



云南大学学报(自然科学版) » 2007, Vol. 29 » Issue (1): 80-85 DOI:

化学

最新目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

◀ Previous Articles | Next Articles ▶▶

### 标准态下碳酸二甲酯合成体系热力学分析

张智芳<sup>1,2</sup>, 陈建刚<sup>1</sup>, 刘昭铁<sup>1</sup>

1. 陕西师范大学 大分子科学陕西省重点实验室 陕西师范大学 化学与材料科学学院 陕西 西安 710062;  
2. 榆林学院 化学系 陕西 榆林 719000

### Studies on thermodynamic analysis for synthesis of dimethyl carbonate

ZHANG Zhi-fang<sup>1,2</sup>, CHEN Jian-gang<sup>1</sup>, LIU Zhao-tie<sup>1</sup>

1. Key Laboratory of Macromolecular Science of Shaanxi Province, School of Chemistry & Materials Science, Shaanxi Normal University, Xi'an Shaanxi 710062, China;  
2. Yulin College, Yulin Shaanxi 719000, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: PDF (995 KB) HTML (KB) 输出: BibTeX | EndNote (RIS) 背景资料

摘要 用Benson基团贡献法计算了碳酸二甲酯(DMC)的热力学数据标准摩尔生成焓 $\Delta_f H_m^\theta$ 、标准摩尔生成吉布斯自由能 $\Delta_f G_m^\theta$ 和等压摩尔热容 $C_{p,m}$ ;在标准态下,300~1 000 K温度范围内对比了甲醇或二甲醚(DME)氧化羰化合成DMC,甲醇或DME与CO<sub>2</sub>直接合成DMC,由合成气合成DMC,DME,甲醛或甲醇这些反应的焓变 $\Delta_r H_m^\theta$ 、吉布斯自由能变 $\Delta_r G_m^\theta$ 和平衡常数 $\ln K^\theta$ .计算结果表明:在讨论的条件范围内,由DME氧化羰化合成DMC是热力学上可自发进行的反应,但DME和CO<sub>2</sub>反应合成DMC与甲醇和CO<sub>2</sub>反应合成DMC,均不能自发进行(需要通过耦合等方式来改变反应途径或重构反应体系,该反应才有可能进行).此计算将为合成DMC的反应路线设计以及新催化剂体系的探索提供热力学依据.

关键词: 碳酸二甲酯 反应自由能 热力学计算

Abstract: The standard enthalpy of formation, free energy and thermal capacity of dimethyl carbonate(DMC) were calculated by using the method of Benson group contributions. The thermodynamic data of various syntheses of DMC were compared at different temperatures. The syntheses included oxidation of methanol or dimethyl ether, reaction of methanol or dimethyl ether with CO<sub>2</sub>, and preparations of DMC, DME, formaldehyde and methanol from H<sub>2</sub> and CO. The results showed that the synthesis of DMC by oxidation carbonylation of DME is thermodynamically feasible, but the syntheses of DMC from DME and CO<sub>2</sub> and from methanol and CO<sub>2</sub> are all thermodynamically unfeasible. These results provided the thermodynamic basis to design the synthesis process and catalyst for DMC.

Key words: dimethyl carbonate free energy thermodynamics

收稿日期: 2006-03-06;

基金资助:国家自然科学基金资助项目(20473051);陕西省自然科学基金资助项目(2004B12)

通讯作者: 刘昭铁(1965-),男,湖南人,博士生导师,主要从事催化纳米材料制备和医用高分子材料等领域的研究工作.

引用本文:

张智芳,陈建刚,刘昭铁. 标准态下碳酸二甲酯合成体系热力学分析[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2007, 29(1): 80-85.

ZHANG Zhi-fang, CHEN Jian-gang, LIU Zhao-tie. Studies on thermodynamic analysis for synthesis of dimethyl carbonate[J]. , 2007, 29(1): 80-85.

没有本文参考文献

没有找到本文相关文章

#### 服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

#### 作者相关文章

- ▶ 张智芳
- ▶ 陈建刚
- ▶ 刘昭铁

版权所有 © 《云南大学学报(自然科学版)》编辑部

编辑出版: 云南大学学报编辑部 (昆明市翠湖北路2号, 650091)

电话: 0871-5033829(传真) 5031498 5031662 E-mail: yndxxb@ynu.edu.cn yndxxb@163.com