\text{OH})$: berechneter Aktivitätskoeffizient des Lösungsmittels C₅OH; $u(\gamma)(\text{C}_5\text{OH})$: Fehler des berechneten Aktivitätskoeffizienten des Lösungsmittels C₅OH. 204</p>
Tabelle 20:	<p>Experimentelle Dichtedaten der IL C₈mimTfO als Funktion der Temperatur bei Umgebungsdruck ($p \approx 1013$ mbar). Der Temperaturfehler beträgt $u(T) = 0.02$ K und der Fehler der Dichtebestimmung $u(\rho) = 4 \cdot 10^{-4}$ g cm⁻³ 207</p>
Tabelle 21:	<p>PC-SAFT Reinstoffparameter: Segmentanzahl m_i, Segmentdurchmesser σ_i, Energieparameter ϵ_i, Assoziationsvolumen κ^{A,B_i} und Assoziationsenergie ϵ^{A,B_i}. Die Parameter für die n-Alkylalkohole ($n = 1-4$) wurden an Dichte- und Dampfdruckdaten aus Referenz 149 angepasst. Die Parameter für die ionischen Flüssigkeiten C_{x}mimTfO ($x = 2, 4, 6, 8$) wurden an experimentelle Dichtedaten (C_{x}mimTfO; $x = 2, 4, 6$)¹⁰⁹ angepasst..... 208</p>

IV. Nomenklatur

Griechische Symbole

<u>Symbol</u>	<u>Einheit</u>	<u>Beschreibung</u>
γ	-	Aktivitätskoeffizient
ε_i	K	Energieparameter der Komponente i (PC-SAFT-Zustandsgleichung)
η	Pa·s	dynamische Viskosität
φ	-	Fugazitätskoeffizient
κ^{A,B_i}	\AA^3	Assoziationsvolumen der Komponente i (PC-SAFT-Zustandsgleichung)
λ	m	Wellenlänge
$\Delta\lambda$	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$	binärer Wechselwirkungsparameter der Wilson-Gleichung
ν	cm^{-1}	Wellenzahl
ρ	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$	Dichte
σ	-	Standardabweichung
σ_i	\AA	Segmentdurchmesser der Komponente i (PC-SAFT-Zustandsgleichung)
Δ	-	Differenz
Λ	-	Wilsonparameter
ε^{A,B_i}	K	Assoziationsenergie der Komponente i (PC-SAFT-Zustandsgleichung)

Lateinische Symbole

<u>Symbol</u>	<u>Einheit</u>	<u>Beschreibung</u>
a	-	Aktivität
A	J	freie Energie
A	$\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	Kalibrierkonstante für Dichtekalibrierung
B	$\text{g}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{cm}^{-3}$	Kalibrierkonstante für Dichtekalibrierung
c_p	$\text{J}\cdot\text{g}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	spezifische isobare Wärmekapazität
C	$\text{g}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{cm}^{-3}$	Kalibrierkonstante für Dichtekalibrierung
D	$\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	Kalibrierkonstante für Dichtekalibrierung
d	m	Durchmesser
f	Pa	Fugazität
Δg	$\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$	binärer Wechselwirkungsparameter des NRTL-Modells
G	J	freie Enthalpie (freie Gibb'sche Enthalpie)
H	J	Enthalpie
I	A	elektrische Stromstärke
l	m	Länge
m	kg	Masse
m_i	-	Segmentanzahl der Komponente i (PC-SAFT-Zustandsgleichung)

M	$\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$	molare Masse
n	-	Brechungsindex
n	-	Länge der Alkylkette des n -Alkylalkohols
n	mol	Stoffmenge
p	Pa	Druck
r	m	radialer Abstand zwischen zwischen zwei Segmenten (PC-SAFT-Zustandsgleichung)
R	$\text{J}\cdot\text{K}^{-1}\cdot\text{mol}^{-1}$	universelle Gaskonstante
S	$\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$	Entropie
T	$^{\circ}\text{C}, \text{K}$	Temperatur
u	-	Fehler
U	V	elektrische Spannung
U	J	innere Energie
V	l, m^3	Volumen
w	-	Massenbruch / Massenanteil
x	-	Länge der Alkylseitenkette am C_xmim^+ Kation
x	-	Molenbruch / Stoffmengenanteil der flüssigen Phase
y	-	Molenbruch / Stoffmengenanteil der Gasphase

Indizes (hoch- / tiefgestellt)

<u>Index</u>	<u>Beschreibung</u>
α	Phase
β	Phase
σ	Dampfdruck des Reinstoffs / Sättigungsdampfdruck
alkohol	Alkohol
alublock	Aluminiumblock (vgl. Aufbau Mikroebulliometer)
au	außen
assoc	Abkürzung für engl. „association“ (PC-SAFT-Zustandsgleichung)
b	Siedezustand (von engl. „boiling“)
c	kritische Daten
calc	berechnete Daten
d	Zersetzungszustand (von engl. „decomposition“)
diff	Differenz
disp	Abkürzung für engl. „disperse“ (PC-SAFT-Zustandsgleichung)
exp	experimentelle Daten
E	Exzess
hc	Abkürzung für engl. „hard chain“ (PC-SAFT-Zustandsgleichung)
hs	Abkürzung für engl. „hard segment“ (PC-SAFT-Zustandsgleichung)
liquidus	Liquidusbereich
literatur	Literaturdaten
H	Heizung

