

Ionic Solution 의 분자 시뮬레이션 기반 VLE 거동 예측 방법 문헌 조사

이온성 용액의 증기-액체 평형(Vapor-Liquid Equilibrium, VLE)은 다양한 산업 공정 및 환경 시스템에서 중요한 역할을 한다. 특히, 이온성 용액은 용액 내 분자간 상호작용이 균일하지 않은 비이상성을 보이므로 일반적인 VLE 모델보다 정밀한 접근 방식이 필요하다. 본 보고서는 다양한 연구를 기반으로 이온성 용액의 VLE 시뮬레이션 방법을 정리하고, Monte Carlo 및 Molecular Dynamics(MD) 방법론을 분석하여 정확한 예측 모델을 구축하는 데 필요한 요소와 상용 소프트웨어들에 대해 검토하며, 넓은 범위의 이온성 용액의 일종인 Deep Eutectic Solvent 로의 적용 가능성에 대해 검토한다.

Table of Contents

- [이온성 용액 VLE 모델링의 세가지 방법](#)
- [분자 시뮬레이션 기반 VLE 주요 연구 사례 분석](#)
- [주요 연구 사례 분석 및 핵심 시뮬레이션 방법](#)
- [이온성 용액 VLE 모델링을 위한 상용 시뮬레이션 소프트웨어들](#)
- [상기 방법론들의 Deep Eutectic Solvent 로의 적용 가능성 검토](#)
- [결론](#)
- [참고문헌](#)

이온성 용액 VLE 모델링의 세가지 방법

문헌 연구 결과, 이온성 용액의 증기-액체 평형(VLE)을 모델링하는 방법은 크게 열역학적 모델 기반 방법, Gibbs Ensemble Monte Carlo(GEMC) 시뮬레이션, 그리고 분자동력학(MD) 시뮬레이션으로 나눌 수 있었다.[1]

열역학적 모델 기반 방법은 실험 데이터를 바탕으로 상평형을 예측하는 방식으로, NRTL(Non-Random Two-Liquid) 모델과 같은 비이상성 열역학 모델이 주로 사용된다. 이 방법은 계산 속도가 빠르고 실험 데이터를 보정하여 높은 정확도를 유지할 수 있다는 장점이 있지만, 새로운 시스템에 대한 예측력이 제한적이며, 실험 데이터가 부족할 경우 적용이 어려울 수 있다.[1]

GEMC 시뮬레이션은 기-액 상평형을 직접 시뮬레이션하는 방법으로, Gibbs Ensemble 을 이용해 상이한 상에서의 물질 균형을 동적으로 조절하며, 특히 상분리가 존재하는 시스템에서 효과적이다. 이 방법은 장거리 정전기적 상호작용을 고려하기 위해 Ewald summation 기법을 적용할 수 있으며, 이온-이온 및 이온-용매 간의 정밀한 상호작용을 분석하는 데 적합하다. 다만, 계산 비용이 높고 복잡한 시스템에서는 수렴 속도가 느릴 수 있다.[1]

MD 시뮬레이션은 원자 수준에서 분자의 운동을 추적하여 시간에 따른 시스템의 거동을 분석하는 방법으로, 이온성 용액의 계면 구조, 동역학적 특성, 그리고 용매화 거동을 연구하는 데 널리 사용된다. 특히, 전하 분포와 분극 효과를 고려한 힘장 모델(예: OPLS, AMBER, CHARMM 등)을 적용함으로써 이온성 액체의 비이상적 특성을 보다 현실적으로 반영할 수 있다. MD 시뮬레이션은 특정 용매 환경에서의 분자동역학적 특성을 분석하는 데 유용하지만, 긴 시뮬레이션 시간이 필요하고 초기 구조 및 힘장 설정이 결과에 큰 영향을 미칠 수 있다.[1]

이러한 방법들은 각각의 장단점이 있으며, 이온성 용액의 특성을 정밀하게 모델링하기 위해서는 열역학적 모델과 분자 시뮬레이션 기법을 적절히 조합하는 접근 방식이 필요하다.

분자 시뮬레이션 기반 VLE 주요 연구 사례 분석

분자 시뮬레이션 기반의 Vapor Liquid Equilibrium에 대해 연구한 문헌 사례들에 대해 조사해보았다.

