بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه مازندران

دانشکده شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد در رشته شیمی فیزیک

موضوع:

مطالعه خواص ترمودینامیکی مایعات یونی بر پایه ایمیدازولیم و مخلوط آنها با آب و بررسی اثرطول زنجیر آلکیل با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو و دینامیک مولکولی

استاد راهنما:

دکتر سعید یگانگی

استاد مشاور:

دکتر عباسعلی رستمی

نام دانشجو:

وحید سخنوران

شهریور ماه ۱۳۸۹

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

والدینی که بودنشان تاج افتخاری است بر سرم و نامشان دلیلی است بر بودنم، چرا که این دو وجود پس از پروردگار مایه هستی‌ام بوده اند، دستم را گرفتند و راه رفتن را در این وادی زندگی پر از فراز و نشیب آموختند. آموزگارانی که برایم زندگی؛ بودن و انسان بودن را معنا کردند.

و تقدیم به خواهران مهربانم

به پاس محبت‌های بی دریغشان که هرگز فروکش نمی‌کند.

سپاسگزاری

ای بینای داور و ای توانی بی‌یاور، سپاس و ستایش بیکران تورا که توش و توان و همتم فرمودی تا قدم در این راه گذارم و در هر لحظه یاریگرم بودی. به حرمت آن نامی که تو آنی و آن صفاتی که تو چنانی، یاریمان کن تا بر بی‌ثمری عمری که بر ما می‌گذرد حسرت نبریم.

در طول دوران تحصیلی و تهیه این پایان نامه از راهنمایی ها و مساعدت های اساتید و دوستان عزیزی بهره برده ام که در این جا لازم است از همه ایشان مراتب سپاس قلبی و تشکر خالصانه خود را داشته باشم.

خصوصاً از استاد راهنمای ارجمندم جناب آقای دکتر سعید یگانگی به خاطر زحمات بی‌دریغ، تلاش های بی‌وقفه و حمایت های ایشان کمال تشکر و قدردانی را دارم. همچنین از جناب آقای دکتر عباسعلی رستمی که زحمت مشاوره این پایان نامه را بعهده داشته اند و نیز از کلیه اساتید بزرگواری که همواره از حضورشان بهره گرفته ام بی‌نهایت سپاسگزارم.

