研究论文

DOI：10.11949/0438-1157.

吗啉氮杂环类功能离子液体合成及低能耗烟气碳捕集

申涛[1,2]，王梦君[3]，白银鸽[3]，张香平[1,3*]

（[1]中国石油大学（北京）化学工程与环境学院，北京 102249；[2]中科（广东）炼化有限公司，广东 湛江 524076；[3]中国科学院过程工程研究所，北京 100190）

摘要： 针对烟气碳捕集高能耗的难题，设计合成了吗啉氮杂环类功能离子液体吗啉咪唑盐（［Mor］［Im］）、吗啉吡唑盐（［Mor］［Py］），构建了离子液体/水复配溶剂体系，系统研究了离子液体溶剂体系基本物性、CO_2吸收解吸性能及吸收机理。结果表明，［Mor］［Im］和［Mor］［Py］具有低粘度、低比热容优势，离子液体/水复配体系的密度和粘度随水含量提升呈先增后减趋势。30 ℃下，两类离子液体对CO_2的吸收容量分别达到0.140 g（g solvent）$^{-1}$和0.143 g（g solvent）$^{-1}$。采用微量热仪测量了离子液体对CO_2的反应热，计算得到离子液体体系具有较低再生热耗，其中［Mor］［Im］/H_2O（80 wt%/20 wt%）的再生热耗仅2.07 GJ（t CO_2）$^{-1}$，相同条件下较30 wt% MEA降低49%。原位表征和量化计算表明，纯离子液体吸收CO_2后主要生成了氨基甲酸盐，离子液体/水体系则同时生成氨基甲酸盐和碳酸氢根，总反应热变小，进而降低了再生热耗，表明［Mor］［Im］/H_2O体系在烟气碳捕集中具有潜在的应用前景。

关键词： 离子液体；二氧化碳捕集；吸收；烟道气；再生热耗

中图分类号： TQ 028.1　　**文献标志码：** A

文章编号： 0438-1157（XXXX）XX-0001-15

Synthesis of morpholine-based N-heterocyclic functional ionic liquids for low-energy consumption flue gas CO_2 capture

SHEN Tao[1,2], WANG Mengjun[3], BAI Yinge[3], ZHANG Xiangping[1,3*]

([1]*College of Chemical Engineering and Environment, China University of Petroleum, Beijing* 102249, *China*; [2] *ZhongKe (Guangdong) Refinery & Petrochemical Company Limited, Zhanjiang* 524076, *Guangdong, China*; [3] *Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100190, *China*)

Abstract: To address the high energy consumption bottleneck in flue gas CO_2 capture, morpholine N-heterocyclic functional ionic liquids (IL), morpholinium imidazole ([Mor][Im]) and morpholinium pyrazole ([Mor][Py]), were designed and synthesized, and IL/H_2O blended solvent systems were constructed for CO_2 capture from flue gas. The physical properties, CO_2 absorption performance and absorption mechanism of the IL solvents were systematically investigated. Physical property measurements reveal that [Mor][Im] and [Mor][Py] feature low viscosity and low specific heat capacity. For the IL/H_2O blended systems, density and viscosity first increase and then decrease with the rising water content. CO_2 absorption tests demonstrate that neat ILs exhibit favorable CO_2 absorption capacities of 0.140 g (g solvent)$^{-1}$ and 0.143 g·(g solvent)$^{-1}$ at 30 °C, respectively. Reaction heats of CO_2 uptake by the ILs were measured using a microcalorimeter, and calculation results demonstrate that these IL systems possess low

收稿日期： 2026-07-06　　**修回日期：** 2026-08-17

通信作者： 张香平(1969—)，女，博士，教授，xpzhang@ipe.ac.cn

第一作者： 申涛(1974—)，男，博士研究生，shent22.zklh@sinopec.com

基金项目： 国家自然科学基金项目(U22A20416)

引用本文： 申涛, 王梦君, 白银鸽, 张香平. 吗啉氮杂环类功能离子液体合成及低能耗烟气碳捕集[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1-15

Citation: SHEN Tao, WANG Mengjun, BAI Yinge, ZHANG Xiangping. Synthesis of morpholine-based N-heterocyclic functional ionic liquids for low-energy consumption flue gas CO_2 capture[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1-15

regeneration heat duty. Specifically, the [Mor][Im]/H_2O (80 wt%/20 wt%) system achieves a regeneration heat consumption of only 2.07 GJ (t CO_2)$^{-1}$, representing a 49% reduction compared with 30 wt% MEA solvent. In-situ characterizations and quantum chemical calculations confirm that neat ILs mainly form carbamate species upon CO_2 absorption, while IL/H_2O systems produce both carbamate and bicarbonate simultaneously. This dual-product pathway reaction pathway lowers the overall reaction enthalpy and consequently lowers regeneration heat consumption, suggesting that the [Mor][Im]/H_2O system possesses promising application prospects for flue gas CO_2 capture.

Keywords: ionic liquids; CO_2 capture; absorption; flue gas; regenerative heat consumption

引 言

工业化进程和化石燃料使用导致CO_2温室气体排放持续上升，造成全球气候变暖，引起严重的环境生态问题[1]。碳减排已成为应对气候挑战的必由之路和核心举措，美国、欧盟等国家和地区设立多项重大研究计划支持碳减排研究，中国提出了力争2030年前“碳达峰”和2060年前“碳中和”的目标。炼化行业作为关系国计民生的支柱产业，也是中国能源消耗和CO_2排放的重点领域之一，据统计2024年中国炼化行业CO_2排放总量约6亿吨，占全国排放总量的5%，面临着较大减排压力[2]。炼厂的CO_2主要排放来自催化裂化工段烟气和燃料加热炉烟气，占比90%以上。CO_2捕集、利用与封存(CCUS)作为实现碳减排的关键托底技术已成为共识，是炼化行业实现双碳目标重要技术保障[3]。作为CCUS核心环节，CO_2捕集能耗与成本约占全CCUS产业链的75%，是其规模应用的关键瓶颈[4]。

常用的CO_2捕集技术有溶剂吸收法、吸附法、膜分离法和低温精馏法。其中，溶剂吸收法是目前CO_2捕集技术中应用最广、气体来源适应性好、技术相对成熟、可得到高纯CO_2产品的技术[5]，从第一代典型的乙醇胺(MEA)，二乙醇胺和二异丙醇胺出发，化学溶剂已发展出第二代混合胺吸收剂，以及第三代新型少水吸收剂[6]。混合胺吸收剂采用不同有机胺组合复配的形式，具有吸收容量高、吸收速率快等优势，但存在溶剂损失量大、再生热耗高等问题，导致运行成本高。因此，开发适用于烟气的低能耗吸收剂是降低CO_2捕集成本，并实现CO_2捕集技术大规模经济应用的关键。

离子液体是室温下呈液态，由阴阳离子构成的新型溶剂。自从Blanchard等[7]在Nature上首次报道CO_2在离子液体1-丁基-3-甲基咪唑六氟磷酸盐([Bmim][PF_6])中具有较高的溶解度，即在25 ℃和8 MPa条件下，CO_2溶解度高达0.12 g CO_2·(g solvent)$^{-1}$。与传统有机胺相比，离子液体具有可忽略的蒸气压、较好的稳定性、结构可设计性等优势[8-10]。Bates等[11]首次报道了一种功能化离子液体，其将氨基植入咪唑阳离子烷基链中制备了1-(3-氨基丙基)-3-丁基咪唑四氟硼酸盐([NH_2p-bim][BF_4])，常温常压下CO_2吸收量可达0.082 g CO_2·(g solvent)$^{-1}$，远远超过传统离子液体的性能。Gurkan等[12]深入分析了氨基酸离子液体捕集CO_2过程，表明常温常压下三己基十四烷基季膦脯氨酸盐([P_{66614}][Pro])和三己基十四烷基季膦蛋氨酸盐([P_{66614}][Met])对CO_2溶解度高达0.9 mol CO_2·(mol IL)$^{-1}$，远高于氨基甲酸盐机理理论吸收量(0.5 mol CO_2·(mol IL)$^{-1}$)。Chen等[13]将多位点吸收策略引入到功能离子液体CO_2捕集，设计了新型氨基多羧酸离子液体，通过多位点对CO_2进行吸收，在40 ℃和0.1 MPa下，CO_2吸收容量高达0.13 g CO_2·(g solvent)$^{-1}$。Li等[14]设计合成了四甲基胍咪唑盐([TMGH][Im])、四甲基胍吡咯盐([TMGH][Pyrr])和四甲基胍苯酚([TMGH][PhO])三种离子液体，系统研究了阴离子、温度、CO_2分压和含水量对CO_2吸收性能的影响，结果表明，质子型离子液体碱性越强，其对CO_2吸收性能越好，在40 ℃和0.1 MPa条件下，[TMGH][Im]可吸收0.154 g CO_2·(g solvent)$^{-1}$，而H_2O的加入对CO_2吸收性能有积极影响，当含水率为7 wt%时，吸收率最高为0.186 g CO_2·(g solvent)$^{-1}$。Chen等[15]以位阻胺AMP和1,2,4-三唑(Triz)为原料合成含N活性位点的功能离子液体2-氨基-2-甲基-1-丙醇1,2,4-三氮唑盐([AMP][Triz])，与四甲基己二胺(TMHDA)复配构建双相吸收剂体系，[AMP][Triz]吸收CO_2过程中通过质子转移促进HCO_3^-生成并稳定于富相，实现CO_2吸收容量达0.12 g CO_2·(g solvent)$^{-1}$，再生热耗仅2.31 GJ (t CO_2)$^{-1}$，较30 wt% MEA溶液降低37.56%。但相关研究多为理想工况下(如纯CO_2条件)吸收性能的测

