

整数规划在数学建模竞赛中的应用初探*

胡 明

(江苏科技大学数理学院, 江苏镇江 212003)

摘 要 介绍了整数规划的基本概念、基本知识和基本模型,以探讨整数规划在2005高教社杯全国大学生数学建模竞赛中的应用为例,使学生初步了解并掌握在数学建模竞赛中怎样利用整数规划的思想、方法建立数学模型.

关键词 整数规划;0-1整数规划;数学建模竞赛

[中图分类号] G640

[文献标识码] A

数学建模竞赛是由美国工业与应用数学学会在1985年发起的一项大学生竞赛活动,目的是促进数学建模的教学,培养学生应用数学的能力.我国在1992年起开展这项竞赛,现已形成一项全国性的竞赛活动,也是参赛学校最多的一种科技竞赛.2008年全国共有1022所高等院校计12284支队伍3万8千多人参加比赛.每年参加数学建模竞赛的学生中相当一部分是大学二、三年级的同学,他们刚刚修完高等数学、线性代数和概率论与数理统计等课程,对参加数学建模竞赛所需具备的其它数学知识以及数学建模的方法没有更多的了解,怎样使这部分学生能更好地参加数学建模竞赛,成为许多指导教师经常讨论的问题.据不完全统计,在以往的数学建模竞赛题中,大概有80%的问题属于优化问题,属于运筹学的研究范畴,而其中相当一部分又是属于整数规划问题,因此尽快掌握运筹学的基本理论,特别是整数规划的基本知识,学会用整数规划的思想、方法建立数学模型显得尤为迫切.下面通过介绍整数规划的基本知识,基本线性模型,利用整数规划的思想、方法建立数学模型.

1 基本知识

定义 1.1^[1] 一般的,整数规划的数学模型是

$$\max(\text{或 min})f = \sum_{j=1}^n c_j x_j \quad (1.1)$$

$$\text{s. t. } \begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = b_i (i=1, 2, \dots, m); \\ x_j \geq 0, (j=1, 2, \dots, n) \text{ 且部分或全部为整数;} \end{cases} \quad (1.2)$$

$$(1.3)$$

其中 f 称为目标函数,目标函数下的一组等式(1.2)或不等式(1.3)称为约束条件, $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 称为决策变量向量, $b = (b_1, b_2, \dots, b_m)^T$ 称为资源向量, $c = (c_1, c_2, \dots, c_n)^T$ 称为价值向量.

依照决策变量取整数要求的不同,整数规划可分为纯整数规划、全整数规划、混合整数规划和0-1整数规划等.

定义 1.2^[1] 所有决策变量要求取非负整数(这时引进的松弛变量和剩余变量可以不要求取整数)的整数规划问题称为纯整数规划;

定义 1.3^[1] 除了要求所有决策变量取非负整数外,而且系数 a_{ij} 和常数项 b_i 也都要求是整数(这时引进的松弛变量和剩余变量也必须是整数)的整数规划问题称为全整数规划;

定义 1.4^[1] 只有一部分的决策变量要求取非负整数,另一部分可以取非负实数的整数规划问题称为混合整数规划;

定义 1.5^[1] 所有决策变量只能取0或1两个数的整数规划问题称为0-1整数规划;

一般整数规划问题可以采用分支定界法、割平面法、匈牙利法等常用的方法求解.在数学建模竞赛中通常用相应的数学软件求解,如Maple, Lindo, Matlab等.因此,如何从实际问题中构造出模型来是最关键的.在实际应用中,可以把基本整数规划问题的模型所讨论的问题的共同点与实际问题的具体特点相结合,构建实际问题的模型.下面介绍几种常见的模型.

2 基本线性规划模型

2.1 合理下料问题^[2]

设有某种型号的圆钢下零件 A_1, A_2, \dots, A_m 的毛坯,在一根圆钢上,下料的不同方式有 B_1, B_2, \dots, B_n 种,每种下料方式可以得到各种零件的毛坯数以及每种零件的需要量如表2.1所示.问应怎样安排下料方式,使得既满足需要,又使所用的原材料最少?