فهرست مطالب

عنوان **شماره صفحه**

فصل اول: مقدمه

۱–۱– پژوهشهای انجام شده قبلی ۳

۱–۲– پژوهش حاضر ۵

فصل دوم: مایعات یونی، ویژگی‌ها و کاربردها

۲–۱– تعریف ۷

۲–۲– تاریخچه مایعات یونی ۷

۲–۳– ویژگیهای مایعات یونی ۹

۲–۴– کاتیونها و آنیونهای سازنده مایعات یونی ۱۰

۲–۵– انواع مایعات یونی ۱۱

۲–۵–۱– مایعات یونی در دمای اتاق ($RTLL_S$) ۱۱

۲–۵–۲– مایعات یونی دمای پائین (LTI_S) ۱۲

۲–۶– سنتز و تهیه مایعات یونی ۱۲

۲–۷– خواص مایعات یونی ۱۳

۲–۸– نقطه ذوب ۱۳

۲–۹– چگالی ۱۵

۲–۱۰– گرانروی ۱۵

۲–۱۱– کشش سطحی ۱۷

۲–۱۲– پایداری گرمایی ۱۷

۲–۱۳– نفوذ و هدایت یونی ۱۸

۲–۱۴– آنتالپی تبخیر مایعات یونی ۱۸

۲–۱۵– ظرفیت گرمایی ۱۹

۲–۱۶– کاربردهای مایعات یونی ۱۹

فصل سوم: مبانی شبیه‌سازی

۳–۱– شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۲۲
۳–۲– اجرای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۲۴
۳–۲– ۱- انتخاب پیکربندی اولیه مناسب ۲۴
۳–۲– ۲- تعادل‌سازی ۲۵
۳–۲– ۳- تولید، نمونه‌برداری و اندازه‌گیری خواص ۲۶
۳–۳– انتگرال‌گیری از معادلات حرکت نیوتن ۲۶
۳–۴– پتانسیل برهمکنش بین ذرات ۲۸
۳–۵- مرزهای سیستم ۲۹
۳–۵–۱- شرایط مرزی تناوبی ۳۰
۳–۵–۲- قرارداد نزدیک‌ترین تصویر ۳۱
۳–۶- انتخاب گام زمانی ۳۲
۳–۷- انواع مجموعه در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۳۲
۳–۷–۱- مجموعه بنادی کوچک (NVE) ۳۳
۳–۷–۲- مجموعه بنادی (NVT) ۳۳
۳–۷–۲–۱- ترموستات نوزه- هوور ۳۳
۳–۷–۳- مجموعه هم دما – هم فشار (NPT) ۳۴
۳–۷–۳–۱- باروستات نوزه – هوور ۳۴
۳–۷–۳–۲- باروستات برندسن ۳۵
۳–۸– روش جمع اوالد ۳۵
۳–۹– تابع توزیع شعاعی ۳۶
۳–۱۰– خواص دینامیکی و انتقالی ۳۸
۳–۱۰–۱- ضریب نفوذ ۳۸
۳–۱۰–۲-اعداد انتقال یونی و هدایت الکتریکی ۳۹
۳–۱۱- شبیه‌سازی مونت کارلو ۴۱

فصل چهارم: جزئیات شبیه‌سازی

۴-۱- میدان نیرو ۴۳
۴-۲- بسته نرم افزاری DL_POLY ۴۸
۴-۲-۱- فایل CONTROL ۴۹
۴-۲-۲- فایل CONFIG ۵۰
۴-۲-۳- فایل FIELD ۵۲
۴-۳- تهیه ساختار اولیه مناسب ۵۴
۴-۴- اجرای محاسبات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مایعات یونی ۵۷
۴-۴-۱- پارامترهای شبیه‌سازی ۵۷
۴-۴-۲- مرحله تعادلسازی ۵۸
۴-۴-۳- محاسبه نتایج ۵۹
۴-۵- شبیه‌سازی مخلوط مایعات یونی با آب ۶۰
فصل پنجم: نتایج و بحث
۵-۱- چگالی ۶۴
۵-۲- تابع توزیع شعاعی ۶۹
۵-۳- محاسبه ضریب نفوذ ۷۸
۵-۴- محاسبه آنتالپی تبخیر ۸۸
۵-۴-۱- انرژی پتانسیل ۸۹
نتیجه‌گیری ۹۳
چند پیشنهاد برای کارهای آینده ۹۶
مراجع ۹۷
خلاصه انگلیسی

فهرست جدول‌ها

عنوان **شماره صفحه**

جدول(۲-۱): خواص تعدادی از مایعات یونی ۱۳

جدول (۲-۲): ظرفیت گرمایی مایعات یونی ۱۹

جدول (۴-۱): پارامترهای برهمکنش‌های ضربدری مایع یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم بروماید ۴۵

جدول (۴-۲): پارامترهای طول پیوندی کاتیون ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم ۴۶

جدول (۴-۳): پارامترهای خمش زاویه‌ای کاتیون ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم ۴۶

جدول (۴-۴): پارامترهای پیچشی کاتیون ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم ۴۷

جدول(۴-۵): . توزیع بارهای جزئی مایعات یونی ۴۸

جدول (۴-۶): کلیدهای مربوط به فایل CONFIG و شرایط مرزی مربوط ۵۲

جدول (۴-۷): واحدهای انرژی در DL_POLY ۵۴

جدول (۴-۸): پارامترهای پتانسیلی به کار رفته برای مولکول آب در مدل SPC ۶۲

جدول (۵-۱): چگالی مایع یونی [hmim]Br در دماهای متفاوت و فشار ۱ atm ۶۵

جدول (۵-۲): چگالی مایعات یونی در دماهای متفاوت و فشار ۱ atm ۶۵

جدول (۵-۳): چگالی مایع یونی [emim]Br در دماهای متفاوت و فشار ۱ atm ۶۶

جدول (۵-۴): چگالی مایعات یونی بر پایه ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیم بروماید در دمای ۴۰۰K و فشار ۱ atm ۶۷