定，在烟气工况条件下由于CO_2浓度低，还存在CO_2吸收容量低、再生热耗高等问题，如Wang等[16]测定发现胆碱1,2,4-三氮唑盐([Cho][1,2,4-Triz])在纯CO_2气源条件下吸收容量为0.177 g CO_2·(g solvent)$^{-1}$，而在CO_2浓度为15 vol%时，吸收容量降至0.106 g CO_2·(g solvent)$^{-1}$，降幅达40%。Tian等[17]设计了离子液体相变吸收剂[TEPAH][L-His]/NPA/H_2O，在烟气CO_2浓度(15 vol%)条件下CO_2吸收容量仅为0.055 g (g solvent)$^{-1}$，测得再生热耗为2.52 GJ (t CO_2)$^{-1}$。

本文针对烟气碳捕集过程中存在的CO_2吸收容量低、再生热耗高等问题，设计开发了新型吗啉氮杂环类功能离子液体，通过在离子液体引入N活性位点提高对CO_2的吸收性能。考察了吸收温度、CO_2分压等对吸收性能的影响，同时考虑到烟气中往往含有多种杂质组分，考察了H_2O、O_2、SO_2、NOx等杂质组分的加入对离子液体吸收CO_2性能的影响，测定了离子液体体系捕集CO_2的再生热耗。最后，通过实验表征和量化计算分析了吗啉氮杂环类功能离子液体吸收CO_2的作用机理和反应路径。

1 实验材料和方法

1.1 材料

吗啉(质量分数>99%)、咪唑(质量分数≥99%)和吡唑(质量分数>99%)均采购自上海麦克林生物科技有限公司，CO_2(99.99%)和N_2(99.99%)均为河南源正特种气体有限公司提供。

1.2 离子液体合成及表征

采用酸碱中和法制备了两种吗啉氮杂环类功能离子液体，分别为吗啉咪唑盐([Mor][Im])和吗啉吡唑盐([Mor][Py])，其结构如图1所示。以[Mor][Im]为代表详细描述合成步骤：首先，称取一定量的咪唑(例如0.1 mol)到500 ml圆底烧瓶中，将等摩尔量的吗啉逐滴加入到圆底烧瓶，滴加完毕后在30 ℃下搅拌反应24 h得到无色透明离子液体。旋蒸除去未反应的原料，然后，在真空烘箱中70 ℃下干燥48 h，得到[Mor][Im]。以相同的方法制备了[Mor][Py]。对所制备得到的离子液体进行了水含量测定，[Mor][Im]为828 mg/kg，[Mor][Py]为1026 mg/kg。采用热重分析仪(Mettler-Toledo TGA2)对离子液体进行热重分析，在氮气气氛保护下，从室温加热到300 ℃，升温速率为10 ℃ min^{-1}，测试结果为[Mor][Im]和[Mor][Py]的热分解温度分别90.7 ℃和90 ℃(取失重5 wt%的温度)。

对所合成的离子液体通过核磁表征结构，确定目标离子液体合成成功。使用Anton Paar密度粘度联用仪测定了吸收剂在30~80 ℃温度范围内的密度和粘度，测量间隔为10 ℃，密度计和粘度仪的标准不确定度分别为0.000005 g·cm^{-1}和0.5%。使用Mettler-Toledo差示扫描量热仪基于蓝宝石法测定了吸收剂在不同温度下的比热容，具体原理为：在与待测样品相同的条件下将蓝宝石(单晶氧化铝)做为参比样品进行测量，然后由已知蓝宝石的比热容通过计算即可得到未知样品的比热容，量热准确度为±0.05%。

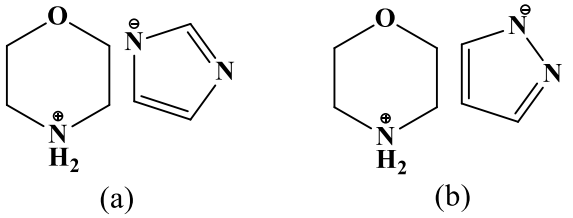


图1 吗啉氮杂环类功能离子液体结构：(a) [Mor][Im]，(b) [Mor][Py]

Fig. 1 Structures of morpholine-based N-heterocyclic functional ILs: (a) [Mor][Im], (b) [Mor][Py]

1.3 CO_2吸收与解吸实验

利用称重法对吗啉氮杂环类功能离子液体的CO_2吸收和解吸性能进行评价。首先，将约4 g的吸收剂加入到定制的玻璃吸收瓶中，将吸收瓶放入恒温水浴中控制一定吸收温度，通过质量流量计控制气体流速为100 mL min^{-1}进行吸收实验。定期称量并记录吸收瓶的总重量，直至吸收量没有变化认为达到吸收平衡。在80 ℃下进行CO_2解吸实验，使用N_2(100 mL min^{-1})持续吹扫吸收饱和离子液体，直至重量保持恒定。对于不同CO_2分压下离子液体吸收剂CO_2吸收容量的测定，通过两个质量流量计分别控制CO_2和N_2两路气体按照不同流量进入混气罐，复配得到不同CO_2分压的气源，以配制15% CO_2分压的气源为例，CO_2和N_2通过质量流量计将流量分别控制为15 mL min^{-1}和85 mL min^{-1}，进入混气罐混合，配制得到的气体在测试前与相应浓度的标气进行对比，控制相对误差在3%以内。通过多次吸收和解吸循环以考察离子液体吸收剂的稳定性。

1.4 再生热耗测定与计算

溶剂吸收法CO_2捕集的再生热耗(Q_{reg})可分为

CO_2反应热(Q_{reac})、升温显热(Q_{sens})和汽化潜热(Q_{latent})三部分(式1)[18]。

$$Q_{reg} = Q_{reac} + Q_{sens} + Q_{latent} \tag{1}$$

Q_{reac}可通过微量热仪(法国塞塔拉姆,C80)测定离子液体对CO_2的吸收焓计算得到。通过微量热测定得到总反应热Q_{abs}(式2),将其与CO_2吸收量进行比值可得到吸收剂对CO_2的摩尔吸收焓ΔH_{reac}(式3),进而通过式4可计算得到Q_{reac}。

$$Q_{abs} = \frac{\int_{t_1}^{t_2} q(t)dt}{m_s} \tag{2}$$

$$\Delta H_{reac} = \frac{Q_{abs} M_{CO_2}}{1000 m_{CO_2}} \tag{3}$$

$$Q_{reac} = \frac{-\Delta H_{reac}}{M_{CO_2}} \tag{4}$$

其中,Q_{abs}为对热流曲线积分计算出的吸收总放热量(J　g^{-1}),t_1是微量热仪中通入CO_2与吸收剂反应的时间(min),t_2是热流曲线达到平稳的时间点(min),q(t)是离子液体与CO_2反应的瞬时热流(mW),m_s为微量热仪中放入的离子液体质量(g),m_{CO2}是离子液体对CO_2的质量吸收量(g CO_2　(g solvent)$^{-1}$),ΔH_{reac}为CO_2摩尔吸收焓(kJ　mol^{-1}),M_{CO2}是CO_2相对分子质量(44.01 g　mol^{-1})。

Q_{sens}表示吸收CO_2后的溶液加热到解吸所需温度需要的升温显热,通过公式(5)计算得到。

$$Q_{sens} = \frac{C_p \cdot \Delta T \cdot m_{IL}}{\Delta \alpha} \tag{5}$$

其中,C_p为溶剂的比热容(kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$),可通过差示扫描量热仪测量;ΔT表示吸收剂升温的温度差(℃),通常假设为10 ℃[19];m_{IL}表示离子液体吸收剂的质量(g),$\Delta\alpha$为所测定的离子液体中CO_2的解吸负荷(g)。

Q_{latent}是吸收剂由液相汽化为气相过程中的相变热,由于离子液体几乎没有蒸发焓,其汽化潜热可以忽略不计,再生过程的Q_{latent}是由水的蒸发产生的,可以使用方程(6)进行计算[10]。

$$Q_{latent} = \frac{\Delta m_{H_2O} \Delta H^{vap}_{H_2O}(T_R)}{\Delta \alpha} \tag{6}$$

其中,Δm_{H2O}为再生过程中水挥发质量(g);ΔH^{vap}_{H2O}为挥发性组分的蒸发焓,kJ·kg^{-1};T_R是指再生温度(℃)。

1.5　CO_2吸收机理分析

为分析吗啉氮杂环类功能离子液体对CO_2的吸收机理,通过核磁共振碳谱(^{13}C NMR)对吸收CO_2前后的离子液体结构进行表征,分析其分子结构变化情况;通过原位红外光谱仪(梅特勒,IR 702L)对离子液体吸收CO_2过程的样品结构进行原位实时表征,追踪吸收过程中离子液体体系的结构变化,具体实验过程为:将盛有3 g离子液体吸收剂的三口烧瓶置于40 ℃的恒温水浴中,将原位红外装置探头放入离子液体中,然后向吸收剂中按照100 ml　min^{-1}的流量通入CO_2气体,原位红外光谱仪实时记录CO_2吸收过程离子液体体系的红外光谱变化。