* [作者简介] 胡 明(1978-),男,江苏科技大学数理学院讲师,硕士;研究方向:优化理论与算法.

表 2.1 每种下料方式可以得到各种零件的毛坯数以及每种零件的需要量

零件 个数 零件	方式	B_1, B_2, \dots, B_n	零件需求量
A_1		$a_{11} \quad a_{12} \quad \dots \quad a_{1n}$	b_1
A_2		$a_{21} \quad a_{22} \quad \dots \quad a_{2n}$	b_2
\dots		$\dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots$	\dots
A_m		$a_{m1} \quad a_{m2} \quad \dots \quad a_{mn}$	b_m

模型建立: 设 x_j 表示用 $B_j (j=1, 2, \dots, n)$ 种方式下料的圆钢的根数, 则这一问题的数学模型为: 求 $x_j (j=1, 2, \dots, n)$, 使得

$$\min f = \sum_{j=1}^n x_j \quad (2.1)$$

$$s. t. \begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \geq b_i (i=1, 2, \dots, m); \\ x_j \geq 0, (j=1, 2, \dots, n) \text{ 且全部为整数}; \end{cases} \quad (2.2)$$

$$(2.3)$$

有许多实际应用问题的数学模型都具有 (2.1) - (2.3) 的形式, 如最小成本运输问题等, 具有很强的代表性.

2.2 旅行售货员问题^[3] (又称货郎担问题)

设有一推销员, 从城市 v_0 出发, 要遍访城市 v_1, v_2, \dots, v_n 各一次, 最后返回 v_0 . 已知从 v_i 到 v_j 的旅费为 c_{ij} , 问他应按怎样的次序访问这些城市, 使得总旅费最少? (设 $c_{ij} = M, M$ 为充分大的整数, $i=0, 1, \dots, n$)

模型建立: 对每一对城市 v_i, v_j , 我们指定一个变量 x_{ij} , 令

$$x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{如果推销员决定从 } v_i \text{ 直接进入 } v_j, \\ 0, & \text{其他情况,} \end{cases}$$

该问题的数学模型为:

$$\min f = \sum_{i,j=0}^n c_{ij} x_{ij} \quad (2.4)$$

$$s. t. \begin{cases} \sum_{j=1}^n x_{ij} = 1, j=0, 1, \dots, n \\ \sum_{j=0}^n x_{ij} = 1, i=0, 1, \dots, n \\ u_i - u_j + n x_{ij} \leq n - 1, 1 \leq i \neq j \leq n \\ x_{ij} = 0 \text{ 或 } 1, i=1, 2, \dots, n \\ u_i \text{ 为实数}, i=1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (2.5)$$

$$(2.6)$$

$$(2.7)$$

$$(2.8)$$

$$(2.9)$$

许多实际问题的数学模型都可转化为 (2.4) - (2.9) 的形式, 如生产顺序表问题、集成电路的布线问题等, 具有很强的代表性.

2.3 选址问题^[4]

某公司拟在市东、西、南三区建立门市部. 拟议中有 7 个位置 (点) $A_i (i=1, 2, \dots, 7)$ 可供选择. 规定:

在东区, 由 A_1, A_2, A_3 三个点中至多选两个;

在西区, 由 A_4, A_5 两个点中至少选一个;

在南区, 由 A_6, A_7 两个点中至少选一个.

如选用 A_i 点, 设备投资估计为 b_i 元, 每年可获利润估计为 c_i 元, 但投资总额不能超过 B 元. 问应选择哪几个点可使年利润为最大?