جدول (۵-۵): چگالی مخلوط مایعات یونی بر پایه ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیم بروماید با آب در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm ۶۸

جدول (۵-۶): مقادیر ضریب نفوذ تک تک اتم‌های سازنده ۵ کاتیون مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم بروماید در دمای ۴۰۰ K و فشار ۱ atm ۸۵

جدول (۵-۷): مقادیر ضریب نفوذ کاتیون و آنیون مایعات یونی ۱- آلکیل ۳ -متیل ایمیدازولیوم بروماید در دمای ۴۰۰ K و فشار ۱ atm ۸۶

جدول (۵-۸): مقادیر ضریب نفوذ کاتیون و آنیون مایعات یونی ۱- هگزیل ۳- متیل ایمیدازولیوم بروماید در دماهای مختلف در و فشار ۱ atm ۸۶

جدول (۵-۹) : مقادیر اعداد انتقال یونی وهدایت الکتریکی (σ) مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- ۸۷

متیل ایمیدازولیوم برومید در دمای K ۴۰۰ و فشار atm ۱
جدول (۵-۱۰): مقادیر اعداد انتقال یونی وهدایت الکتریکی (σ) مایعات یونی ۱- هگزیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید در دماهای متفاوت در و فشار atm ۱ ۸۷
جدول (۵-۱۱): مقادیر انرژی بر حسب ($kJ\ mol^{-1}$) مربوط به بخش‌های متفاوت انرژی پیکربندی مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید در دمای K ۴۰۰ و فشار atm ۱ ۹۰
جدول (۵-۱۲): مقادیر انرژی بر حسب ($kJ\ mol^{-1}$) مربوط به بخش‌های متفاوت انرژی پیکربندی مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید در دمای K ۴۰۰ و فشار atm ۱در حالت گازی ۹۰
جدول (۵-۱۳): مقادیر انرژی بر حسب ($kJ\ mol^{-1}$) مربوط به بخش‌های متفاوت انرژی پیکربندی مایعات یونی ۱- هگزیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید در دماهای متفاوت و فشار atm ۱ ۹۱
جدول (۵-۱۴): مقادیر انرژی بر حسب ($kJ\ mol^{-1}$) مربوط به بخش‌های متفاوت انرژی پیکربندی مایعات یونی ۱- هگزیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید در دماهای متفاوت و atm ۱در حالت گازی ۹۱
جدول (۵-۱۵): مقادیر به دست آمده آنتالپی تبخیر برای برای مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید دردمای K ۴۰۰ و فشار atm ۱ ۹۲
جدول (۵-۱۶): مقادیر به دست آمده آنتالپی تبخیر برای برای مایعات یونی ۱- هگزیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید دردماهای متفاوت و فشار atm ۱ ۹۲

فهرست شکل‌ها

عنوان **شماره صفحه**

شکل (۲-۱): تعداد مقالات منتشر شده در سراسر جهان در طول سال‌های مختلف ۸

شکل (۲-۲): ساختار تعدادی از کاتیون‌های مایعات یونی ۱۰

شکل (۲-۳): ساختار تعدادی ازآنیونهای مایعات یونی ۱۱

شکل(۲-۴): دیاگرام فاز تجربی برای سیستم [emim]Cl / $AlCl_3$]. دما بر حسب کسر مولی X_{AlCl3} ۱۴

شکل(۳-۱): پتانسیل (۶-۱۲) لنارد- جونز ۲۸

شکل (۳-۲): شرایط مرز تناوبی سیستم ۳۱

شکل (۳-۳): نمای شماتیک محاسبه تابع توزیع شعاعی ۳۷

شکل (۴-۱): نمایش اسکلت مولکولی کاتیون ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم ۴۵

شکل (۴-۲): تصویر نمونه از یک فایل CONTROL ۵۰

شکل (۴-۳): تصویر نمونه از یک فایل CONFIG ۵۱

شکل (۴-۴): تصویر نمونه از یک فایل FIELD ۵۳

شکل(۴-۵): ساختار اولیه مایع یونی در جعبه مکعبی حاوی (۲۱۶) جفت یونی مایع یونی ۱- هگزیل ۳- متیل ایمیدازولیوم بromید ۵۵

