

# Tests d'un nouveau modèle pour [EMI][BF<sub>4</sub>]

January 13, 2012

- Modèle inspiré de Roy (*J. Phys. Chem. B*, **114**, 12629 (2010))

## 1 Paramètres

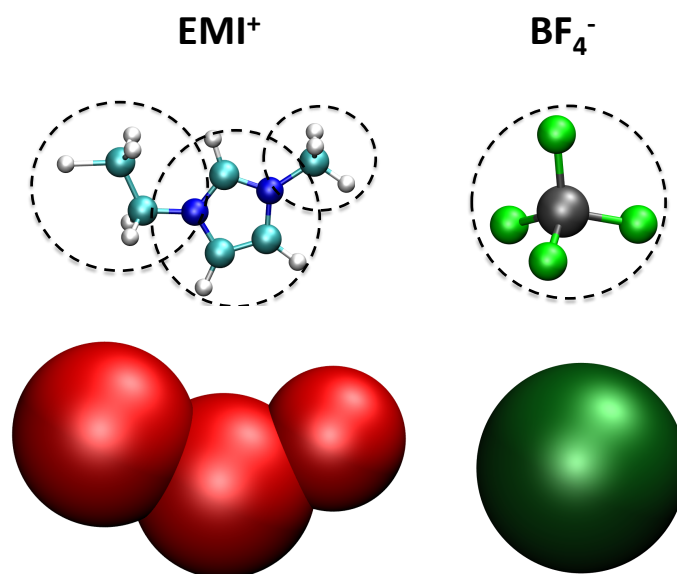
Les paramètres de l'anion sont les mêmes que pour [BMI][BF<sub>4</sub>], seuls les paramètres du cation sont modifiés, à savoir :

- les charges portées par les sites;
- les coordonnées du site 3;
- les paramètres de Lennard-Jones pour le site 3.

Les changements ont été réalisés de la manière suivante :

- les charges ont été choisies d'après le modèle de tout-atome de Chaban (charge d'un site = somme des charges portées par les atomes appartenant à ce site multipliée par un facteur pour que la charge totale de la molécule soit égale à 0.78 e);
- la géométrie (distance C1/C3 et angle C2/C1/C3) a été choisie suivant une configuration tout-atome en prenant les centres de masse des différents sites de la molécule (remarque : pour la distance, une interpolation à partir des butyl et méthyl de [BMI][PF<sub>6</sub>] donne le même résultat);
- le paramètre sigma a été obtenu en fittant la densité avec les données expérimentales;
- le paramètre epsilon permet d'ajuster un peu la diffusion.

Les tests permettant les fits ont été effectués à 400 K.

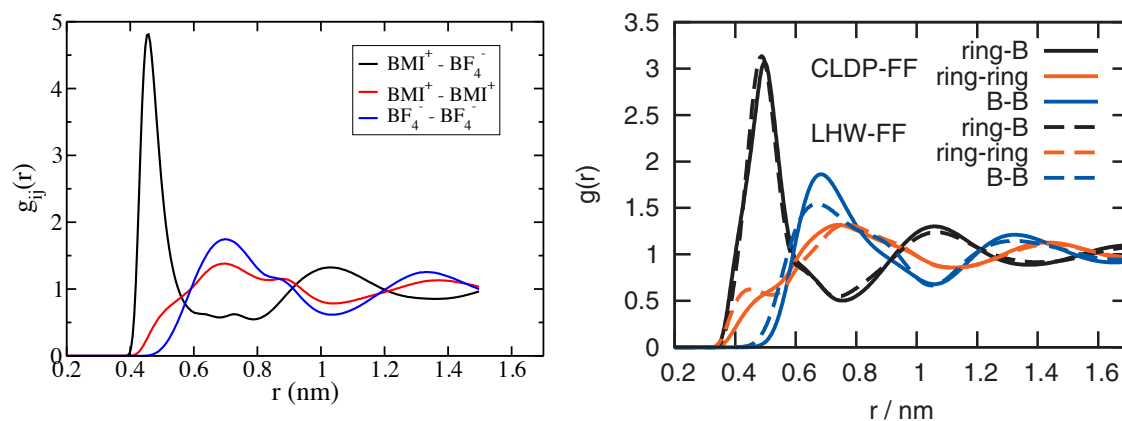


Site	x (Å)	y (Å)	z (Å)	M (g.mol <sup>-1</sup> )	$\sigma_i$ (Å)	$\varepsilon_i$ (kJ.mol <sup>-1</sup> )	$q_i$ (e)
C1	0	-0.527	1.365	67.07	4.38	2.56	0.3591
C2	0	1.641	2.987	15.04	3.41	0.36	0.1888
C3	0	-0.737	-1.653	29.07	4.38	1.24	0.2321
A	0	0	0	86.81	4.51	3.24	-0.7800

## 2 Comparaison des propriétés avec les valeurs de la littérature

### 2.1 Fonctions de distribution radiale

- Comparaison avec Dommert, *J. Chem. Phys.*, **129**, 224501 (2008)



## 2.2 Densité

- Comparaison avec Chaban, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 7910 (2011)

T (K)	298	323	400	500
$L_x = L_y = L_z$ (Å)	53.04	53.32	54.16	55.30
$\rho$ (kg.m <sup>-3</sup> )	1269	1249	1192	1119
$\rho_{\text{exp}}$ (kg.m <sup>-3</sup> )	1279/1280	1220	1193	–
$\rho_{\text{Chaban}}$ (kg.m <sup>-3</sup> )	1252	1232	1162	–

## 2.3 Diffusion

- Comparaison avec Chaban, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 7910 (2011)

T (K)	298	323	400
$D_A$ (10 <sup>-11</sup> m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )		5.8	38.0
$D_A$ exp (10 <sup>-11</sup> m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	4.2	9.0	39.4
$D_A$ Chaban (10 <sup>-11</sup> m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	2.4	7.0	34.0
$D_C$ (10 <sup>-11</sup> m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )		10.4	53.8
$D_C$ exp (10 <sup>-11</sup> m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	5.9	10.5	44.0
$D_C$ Chaban (10 <sup>-11</sup> m <sup>2</sup> .s <sup>-1</sup> )	4.7	11.0	43.0

## 2.4 Viscosité

- Comparaison avec Chaban, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **13**, 7910 (2011)

On obtient une viscosité de 5.7 mPa.s (exp = 4.0 ou 5.4 mPa.s, Chaban = 4.0 mPa.s).

## 2.5 Tension de surface

Pas encore fait.

## 2.6 Remarque

Deux autres géométries ont été testées (1 : même géométrie que BMI, 2 : distance raccourcie mais angle inchangé). Les fonctions de distribution radiale sont très similaires pour les géométries modifiées mais un peu différentes par rapport à la géométrie initiale de BMI. Dans tous les cas, le pics sont décalés vers les basses valeurs de r. Les paramètres de LJ ont peu d'influence sur les fonctions de distribution radiale.