<i>i</i>	Komponente i
ideal	ideales Verhalten / Idealteil
in	innen
<i>j</i>	Komponente j
m	Schmelzzustand (von engl. „melting“)
M	molar
ME	Mikroebulliometer
r	relative Abweichung
real	reales Verhalten / Realteil
start	Startwert
tau	Taupunkt
therm	Thermometer
0	Reinstoff

Abkürzungen

<u>Abkürzung</u>	<u>Beschreibung</u>
AARD	Abkürzung für engl. „average absolute relative deviation“ (mittlere relative Standardabweichung)
bspw.	beispielsweise
engl.	englisch
FKM	Fluorkautschuk
ggf.	gegebenenfalls
IL	(engl. ionic liquid) ionische Flüssigkeit

konst.	konstant
LM	Lösungsmittel
NLP	nichtlineares Optimierungsproblem
NRTL-Modell	Nonrandom Two Liquid-Modell
ppm	parts per million
PC	Polycarbonat
PC-SAFT	Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory
PET	Polyethylenterephthalat
Ref.	Referenz
VdW	Van-der-Waals
vgl.	vergleiche

Ionische Flüssigkeiten

<u>Abkürzung</u>	<u>Beschreibung</u>
C _x mimCl	1-Alkyl-3-methylimidazolium Chlorid
C ₂ mimCl	1-Ethyl-3-methylimidazolium Chlorid
C ₄ mimCl	1-Butyl-3-methylimidazolium Chlorid
C ₆ mimCl	1-Hexyl-3-methylimidazolium Chlorid
C ₂ mimDCA	1-Ethyl-3-methylimidazolium Dicyanamid
C ₁ mimNO ₃	1,3-Dimethylimidazolium Nitrat
C ₄ mimNO ₃	1-Butyl-3-methylimidazolium Nitrat
C _x mimPF ₆	1-Alkyl-3-methylimidazolium Hexafluorophosphat
C _x mimTfO	1-Alkyl-3-methylimidazolium Trifluormethylsulfonat
C ₂ mimTfO	1-Ethyl-3-methylimidazolium Trifluormethylsulfonat
C ₄ mimTfO	1-Butyl-3-methylimidazolium Trifluormethylsulfonat
C ₆ mimTfO	1-Hexyl-3-methylimidazolium Trifluormethylsulfonat
C ₈ mimTfO	1-Oktyl-3-methylimidazolium Trifluormethylsulfonat
C _x pyNTf ₂	1-Alkylpyridinium Bis[(trifluormethyl)sulfonyl]amid
N ₇₇₇ Cl	Tetraheptylammonium Chlorid
P ₁₁₁₈ Ts	Trimethyloctylphosphonium Tosylat

Kationen

<u>Abkürzung</u>	<u>Beschreibung</u>
A ₁ mim ⁺	1-Allyl-3-methylimidazolium
Bzmim ⁺	1-Benzyl-3-methylimidazolium
C _x mim ⁺	1-Alkyl-3-methylimidazolium
ClC ₂ mim ⁺	1-Chlorethyl-3-methylimidazolium
C ₁ im ⁺	1-Methylimidazolium
C _x py ⁺	1-Alkylpyridinium
C _x mpy ⁺	1-Alkyl-3-methylpyridinium
C _x mpyr ⁺	1-Alkyl-1-methylpyrrolidinium
Na ⁺	Natrium
N ₁₁₁₁ ⁺	Tetramethylammonium
N ₁₂₂₂ ⁺	Triethylmethylammonium
N _{111(C2OH)} ⁺	Trimethyl-ethanol-ammonium
N _{11(C2OH)2} ⁺	Dimethyl-diethanol-ammonium
N ₇₇₇₇ ⁺	Tetraheptylammonium
P ₁₁₁₈ ⁺	Trimethyloctylphosphonium
P ₄₄₄₄ ⁺	Tetrabutylphosphonium

Anionen

<u>Abkürzung</u>	<u>Beschreibung</u>
$\text{B}(\text{CN})_4^-$	Tetracyanoborat
BF_4^-	Tetrafluorborat
CF_3CO_2^-	Trifluoracetat
Cl^-	Chlorid
DCA^-	Dicyanamid
EtSO_4^-	Ethylsulfat
F^-	Fluorid
HCOO^-	Format
HPr^-	2-Hydrogenpropionat
I^-	Iodid
MeSO_3^-	Methylsulfonat
MeSO_4^-	Methylsulfat
NO_3^-	Nitrat
NTf_2^-	Bis[(trifluormethyl)sulfonyl]amid
OAc^-	Acetat
Ts^-	Tosylat
PF_6^-	Hexafluorphosphat
Pr^-	Propionat
SCN^-	Thiocyanat
TfO^-	Trifluormethylsulfonat

***n*-Alkylalkohole**

<u>Abkürzung</u>	<u>Beschreibung</u>
C ₁ OH	Methanol
C ₂ OH	Ethanol
C ₃ OH	Propan-1-ol
C ₄ OH	Butan-1-ol
C ₅ OH	Pentan-1-ol
C ₆ OH	Hexan-1-ol

Weitere Substanzen

H ₂ O	Wasser
LiBr	Lithiumbromid
NaCl	Natriumchlorid
NH ₃	Ammoniak