شکل(۴-۶): یک نمونه از ساختار اولیه مناسب شبیه‌سازی در جعبه مکعبی حاوی (۲۱۶) جفت یونی مایع یونی ۱- هگزیل ۳- متیل ایمیدازولیوم بromید ۵۶

شکل(۴-۷): نمودار انرژی کل بر حسب دما ۵۹

شکل (۵-۱): تغییر چگالی با دما در مایع یونی[emim]Br در دمای K ۴۰۰ و فشار atm ۱ ۶۷

شکل (۵-۲): وابستگی چگالی به طول زنجیر آلکیل در مایع یونی بر پایه ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیم بromید با آب در دمای K ۲۹۸/۱۵ و فشار atm ۱ ۶۸

شکل(۵-۳): توزیع شعاعی کاتیون-کاتیون، کاتیون-آنیون، آنیون – آنیون مایع یونی [hmim]Br ۶۹

شکل(۵-۴): توزیع شعاعی کاتیون-کاتیون، کاتیون-آنیون، آنیون – آنیون مایع یونی [pmim]Br ۷۰

شکل(۵-۵): توزیع شعاعی کاتیون-کاتیون، کاتیون-آنیون، آنیون – آنیون مایع یونی [bmim]Br ۷۱

شکل(۵-۶): توزیع شعاعی کاتیون-کاتیون، کاتیون-آنیون، آنیون – آنیون مایع یونی [emim]Br ۷۲
شکل (۵-۷): توزیع شعاعی کاتیون-کاتیون، کاتیون-آنیون، آنیون – آنیون مایع یونی [dmim]Br ۷۳
شکل (۵-۸): توابع توزیع شعاعی اتم CT3 و شبه اتم‌های کاتیون در مایع یونی [hmim]Br ۷۴
شکل (۵-۹): توابع توزیع شعاعی آنیون برومید و دو نوع کربن حلقه ایمیدازولیوم در مایع یونی [hmim]Br ۷۵
شکل (۵-۱۰): توابع توزیع شعاعی آنیون و اتم‌های هیدروژن کاتیون در مایع یونی [hmim]Br ۷۶
شکل(۵-۱۱): توابع توزیع شعاعی آنیون-کاتیون مایع یونی [hmim]Br در دماهای متفاوت و فشار ۱ atm ۷۶
شکل(۵-۱۲): توابع توزیع شعاعی آنیون – آنیون مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم ۷۷
شکل(۵-۱۳): توابع توزیع شعاعی کاتیون – کاتیون مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم ۷۷
شکل(۵-۱۴): توابع توزیع شعاعی کاتیون – آنیون مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم ۷۸
شکل (۵-۱۵): میانگین مربع جابجایی آنیون مایع یونی [bmim]Br بر حسب زمان در دمای ۴۰۰ K و فشار ۱ atm برای ۳ شبیه‌سازی NVE (خطوط توپر) و میانگین آنها (نقطه چین) ۷۹
شکل (۵-۱۶): میانگین مربع جابجایی کاتیون مایع یونی [bmim]Br بر حسب زمان در دمای ۴۰۰ K فشار ۱ atm برای ۳ شبیه‌سازی NVE (خطوط توپر) و میانگین آنها (نقطه چین) ۷۹
شکل (۵-۱۷): میانگین مربع جابجایی آنیون و کاتیون مایع یونی [hmim]Br برحسب زمان در دمای ۴۰۰ K و فشار ۱ atm کاتیون (خطوط توپر) و آنیون (نقطه چین) ۸۰
شکل (۵-۱۸): میانگین مربع جابجایی آنیون و کاتیون مایع یونی [pmim]Br بر حسب زمان در دمای ۴۰۰ K و فشار ۱ atm کاتیون (خطوط توپر) و آنیون (نقطه چین) ۸۱
شکل (۵-۱۹): میانگین مربع جابجایی آنیون و کاتیون مایع یونی [bmim]Br بر حسب زمان در دمای ۴۰۰ K و فشار ۱ atm کاتیون (خطوط توپر) و آنیون (نقطه چین) ۸۱
شکل (۵-۲۰): میانگین مربع جابجایی آنیون و کاتیون مایع یونی [emim]Br بر حسب زمان در دمای ۴۰۰ K و فشار ۱ atm کاتیون (خطوط توپر) و آنیون (نقطه چین) ۸۲
شکل (۵-۲۱): میانگین مربع جابجایی آنیون و کاتیون مایع یونی [dmim]Br بر حسب زمان در دمای ۴۰۰ K و فشار ۱ atm کاتیون (خطوط توپر) و آنیون (نقطه چین) ۸۲
شکل (۵-۲۲): میانگین مربع جابجایی آنیون مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید در ۸۳