在实验表征基础上,通过量化计算分析吸收机理,具体方法如下:基于密度泛函理论在B3LYP/6-31+G(d)水平下对离子液体阴阳离子结构、H_2O、CO_2以及反应产物构型进行了优化,为提高对色散作用的计算精度,在构型优化过程中引入Grimme的D3(BJ)色散校正方法[20]。通过频率分析判断优化构型为势能面极小点或过渡态结构,并获取吉布斯自由能的热力学校正量。在优化结构的基础上,分子的单点能在B3LYP/6-311++G (d,p)水平下计算得到。最后,利用Multiwfn 3.8程序开展波函数分析[21, 22],借助VMD软件完成分子结构可视化工作[23]。

2　结果与讨论

2.1　离子液体结构表征及物性测定

2.1.1　离子液体结构表征　对制备的吗啉类氮杂环离子液体进行核磁共振氢谱(^{1}H NMR)和^{13}C NMR分析,其结果如图2所示,由图可知,吗啉类氮杂环离子液体对应的^{1}H NMR和^{13}C NMR化学位移如下:

[Mor][Im](^{1}H NMR,600 MHz,DMSO-d6):12.01(s,2H),7.63(d,1H),7.01(s,2H),3.49(m,4H),2.65(m,4H);[Mor][Im](^{13}C NMR,150 MHz,DMSO-d6):δ 134.54,66.79,45.50。

[Mor][Py](^{1}H NMR,600 MHz,DMSO-d6):12.80(s,2H),7.60(d,2H),6.25(s,1H),3.49(m,4H),2.65(m,4H);[Mor][Py](^{13}C NMR,150 MHz,DMSO-d6):δ 103.58,66.79,45.51。

通过核磁表征结果表明所设计的功能离子液体成功制备出来。

2.1.2　功能离子液体物性测定　密度、粘度、比热容等基础性质对离子液体工艺设计优化和工业应用十分重要,如粘度可影响离子液体对CO_2吸收的传质性能,测定离子液体体系的物性具有重要意义。通过密度粘度仪测定了30~80 ℃间离子液体及离子液体/水复配体系的密度(表1)和粘度(表2)。

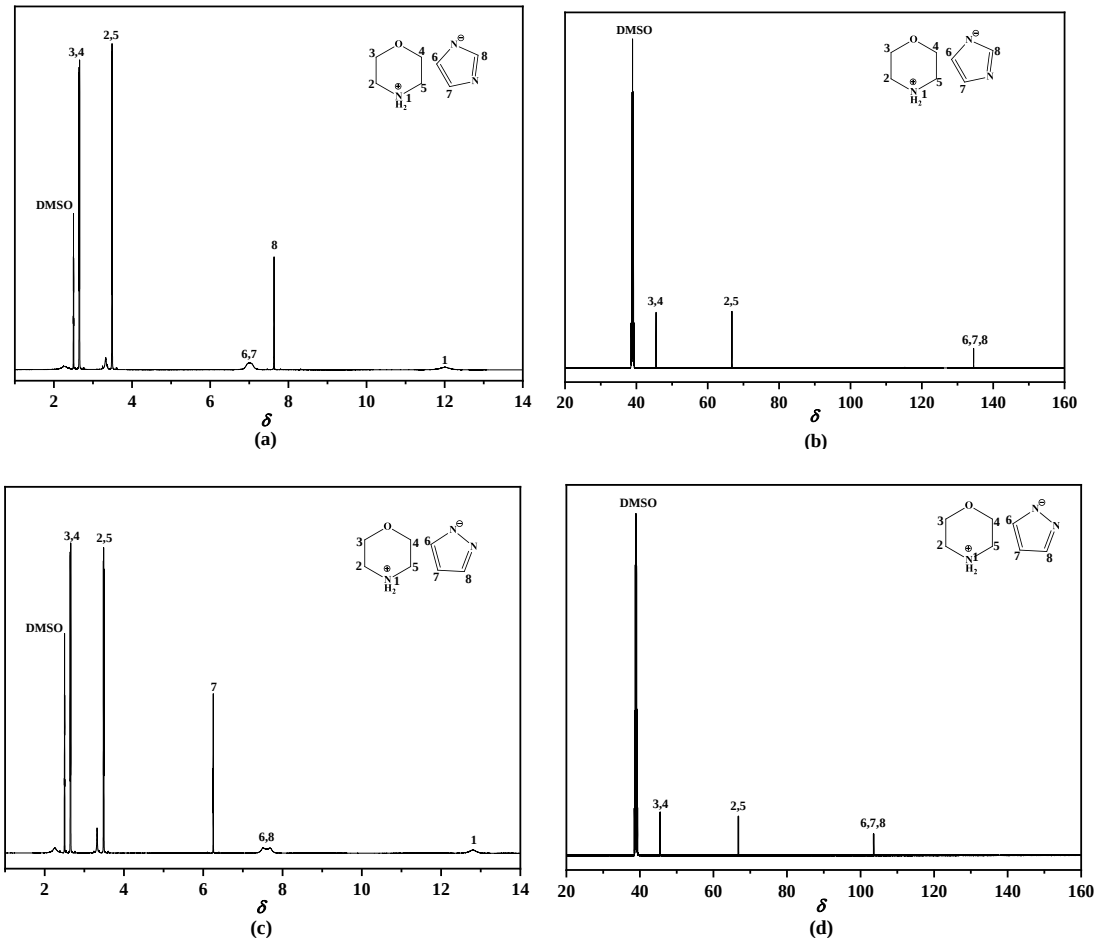


图2 离子液体核磁结构表征:(a) [Mor][Im]的 ^{1}H NMR,(b) [Mor][Im]的 ^{13}C NMR,(c) [Mor][Py]的 ^{1}H NMR,(d) [Mor][Py]的 ^{13}C NMR

Fig. 2 NMR Structural Characterization of ILs: (a) ^{1}H NMR of [Mor][Im], (b) ^{13}C NMR of [Mor][Im], (c) ^{1}H NMR of [Mor][Py], (d) ^{13}C NMR of [Mor][Py]

由表1可知,在30~80 ℃范围内,离子液体及离子液体/水复配体系的密度均随温度升高而下降,变化趋势近似线性。以[Mor][Im]为例,30 ℃下密度为1.048 g cm^{-3},升温至80 ℃降至1.004 g cm^{-3}。温度提升会加剧阴阳离子热运动,分子间平均距离增大,体系自由体积扩张,单位体积内分子总质量减少,宏观表现为密度持续降低。在相同温度下,少量水的加入会小幅提高体系的密度,继续增加水含量则体系密度逐渐降低,如[Mor][Im]/H_2O体系在水含量为20 wt%时密度最高达到1.056 g cm^{-3}(30 ℃),当水含量增加至40 wt%时密度降至1.048 g cm^{-3}(30 ℃),与纯[Mor][Im]的密度相当。这种现象是由于水分子尺寸更小,少量水存在可填充离子间隙压缩自由体积,过量水则因纯水密度低于离子液体,稀释作用占据主导。[Mor][Py]体系也展现了类似的规律。

与密度相比,温度、水对离子液体体系粘度的影响更大,由表2可知,温度由30 ℃升至80 ℃时,所有体系粘度均大幅降低,如[Mor][Im]在30 ℃下的粘度为6.802 mPa s,80 ℃时仅1.962 mPa s,下降幅度超70%。小分子水的引入一般认为可降低离子液体体系的粘度,而本研究发现,离子液体/水复配体系的粘度随着水含量的增加呈先增加后降低的趋势,如30 ℃下[Mor][Im]/H_2O体系在水含量为10 wt%和20 wt%时粘度分别增加到7.21 mPa s和7.62 mPa s,当水含量继续增加到30 wt%后,离子液体体系的粘度下降至5.639 mPa s。这主要是由于离子液体阴离子中富电子的N原子与水分子之间可形成较强的氢键作用,水在两个阴离子之间形成氢键桥的作用,导致体系的粘度增加[24]。同等温度与水含量条件下,[Mor][Py]体系粘度始终低于[Mor][Im]体系,说明吡唑与吗啉离子间相互作用力更弱,流体流动阻力更小。

表1　离子液体及离子液体/水复配体系密度测定结果

Table 1　Density Measurement Results of ILs and IL/H_2O Systems

温度(℃)	密度(g cm^{-3})									
	[Mor][Im]	[Mor][Im]/H_2O (90wt%/10wt%)	[Mor][Im]/H_2O (80wt%/20wt%)	[Mor][Im]/H_2O (70wt%/30wt%)	[Mor][Im]/H_2O (60wt%/40wt%)	[Mor][Py]	[Mor][Py]/H_2O (90wt%/10wt%)	[Mor][Py]/H_2O (80wt%/20wt%)	[Mor][Py]/H_2O (70wt%/30wt%)	[Mor][Py]/H_2O (60wt%/40wt%)
30	1.048	1.052	1.056	1.054	1.048	1.038	1.043	1.042	1.039	1.037
40	1.039	1.043	1.047	1.046	1.041	1.029	1.034	1.033	1.031	1.028
50	1.030	1.034	1.039	1.038	1.033	1.02	1.025	1.024	1.022	1.019
60	1.022	1.026	1.031	1.029	1.025	1.011	1.016	1.015	1.013	1.01
70	1.013	1.017	1.022	1.021	1.017	1.002	1.007	1.006	1.004	1.001
80	1.004	1.008	1.013	1.013	1.009	0.992	0.998	0.997	0.995	0.991

