

研究论文

MgCl₂/甲醇溶液的红外光谱研究及量子计算

吴晓静* 许晓娜

(合肥工业大学化工学院 合肥 230009)

收稿日期 2008-7-15 修回日期 2008-10-29 网络版发布日期 2009-4-2 接受日期 2008-11-25

摘要

利用红外光谱研究了MgCl₂/甲醇溶液中的氢键种类及其变化和溶液离子化作用. 红外光谱结果分析表明, Mg²⁺与溶剂发生了强烈的相互作用导致溶液中的氢键发生变化. 随着MgCl₂浓度的增加, 多聚体氢键(δ -OHs)减少, 低聚体和二聚体氢键(γ -OHs)增加, OHs总数维持不变. 通过对光谱曲线的分解拟合, 定量地计算了不同浓度范围(0.21~0.62 mol·kg⁻¹)内Mg²⁺的溶剂化数为5.5到5.0. 并利用量子化学方法对溶剂化数为5和6的配合物结构进行优化及热力学性质的计算, 通过光谱变化及理论计算推断Cl⁻可能会以氢键结合甲醇分子的形式存在.

关键词 [甲醇](#) [红外光谱](#) [离子溶剂化](#) [氢键](#) [量子化学](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

吴晓静 wuxiaojing@ustc.edu

作者个人主页:

吴晓静* 许晓娜

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (333KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“甲醇”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [吴晓静, 许晓娜](#)