دمای K ۴۰۰ و فشار atm ۱
شکل (۵-۲۳): میانگین مربع جابجایی کاتیون مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید در دمای K ۴۰۰ و فشار atm ۱ ۸۳

فهرست علائم و اختصارات

B	i te o el B ll i ith er e ie me t
mim	1- t l -meth l imi a oli m
BF	etra l oro orate
B LYP	Beke three Parameter Lee Ya Par
m	Ce timeter
C	Ce ti ra e
C	Chemi tr at a romole lare e ha i
mim	1 imeth l imi a oli m
emim	1-eth l -meth l imi a oli m
em im	1-eth l -meth l imi a oli m
e	le tro olt
F	Fa e e tere i
r	ram
J	Jo le
kCal	Kilo Calorie
k J	Kilo o le
D	ole lar D ami
m a	mili a al
Nm	Ne to eter
N	N lear ma eti re o a e
N	Bi metha l o l ami e
	a o e o
NP	N m er- Pre re- em rat re
N	N m er- ol me - er
N	N m er- ol me - em rat re
omim	1-o t l -meth l imi a oli m
OPLS	O timi e Pote tial or Li i Sim latio
PF	e a l oro ho hate

i o e o

F ri l oro a eti a i

FO ri l oro metha e l o ate

N F Bi ri l orometh l l o l imi e

فصل اول

مقدمه

دستیابی به تکنولوژی‌های نوین جهت جایگزینی مواد شیمیایی پر مصرف در صنعت به منظور کاهش آلاینده‌ها، حذف مسائل خوردگی و کاهش مصرف انرژی همواره مورد توجه خاص قرار داشته است. با توجه به ویژگیهای مطلوب مایعات یونی تحت عنوان حلال‌های سبز، دستیابی به دانش فنی ساخت آنها به عنوان ترکیبات شیمیایی مناسب با ارزش افزوده بسیار بالا از یک سو و استفاده از آنها در فرایند تصفیه گازهای طبیعی به صورت یک محیط بدون آلاینده و حذف خوردگی جهت جذب گازهای اسیدی به منظور جایگزین مناسبی برای آمین‌ها از سوی دیگر مطرح است که بر این اساس کاهش مصرف انرژی در صنایع گاز و افزایش ظرفیت تولید پالایشگاههای گاز مورد توجه قرار گرفته است. به علاوه دستیابی به محصولات شیمیائی و پتروشیمیائی با خلوص و ارزش افزوده بالاتر با استفاده از محیط مایعات یونی از اهمیت بالائی برخوردار است. این ترکیبات ساختار یونی داشته و به دلیل نداشتن تقارن مولکولی درساختمان کاتیون آنها علیرغم ماهیت نمکی، دارای نقطه ذوب پائین و اکثراً در دمای محیط به شکل مایع وجود دارند. این ترکیبات عموماً شامل یک کاتیون حجیم و یک آنیون آلی یا معدنی می باشند. پایه‌های کاتیونی، ایمیدازولیوم، پیریدینیوم، پیرولیدینیوم و فسفونیوم با شاخه‌های هیدروکربوری مختلف وآنیونهایی مثل یونهای هالید، BF_6^- (تترافلوئوروبرات)، PF_6^- (هگزافلوئوروفسفات)، $^-$

