

光谱学与光谱分析

红外光谱法和量子化学法对离子液体提取水中壬基酚的机理研究

付新梅¹, 汪磊², 戴树桂³

1. 西南科技大学环境与资源学院, 四川 绵阳 621010
2. 南开大学, 环境污染过程与基准教育部重点实验室, 天津 300071
3. 南开大学环境科学与工程学院, 天津 300071

收稿日期 2010-5-10 修回日期 2010-8-20 网络版发布日期 2011-3-1

摘要 采用红外光谱法和量子化学计算法(密度泛函B3LYP方法), 分别对常见离子液体1-甲基-3-丁基咪唑六氟磷酸盐和含羟基的咪唑型离子液体提取水环境中的壬基酚的提取机理进行了研究。研究结果显示常见离子液体与壬基酚相互作用前后的红外谱图上没有氢键存在的迹象, 而含羟基的离子液体在与壬基酚作用后其羟基峰发生了明显的红移。量子化学计算结果表明常见离子液体中的阳离子⁺与壬基酚发生了C—H...O氢键相互作用; 而含羟基的离子液体中的阳离子[C₄H₉OHIM]⁺与壬基酚发生了O—H...O氢键相互作用。两种研究方法结果均显示含羟基的离子液体与壬基酚的氢键作用比常见离子液体强, 导致其对壬基酚的萃取率也大, 此机理研究结果与萃取实验结果完全吻合。

关键词 [离子液体](#) [壬基酚](#) [萃取机理](#) [红外光谱法](#) [量子化学计算](#)

分类号 [O641.3](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2011\)03-0625-05](#)

通讯作者:

付新梅 fuxinmei68@yahoo.com.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1891KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“离子液体”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [付新梅](#)

· [汪磊](#)

· [戴树桂](#)