가장 먼저, Henry J. Strauch & Peter T. Cummings의 연구[2]에서는 Gibbs Ensemble Monte Carlo(GEMC) 기법을 이용하여 NaCl, 메탄올, 물로 이루어진 전해질 혼합계의 증기-액체 평형을 시뮬레이션했다. GEMC 방법을 적용함으로써 전해질 농도 변화에 따른 상거동을 분석하고, 메탄올의 휘발성 증가 효과를 정량적으로 재현하는 데 성공했다. 이를 통해 GEMC 시뮬레이션이 전해질 혼합계의 증기-액체 평형을 예측하는 데 유용한 도구임을 입증했으며, 실험적으로 측정하기 어려운 시스템에서 보다 정밀한 상거동 분석이 가능함을 보여주었다.

이와 관련하여 Jan Picálek et al.은 분자동역학(MD) 시뮬레이션을 이용하여 이온성 액체(IL)와 물의 혼합계에서 액체-증기 계면 구조를 분석했다.[3] 연구진은 비분극(non-polarizable) 및 분극 가능한(polarizable) 힘장 모델을 비교하여 계면에서의 이온 분포를 평가한 결과, 높은 IL 농도에서는 표면장력이 증가하는 경향을 보였으며, 특히 분극 가능한 힘장에서 더욱 두드러진 변화를 나타내었다. 이는 IL과 물 간의 계면 구조가 물 흡수 및 탈착 과정에 미치는 영향을 설명하는 데 중요한 실마리를 제공하며, IL을 포함한 혼합계에서 계면의 역할을 보다 깊이 이해하는 데 기여했다.

Guohui Zhou et al.의 연구[4]에서는 이미다졸리움 기반 이온성 액체(ILs)의 기-액(Vapor-Liquid) 계면 특성을 분석하고, 물 흡수 및 탈착 과정의 메커니즘을 규명하기 위해 분자동역학(MD) 시뮬레이션을 수행했다. 연구진은 Jorgensen et al.이 개발한 OPLS(Optimized Potentials for Liquid Simulations) 힘장을 사용하여 IL과 용매 간의 상호작용을 모델링하였으며, GROMACS 5.1.5 패키지를 활용하여 시뮬레이션을 수행했다. 분석 결과, 이미다졸리움 기반 ILs와 물의 혼합계에서 물 분자가 주로 계면 내부층에 분포하며, IL은 외부층을 형성하면서 특정한 배향을 가지는 것으로 나타났다. 이는 IL의 구조적 특성이 기-액 계면에서의 거동에 중요한 영향을 미친다는 점을 시사하며, 계면 장력 및 수분 흡수 특성을 조절하는 데 필요한 기초 정보를 제공했다.

A.Z. Panagiotopoulos의 연구[5]에서는 Gibbs Ensemble Monte Carlo (GEMC) 기법을 적용하여 단순 유체(simple fluids), 이온성 유체(ionic fluids), 고분자 유체(polymeric fluids)의 상평형(phase equilibrium)을 분석했다. 특히, 이온성 유체의 모델링을 위해 Restricted Primitive Model (RPM)을 도입하여, 동일 크기의 양이온과 음이온이 단순한 전기적 인력과 반발력만을 따르는 시스템으로 가정했다. 이를 통해 이온성 용액에서의 상거동을 단순화하여 분석할 수 있었으며, 고분자 용액(polymeric fluids)의 상평형을 보다

정밀하게 계산하기 위한 새로운 화학 퍼텐셜 계산 기법을 적용했다. 이러한 접근법은 다양한 유체 시스템에서의 상거동을 정확하게 예측할 수 있도록 하였으며, 복잡한 분자 시스템에서도 활용될 수 있는 시뮬레이션 기법의 신뢰성을 높였다.

Sandip Paul 과 Amalendu Chandr[6] 는 전해질 용액의 액체-증기(Liquid-Vapor) 계면에서의 평형 및 동역학적 특성을 분석하기 위해 분자동력학(MD) 시뮬레이션을 수행했다. 연구진은 Lennard-Jones 입자로 하전된 이온을 모델링하고, 용매 분자는 Stockmayer 퍼텐셜을 따르는 쌍극자 분자로 표현하여, 액체-증기 계면에서의 밀도 분포, 계면 구조, 표면장력(surface tension), 분자 확산(translational diffusion), 회전 확산(rotational diffusion), 및 쌍극자 정렬(relaxation)을 분석했다. 특히, 전해질 농도가 증가함에 따라 용매-용매, 이온-용매, 이온-이온 상호작용이 어떻게 변하는지를 평가하였으며, 장거리 정전기 상호작용을 Ewald summation 기법을 이용해 정밀하게 모델링했다. 이러한 연구 결과는 전해질 용액의 계면에서 일어나는 분자동역학적 변화를 분석하는 데 기초 자료로 활용될 수 있으며, 전해질 시스템의 계면 거동을 보다 정밀하게 설명할 수 있도록 했다.