[$(CF_3SO_2)_2N$] [بیس (تری فلوئوورومتیل سولفونیل) ایمید] و غیره در ساختمان مایعات یونی بکار می‌روند .امروزه مایعات یونی به دلیل خواص منحصر به فردشان مانند قطبیت بالا و عدم تشکیل کمپلکس، فشار بخار پایین، پایداری الکتروشیمیایی گسترده، رسانایی الکتریکی خوب و تحرک یونی بالا مورد توجه زیادی قرار گرفته‌اند، بنابراین درک خواص این مواد در پیشبرد کاربرد آنها در واکنشهای شیمیایی بسیار مؤثر می‌باشد. از طرف دیگر شبیه‌سازی مولکولی اطلاعات ارزشمندی را درباره خواص ترمودینامیکی و انتقالی آنها فراهم می‌کند. با استفاده از این شیوه ارزشمند می‌توان خواص ترمودینامیکی و ساختاری سیستمی که هیچ داده تجربی برای آن موجود نیست، یا به دست آوردن اطلاعات تجربی برای آن دشوار می باشد را پیش بینی نمود. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی حرکت مولکولها را در حالتهای جامد، مایع و گاز محاسبه می‌کند؛ یا بعبارتی، چگونگی تغییر موقعیتها، سرعتها و جهت‌گیریهای مولکولها را با زمان تشریح می‌نماید. در واقع دینامیک مولکولی تصویر حرکتی را فراهم می‌آورد که مولکولها را هنگام چرخیدن، برگشتن، برهمکنش با یکدیگر و احتمالاً برهمکنش با دیواره ظرف دنبال می‌کند. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فهم مدرن ایده‌ای قدیمی در علم است که می‌گوید رفتار سیستم قابل محاسبه است و این محاسبه در شرایطی امکان‌پذیر است که برای اجزای سیستم مجموعه‌ای ازشرایط اولیه به اضافه نیروهای برهمکنش را داشته باشیم. از زمان نیوتن تا کنون، این تفسیر مکانیکی طبیعت علم را در کنترل داشته است.

۱-۱- پژوهشهای انجام شده قبلی

حمایت شکاری[1] و همکارانش تأثیر زنجیرآلکیل را روی خواص ترمودینامیکی مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید را در دماهای مختلف بررسی کردند [۱]. مایاجا[2] و همکارانش دانسیته مخلوطهای دو تایی بر اساس آلکیل ایمیدازولیوم وآب [۲]، همچنین رحمت صادقی[3] و همکارانش چگالی و سرعت صوت را در مایع یونی ۱- هگزیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید درآب را در دماهای مختلف اندازه‌گیری کردند [۳].

رابه[4] و همکارانش خواص ساختاری و ترمودینامیکی تعدادی از مایعات یونی بر اساس ایمیدازولیوم را با استفاده از شبیه‌سازی مولکولی محاسبه کردند [۴]. لوپز[5] و همکارانش نیز یک میدان نیروی مولکولی جدیدی را بر پایه میدان نیروی AMBER/OPLS برای مایعات یونی بر اساس کاتیونهای ایمیدازولیوم، پیریدینیوم، فسفونیم و آنیونهای کلرید، برومید و دی سیانامید به کار بردند [۵].

لیو[6] وهمکارانش با استفاده از میدان نیروی اتمهای متحد تعدادی دیگر از مایعات یونی بر پایه ایمیدازولیوم با آنیونهای کلر، هگزا فلوئورو فسفات را شبیه‌سازی نموده و آنها همچنین با شبیه‌سازی مخلوط مایع یونی و استونیتریل خواصی مانند دانسیته، ضرایب نفوذ خودبخودی و آنتالپی‌های تبخیر این مخلوط را محاسبه کردند [۶] و در بررسی دیگری از یک میدان نیروی پالوده برای این دسته از مایعات استفاده کردند [۷].

1- Shekari Hemayat
2- Mayaga
3- Sadeghi Rahmat
4- Raabe
5- Lopes
6- Liu

مگین[1] و همکارنش برای شبیه‌سازی مایع یونی از میدان نیروی کل اتمها استفاده کردند. آنها شبیه‌سازی این مایع یونی را در مجموعه NPT در دماهای مختلف انجام دادند و نشان دادندکه کمیت‌های محاسبه شده نظیر نفوذهای خودبخودی، توابع توزیع شعاعی، دانسیته و اترژی چسبندگی در توافق خوبی با داده‌های تجربی در دسترس بود [۸].