模型建立: 引入 0-1 变量 $x_i (i=1, 2, \dots, 7)$, 令

$$x_j = \begin{cases} 1, & \text{当 } A_i \text{ 点被选用,} \\ 0, & \text{当 } A_i \text{ 点不被选用,} \end{cases} \quad i=1, 2, \dots, 7$$

于是, 问题的数学模型为:

$$\min f = \sum_{i=1}^7 c_i x_i \quad (2.10)$$

$$s. t. \begin{cases} \sum_{i=1}^7 b_i x_i \leq B \\ x_1 + x_2 + x_3 \leq 2 \\ x_4 + x_5 \geq 1 \\ x_6 + x_7 \geq 1 \\ x_i = 0 \text{ 或 } 1 \end{cases} \quad (2.11)$$

$$(2.12)$$

$$(2.13)$$

$$(2.14)$$

$$(2.15)$$

许多实际问题的数学模型都可转化为(2.10) – (2.15)的形式,如钢管的订购和运输问题等,具有很强的代表性. 这些基本模型的共同点是:

- (1)有可以选择的某一方案,它们可用一组整数变量 $x_i (i=1,2,\dots,n)$ 表示;
- (2)变量 $x_i (i=1,2,\dots,n)$ 满足一定的约束条件;
- (3)有一个决策目标.

在数学建模比赛中,假如遇到的问题是与上述特点相符合,可以利用建立以上基本整数规划模型的思想、方法结合所面对的问题的具体特点建立数学模型. 下面考虑讨论建立 2005 年高教社杯全国大学生数学建模竞赛 B 题问题(2)的模型.

3 DVD 租赁优化问题^[5]

考虑如下的在线 DVD 租赁问题. 顾客缴纳一定数量的月费成为会员,订购 DVD 租赁服务. 会员对哪些 DVD 有兴趣,只要在网站提交订单,网站就会通过快递的方式尽可能满足要求. 会员提交的订单包括多张 DVD,这些 DVD 是基于其偏爱程度排序的. 网站会根据手头现有的 DVD 数量和会员的订单进行分发. 每个会员每个月租赁次数不得超过 2 次,每次获得 3 张 DVD. 会员看完 3 张 DVD 之后,只需要将 DVD 放进网站提供的信封里寄回(邮费由网站承担),就可以继续下次租赁.

表 2.2 中列出了网站手上 100 种 DVD 的现有张数和当前需要处理的 1000 位会员的在线订单(表 2.2 的数据格式示例如下表 2.2,具体数据请从 <http://mcm.edu.cn/mcm05/problems2005c.asp> 下载),如何对这些 DVD 进行分配,才能使会员获得最大的满意度?

表 2.2 现有 DVD 张数和当前需要处理的会员的在线订单(表格格式示例)

DVD 编号	D001	D002	D003	D004	...
DVD 现有数量	10	40	15	20	...
C0001	6	0	0	0	...
会员 C0002	0	0	0	0	...
在线 C0003	0	0	0	3	...
订单 C0004	0	0	0	0	...
...

注:D001 ~ D100 表示 100 种 DVD,C0001 ~ C1000 表示 1000 个会员,会员的在线订单用数字 1,2,... 表示,数字越小表示会员的偏爱程度越高,数字 0 表示对应的 DVD 当前不在会员的在线订单中.

3.1 模型假设^[6]

- (1)一个月为一个周期,考虑在一个周期内 DVD 的租赁情况;
- (2)一个周期结束,所租赁出的 DVD 全部归还网站,不影响下一个周期的租赁;
- (3)一个会员在一个周期内租赁到自己想看的 DVD 的时间不影响他的满意度;
- (4)会员只有在将第一次租赁的 3 张 DVD 还回网站之后,才能进行第二次租赁;
- (5)每个会员同一种 DVD 只租赁一次;
- (6)DVD 在租赁过程中无损坏.

3.2 模型建立及求解^[6]

设 $x_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{表示第 } i \text{ 个会员分到了第 } j \text{ 种 DVD} \\ 0, & \text{表示第 } i \text{ 个会员没有分到了第 } j \text{ 种 DVD} \end{cases}$, 则对会员的分配矩阵为:

$$X = \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \cdots & x_{1,100} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & \cdots & x_{2,100} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ x_{1000,1} & x_{1000,2} & \cdots & x_{1000,100} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \cdots \\ X_{1000} \end{bmatrix}$$

其中 X_i 为一行向量,表示对第 i 个会员的 DVD 分配情况.