마지막으로, Y. Shim et al.[7]은 상온 이온성 액체(Room-Temperature Ionic Liquids, RTIL)의 평형 용매화 구조 및 자유 에너지를 분석하기 위해 분자동력학(MD) 시뮬레이션을 수행했다. 연구진은 [EMIM]Cl 및 [EMIM]PF₆ 수용액을 모델링하여 용매화 거동을 분석하고, 용질로 이원자(diatomic) 및 벤젠형(benzenelike) 분자를 사용하여 용매-용질 상호작용을 평가했다. 또한, 다양한 전하 분포(charge separation) 조건에서 용매 구조 및 자유 에너지 변화를 조사하여 RTIL 시스템의 물리화학적 특성을 보다 정밀하게 이해하고자 했다. 연구 결과, RTIL에서의 평형 용매화 구조 및 자유 에너지를 분석할 수 있었으며, 이는 이온성 액체의 용매화 특성을 보다 정확히 평가하는 데 중요한 자료가 될 수 있음을 보여주었다.

이러한 연구들은 각각 이온성 액체 및 전해질 혼합계의 증기-액체 평형을 보다 정밀하게 예측하기 위한 다양한 접근법을 제시하였으며, 실험적으로 측정하기 어려운 시스템에서도 시뮬레이션을 통한 정밀한 이온성 용액 시스템 모델링했고 그를 통해 시스템에 대한 여러 타겟 특성 정밀 분석을 성공적으로 입증했다.

주요 연구 사례 분석 및 핵심 시뮬레이션 방법

위에서 언급한 상기 연구들은 주로 전하 분포(charge distribution), 분극 효과(polarization), 그리고 힘장(force field) 모델의 최적화를 통해 이온성 용액의 상거동을 보다 정확하게 재현하는 데 초점을 맞추었다. 이온 용액의 핵심적인 특성을 정밀하게 모델링하기 위함인데, 이러한 방법론들에 대해 자세히 살펴보면 다음과 같다.

전하 분포를 고려하는 연구에서는 이온과 용매 분자 간의 정전기적 상호작용을 보다 현실적으로 반영하기 위해 Ewald summation 기법을 적용했다. 이는 장거리 정전기적 상호작용을 정밀하게 모델링하여, 이온-이온 및 이온-용매 간의 동역학적 변화를 보다 정확히 분석할 수 있도록 한다.

분극 효과를 반영한 연구에서는 분극 가능한(polarizable) 힘장 모델을 도입하여, 이온의 전하 분포가 전기장 변화에 따라 조정되는 특성을 반영했다. 이를 통해 높은 이온 농도에서의 표면장력 증가 경향을

설명할 수 있으며, 특히 이온성 액체(IL)와 물의 혼합계에서 계면 구조와 표면장력 변화가 IL의 물리적 특성과 어떻게 연결되는지를 분석하는 데 중요한 역할을 했다.

힘장 모델로는 Jorgensen et al.의 OPLS(Optimized Potentials for Liquid Simulations) 힘장이 주로 적용되었으며, Lennard-Jones 퍼텐셜, 결합 변형(bond stretching), 각도 변형(angle bending), 이면각 회전(dihedral rotation), 그리고 쿨롱(Coulomb) 상호작용을 포함하여 IL과 용매 간의 정밀한 상호작용을 모델링했다.

또한, Restricted Primitive Model(RPM)과 Gibbs Ensemble Monte Carlo(GEMC) 기법을 활용하여 단순 유체와 이온성 유체의 상거동을 예측하고, 이온 농도 변화에 따른 상평형을 분석했다. 특히 GEMC 기법은 실험적으로 측정하기 어려운 고농도 이온 용액에서의 증기-액체 평형을 예측하는 데 유용한 방법으로 활용되었다.

