

**Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät**

**Institut für Chemie**

**Fachgebiet: Physikalische Chemie**

Betreuer: Prof. Dr. Ralf Ludwig

---

**Stella Schmode**

(e-mail: stella.schmode@googlemail.com )

***Entwicklung und Charakterisierung von Farbstoffen als Sonden zur Bestimmung der Lösungsmittleigenschaften von molekularen und ionischen Flüssigkeiten***

Die vorliegende Dissertationsschrift befasst sich mit der Bestimmung von Lösungsmittleigenschaften molekularer Lösungsmittel und Ionischer Flüssigkeiten mit Hilfe von spektroskopischen Methoden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Farbstoff *N*-Methyl-6-oxychinolon mit UV-vis-, Fluoreszenz- und IR-Spektroskopie sowie dichtefunktionaltheoretischen Methoden charakterisiert. Aus lösungsmittelabhängigen Studien wurden anhand der spektralen Signaturen der Sonde in molekularen Lösungsmitteln Auswertungsroutinen zur qualitativen und quantitativen Bestimmung der Lösungsmittelpolarität und -acidität entwickelt. Diese wurden anschließend auf die Lösungsmittelklasse der Ionischen Flüssigkeiten angewandt. Um die Handhabbarkeit und die spektralen Eigenschaften des Farbstoffs in Ionischen Flüssigkeiten zu verbessern wurde eine neuartige Ionische Flüssigkeit mit implementiertem Farbstoff synthetisiert. Diese wurde vollständig charakterisiert und die Anwendung als spektrale Sonde nachgewiesen.

The present work concentrates on the determination of solvent properties of molecular solvents and ionic liquids with spectroscopic methods. Therefore, the dye *N*-Methyl-6-oxyquinolone was characterized by UV-vis, fluorescence and infrared spectroscopy as well as density functional theory. Evaluation routines for a qualitative and quantitative determination of the solvent polarity and acidity were developed by analyzing the spectral signatures of the probe in diverse molecular solvents. These routines were adopted to the solvent class of ionic liquids. To enhance the practicability and the spectral sensitivity of the dye in ionic liquids a new ionic liquid with implemented dye was synthesized. This ionic liquid dye was fully characterized and the utilization as spectral probe was proved.