表2　离子液体及离子液体/水复配体系粘度测定结果

Table 2　Viscosity Measurement Results of ILs and IL/H_2O Systems

温度(℃)	粘度(mPa s)									
	[Mor][Im]	[Mor][Im]/H_2O (90wt%/10wt%)	[Mor][Im]/H_2O (80wt%/20wt%)	[Mor][Im]/H_2O (70wt%/30wt%)	[Mor][Im]/H_2O (60wt%/40wt%)	[Mor][Py]	[Mor][Py]/H_2O (90wt%/10wt%)	[Mor][Py]/H_2O (80wt%/20wt%)	[Mor][Py]/H_2O (70wt%/30wt%)	[Mor][Im]/H_2O (60wt%/40wt%)
30	6.802	7.210	7.620	5.639	4.215	3.745	5.603	4.865	3.418	2.98
40	5.026	5.130	5.235	4.047	3.083	2.810	3.936	3.472	2.513	2.205
50	3.836	3.820	3.760	3.008	2.329	2.200	2.884	2.576	1.892	1.650
60	3.008	2.960	2.821	2.323	1.822	1.770	2.204	1.987	1.476	1.285
70	2.408	2.350	2.195	1.842	1.463	1.454	1.732	1.571	1.178	0.990
80	1.962	1.910	1.757	1.498	1.202	1.222	1.400	1.273	0.963	0.815

比热容是离子液体碳捕集工艺中关键热物性参数，直接决定吸收剂升温再生阶段所需显热消耗，是评估体系能耗的核心指标。本研究测定了30~80 ℃区间内，[Mor][Im]、[Mor][Py]两种离子液体的比热容(图3)，结果表明，两种离子液体比热容均随测试温度升高而线性增长，30 ℃时，[Mor][Im]比热容为1.8595 kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$，[Mor][Py]仅1.8046 kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$；温度升至80 ℃，前者比热容增至2.1471 kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$，后者为2.0773 kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$，全温度段[Mor][Im]比热容稍高于[Mor][Py]，从升温显热角度来看，[Mor][Py]的低热容特性使得其在碳捕集工艺中更具低能耗的优势。进一步，测定了离子液体与水复配后[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)的比热容，离子液体/水复配溶剂的比热容均高于纯离子液体，两种离子液体/水复配体系的比热容较为接近，如80 ℃下[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)的比热容为2.36 kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$，[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)的比热容为2.37 kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$。

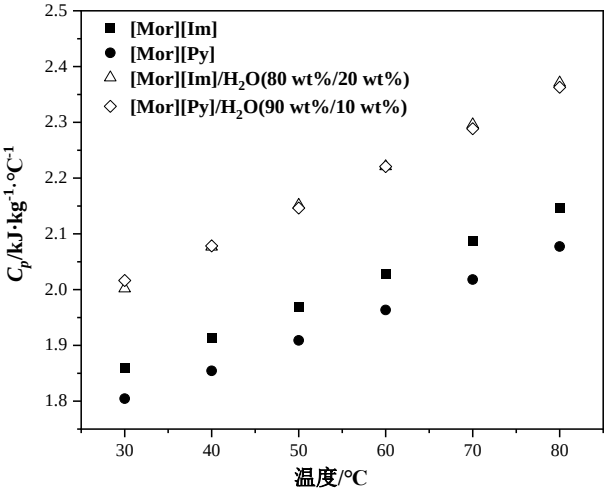


图3　[Mor][Im]和[Mor][Py]两种离子液体及含水体系的比热容

Fig. 3　Specific heat capacities of [Mor][Im], [Mor][Py] and IL/H_2O blended systems

2.2　离子液体体系水含量对CO_2吸收性能的影响

实际工况下烟气中的水蒸气会随着原料气进入离子液体吸收体系，水的存在除了影响吸收剂的

物化性质，对CO_2吸收性能也可能产生影响。为了考察水含量对离子液体体系吸收CO_2性能的影响，配制了不同含水量的离子液体/水复配体系，在40 ℃吸收温度下测定了对纯CO_2的吸收容量（图4）。对于[Mor][Im]体系，纯离子液体的饱和CO_2吸收容量为0.140 g·(g solvent)$^{-1}$，水含量为10 wt%和20 wt%对应的CO_2吸收容量分别为0.134 g·(g solvent)$^{-1}$和0.119 g·(g solvent)$^{-1}$，较纯[Mor][Im]分别降低4.3%和15%，说明少量水分（＜10 wt%）对离子液体的CO_2吸收能力影响较小，水含量增大对离子液体的CO_2饱和吸收容量影响增大。[Mor][Py]体系表现出与[Mor][Im]类似趋势，且对水分更敏感。纯[Mor][Py]对CO_2的饱和吸收容量为0.143 g·g^{-1}，略优于[Mor][Im]；当水含量为10 wt%和20 wt%时，体系的CO_2吸收容量降幅较为明显，分别为0.120 g·(g solvent)$^{-1}$和0.108 g·(g solvent)$^{-1}$，较纯[Mor][Py]分别降低16.1%和24.5%，说明水分对[Mor][Py]的CO_2吸收容量影响要大于[Mor][Im]体系。

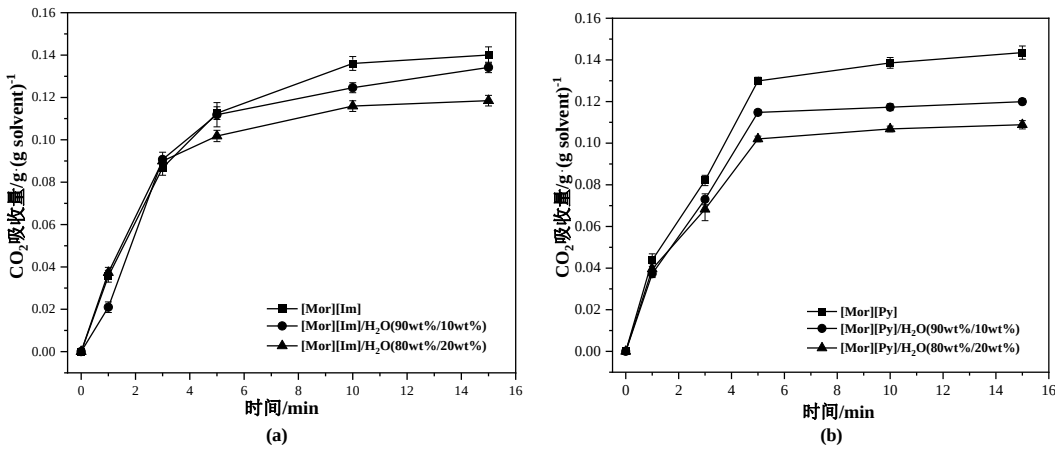


图4 不同含水量对(a) [Mor][Im]/H_2O和(b) [Mor][Py]/H_2O体系吸收CO_2的影响

Fig. 4 Effects of Different H_2O Contents on CO_2 Absorption of (a) [Mor][Im]/H_2O and (b) [Mor][Py]/H_2O Systems

除此之外，实验还发现离子液体体系吸收CO_2后发生了相变化。在[Mor][Py]/H_2O体系中，无水和低含水体系吸收CO_2后析出固体颗粒，当水含量提升至10 wt%以上，吸收产物完全转变为均一液态。对于[Mor][Im]/H_2O体系仅在20 wt%高含水条件下吸收后保持液态。这主要是由于两种离子液体吸收CO_2生成的氨基甲酸盐类产物在水中的溶解度不同导致的，[Mor][Py]与CO_2反应产物水溶性更好，少量水分即可溶解固体沉淀；而[Mor][Im]吸收产物水溶性较低，需要更高比例水分才能完全溶解。在工业实际操作过程中，吸收产生的固体组分，易附着在分离设备内构件中、堵塞管路，增加系统压降与设备清理成本，难以连续化工业运行。综合考虑吸收容量和反应产物物相，选取[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)进行后续研究。

2.3 不同温度对CO_2吸收性能的影响

为了研究吸收温度对离子液体体系CO_2吸收性能的影响，在30、40、50 ℃下测定了[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)对纯CO_2的吸收容量（图5）。对比不同温度下的饱和吸收容量可发现，两种离子液体体系均表现出温度升高，饱和CO_2吸收容量下降的规律。对于[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)体系，30 ℃下饱和容量为0.137 g·(g solvent)$^{-1}$，40 ℃降至0.119 g·(g solvent)$^{-1}$；[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系在30 ℃时CO_2饱和吸收容量为0.135 g·(g solvent)$^{-1}$，40 ℃为0.120 g·(g solvent)$^{-1}$，50 ℃仅为0.118 g·(g solvent)$^{-1}$。说明离子液体吸收CO_2为放热过程，升温对两种离子液体体系的CO_2饱和吸收容量不利。

从吸收动力学过程来看，两种离子液体体系在实验温度范围内，吸收初期CO_2吸收容量快速上升，随反应进行吸收速率逐渐变慢。以[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)为例，在50 ℃条件下，吸收3 min后CO_2吸收容量已达0.101 g·(g solvent)$^{-1}$，达到该温度下饱和吸收量的87.8%，15 min后达到吸收平衡；而30 ℃下，体系吸收过程更平缓，吸收3 min后的吸收容量仅达到0.0787 g·(g solvent)$^{-1}$，直至20 min才达到吸收平衡，说明升温能够提升离子液体对CO_2的吸收速率，利用传质过程。[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系则展现了更快的吸收速率，在30 ℃的吸收

温度下，15 min即达到吸收平衡。

综合分析可知，温度对离子液体吸收CO_2存在双向作用，在低温条件下，离子液体体系具有更高的CO_2负载量，但吸收速率较慢；升温可加快吸收速率、缩短平衡时间，但会降低饱和吸收容量。对于两种离子液体体系，[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)在低温下具有更高的CO_2吸收容量，[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)在高温下对CO_2的吸收更有优势。