이와 같은 다양한 방법론 이외에도 추가 문헌 조사를 통해 더 많은 접근법을 알아볼 수 있으며, 타겟 이온성 용액 시스템의 특성에 맞게 적절히 조합하면, 보다 정확도 높은 결과를 얻을 수 있다.

이온성 용액 VLE 모델링을 위한 상용 시뮬레이션 소프트웨어들

이온성 용액의 증기-액체 평형(VLE) 모델링을 위해 Monte Carlo(MC) 및 Molecular Dynamics(MD) 시뮬레이션 기법을 지원하는 여러 상용 및 오픈소스 프로그램이 널리 사용된다. 이러한 프로그램들은 각각의 특성에 따라 특정 연구 분야에 적합하며, 힘장(force field) 최적화, 전하 분포 조정, 장거리 정전기적 상호작용 계산 등의 기능을 제공한다.

GROMACS는 MD 시뮬레이션을 수행하는 대표적인 오픈소스 소프트웨어로, 강력한 병렬 연산 기능과 효율적인 계산 속도로 인해 이온성 액체(IL) 및 전해질 용액의 거동을 분석하는 데 널리 사용된다. OPLS, CHARMM, AMBER 등 다양한 힘장을 적용할 수 있으며, 특히 이온성 용액의 계면 구조 분석과 동역학적 특성을 연구하는 데 유용하다 [8].

LAMMPS는 또 다른 MD 시뮬레이션 프로그램으로, 특히 큰 시스템이나 비정형적인 분자 구조를 다루는 연구에서 강점을 보인다. Ewald summation 및 PME(Particle Mesh Ewald) 기법을 통해 장거리 정전기적 상호작용을 정밀하게 계산할 수 있어, 이온성 용액의 복잡한 전하 분포와 계면 거동을 모델링하는 데 적합하다 [9].

DL_POLY는 고성능 병렬 계산이 가능한 MD 시뮬레이션 패키지로, 다양한 퍼텐셜 모델을 지원하며, 대규모 이온성 용액 및 혼합계 연구에 자주 활용된다. 특히 분극 가능한(polarizable) 힘장을 적용하여 이온-용매 상호작용을 보다 정밀하게 분석할 수 있다 [10].

Monte Carlo 시뮬레이션에서는 Towhee와 MCCCSTowhee가 대표적인 오픈소스 패키지로, Gibbs Ensemble Monte Carlo(GEMC) 및 Grand Canonical Monte Carlo(GCMC) 기법을 활용하여 VLE 데이터를 계산하는 데 사용된다. 이들은 이온성 용액에서의 상평형을 직접 분석할 수 있으며, 실험 데이터와 비교하여 힘장 매개변수를 보정하는 데 유용하다 [11].

또한, Materials Studio 는 상용 소프트웨어로서, MD 및 MC 시뮬레이션을 포함한 다양한 화학적 계산 도구를 제공하며, 특히 COMPASS 및 Dreiding 과 같은 정밀한 힘장을 적용할 수 있어, 이온성 액체 및 복합 용액의 상거동을 분석하는 데 많이 활용된다 [12].

이러한 시뮬레이션 프로그램들은 각기 다른 강점을 가지고 있으며, 연구 목적과 시스템의 특성에 따라 적절한 방법을 선택하여 적용하면, 보다 신뢰성 높은 VLE 예측이 가능하다.

상기 방법론들의 Deep Eutectic Solvent 로의 적용 가능성 검토

Deep Eutectic Solvent(DES)의 Molecular 시뮬레이션을 위한 정밀한 모델링이 여러 연구에서 수행되었으며, 주로 분자동력학(MD) 기법을 활용하여 DES 의 물리화학적 특성을 분석하는 데 집중되었다. 기존 연구들은 VLE 자체를 직접 다룬 사례는 부족하지만, DES 의 증기-액체 특성을 예측하기 위해 MD 시뮬레이션을 성공적으로 적용한 사례들이 존재한다. 이를 바탕으로 적절한 모델링과 세팅을 적용하면 VLE 시뮬레이션도 충분히 가능할 것으로 보인다.

