

CO₂/离子液体体系热力学性质的分子动力学模拟

王伟彬, 银建中, 孙丽华, 冯恩民

大连理工大学化工学院, 辽宁 大连 116012|大连理工大学数学科学学院, 辽宁 大连 116024

摘要:

超临界CO₂和离子液体(ILs)是两种绿色溶剂. 离子液体可以溶解超临界CO₂, 而超临界CO₂不能溶解离子液体. 由此设计构成的CO₂/IL二元系统, 同时具备了超临界CO₂和离子液体的许多优点: 既可以降低离子液体的粘度, 还便于相分离, 是新型的耦合绿色溶剂. 其物理化学性质对于设计反应、分离等过程非常重要. 因此, 本文以CO₂/IL二元系统为研究对象, 通过选择合适的分子力场和系综, 运用分子动力学(MD)模拟方法研究了CO₂/[bmim][PF₆]、CO₂/[bmim][NO₃]等体系的热力学性质. 结果表明, CO₂对ILs膨胀度的影响非常小, 当CO₂摩尔分数为0.5时, ILs膨胀仅为15%. CO₂/ILs的扩散系数远小于CO₂膨胀甲醇、乙醇溶液的扩散系数. 随着CO₂含量的增加, ILs的扩散系数提高, 粘度显著下降, 表明CO₂能有效地改善ILs扩散性, 减小其粘度. 因此CO₂可用以改善离子液体溶剂体系的传递特性, 增强反应分离过程在其中的进行.

关键词: 离子液体 超临界二氧化碳 热力学平衡 输运性质 分子模拟

收稿日期 2009-04-17 修回日期 2009-07-01 网络版发布日期 2009-08-18

通讯作者: 银建中 Email: jzyin@dlut.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 李雪辉;张磊;王乐夫;唐应彪.N-羧基吡啶功能化离子液体的表征[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 430-435
2. 林棋;付海燕;薛芳;袁茂林;陈华;李贤均.新型离子液体介质中长链烯烃氢甲酰化反应[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 465-469
3. 翟翠萍;王键吉;轩小朋;汪汉卿.核磁方法研究离子液体与丙酮的相互作用[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 456-459
4. 武晓君;李群祥;黄静;杨金龙.单分子器件电子输运性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 995-1002
5. 潘旭;戴松元;王孔嘉;史成武;郭力.染料敏化纳米薄膜太阳能电池中离子液体基电解质的研究进展[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 697-702
6. 吴雄武;时钧.流体熵相关性性质的Monte Carlo模拟新方法[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 740-745
7. 张志恒;关伟;杨家振;谭志诚;孙立贤.室温离子液体EMIES的标准生成焓[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1469-1471
8. 佟静;张庆国;洪梅;杨家振.铝基离子液体BMIAICI₄的热力学性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 71-75
9. 李雪辉;张磊;李琼;耿卫国;叶玉嘉;王乐夫.1-正丁基-3-甲基咪唑溴化物离子液体TGA-FTIR研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1465-1468
10. 吴晓萍;刘志平;汪文川.分子模拟研究气体在室温离子液体中的溶解度[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1138-1142
11. 曹洁明;王军;房宝青;郑明波;陆红霞;常欣;王海燕.离子液体中不同形貌ZnO纳米材料的合成及表征[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 668-672
12. 耿卫国;李雪辉;王乐夫;段红丽;潘微平.多羧基咪唑离子液体的酸性表征[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 230-233
13. 刘士军;陈启元;舟桥重信.超临界二氧化碳中吡啶与钴(II)、镍(II)、锌(II)配合物反应动力学[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 893-897
14. 朴铃钰;韩扬;寇元.二苯醚烷基化反应中酸性离子液体的循环使用[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1083-1088
15. 蒲敏;陈标华;李会英;刘坤辉.DFT法研究离子液中EMIM⁺催化丁烯双键异构反应机理(II)[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 383-387
16. 刘洁翔;董梅;秦张峰;王建国.AIPO₄-5分子筛中二氯苯吸附的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 696-700

