

研究论文

超临界NaCl水溶液的分子动力学模拟

周健; 朱宇; 汪文川; 陆小华; 王延儒; 时钧

南京化工大学化工学院, 江苏省化学工程与技术重点实验室, 南京 210009; 北京化工大学化学工程学院, 北京 100029

摘要:

采用分子动力学模拟的方法对超临界NaCl水溶液的微观结构进行了研究. 模拟发现在所研究超临界条件下, 密度的变化比温度的变化对超临界NaCl水溶液的微观结构影响更大. 温度及密度对Cl⁻-H₂O径向分布函数的影响比对Na⁺-H₂O径向分布函数的影响要大. 超临界条件下, 各g_{Na⁺-Cl⁻}在0.261 nm处出现峰值, 表明Na⁺、Cl⁻之间发生了离子的缔合. 超临界条件下, 随温度增加, 缔合作用增强; 随密度增加, 缔合作用减弱. 本文工作为建立可适用于超临界条件下的电解质热力学模型提供了依据.

关键词: 氯化钠 微观结构 超临界流体 分子动力学 分子模拟 电解质溶液 离子缔合

收稿日期 2001-08-06 修回日期 2001-11-05 网络版发布日期 2002-03-15

通讯作者: 陆小华 Email: xhlu@njuct.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 张锁江, 韩世钧, 金银东. NaCl(或KCl)-CH₃OH-H₂O体系的摩尔电导[J]. 物理化学学报, 1996, 12(01): 75-80
2. 李玲; 邱晓梅; 孙德志; 刘峰; 邱友莹; 尹宝霖. D-甘露醇与D-山梨醇在氯化钠水溶液中的稀释焓[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 215-220
3. 刘敏; 朱兰英; 李斌; 赵强; 孙得志; 林瑞森. N,N-二甲基甲酰胺在不同浓度氯化钠水溶液中的稀释过程热力学[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1307-1320
4. 黄卡玛; 贾国柱; 杨晓庆. 微波频率下氯化钠溶液电导率的非线性特性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(01): 20-24

扩展功能

本文信息

PDF(1575KB)

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

- ▶ 氯化钠
- ▶ 微观结构
- ▶ 超临界流体
- ▶ 分子动力学
- ▶ 分子模拟
- ▶ 电解质溶液
- ▶ 离子缔合

本文作者相关文章

- ▶ 周健
- ▶ 朱宇
- ▶ 汪文川
- ▶ 陆小华
- ▶ 王延儒
- ▶ 时钧