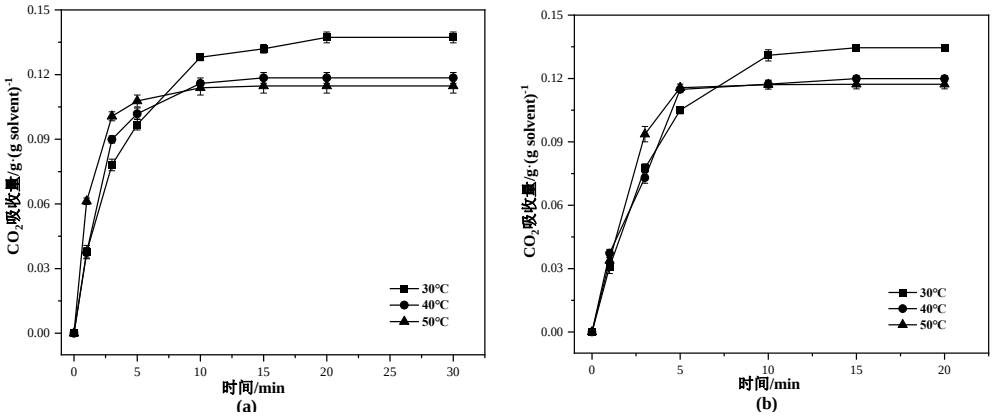


图5　不同温度对(a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和(b) [Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系吸收CO_2的影响

Fig. 5　Effects of temperature on CO_2 absorption in (a) [Mor][Im]/H_2O (80 wt%/20 wt%), (b) [Mor][Py]/H_2O (90 wt%/10 wt%)

2.4　不同CO_2分压对CO_2吸收性能的影响

在工业实际应用中，气源中CO_2分压往往不同，如燃煤烟气中约为15%，油田气伴生气中为30%~70%，因此考察不同CO_2分压对离子液体体系CO_2吸收性能的影响对实际应用具有重要意义。在40 ℃下，测定了[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)对15%、30%、50%和100% CO_2的吸收性能(图6)。对比各分压下的饱和吸收容量可知，随着CO_2分压增高，两种离子液体体系的饱和CO_2吸收容量增大。对于[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)体系，15%的CO_2分压下的饱和容量仅为0.0802 g·(g solvent)$^{-1}$，30%的CO_2分压下达到0.0919 g·(g solvent)$^{-1}$，50%的CO_2分压下为0.109 g·(g solvent)$^{-1}$。[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系对15%、30%和50%的CO_2的饱和吸收容量分别为为0.0883 g·(g solvent)$^{-1}$、0.104 g·(g solvent)$^{-1}$和0.113 g·(g solvent)$^{-1}$，对于中低分压条件，该体系对CO_2的吸收容量略优于[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)体系，对于纯CO_2条件，两种体系的饱和容量比较接近。

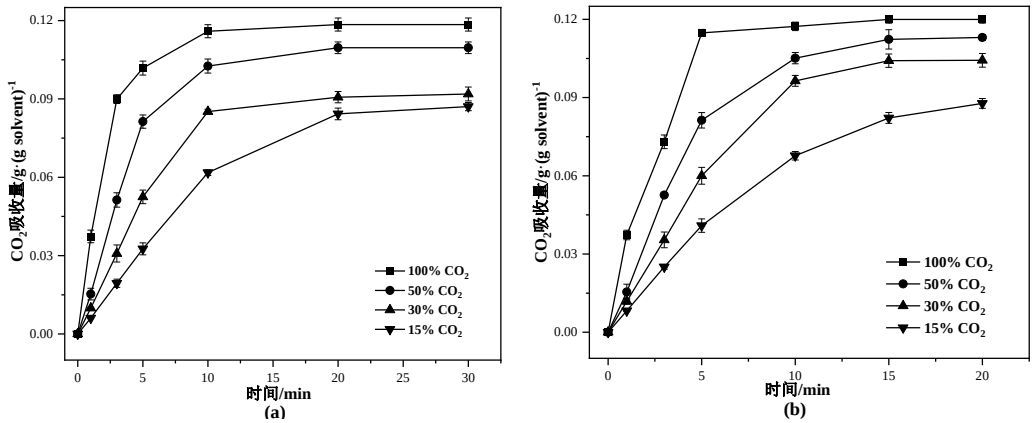


图6　不同CO_2分压对(a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和(b) [Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系吸收CO_2的影响

Fig. 6　Effects of different CO_2 partial pressures on CO_2 absorption in (a) [Mor][Im]/H_2O (80 wt%/20 wt%), (b) [Mor][Py]/H_2O (90 wt%/10 wt%)

2.5 烟气中杂质组分对CO_2吸收性能的影响

实际烟气中除了CO_2、水蒸气之外，还含有O_2、SO_2、NOx等杂质组分，为了考察烟气中杂质组分对CO_2吸收性能的影响，依据当前常规锅炉烟气达标排放组成，在15% CO_2气源中分别加入烟气杂质组分，得到分别含6% O_2、35 mg·m^{-3} SO_2、50 mg·m^{-3} NO、50 mg·m^{-3} NO_2的测试气源，实验测定含不同烟气杂质条件下离子液体的CO_2吸收容量变化(图7)。由图可知，气源中配入35 mg·m^{-3} SO_2后[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)对CO_2的吸收容量分别降低了2.97%和2.09%，配入50 mg·m^{-3} NO后两种离子液体体系的CO_2吸收容量仅降低1%，配入50 mg·m^{-3} NO_2后，[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)对CO_2的吸收容量分别降低了4.24%和4.13%，说明NO_2对离子液体的CO_2吸收容量影响较大。气源中加入O_2后，离子液体体系对CO_2的吸收容量变化不大，说明离子液体具有较好的耐受O_2特性。总之，在烟气杂质组分存在的条件下，所开发的两种离子液体体系仍具有较好CO_2吸收容量，表明这两种离子液体具有较好的烟气耐受性。

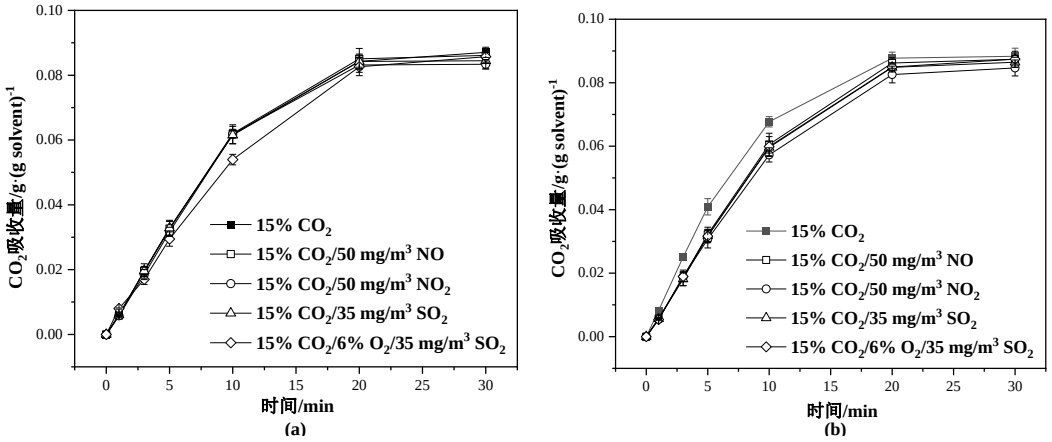


图7 烟气中杂质对离子液体CO_2吸收性能的影响：(a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%), (b) [Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)

Fig. 7 Effects of impurities in flue gas on CO_2 absorption performance of ionic liquids: (a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%), (b) [Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)

2.6 再生热耗测定

溶剂吸收法碳捕集过程的运行成本主要为解吸过程的蒸汽消耗，因此再生热耗Q_{reg}是碳捕集中需重点关注的指标。实验测定了吗啉氮杂环功能离子液体及与水复配体系的Q_{reg}值，并与30 wt% MEA溶液进行了对比(图8)。测定得到[Mor][Im]、[Mor][Py]、[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)对CO_2的Q_{reac}分别为1.92、2.06、1.72、1.84 GJ (t CO_2)$^{-1}$，说明[Mor][Py]具有比[Mor][Im]更高的反应热；当离子液体中加入水后反应热降低，主要是由于水的加入改变了反应路径，生成了更容易解吸的碳酸氢盐(见2.8节分析)。由于离子液体较低的比热容(80 ℃下，[Mor][Im]为2.15 kJ kg^{-1} ℃$^{-1}$、[Mor][Py]为2.08 kJ kg^{-1} ℃$^{-1}$)，离子液体体系解吸过程的升温显热Q_{sens}均低于30 wt% MEA吸收剂，如[Mor][Im]的Q_{sens}值为0.18 GJ (t CO_2)$^{-1}$，[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)的Q_{sens}值为0.24 GJ (t CO_2)$^{-1}$，30 wt% MEA的Q_{sens}值则为0.85 GJ (t CO_2)$^{-1}$[25]。在汽化潜热Q_{latent}方面，离子液体自身基本不挥发，其汽化潜热可忽略不计[26]，对于离子液体/水复配体系，Q_{latent}主要来自水的汽化，由于较低的水含量，Q_{latent}值也远低于与30 wt% MEA。总之，离子液体及离子液体/水复配体系的再生热耗顺序为[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)＜[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)＜[Mor][Im]＜[Mor][Py]，最低的[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)的再生热耗为2.07 GJ (t CO_2)$^{-1}$，较30 wt% MEA降低49%。与文献中报道的离子液体复配体系相比，本研究开发了离子液体在CO_2吸收容量和再生热耗方面具有一定优势(表3)。