设 a_{ij} 表示第 i 个会员对第 j 张 DVD 的偏爱度,由于 a_{ij} 的值越大,表示偏爱程度越小,同时会员得到该 DVD 的满意度越小,因而我们定义第 i 个会员对分配到第 j 张 DVD 的满意度为 b_{ij} ,则

$$b_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{a_{ij}}, & a_{ij} \neq 0, \\ 0, & a_{ij} = 0, \end{cases}$$

因而会员的满意度矩阵为

$$B = \begin{bmatrix} b_{1,1} & b_{1,2} & \cdots & b_{1,100} \\ b_{2,1} & b_{2,2} & \cdots & b_{2,100} \\ \cdots & \cdots & \ddots & \cdots \\ b_{1000,1} & b_{1000,2} & \cdots & b_{1000,100} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ \cdots \\ B_{1000} \end{bmatrix}$$

其中 B_i 为一行向量,表示第 i 个会员对分配到各类 DVD 的满意度. 因而,第 i 个会员对该分配方案的满意度为: $X_i \cdot B_i^T = \sum_{j=1}^{100} x_{ij} \cdot b_{ij}$. 当第 i 个会员得到其偏爱度为 1、2、3 的 3 张 DVD 时,他是最满意的,其满意度为 $1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} = \frac{11}{6}$,由此可以得到第 i 个会员的标准化满意度为:

$$\frac{X_i \cdot B_i^T}{\frac{11}{6}} = \frac{\sum_{j=1}^{100} x_{ij} \cdot b_{ij}}{\frac{11}{6}} = \frac{11}{6} \sum_{j=1}^{100} x_{ij} \cdot b_{ij}, i = 1, 2, \dots, 1000.$$

为了会员获得最大的满意度,可以使他们的满意度和达到最大,由此得到目标函数为:

$$\max f = \frac{6}{11 \times 1000} \sum_{i=1}^{1000} \sum_{j=1}^{100} x_{ij} \cdot b_{ij}.$$

在分配的过程中,每种 DVD 分配给会员的总数不超过网站准备的总数,即: $\sum_{i=1}^{1000} x_{ij} \leq n_j, j = 1, 2, \dots, 100$. 在一次分配中,每个会员获得 3 张 DVD;如果不够 3 张就视为分给该会员 0 张 DVD,即: $0 \leq \sum_{i=1}^{1000} x_{ij} \leq 3, i = 1, 2, \dots, 1000$.

综合以上分析,可以得到该问题的数学模型为

$$\begin{aligned} \max f &= \frac{6}{11 \times 1000} \sum_{i=1}^{1000} \sum_{j=1}^{100} x_{ij} \cdot b_{ij} \\ \text{s. t. } &\begin{cases} \sum_{i=1}^{1000} x_{ij} \leq n_j, j = 1, 2, \dots, 100 \\ 0 \leq \sum_{i=1}^{1000} x_{ij} \leq 3, i = 1, 2, \dots, 1000 \\ x_{ij} = 0 \text{ 或 } 1, i = 1, 2, \dots, 1000, j = 1, 2, \dots, 100. \end{cases} \end{aligned}$$

根据上述数学模型,使用 Lingo 软件进行求解,结果如下:目标函数的最大值为 $f^* = 89.13\%$;没有得到 DVD 的人数为 0;得到 1 张 DVD 的人数为 6;得到 2 张 DVD 的人数为 54;得到 3 张 DVD 的人数为 940;比率分别为 0%, 0.6%, 5.4%, 94%.

4 结束语

对于在数学建模竞赛中遇到的能用整数规划模型描述的问题,一方面,要考虑利用现有基本整数规划模型的思想、方法结合所讨论问题的具体特点建立数学模型,在此基础上进一步要考虑建立符合具体问题特性的具有创新特色的模型;另一方面,在模型建立的同时要兼顾到模型的求解能否实现. 因此,在竞赛前应加强对基本模型的理解,提高利用基本模型的思想、方法对实际问题建立数学模型的能力以及利用相关数学软件求解模型的能力.

