

分子模拟研究气体在室温离子液体中的溶解度

吴晓萍; 刘志平; 汪文川

北京化工大学化学工程学院分子与材料模拟研究室, 教育部纳米材料重点实验室, 北京 100029

摘要:

在作者先前建立的分子力场基础上, 采用Widom粒子插入法预测了CO₂、N₂、O₂、Ar及CH₄等5种气体在多种咪唑类离子液体中的溶解度, 包括2种侧链长度的阳离子和3种阴离子. 首先考察了256个离子对组成的体系中溶质分子插入次数对计算结果的影响, 在此基础上计算了不同温度下气体在1-丁基-3-甲基咪唑的四氟化硼盐([bmim][BF₄])和六氟化磷盐([bmim][PF₆])中的溶解度. 计算结果正确反映了CO₂气体溶解度的变化趋势, 在[bmim][BF₄]中溶解度的模拟结果与实验值符合很好, 且明显优于Pádua等的模拟结果; 在[bmim][PF₆]中的溶解度较实验值偏高, 精度与文献模拟结果相当; 并预测了较高温度下CO₂气体在[bmim][BF₄]和[bmim][PF₆]中的溶解度. 计算结果也正确地反映了5种气体在[bmim][PF₆]中溶解度实验值的相对大小. 另外考察了常温下几种气体在不同室温离子液体中的溶解度, 模拟结果表明气体在含有较长碳链和双-三氟甲基磺酰胺阴离子(Tf₂N⁻)的离子液体中溶解度较大.

关键词: 室温离子液体 分子动力学模拟 粒子插入法 气体溶解度

收稿日期 2005-03-04 修回日期 2005-05-27 网络版发布日期 2005-10-15

通讯作者: 刘志平 Email: liuzhp@mail.buct.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 张晟卯;张春丽;张经纬;张治军;党鸿辛;吴志申;刘维民.室温离子液体中银纳米微粒的制备与结构表征[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 554-556
2. 张旭志;焦奎.单壁碳纳米管和室温离子液体胶修饰电极[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1439-1444
3. 孙伟;高瑞芳;王丹丹;焦奎.血红蛋白在离子液体[BMIM]PF₆碳糊电极上的直接电化学[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1247-1251

扩展功能

本文信息

PDF(208KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 室温离子液体

▶ 分子动力学模拟

▶ 粒子插入法

▶ 气体溶解度

本文作者相关文章

▶ 吴晓萍

▶ 刘志平

▶ 汪文川