

## [EPy]Cl和[EPy]Br离子对的气相和液相结构及阴阳离子间的相互作用

王小露; 万辉; 管国锋

南京工业大学化学化工学院, 南京 210009

摘要:

采用密度泛函理论B3LYP/6-31+G(d,p)方法对氯化乙基吡啶([EPy]Cl)、溴化乙基吡啶([EPy]Br)的离子对进行了结构优化和频率分析, 并利用自洽反应场(SCRF)的导体极化连续模型(CPCM)考察了离子液体液相下的结构及相互作用. 得到了两种离子液体的离子对气相、液相下最稳定结构及气相红外光谱特征值, 两种离子液体的离子对结构存在相似性, 红外光谱特征值与文献值比较吻合. 应用自然键轨道(NBO)理论分析了离子对中原子电荷分布及电荷转移情况, 结果证明两种离子液体中阴阳离子间除了静电相互作用外还存在着氢键作用. 通过对比气相及液相下的几何参数、相互作用能及NBO分析结果, 发现液相下阴阳离子的相互作用明显降低. 液相环境抵消了大部分阴阳离子间的静电作用, 导致液相下阴阳离子间相互作用的减小.

关键词: 离子液体 密度泛函理论 自然键轨道 导体极化连续模型

收稿日期 2008-04-18 修回日期 2008-07-30 网络版发布日期 2008-09-30

通讯作者: 管国锋 Email: guangf@njut.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 李雪辉;张磊;王乐夫;唐应彪.N-羧基吡啶功能化离子液体的表征[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 430-435
2. 林棋;付海燕;薛芳;袁茂林;陈华;李贤均.新型离子液体介质中长链烯炔氢甲酰化反应[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 465-469
3. 翟翠萍;王键吉;轩小朋;汪汉卿.核磁方法研究离子液体与丙酮的相互作用[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 456-459
4. 潘旭;戴松元;王孔嘉;史成武;郭力.染料敏化纳米薄膜太阳能电池中离子液体基电解质的研究进展[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 697-702
5. 张志恒;关伟;杨家振;谭志诚;孙立贤.室温离子液体EMIES的标准生成焓[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1469-1471
6. 佟静;张庆国;洪梅;杨家振.铝基离子液体BMIAICl<sub>4</sub>的热力学性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 71-75
7. 李雪辉;张磊;李琼;耿卫国;叶玉嘉;王乐夫.1-正丁基-3-甲基咪唑溴化物离子液体TGA-FTIR研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1465-1468
8. 吴晓萍;刘志平;汪文川.分子模拟研究气体在室温离子液体中的溶解度[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1138-1142
9. 曹洁明;王军;房宝青;郑明波;陆红霞;常欣;王海燕.离子液体中不同形貌ZnO纳米材料的合成及表征[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 668-672
10. 耿卫国;李雪辉;王乐夫;段红丽;潘微平.多羧基咪唑离子液体的酸性表征[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 230-233
11. 朴铃钰;韩扬;寇元.二苯醚烷基化反应中酸性离子液体的循环使用[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1083-1088
12. 蒲敏;陈标华;李会英;刘坤辉.DFT法研究离子液中EMIM<sup>+</sup>催化丁烯双键异构反应机理(II)[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 383-387
13. 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
14. 李巍;荣华;吴新民;陈中元.苏氨酸对甲苯磺酸盐及其酯化物的微波合成、表征及量化计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 868-872
15. 高丽霞;王丽娜;齐涛;李玉平;初景龙;曲景奎.离子液体AlCl<sub>3</sub>/Et<sub>3</sub>NHCl中电沉积法制备金属铝[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 939-944
16. 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
17. 蒲敏;刘坤辉;李会英;陈标华.DFT法研究离子液中EMIM<sup>+</sup>催化丁烯双键异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 826-830

扩展功能

本文信息

PDF(846KB)

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

▶ 离子液体

▶ 密度泛函理论

▶ 自然键轨道

▶ 导体极化连续模型

本文作者相关文章

▶ 王小露

▶ 万辉

▶ 管国锋

18. 吴晓萍;刘志平.室温离子液体[bmim][BF<sub>4</sub>]和水混合物的计算机模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1036-1041
19. 王勇;李浩然;吴韬;王从敏;韩世钧.烷基咪唑型卤盐类离子液体的合成机理研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 517-522
20. 王晓化;陶国宏;吴晓牧;寇元.离子液体酸性的红外光谱探针法研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 528-533
21. 翟翠萍, 刘学军, 赵扬, 王键吉.用核磁共振技术研究[C<sub>4</sub>mim][BF<sub>4</sub>]在重水和氘代氯仿中的聚集行为[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1185-1189
22. 闫超群 万辉 管国锋.1,3-二取代咪唑类离子液体熔点预测[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2198-2202
23. 杨培霞;安茂忠;苏彩娜;王福平.离子液体中钴的电沉积行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2032-2036
24. 郑永军;吾满江·艾力.Tween80/BmimPF<sub>6</sub>/醇/甲苯体系的相行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2143-2148
25. 闫智英;武丽艳;孙桂香;张宁;郑文君.离子液体-水混合溶剂中制备纳米晶TiO<sub>2</sub>的结构特性及其光催化活性[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1032-1036
26. 李姝;刘磊;曹臻;汪继强;言天英.室温熔盐二(三氟甲基磺酸酐)亚胺锂-尿素体系的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 983-986
27. 马淳安;王晓娟;李国华;李美超;陈松.硝基甲烷在离子液体BMimBF<sub>4</sub>中的电还原特性[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1719-1722
28. 孙伟;高瑞芳;王丹丹;焦奎.血红蛋白在离子液体[BMIM]PF<sub>6</sub>碳糊电极上的直接电化学[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1247-1251
29. 王金波;明方永;蒋维东;樊光银;刘德蓉;陈华;李贤均.离子液体介质中钌纳米粒子催化苯乙酮及其衍生物的不对称加氢反应[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1381-1386
30. 雷声;张晶;黄建滨.离子液体[BMim]BF<sub>4</sub>对SDS水溶液表面活性和聚集能力的促进[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1657-1661
31. 孙国华;李开喜;范慧;谷建宇;李强;刘越.含二茂铁离子液体电容器的电化学性能[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 103-108
32. 马淳安;陈松;褚有群;毛信表.硝基苯在离子液体BMimBF<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>O中的电还原[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 575-580
33. 李雪辉;江燕斌;张磊;李榕.N-酯基取代吡啶功能化离子液体的合成与表征[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 747-751
34. 丁运生;王僧山;查敏;王志刚.有机阳离子[C<sub>18</sub>mim]<sup>+</sup>在蒙脱土层间的物理化学吸附与聚集状态\*[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 548-551
35. 林棋;付海燕;袁茂林;陈华;李贤均.负载离子液体纳米钨催化芳卤羰化反应[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1272-1276
36. 吴阳, 张甜甜, 于宁.1-乙基-3-甲基咪唑阳离子与天冬酰胺阴离子的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1689-1696
37. 王伟彬, 银建中, 孙丽华, 冯恩民.CO<sub>2</sub>/离子液体体系热力学性质的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2291-2295