参 考 文 献

- 1 邓成梁. 运筹学的原理和方法[M]. 武汉:华中科技大学,2001,(7):249~250.
- 2 傅家良. 运筹学方法与模型[M]. 上海:复旦大学出版社,2007,(2):136.
- 3 刁在筠,郑汉鼎,刘家壮,刘桂真. 运筹学[M]. 北京:高等教育出版社,1996,(4):77~78.
- 4 钱颂迪等. 运筹学(第三版)[M]. 北京:清华大学出版社,2005,(6):122.
- 5 2005 高教社杯全国大学生数学建模竞赛 B 题. 2005 年全国大学生数学建模竞赛,2005.
- 6 王颖,高德宏,施恒. DVD 租赁优化方案[J]. 工程数学学报,2005,22,(7):76~84.

Preliminary Probe into the Application of Integer Programming in Mathematical Contest in Modeling

HU Ming

(School of Mathematics and Physics, Jiangsu University of Science and Technology, Zhenjiang, Jiangsu, 212003, China)

Abstract The basic concepts, knowledge and model of integer programming are introduced in the article. With the mathematical contest in modeling in 2005 as an example, it is expected with this article the students may have a primarily understanding of making use of the ideas and methods of Integer Programming to build a mathematical model in Mathematical Contest in Modeling.

Key words integer programming, 0-1 integer programming, mathematical contest in modeling

(责任编辑 印亚静)

离子液体 1-丁基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐的合成及表征*

司 南 季 益 刚 姜 大 炜

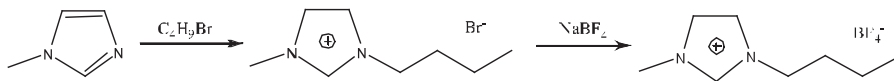
(江苏教育学院化学系, 江苏南京 210013)

摘 要 以 N-甲基咪唑和溴代正丁烷为原料合成了中间体 1-丁基-3-甲基咪唑硼酸盐, 讨论了反应温度、反应时间和原料摩尔比对产物收率影响, 得到最佳的条件是: 溴代正丁烷与 N-甲基咪唑以 1.1:1 (摩尔比) 的比例, 在 70℃ 下反应 24h. 中间体经过阴离子交换, 得到标题化合物 1-丁基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐. 产物的结构经 IR 和 ¹H-NMR 确定.

关键词 离子液体; 1-丁基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐; 合成
[中图分类号] TQ128+.54 [文献标识码] A

自从 1992 年 Wiles 领导的研究小组合成了低熔点、抗水解、稳定性强的 1-乙基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐离子液体 ([EMIM]BF₄) 以来^[1], 离子液体受到世界各国研究工作者的关注. 与传统的有机溶剂和电解质相比, 离子液体具有以下优点^[2,3]: 较低的蒸汽压, 不易挥发; 较高的热力学和化学稳定性; 可溶解多种极性、非极性的有机物、无机物, 易与其他物质分离, 可以循环利用; 离子有较高的电导率和较宽的电化学窗口等. 离子液体已经广泛用于分离过程^[4]、电化学^[5]、多种化学反应^[2]以及微/纳米材料、介孔材料的合成中^[6].

田丹碧等^[7] 先前研究了微波法合成 1-丁基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐 ([BMIM]BF₄), 虽然微波法反应时间短、不需要有机溶剂, 但是产率不高, 反应很难控制 (没有搅拌装置和温控控制, 导致局部过热引起物质分解). 本文用溴代正丁烷合成了 1-丁基-3-甲基咪唑溴盐 ([BMIM]Br), 考察了原料摩尔比、反应时间和反应温度对反应产率的影响, 然后在丙酮溶剂中与四氟硼酸钠进行阴离子交换制备目标产物 [BMIM]BF₄, 反应式如下:



1 实验部分

1.1 试剂与仪器

试剂: N-甲基咪唑 (工业级, 用前重蒸); 溴代正丁烷 (CP); 甲苯 (AR); 乙酸乙酯 (AR); 二氯甲烷 (AR)

主要仪器: 真空干燥箱 (DZF-6020); 核磁共振仪 (Bruker EMX-10/12); 红外光谱仪 (Nicolet Nexus 470, KBr 压片)

1.2 合成步骤

1.2.1 1-丁基-3-甲基咪唑溴盐 ([BMIM]Br) 的制备

在装有搅拌器、回流冷凝管、温度计和氮气管的 250mL 四口烧瓶中加入 N-甲基咪唑和溴代正丁烷, 120mL 甲苯作为溶剂, 通氮气保护, 加热搅拌反应. 反应结束后冷却至室温, 下层为黄色粘稠液体 [BMIM]Br 粗品, 弃去上层溶液, 用 20mL 乙酸乙酯洗涤 3 次除去未反应完的溴代正丁烷, 旋转蒸发除去乙酸乙酯, 在 60℃ 下真空干燥 24h, 得到纯品.