2.7 离子液体/水复配体系的CO_2吸收-解吸循环性能

将吸收CO_2饱和后的离子液体/水复配体系再生后继续进行CO_2吸收，以评估离子液体体系的循

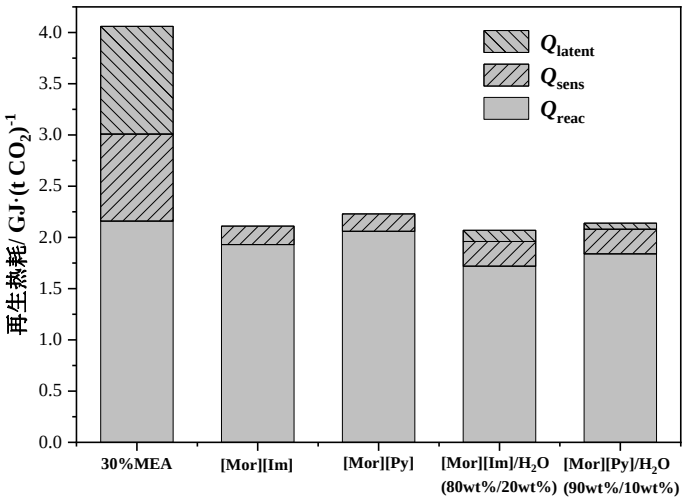


图8 不同吸收剂的再生热耗对比

Fig. 8 Comparison of regeneration heat consumption of different absorbents

表3 离子液体及离子液体/水复配体系CO_2吸收容量和再生热耗与文献对比

Table 3 Comparison of CO_2 absorption capacity and regeneration heat consumption of ILs and IL/H2O systems with literature data

吸收剂	CO_2吸收容量(g (g solvent)$^{-1}$)	再生热耗 (GJ (t CO_2)$^{-1}$)	文献
[Mor][Im]	0.140	2.11	本工作
[Mor][Py]	0.143	2.23	本工作
[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)	0.119	2.07	本工作
[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)	0.120	2.14	本工作
[N1111][Gly]/ethanol(33 wt%/67 wt%)	0.085	–	[27]
[TEPAH][L-His]/NPA/H_2O	0.055	2.52	[17]
MEA@ZIF-8/[Amim][NTf_2](5 wt%/95wt%)	0.094	–	[28]
[Ch][lys]/H_2O(30 wt%/70 wt%)	0.066	–	[29]
[Ch][Gly]/H_2O(30 wt%/70 wt%)	0.044	–	[29]
[Cho][1,2,4-Triz]	0.106	0.89	[16]
[N1111][Gly]/PZ/MDEA/H_2O(5.02 wt%/17.06 wt%/20 wt%/57.92wt%)	0.081	2.58	[30]
MEA/[Bpy][NO_3]/H_2O(30 wt%/10 wt%/60wt%)	0.131	2.88	[25]

环使用性能。对[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系进行了5次吸收-解吸循环测试,结果如图9所示。对于[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%),5次吸收-解吸循环后,CO_2的吸收容量仍达到0.112 g·(g solvent)$^{-1}$,是新鲜溶剂的94.1%;对于[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%),5次吸收-解吸循环后,CO_2的吸收容量仍达到0.115 g·(g solvent)$^{-1}$,是新鲜溶剂的95.8%。对吸收-解吸循环后的离子液体体系进行红外表征,结果表明循环使用后两种离子液体的结构均与新鲜离子液体保持一致(图10),因此,[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)两种体系均具有较好的CO_2吸收-解吸循环性能和使用稳定性。

2.8 CO_2吸收机理

通过原位红外和核磁表征对[Mor][Im]、[Mor][Py]、[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)吸收CO_2前后的结构变化进行了分析,然后通过量化计算分析了不同体系的反应路径,获得吗啉氮杂环类功能离子液体及其与水复配体系吸收CO_2的反应机理。

2.8.1 *原位红外* 通过原位红外光谱仪测定了CO_2通入[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)中的光谱变化(图11a),结果发现,该体系在吸收CO_2过程中在1411.2 cm^{-1}、1362.3 cm^{-1}、1268.4 cm^{-1}和992.2 cm^{-1}处出现了4个新峰,其中1411.2 cm^{-1}归属于-COO的不对称拉伸和弯曲振动,1362.3 cm^{-1}和1268.4 cm^{-1}分别对应

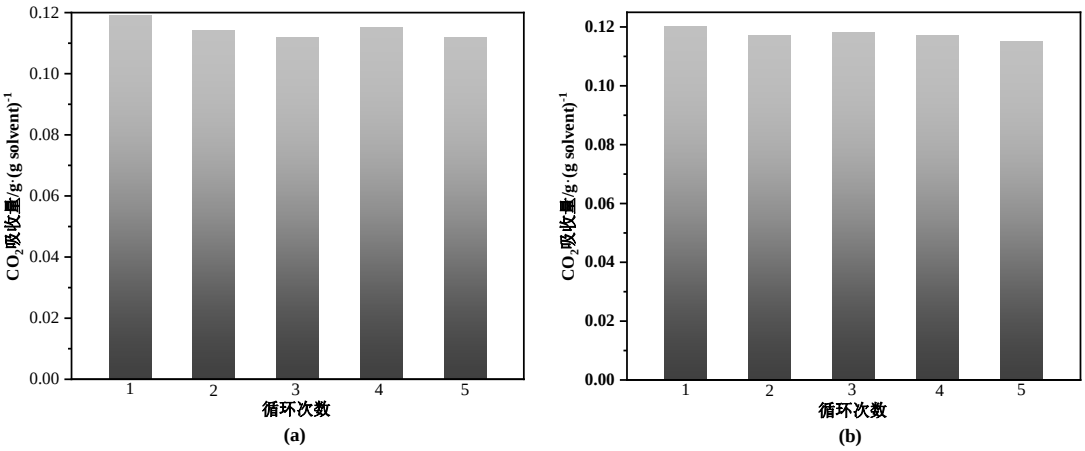


图9 (a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和(b)[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系的CO_2吸收–解吸循环性能

Fig. 9 CO_2 absorption – desorption cycle performance of (a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%) and (b)[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)

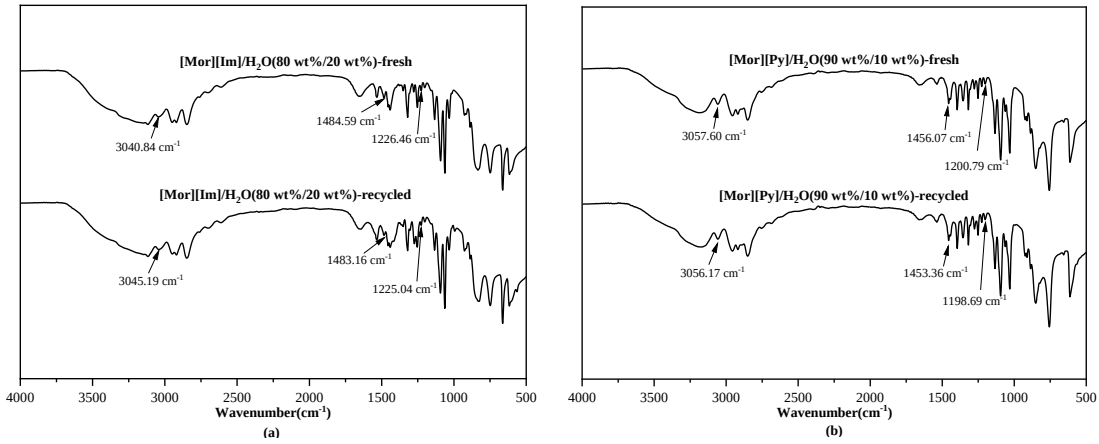


图10 (a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和(b)[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系吸收解吸循环后红外光谱对比

Fig. 10 FT-IR spectra after absorption-desorption cycles for systems of (a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)和(b) [Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)

于C–O伸缩和C–N对称伸缩峰,说明离子液体体系吸收CO_2后可能有氨基甲酸盐的生成,在992.2 cm^{-1}处产生的特征峰表明吸收CO_2的过程有可能形成了碳酸氢根。对于[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)体系吸收CO_2过程,体系在1626.1 cm^{-1}、1530.1 cm^{-1}、1408.7 cm^{-1}、1264.5 cm^{-1}和989.3 cm^{-1}处出现了5个新峰(图11b),其中1626.1 cm^{-1}处的峰应为氨基甲酸酯C=O的不对称伸缩振动,1408.7 cm^{-1}和1530.1 cm^{-1}归属于–COO的不对称伸缩振动,1264.5 cm^{-1}对应于C–N对称伸缩峰,说明[Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)吸收CO_2后可能生成氨基甲酸盐,在989.3 cm^{-1}和处产生的特征峰表明吸收CO_2的过程形成了碳酸氢根。

