



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
«КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Петербургский институт ядерной физики
им. Б.П. Константинова 



2019 OPEN SCIENCE

VI Всероссийский молодёжный научный форум

СБОРНИК ТЕЗИСОВ

13-15 ноября
г. Гатчина

**Микроструктура и молекулярная подвижность
в смесях ионных жидкостей на основе 1-бутил-3-метилимидазолия
с водой по данным метода молекулярной динамики**

В. А. Коновалов, А. В. Егоров, В. И. Чижик

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Изучение смесей ионных жидкостей (ИЖ) с водой представляет большой интерес как для развития физики жидкого состояния в целом, так и для практического применения в технологических процессах. Однако, несмотря на значительные усилия, предпринятые в данном направлении, целый ряд проблем не решен до сих пор. В настоящей работе, с помощью компьютерного моделирования (метод молекулярной динамики) исследовано влияние присутствия молекул воды на микроструктуру и молекулярную подвижность в смесях ИЖ на основе катиона 1-бутил-3-метилимидазолия с водой.

В работе были рассмотрены 3 ионные жидкости: нитрат, тетрафторборат и йодид 1-бутил-3-метилимидазолия. Для каждой ИЖ моделировалось шесть смесей с различным соотношением компонент (11, 20, 33, 40, 50 и 95 моль% ИЖ), а также три чистые ионные жидкости. Моделирование проводилось с использованием пакета MDynaMix [1] в изотермоизобарическом ансамбле при комнатной температуре и атмосферном давлении. Молекулы воды описывались с помощью двух жестких моделей: пятицентровой TIP5P [2] и трехцентровой SPC/E [3]. Взаимодействия ионов моделировались с использованием потенциалов, описанных в работах [4–7]. Время уравнивания для каждой из рассмотренных систем составляло 0.5 нс, время последующего моделирования – 0.5 нс.

Подробно изучено влияние содержания воды на структурные (функции радиального распределения и координационные числа ионов) и динамические (коэффициенты самодиффузии компонентов и времена переориентации молекул воды) свойства смесей. Отдельное внимание было уделено изучению влияния вида модельных представлений на характеристики исследуемых систем. Предложена модель, описывающая характер изменения структуры смесей при увеличении содержания воды.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований (грант 17-03-00057а).

1. Lyubartsev A. P., Laaksonen A. // *Comp. Phys. Comm.* 2006. V. 128. P. 565.
2. Mahoney W., Jorgensen W. L. // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 112. P. 891.
3. Berendsen H. J. C., Grigera J. R., Straatsma T. P. // *J. Phys. Chem.* 1987. V. 91. P. 6269.
4. Lopes J. N. C., Deschamps J., Padua A. A. H. // *J. Phys. Chem. B.* 2004. V. 108. P. 2038.
5. Heinzinger K. // *Physica B.* 1985. V. 131. P. 196.
6. Soetens J.-S., Millot C., Maigret B. // *Phys. Chem. A.* 1998. V. 102. P. 1055.
7. Megyes T., Balint S., Peter E., Grosz T., Bako I., Krienke H., Bellissent-Funel M.-C. // *J. Phys. Chem. B.* 2009. V. 113. P. 4054.