1.2.2 1-丁基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐 ([BMIM]BF₄) 的制备

将 0.1mol [BMIM]Br 与 0.1mol NaBF₄ 放入单口烧瓶中, 以丙酮为溶剂进行阴离子交换. 室温下, 磁力搅拌 24h. 真空抽滤反应液, 减压蒸出滤液中的丙酮, 然后加入二氯甲烷, 抽滤, 析出白色固体, 滤液再减压蒸出二氯甲烷, 将产物在 60℃ 下真空干燥 24h, 得到淡黄色粘稠液体, 收率 95.3%.

2 结果与讨论

2.1 反应条件对 [BMIM]Br 的影响

2.1.1 反应温度

固定反应时间为 24h 和原料摩尔比为 1:1, 反应温度为 30, 50, 70, 90, 110℃ 时, [BMIM]Br 收率分别为 25.2%, 73.4%, 91.4%, 88.6%, 84.3%. 由图 1 可知, 该反应在室温下可以进行, 但是收率较低, 随着反应温度的增加, [BMIM]Br 收率有着明显提

* [作者简介] 司 南 (1982-), 男, 江苏教育学院化学系教师, 硕士研究生.

高,先增后减.在反应温度 70℃时收率最大.

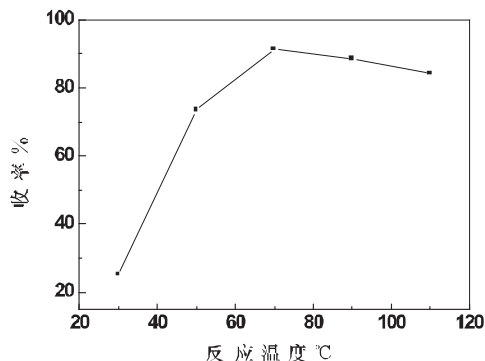


图 1 温度对 [BMIM]Br 收率的影响

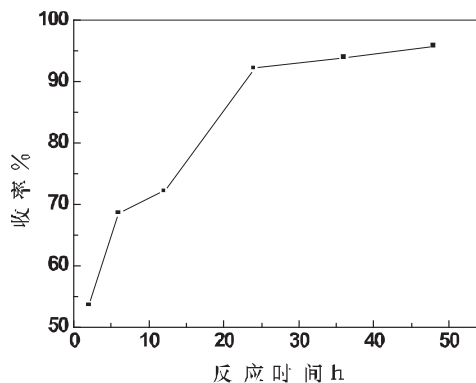


图 2 反应时间对 [BMIM]Br 收率的影响

2.1.2 反应时间

固定反应温度为 70℃ 和原料摩尔比为 1:1, 反应时间为 2, 6, 12, 24, 36, 48h 时, [BMIM]Br 收率分别为 53.5%, 68.6%, 72.1%, 92.2%, 94.0%, 95.8%. 由图 2 可知, 随着反应时间的增加, [BMIM]Br 的收率不断增加, 在 24h 以后增幅不大. 从节能角度看, 反应时间在 24h 较为合适.

2.1.3 原料摩尔比

固定反应温度为 70℃ 和反应时间为 24h, 原料摩尔比 (N-甲基咪唑: 溴代正丁烷) 为 1.2:1, 1.1:1, 1:1, 1:1.1, 1:1.2, [BMIM]Br 收率分别为 84.6%, 88.2%, 91.8%, 94.7%, 90.1%. 由图 3 可知, 原料摩尔比对收率的影响不大. 从机理上讲, 如果溴代正丁烷过少, 自由基存在相对较少, 收率自然不高; 如果溴代正丁烷明显过量, 则可能迅速生成大量极性的 [BMIM]Br, 从而抑制反应, 降低收率. 所以溴代正丁烷略微过量点, 其摩尔数是 N-甲基咪唑的 1.1 倍, 一方面可以促进反应的进行, 另一方面过量的溴代烷烃便于后期的处理.