여러 연구에서는 MD 방법론을 통해 DES 의 상거동을 정밀하게 재현하기 위해 힘장(force field) 모델링, 전하 분포(charge distribution) 고려, 그리고 수소 결합 네트워크 분석을 수행하였다. 일반적으로 OPLS(Optimized Potentials for Liquid Simulations) 및 GAFF(Generalized AMBER Force Field)와 같은 힘장이 적용되었으며, 이를 통해 DES 내 개별 분자 간의 상호작용을 정밀하게 반영하였다[13,14]. 또한, Ewald summation 기법을 활용하여 장거리 정전기적 상호작용(long-range electrostatic interactions)을 보다 정확하게 고려하였으며, 이를 통해 이온성 상호작용을 보다 현실적으로 모델링하는 데 성공하였다[15].

특히, DES 의 용해도 및 증기화 엔탈피를 분석하기 위한 MD 연구에서는 Hildebrand 및 Hansen 용해도 파라미터를 계산하고, 이를 실험 데이터와 비교하는 방식으로 모델 검증이 수행되었다[16]. 이는 VLE 모델링을 위해 필요한 퍼텐셜 매개변수를 최적화하는 데 중요한 기초 데이터를 제공한다. 또한, 과잉 깁스 자유에너지(Excess Gibbs Free Energy) 및 열역학적 적분(Thermodynamic Integration)을 적용하여 증기압 및 증기상 조성을 예측하는 연구도 진행되었으며, 이는 실험적 데이터가 부족한 DES 시스템에서도 신뢰할 수 있는 예측을 가능하게 한다[17].

따라서, DES 의 VLE 를 시뮬레이션하기 위해서는 기존 연구에서 사용된 MD 모델링 기법을 활용하여 힘장 최적화, 전하 분포 조정, 수소 결합 네트워크 분석, 그리고 열역학적 적분을 통한 증기압 계산을 포함한 접근 방식이 필요하다. 비록 VLE 를 직접 분석한 MD 연구는 많지 않지만, 증기-액체 특성과 관련된 다양한 물성을 성공적으로 모델링한 사례들이 존재하며, 이러한 기법들을 적절히 조합하여 적용한다면 DES 의 VLE 를 정밀하게 예측할 수 있을 것으로 기대된다.

결론

이온성 용액의 증기-액체 평형(VLE) 시뮬레이션에는 주로 Monte Carlo(MC) 및 Molecular Dynamics(MD) 방법이 사용되며, 각 방법은 이온성 용액의 비이상성 특성과 복잡한 상호작용을 정밀하게 모델링하는 데 중요한 역할을 한다. 전하 분포, 분극 효과, 힘장 최적화 등의 요소를 적절히 고려하면, 실험적으로

관찰되는 상거동을 효과적으로 재현할 수 있다. 특히, Gibbs Ensemble Monte Carlo(GEMC) 기법을 활용하면 상공존 관계를 직접 계산할 수 있으며, MD 시뮬레이션을 통해 이온과 용매 분자 간의 동역학적 거동을 분석할 수 있다.

이러한 방법론은 일반적인 이온성 액체뿐만 아니라, Deep Eutectic Solvent(DES)와 같은 특수한 이온성 용액에도 적용될 수 있다. DES 역시 넓은 범주에서 이온성 용액의 한 종류로 간주될 수 있으며, CO₂ 가스와 같은 다양한 용질과의 VLE 관계를 연구하는 데 있어 적절한 MC 및 MD 모델링 기법을 활용하면, 용매의 특성을 반영한 신뢰성 높은 예측이 가능할 것으로 기대된다. 또한, 다양한 힘장(force field) 및 퍼텐셜 모델을 최적화하여 적용하면, 이온성 용액의 특성을 보다 정밀하게 반영할 수 있으며, 실험 데이터와의 비교를 통해 모델의 신뢰도를 향상시킬 수 있다.

결론적으로, 이온성 용액의 VLE 시뮬레이션은 정밀한 모델링 기법과 적절한 방법론 선택에 따라 높은 정확도를 달성할 수 있으며, 이를 활용하면 새로운 용매 시스템의 설계 및 응용 가능성을 탐색하는 데 중요한 도구로 작용할 것이다.

