
力学所在离子液体自由表面电喷射研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12402.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

离子液体是室温下呈液态的无溶剂电解液，离子液体的电雾化（electrospray ionization）在空间推进、纳米制造和质谱分析等领域具有重要应用。离子液体的纯离子态（pure-ion mode）电雾化是一种新兴技术，近年来在国际上引发广泛关注，其离子束具有高荷质比、高亮度和多样可控的离子种类，有望解决应用中长期面临的挑战。目前，离子液体的纯离子态电雾化技术尚未达到应用所需的高稳定性和高效，学界尚不清楚其中的机理。

中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室微纳流体力学课题组副研究员蒋玺恺及合作者对离子液体电雾化进行了研究。研究人员使用分子动力学模拟，研究了电场作用下，离子液体自由表面上的离子喷射特征与机理，探讨了喷射电流和喷出物质的成分随电场的变化，发现分子模拟结果与经典离子喷射理论结果一致，这是国际上首次使用分子模拟来验证经典离子喷射理论。

模拟中喷出的物质包括离子单体和二聚体，其占比与文献中实验结果一致。对于离子单体，在其喷出之前，除了需要跨越经典理论考虑的液面上方能垒之外，模拟发现，它还需要跨越液面下方的一个能垒，该能垒源于离子液体独特的液面结构。对于二聚体，电场和离子间相互作用力对其占比具有重要影响。为了解释不同成分的形成原因，研究人员进一步使用副本交换分子动力学（replica exchange molecular dynamics）模拟，发现液面附近离子存在四种不同的亚稳态，这些亚稳态决定了喷出物质的成分。

该研究加深了学界对于离子液体电雾化的理解，为选择满足电雾化特定需求的离子液体提供了理论指导。相关研究成果发表在J. Phys. Chem.

Lett.上，研究工作得到中科院前沿科学重点研究项目、战略性先导科技专项（B类）的支持。

[论文链接](#)

图1 (左) 分子动力学模拟系统示意图, (右) 离子液体[BMIM][PF₆]的计算模型

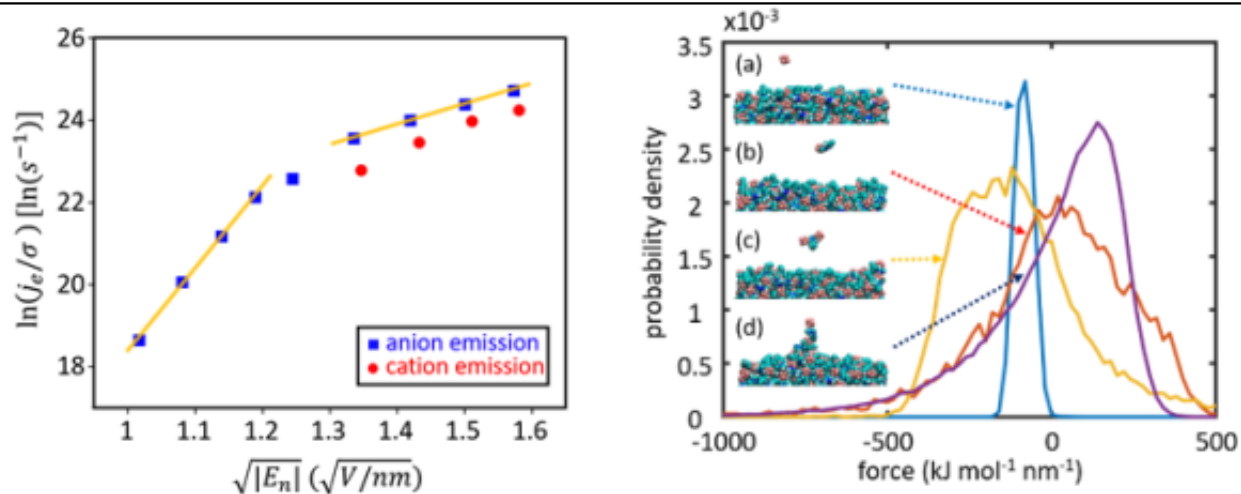


图2 (左) 离子喷射电流与电场的关系, (右) 离子液体液面上方离子的四种亚稳态

研究团队单位: 力学研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有, 请勿用于商业用途, [爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发