هنکه[2] با هدف بررسی خواص فیزیکی بعنوان تابعی از نسبت اجزای سازنده ترکیب شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مخلوط مایع یونی ۱ و۳ دی آلکیل ایمیدازولیوم و آب را انجام دادند و رفتار دو مایع یونی ۱ و۳ دی آلکیل ایمیدازولیوم کلرید و هگزا فلوئورو فسفات را با هم مقایسه نمودند. آنها مشاهده کردند که مایعات یونی با آنیون هگزا فلوئورو فسفات نسبت به مایعات یونی با آنیون کلرید بیشتر آبگریزند. این بخاطر اختلاف در حجم‌های اضافی و آنتالپی‌های مخلوط در مورد این دو مایع است. آنها برای شبیه‌سازی از برنامه DL_POLY در مجموعه NVT استفاده کردند [۹].

لی[3] و همکارانش برای بررسی هدایت‌های یونی نمکهای با کاتیون [bmim] با آنیونهای CF_3COO^-، PF_6^- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را با استفاده از میدان نیروی CHARMM22 انجام دادند و مشاهده نمودند که هدایت‌های یونی محاسبه‌شده در توافق خوبی با نتایج تجربی بود [۱۰].

سامان علوی[4] و همکارانش برای مطالعه خواص انتقالی ۱۲ مایع یونی در دمای اتاق بر پایه ۱-آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیم (آلکیل= متیل، اتیل، پروپیل، بوتیل) با آنیونهای Cl^-، NO_3^-، PF_6^-، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

1- Maginn
2- Hanke
3- Lee
4- Alavi

استفاده کردند.آنها برای بررسی دینامیک این مایعات از میانگین مربع جابجایی و تابع خودهمبستگی سرعتی در دمای K ۴۰۰ استفاده نمودند [۱۱].

۱-۲- پژوهش حاضر

در این پایان نامه خواصی از قبیل چگالی، تابع توزیع شعاعی و ضریب نفوذ و انرژی دسته‌ای از مایعات یونی بر پایه ایمیدازولیم با استفاده از روشهای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته است. بر همکنشهای برون مولکولی و درون مولکولی بر پایه مکانیک کلاسیکی بررسی می‌شود و با استفاده از روابط معمول در ترمودینامیک آماری خواص ترمودینامیکی این سامانه محاسبه می‌شود. ساختار ترکیب، انعطاف پذیر فرض شده و از میدان نیروی اتمهای متحد استفاده می‌شود. شبیه‌سازی مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید با زنجیرهای آلکیلی مختلف (متیل، اتیل، بوتیل، پنتیل، هگزیل) برای بررسی اثر طول زنجیر گروه آلکیلی و همچنین ارتباط چگالی شبیه‌سازی شده مایع با تعداد کربن زنجیر آلکیل در این تحقیق بررسی می‌شود. در فصل دوم درباره مایعات یونی، خصوصیات و اهمیت آنها بحث می‌شود. در فصل سوم درباره مبانی شبیه‌سازی از جمله انتگرال‌گیری از معادلات حرکت نیوتن، مراحل اصلی شبیه‌سازی، پتانسیل برهمکنش بین ذرات، شرایط مرزی تناوبی، انواع مجموعه در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و خواصی مانند تابع توزیع شعاعی، ضریب نفوذ و عدد انتقال توضیحاتی ارائه می‌شود. در فصل چهارم جزئیات شبیه‌سازی مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید با زنجیرهای آلکیلی مختلف (متیل، اتیل، بوتیل، پنتیل، هگزیل) توضیح داده می‌شود و نهایتاً در فصل پنجم نتایج بدست آمده از چگالی، تابع توزیع شعاعی، ضریب نفوذ، آنتالپی تبخیر مایعات یونی ۱- آلکیل ۳- متیل ایمیدازولیوم برومید با زنجیرهای آلکیلی مختلف و تأثیر دما و طول زنجیر آلکیلی روی بعضی از این خواص مورد بررسی قرار می‌گیرد.