2.8.2 NMR表征分析 为了验证原位红外光谱的表征结果,研究了CO_2吸收前后离子液体体系的核磁谱图(图12)。在纯[Mor][Im]与CO_2反应后的^{13}C NMR谱图中(图12b),在δ 122.24处观察到新的碳峰,该峰归属于$[Im]^-$中的N位点与CO_2反应生成氨基甲酸根;对于[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)体系,溶剂在吸收CO_2后也观察到了氨基甲酸盐中的碳峰(δ 120.97),说明[Mor][Im]与[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)在吸收CO_2后生成了氨基甲酸盐产物。同时,[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)体系吸收CO_2后在δ 159.38处出现了一个新的特征峰,该峰归属于碳酸氢根的碳峰,而纯[Mor][Im]中未出现该峰,说明水的加入,改变了离子液体与CO_2的反应路径,除了生成氨基甲酸盐之外,还有碳酸氢盐生成。相似的,纯[Mor][Py]与CO_2反应后在δ 132.07处观察到新的碳峰,该峰归因于吡唑阴离子与CO_2反应生成氨基甲酸盐;当体系中含有水时,溶剂在吸收CO_2后也出

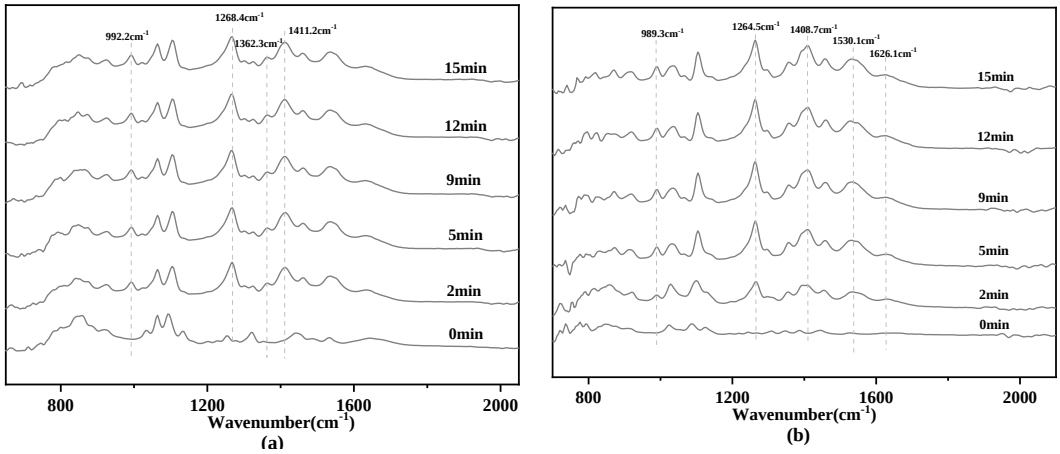
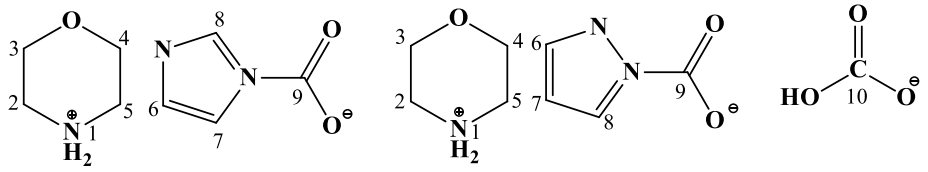


图11 离子液体/水复配体系CO_2吸收过程的原位红外光谱:(a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%), (b) [Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)

Fig. 11 In-situ FTIR spectra of CO_2 absorption in IL/H_2O: (a) [Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%), (b) [Mor][Py]/H_2O(90 wt%/10 wt%)

现了氨基甲酸盐(δ 133.58)和碳酸氢根(δ 160.27)的特征碳峰。^{13}C NMR的表征结果验证了原位红外的结果,[Mor][Im]和[Mor][Py]与CO_2作用生成氨基甲酸盐产物实现对CO_2的吸收,当体系中含有水时,离子液体与CO_2作用还生成了碳酸氢盐产物。



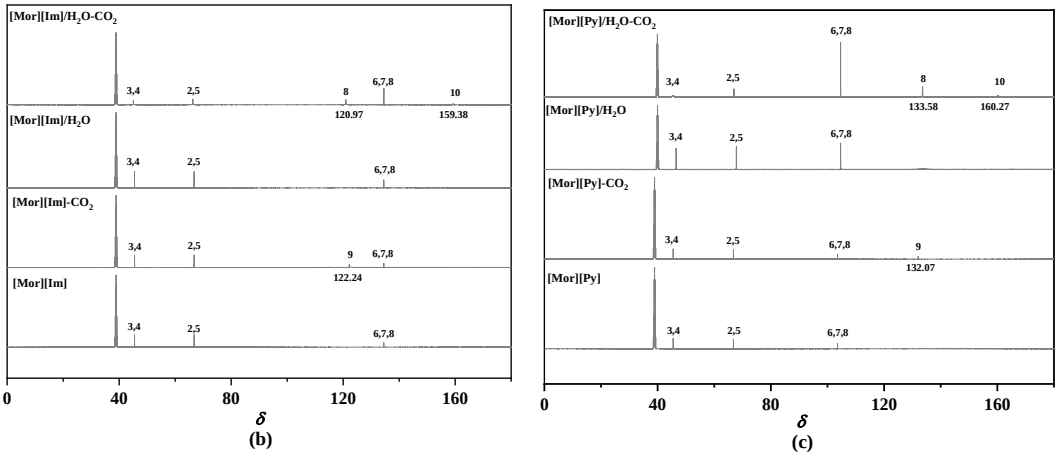


图12 离子液体体系吸收CO_2前后NMR表征:(a) 可能产物结构示意图,(b) [Mor][Im]及[Mor][Im]/H_2O吸收CO_2前后的^{13}C NMR光谱,(c) [Mor][Py]及[Mor][Py]/H_2O吸收CO_2前后的^{13}C NMR光谱

Fig. 12 NMR characterization of IL systems before and after CO_2 Absorption: (a) Schematic diagram of possible product structures, (b) ^{13}C NMR spectra of [Mor][Im] and [Mor][Im]/H_2O before and after CO_2 absorption, (c) ^{13}C NMR spectra of [Mor][Py] and [Mor][Py]/H_2O before and after CO_2 absorption

2.8.3 量化计算 基于原位红外和核磁表征结果,通过量化计算分析了离子液体及离子液体/水复配体系吸收CO_2的反应路径(图13)。当离子液体体系中不含水时,两种离子液体阴离子($[Im]^-$和$[Py]^-$)通过N活性位点与CO_2之间作用生成相应的氨基甲酸盐,其中,[Mor][Im]与CO_2反应生成[Mor][Im]-CO_2的

焓变为−62.7 kJ mol^{-1}，[Mor][Py]与CO_2反应生成[Mor][Py]−CO_2的焓变为−67.1 kJ mol^{-1}，说明[Mor][Py]与CO_2反应生成的产物更稳定，解吸所需的反应热会更高，与前面所测的反应热结果一致。当两种离子液体体系中含有水时，离子液体吸收CO_2过程的反应路径发生变化，除了上述生成氨基甲酸盐的路径之外，$[Im]^-$和$[Py]^-$会与水作用夺取水的质子生成[Im]−H、[Py]−H和OH^-，进一步和CO_2反应生成碳酸氢根产物，该过程的反应焓变分别为−54.4 kJ mol^{-1}和−60.7 kJ mol^{-1}，说明生成碳酸氢根的反应焓更低，相较于氨基甲酸盐反应路径，有望获得更低的解吸反应热。

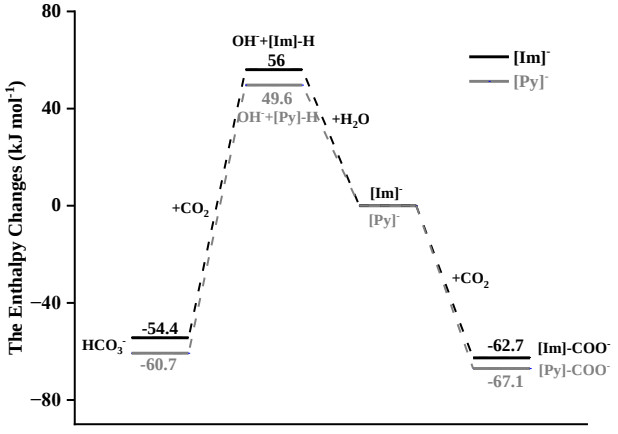


图13 吗啉氮杂环离子液体吸收CO_2的反应路径及焓变

Fig. 13 Reaction pathways and corresponding enthalpy changes for CO_2 absorption by morpholine-based n-heterocyclic ILs

3 结论

本文针对烟气碳捕集过程，设计开发了吗啉氮杂环类功能离子液体([Mor][Im]和[Mor][Py])及离子液体/水复配溶剂体系，研究了离子液体的物性和对CO_2的吸收解吸性能和机理，主要结论如下：

(1)两种吗啉氮杂环离子液体的密度随着温度升高线性下降，[Mor][Im]和[Mor][Py]在30~80 ℃间密度分别为1.048~1.004 g cm^{-3}和1.038~0.992 g cm^{-3}；随着水含量增加，离子液体/水复配体系的密度呈先增加后降低的趋势。在粘度方面，所合成的两种离子液体均具有较低的粘度，30 ℃下，[Mor][Im]和[Mor][Py]的粘度分别为6.802 mPa s和3.745 mPa s，远低于常规离子液体粘度，随着温度升高离子液体体系的粘度大幅降低，在80 ℃下，[Mor][Im]和[Mor][Py]的粘度分别降低到1.962 mPa s和1.222 mPa s。此外，两种离子液体也具有较低的比热容，30~80 ℃范围内，[Mor][Im]比热容为1.8595~2.1471 kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$，[Mor][Py]为1.8046~2.0773 kJ·kg^{-1}·℃$^{-1}$。