참고문헌

- [1] Panda, D. K., & Bhargava, B. L. (2022). Molecular dynamics investigation of non-ionic deep eutectic solvents. *Journal of Molecular Graphics and Modelling, 113*, 108152. <https://doi.org/10.1016/j.jmngm.2022.108152>
- [2] H. J. Strauch, P. T. Cummings, "Computer simulation of vapor-liquid equilibrium in mixed solvent electrolyte solutions," *Fluid Phase Equilib.*, 83, 213-222 (1993). [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(93\)87024-U](https://doi.org/10.1016/0378-3812(93)87024-U)
- [3] J. Picálek, B. Minofar, J. Kolafa, P. Jungwirth, "Aqueous solutions of ionic liquids: study of the solution/vapor interface using molecular dynamics simulations," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, [DOI unavailable].
- [4] G. Zhou, K. Jiang, Y. Zhang, Z. Wang, X. Liu, "Insight into the properties and structures of vapor-liquid interface for imidazolium-based ionic liquids by molecular dynamics simulations," *J. Mol. Liq.*, **326**, 115295 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.115295>.
- [5] A. Z. Panagiotopoulos, "Molecular simulation of phase equilibria: simple, ionic and polymeric fluids," *Fluid Phase Equilib.*, 76, 97-112 (1992). [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(92\)85080-R](https://doi.org/10.1016/0378-3812(92)85080-R).
- [6] S. Paul, A. Chandra, "Liquid-Vapor Interfaces of Simple Electrolyte Solutions: Molecular Dynamics Results for Ions in Stockmayer Fluids," *J. Phys. Chem. B*, 107(46), (2003).
- [7] Y. Shim, M. Y. Choi, H. J. Kim, "A molecular dynamics computer simulation study of room-temperature ionic liquids. I. Equilibrium solvation structure and free energetics," *J. Chem. Phys.*, 122, 044510 (2005). [<https://doi.org/10.1063/1.1819317>]
- [8] Abraham, M. J., Murtola, T., Schulz, R., Páll, S., Smith, J. C., Hess, B., & Lindahl, E. (2015). GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. *SoftwareX*, 1–2, 19-25. <https://doi.org/10.1016/j.softx.2015.06.001>
- [9] Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R., Bolintineanu, D. S., Brown, W. M., Crozier, P. S., in 't Veld, P. J., Kohlmeyer, A., Moore, S. G., Nguyen, T. D., Shan, R., Stevens, M. J., Tranchida, J., Trott, C., & Plimpton, S. J. (2022). LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*, 271, 108171. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
- [10] London, N., Limbu, D. K., Momeni, M. R., & Shakib, F. A. (2024). DL_POLY Quantum v2.0: A modular general-purpose software for advanced path integral simulations. *Theoretical and Computational Chemistry*. (Preprint)

- [11] Martin, M. G. (2013). MCCCSTowhee: A tool for Monte Carlo molecular simulation. *Molecular Simulation*, 39(14-15), 1212-1222. <https://doi.org/10.1080/08927022.2013.828208>
- [12] Accelrys Inc. (2011). *Materials Studio 6.0 User Guide*. Accelrys Software Inc., San Diego, CA.
- [13] D. K. Panda, B. L. Bhargava, "Molecular dynamics investigation of non-ionic deep eutectic solvents," *J. Mol. Graph. Model.*, 113, 108152 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2022.108152>
- [14] H. S. Salehi, M. Ramdin, O. A. Moulton, T. J. H. Vlugt, "Computing solubility parameters of deep eutectic solvents from Molecular Dynamics simulations," *Fluid Phase Equilib.*, 494, 112720 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2019.05.022>
- [15] H. S. Salehi, H. M. Polat, F. de Meyer, C. Houriez, C. Coquelet, T. J. H. Vlugt, O. A. Moulton, "Vapor pressures and vapor phase compositions of choline chloride urea and choline chloride ethylene glycol deep eutectic solvents from molecular simulation," *J. Chem. Phys.*, 155, 114504 (2021). <https://doi.org/10.1063/5.0062408>
- [16] Y. Shen, R. Abedin, F. R. Hung, "On the Performance of Confined Deep Eutectic Solvents and Ionic Liquids for Separations of Carbon Dioxide from Methane: Molecular Dynamics Simulations," *J. Phys. Chem. B*, 123(30), 6706-6715 (2019). <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b04205>
- [17] A. Z. Panagiotopoulos, "Molecular Simulation of Phase Equilibria: Simple, Ionic, and Polymeric Fluids," *J. Phys. Chem.*, 99(4), 12385-12389 (1995). <https://doi.org/10.1021/j100032a035>