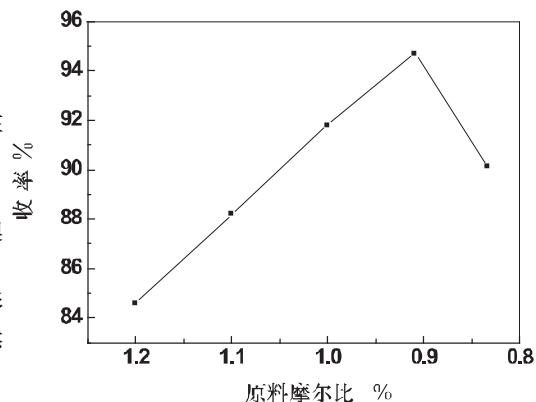


图 3 原料摩尔比对 [BMIM]Br 收率的影响

2.2 产物结构确认

2.2.1 红外光谱分析 (IR)

通过红外光谱图能够揭示合成物质的分子结构特征. 从图 4 可以观察到 C-H 的伸缩振动吸收谱带, 其中 3142cm^{-1} 、 3077cm^{-1} (左图) 和 3161cm^{-1} 、 3121cm^{-1} (右图) 是芳香 C-H 的伸缩振动引起的, 而 2960cm^{-1} 、 2873cm^{-1} (左图) 和 2941cm^{-1} 、 2876cm^{-1} (右图) 是饱和 C-H 的伸缩振动引起的. 其它主要吸收谱带: 1570cm^{-1} 、 1465cm^{-1} (左图) 和 1572cm^{-1} 、 1466cm^{-1} (右图) 是芳环骨架振动; 1466cm^{-1} 、 1382cm^{-1} (左图) 和 1465cm^{-1} 、 1385cm^{-1} (右图) 是 MeC-H 的变形振动; 1061cm^{-1} 为 BF_4 基团. 左图在 3450cm^{-1} 处有比较强的 O-H 的特征吸收峰, 说明 [BMIM]Br 还有水存在, 一方面可能是原料的水分没有除尽, 另一方面可能是吸收了空气中的水分.

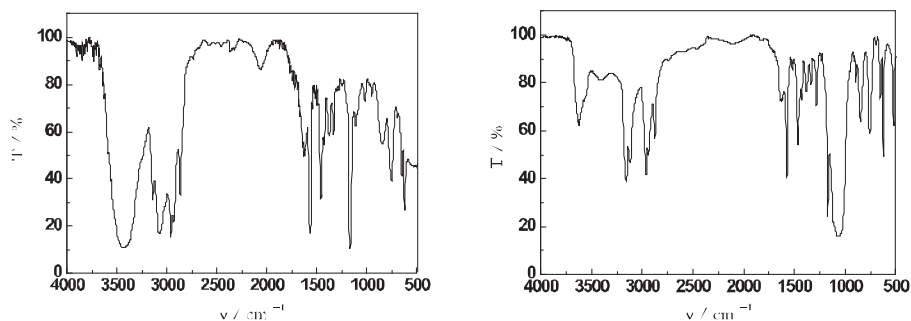


图 4 红外谱图 (左: [BMIM]Br; 右: [BMIM]BF₄)

2.2.2 核磁共振分析 (¹H-NMR)

以 D_2O 为溶剂分别对 [BMIM]Br 和 [BMIM]BF₄ 进行了核磁共振分析 (图 5 是两者的核磁共振谱图). [BMIM]Br 的质子化学位移如下所示: 9.30 (1H, NCHN); 7.84 (1H, NCHCHN); 7.77 (1H, NCHCHN); 4.20 (2H, $\text{NCH}_2(\text{CH}_2)_2\text{CH}_3$); 3.88 (3H, NCH_3);