(2)测定了离子液体体系对CO_2的吸收性能，其中不含水的[Mor][Im]和[Mor][Py]对CO_2的吸收容量达到了0.140 g·(g solvent)$^{-1}$和0.143 g·(g solvent)$^{-1}$，当水引入离子液体后，CO_2的吸收容量降低，水含量为10 wt%时，[Mor][Im]/H_2O和[Mor][Py]/H_2O对CO_2的饱和吸收容量分别降低4.3%和16.1%；当水含量增加到20 wt%时，[Mor][Im]/H_2O和[Mor][Py]/H_2O对CO_2的饱和吸收容量分别降低15%和24.5%，说明水分对[Mor][Py]的影响要强于[Mor][Im]。温度对离子液体体系吸收CO_2的影响是双向的，升温有利于吸收速率提升，低温则有利于CO_2吸收容量的增加。再生热耗测试结果表明，所设计的离子液体及其含水体系均具有较低的再生热耗，其中[Mor][Im]/H_2O(80 wt%/20 wt%)再生热耗最低，达到了2.07 GJ/t CO_2，较30 wt% MEA降低49%，具有较大的应用潜力。

(3)通过原位红外、核磁表征和量化计算分析了离子液体对CO_2的吸收机理，结果表明，[Mor][Im]和[Mor][Py]主要通过与CO_2作用生成氨基甲酸盐产物实现对CO_2的吸收，但当体系中含有水时，除了能生成氨基甲酸盐之外，离子液体还与CO_2、H_2O等作用生成了更容易解吸的碳酸氢盐产物，正是由于反应路径的改变使得离子液体/水体系的反应热降低，进而降低再生热耗。

符号说明

Cp—比热容，kJ·kg−1·℃−1

MCO2—CO2相对分子质量，g mol−1

m_{CO2}—CO_2的质量吸收量，g —— CO_2 (g solvent)$^{-1}$

mIL—离子液体吸收剂的质量，g

ms—微量热仪中放入的离子液体质量，g

Qabs—总反应热，J g−1

Q_{latent}—汽化潜热，GJ (t —— CO_2)$^{-1}$

Q_{reac}—CO_2反应热，GJ (t —— CO_2)$^{-1}$

Q_{reg}—再生热耗，GJ (t —— CO_2)$^{-1}$

Q_{sens}—升温显热，GJ (t —— CO_2)$^{-1}$

q(t)—瞬时热流，mW

TR—再生温度，℃

t1—CO2开始通入吸收剂的时间点，min

t2—热流曲线达到平稳的时间点，min

Δα—CO2解吸负荷，g

δ—化学位移

ΔmH2O—再生过程中水挥发质量，g

ΔHH2Ovap—挥发性组分的蒸发焓，kJ·kg−1

ΔHreac—CO2摩尔吸收焓，kJ mol−1

ΔT—温度差，℃

参考文献

[1] IEA. Global Energy Review 2025; Paris, 2025. https://www.iea.org/reports/global-energy-review-2025.

[2] 李军, 曹建军. "双碳"目标下我国炼化产业发展趋势[J]. 当代石油石化, 2025, **33**(5): 1-5.
Li J, Cao J J. The development trend of China′s refining and chemical industry under the "dual-carbon" goal[J]. Petroleum & Petrochemical Today, 2025, **33**(5): 1-5

[3] 周红军, 周颖, 徐春明. 中国碳达峰碳中和目标下炼化一体化新路径与实践[J]. 化工进展, 2022, **41**(4): 2226-2230.
Zhou H J, Zhou Y, Xu C M. Exploration of refining and chemical integration under China′s dual-carbon target[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2022, **41**(4): 2226-2230.

[4] IEA. CCUS in clean energy transitions. 2020. https://www.iea.org/reports/ccus-in-clean-energy-transitions.

[5] 赵然磊, 马文涛, 徐晓, 等. 二氧化碳捕集化学吸收剂的研究进展[J]. 精细化工, 2023, **40**(1): 1-9.
Zhao R L, Ma W T, Xu X, et al. Research progress of chemical absorbents for carbon dioxide capture[J]. Fine Chemicals, 2023, **40**(1): 1-9.

[6] Chang J W, Chen K L, Li J L, et al. Liquid amine-based CO_2 capture: A review of absorbent systems innovation, multi-scenario applications, and machine learning-assisted optimization[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2026, **231**: 116754.

[7] Blanchard L A, Hancu D, Beckman E J, et al. Green processing using ionic liquids and CO_2[J]. Nature, 1999, **399**(6731): 28-29.

[8] Paduszynski K, Krolikowska M. Effect of side chain functional group on interactions in ionic liquid systems: Insights from infinite dilution thermodynamic data[J]. Journal of Physical Chemistry B, 2017, **121**(43): 10133-10145.

[9] Ghaed-Sharaf T, Omidvar A. CO_2 capture with green ionic liquid and deep eutectic solvent: A comparative study[J]. Journal of Molecular Liquids, 2023, **383**: 122048.

[10] Liu F, Shen Y, Shen L, et al. Thermodynamics and kinetics of novel amino functionalized ionic liquid organic solvent for CO_2 capture[J]. Separation and Purification Technology, 2022, **286**: 120457.

[11] Bates E D, Mayton R D, Ntai I, et al. CO_2 Capture by a Task-Specific Ionic Liquid[J]. Journal of the American Chemical Society, 2002, **124**(6): 926-927.

[12] Gurkan B E, de la Fuente J C, Mindrup E M, et al. Equimolar CO_2 absorption by anion-functionalized ionic liquids[J]. Journal of the American Chemical Society, 2010, **132**(7): 2116-2117.

[13] Chen F F, Huang K, Zhou Y, et al. Multi-molar absorption of CO_2 by the activation of carboxylate group in amino acid ionic liquids [J]. Angewandte Chemie International Edition, 2016, **55**(25): 7166-7170.

[14] Li F F, Bai Y G, Zeng S J, et al. Protic ionic liquids with low viscosity for efficient and reversible capture of carbon dioxide[J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2019, **90**: 102801.

[15] Chen W D, Chen M S, Lei T, et al. The improvement of CO_2 biphasic absorption with spatially resistive ionic liquids[J]. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2025, **13**(9): 3600-3607.

[16] Wang B, Yin K X, Liu W, et al. Effect of impurities in flue gas on CO_2 absorption by azole-anion-based functionalized ionic liquid [J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2025, **13**(6): 119953.

[17] Tian Q F, Nie W, Niu W J, et al. Phase-change ionic liquid-based CO_2 absorbents incorporating amino acid-coupled solvents: Synergistic effects and capture mechanisms[J]. Chemical Engineering Journal, 2026, **529**: 172794.

[18] Oexmann J, Kather A. Minimising the regeneration heat duty of post-combustion CO_2 capture by wet chemical absorption: The misguided focus on low heat of absorption solvents[J]. International Journal of Greenhouse Gas Control, 2010, **4**(1): 36-43.

[19] Liu F, Shen Y, Shen L, et al. Sustainable ionic liquid organic solution with efficient recyclability and low regeneration energy consumption for CO_2 capture[J]. Separation and Purification Technology, 2021, **275**: 119123.

[20] Grimme S, Ehrlich S, Goerigk L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory[J]. Journal of Computational Chemistry, 2011, **32**(7): 1456-1465.

[21] Lu T, Chen F W. Multiwfn: A multifunctional wavefunction analyzer[J]. Journal of Computational Chemistry, 2012, **33**(5): 580-592.

[22] Lu T. A comprehensive electron wavefunction analysis toolbox for chemists, Multiwfn[J]. The Journal of Chemical Physics, 2024, **161** (8): 082503.

[23] Humphrey W, Dalke A, Schulten K. VMD: Visual molecular dynamics[J]. Journal of Molecular Graphics, 1996, **14**(1): 33-38.

[24] Chamoun-Farah A, Thacker P J, Benavides-Perez I D, et al. Effect of water on the viscosity, density, and ionic conductivity of ionic liquids with aprotic N-heterocyclic anions[J]. Journal of Chemical & Engineering Data, 2026, **71**(1): 114-128.

[25] Bai Y G, Wang K X, Wang L L, et al. Experimental investigation on post-combustion CO_2 capture for [Bpy] [NO_3] and MEA aqueous blends with lower regeneration energy[J]. Separation and Purification Technology, 2023, **327**: 124846.

[26] Jia K G, Zeng S J, Li G L, et al. Impurities effect on CO_2 capture from flue gas by energy-efficient diazole-functionalized ionic liquid solvents[J]. Separation and Purification Technology, 2025, **358**: 130270.

[27] Jiang W F, Zhang L Q, Zhang Y D, et al. Effect of SO_2 on CO_2 absorption in the biphasic [N1111] [Gly]/ethanol absorbent: Experimental evaluation and quantum chemical analysis[J]. Separation and Purification Technology, 2026, **389**: 136909.

[28] Zhao P P, Li Z H, Dong B K, et al. An enhancement and mechanism of CO_2 capture by a dual-amino porous ionic liquid[J]. Separation and Purification Technology, 2025, **360**: 131064.

[29] Zhang Y Q, Ma D F, Fu T T, et al. A comparative investigation on carbon dioxide capture performance and applicability of three novel choline amino acid ionic liquid aqueous solutions[J]. Chemical Engineering Journal, 2025, **515**: 163522.

[30] Meng H Y, Lu C, Yang J H, et al. The energy-saving strategy for

CO_2 capture in ionic liquid reinforced amine absorbents with a potentiometric method[J]. ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 2025, **13**(5): 2097−2106.