扩展功能

本文信息

PDF(656KB)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 离子液体

▶ 超临界二氧化碳

▶ 热力学平衡

▶ 输运性质

▶ 分子模拟

本文作者相关文章

▶ 王伟彬

▶ 银建中

▶ 孙丽华

▶ 冯恩民

17. 张晟卯;张春丽;张经纬;张治军;党鸿辛;吴志申;刘维民.室温离子液体中银纳米微粒的制备与结构表征[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 554-556
18. 邵俊;徐桦;陆文聪;陈念贻.高压 $\text{Na}_2\text{O-SiO}_2$ 系输运性质反常的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 237-239
19. 李巍;荣华;吴新民;陈中元.苏氨酸对甲苯磺酸盐及其酯化物的微波合成、表征及量化计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 868-872
20. 高丽霞;王丽娜;齐涛;李玉平;初景龙;曲景奎.离子液体 $\text{AlCl}_3/\text{Et}_3\text{NHCl}$ 中电沉积法制备金属铝[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 939-944
21. 张旭志;焦奎.单壁碳纳米管和室温离子液体胶修饰电极[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1439-1444
22. 蒲敏;刘坤辉;李会英;陈标华.DFT法研究离子液中 EMIM^+ 催化丁烯双键异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 826-830
23. 庄文昌;陈晓;杨春杰;王庐岩;柴永存.小角X射线散射表征AOT/水层状溶致液晶的有序性[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1055-1058
24. 杨兵;张海全;许海;郑岩;于景生;马於光;沈家骢.间位聚苯及其衍生物的构象与电子结构的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1476-1480
25. 吴晓萍;刘志平.室温离子液体 $[\text{bmim}][\text{BF}_4]$ 和水混合物的计算机模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1036-1041
26. 王勇;李浩然;吴韬;王从敏;韩世钧.烷基咪唑型卤盐类离子液体的合成机理研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 517-522
27. 郭向丹;黄世萍;滕加伟;谢在库.水在 $\text{Na}_n\text{ZSM-5}$ 型分子筛中吸附的研究: 分子模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 270-274
28. 王晓化;陶国宏;吴晓牧;寇元.离子液体酸性的红外光谱探针法研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 528-533
29. 王丽娟 刘够生 宋兴福 于建国.十二烷基吗啉选择性吸附氯化钠的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 963-969
30. 翟翠萍, 刘学军, 赵扬, 王键吉.用核磁共振技术研究 $[\text{C}_4\text{mim}][\text{BF}_4]$ 在重水和氘代氯仿中的聚集行为[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1185-1189
31. 施介华, 肖科科, 吕园园. α -氯丙酸乙酯对映体与 β -环糊精的主客体相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1273-1278
32. 陶长贵, 冯海军, 周健, 吕玲红, 陆小华.氧气在聚丙烯内吸附和扩散的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1373-1378
33. 邵庆 吕玲红 陆小华 魏明杰 朱育丹 沈文枫.纳米受限下溶质水化结构的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 583-589
34. 闫超群 万辉 管国锋.1,3-二取代咪唑类离子液体熔点预测[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2198-2202
35. 王小露;万辉;管国锋.[EPy]Cl和[EPy]Br离子对的气相和液相结构及阴阳离子间的相互作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2077-2082
36. 杨培霞;安茂忠;苏彩娜;王福平.离子液体中钴的电沉积行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2032-2036
37. 李晓锋;赵立峰;孙淮.GEMC和GDI方法计算流体气液相平衡的比较[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1824-1830
38. 郑永军;吾满江·艾力.Tween80/BmimPF₆/醇/甲苯体系的相行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2143-2148
39. 闫智英;武丽艳;孙桂香;张宁;郑文君.离子液体-水混合溶剂中制备纳米晶TiO₂的结构特性及其光催化活性[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1032-1036
40. 李姝;刘磊;曹臻;汪继强;言天英.室温熔盐二(三氟甲基磺酸酐)亚胺锂-尿素体系的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 983-986
41. 马淳安;王晓娟;李国华;李美超;陈松.硝基甲烷在离子液体BmimBF₄中的电还原特性[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1719-1722
42. 孙伟;高瑞芳;王丹丹;焦奎.血红蛋白在离子液体[Bmim]PF₆碳糊电极上的直接电化学[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1247-1251
43. 王金波;明方永;蒋维东;樊光银;刘德蓉;陈华;李贤均.离子液体介质中钌纳米粒子催化苯乙酮及其衍生物的不对称加氢反应[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1381-1386
44. 雷声;张晶;黄建滨.离子液体[Bmim]BF₄对SDS水溶液表面活性和聚集能力的促进[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1657-1661
45. 孙国华;李开喜;范慧;谷建宇;李强;刘越.含二茂铁离子液体电容器的电化学性能[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 103-108
46. 欧阳方平;徐慧;李明君;肖金.Armchair型石墨纳米带的电子结构和输运性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 328-332

47. 陈玉平;吕玲红;邵庆;黄亮亮;陆小华.烷烃在丝光沸石型分子筛中吸附和扩散行为[J].物理化学学报,2007,23(06):905-910
48. 马淳安;陈松;褚有群;毛信表.硝基苯在离子液体BMimBF₄-H₂O中的电还原[J].物理化学学报,2007,23(04):575-580
49. 周健;汪文川.Gibbs系综Monte Carlo模拟甲烷的吸附平衡[J].物理化学学报,2001,17(08):723-727
50. 周健;朱宇;汪文川;陆小华;王延儒;时钧.超临界NaCl水溶液的分子动力学模拟 [J].物理化学学报,2002,18(03):207-212
51. 李雪辉;江燕斌;张磊;李榕.*N*-酯基取代吡啶功能化离子液体的合成与表征[J].物理化学学报,2006,22(06):747-751
52. 周健;陆小华;王延儒;时钧.超临界水的分子动力学模拟[J].物理化学学报,1999,15(11):1017-1022
53. 石磊;张小岗;张喜丰;杨冠英;韩布兴;闫海科.混合超临界流体的密度及分子间相互作用[J].物理化学学报,2000,16(01):31-35
54. 丁运生;王僧山;查敏;王志刚.有机阳离子[C₁₈mim]⁺在蒙脱土层间的物理化学吸附与聚集状态*[J].物理化学学报,2006,22(05):548-551
55. 曾勇平;居沈贵;邢卫红;陈长林.分子模拟噻吩、苯、正己烷混合物在MFI和MOR中的吸附行为[J].物理化学学报,2007,23(03):343-348
56. 林棋;付海燕;袁茂林;陈华;李贤均.负载离子液体纳米钨催化芳卤羰化反应[J].物理化学学报,2006,22(10):1272-1276
57. 刘永明;李桂芝;宋万坤;王进军.盐酸拓扑替康与人血清白蛋白的相互作用及分子模拟[J].物理化学学报,2006,22(12):1456-1459
58. 吴阳,张甜甜,于宁.1-乙基-3-甲基咪唑阳离子与天冬酰胺阴离子的相互作用[J].物理化学学报,2009,25(08):1689-1696