

水-甲醇体系的Monte Carlo分子模拟

吴雄武,滕藤,李以圭,陆九芳

清华大学化学工程系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文应用Monte Carlo分子模拟方法对水、甲醇水-甲醇的1:1混合物、甲醇无限稀释时的水溶液和水无限稀释时的甲醇溶液等五个体系进行了研究。采用TIP分子位能函数,得到了上述体系的热力学性质、原子径向分布函数、分子氢键配位数分布。并以Monte Carlo分子模拟获得的结构函数与X射线衍射实验结果进行了比较。

关键词 [水](#) [热力学性质](#) [甲醇](#) [X射线衍射分析](#) [缩合](#) [氢键](#) [径向分布函数](#) [蒙特卡罗模拟](#) [分子模拟](#)

分类号 [0645](#)

Monte carlo molecular simulation for water-methanol system

WU XIONGWU, TENG TENG, LI YIGUI, LU JIUFANG

Abstract Five systems including the pure water, pure methanol, 1:1 mixture for water-methanol, infinite dilute aqueous solution and infinite dilute methanol solution are studied by means of Monte Carlo mol. simulation. The transferable intermol. potential function (TIP) is used. The thermodyn. properties, atomic radial distribution function, distribution of coordination no. of hydrogen bond for the above systems are obtained. The X-ray structure functions of pure water, pure methanol and 1:1 mixture for water-methanol, which are measured by x-ray diffractometer, agree with those obtained from Monte Carlo mol. simulation.

Key words [WATER](#) [THERMODYNAMIC PROPERTIES](#) [METHANOL](#) [X-RAY DIFFRACTION ANALYSIS](#) [ASSOCIATION](#) [HYDROGEN BONDS](#) [RADIAL DISTRIBUTION FUNCTION](#) [MONTECARLO SIMULATIONS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“水”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [吴雄武](#)
- [滕藤](#)
- [李以圭](#)
- [陆九芳](#)