FCSE 前沿研究：基于分子间弱相互作用分离双环芳烃和三环芳烃化合物

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/29767.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

FCSE
前沿研究：基于分子间弱相互作用分离双环芳烃和三环芳烃化合物。论文标题：Deciphering the intermolecular interactions for separating bicyclic and tricyclic aromatics via different naphthalene-based solvents

期刊：Frontiers of Chemical Science and Engineering

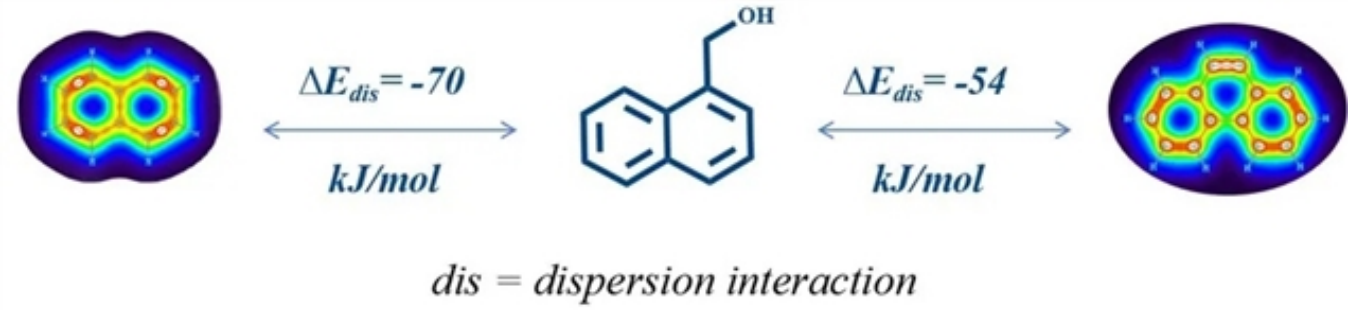
作者：Pengzhi Bei, Antony Rajendran, Jie Feng, Wen-Ying Li

发表时间：03 Apr 2024

DOI：10.1007/s11705-024-2462-9

微信链接：点击此处阅读微信文章

阅读原文请点击Deciphering the intermolecular interactions for separating bicyclic and tricyclic aromatics via different naphthalene-based solvents



背景及意义

煤焦油中含有丰富的稠环芳烃化合物，以双环芳烃和三环芳烃化合物为主，它们是制造燃料、染料和医药中间体的重要原料。从结构上看，稠环芳烃化合物没有明显的氢键识别位点，很难与溶剂之间形成较强的氢键作用。因此，利用分子间弱相互作用分离稠环芳烃化合物具有一定的挑战

。课题组的前期工作则是利用了分子间弱相互作用中的静电相互作用，完成了同分异构体蒽和菲之间的分离，但是对于双环芳烃和三环芳烃，静电作用的分离效果有限。因此，本研究以双环芳烃和三环芳烃的结构差异作为切入点，通过萘基溶剂与待分离化合物之间色散相互作用的不同，进行了煤焦油中双环芳烃和三环芳烃化合物的分离研究，并对分离过程中的能量形式、作用位点和电子转移情况进行了深入的考察和验证。

内容及主要结论

本研究主要以分子间弱相互作用中的色散相互作用为基础，完成了双环芳烃和三环芳烃化合物之间的分离。首先以萘分子、菲分子、蒽分子、芴分子等稠环芳烃化合物彼此之间的结构差异为导向，以色散相互作用作为切入点，选取了合适的萘基溶剂考察其分离性能，由于萘基化合物与萘分子之间具有高度相似的结构，因此通过调控取代基供/吸电子能力的不同以及进一步控制取代基诱导效应的强弱来调控溶剂与萘分子之间色散相互作用能量的大小，并且从多个方面对分离机理进行了验证，具体结论如下：

1. 不同稠环芳烃化合物的π-电子离域情况有所不同（图1）。在萘分子中，π-电子在两个六元环上均有分布，显示出较强的电子连通性；相比之下，其他的三环芳烃化合物则表现出较弱的π-电子离域现象，这种差异使得萘分子与溶剂之间更容易形成较强的色散相互作用。

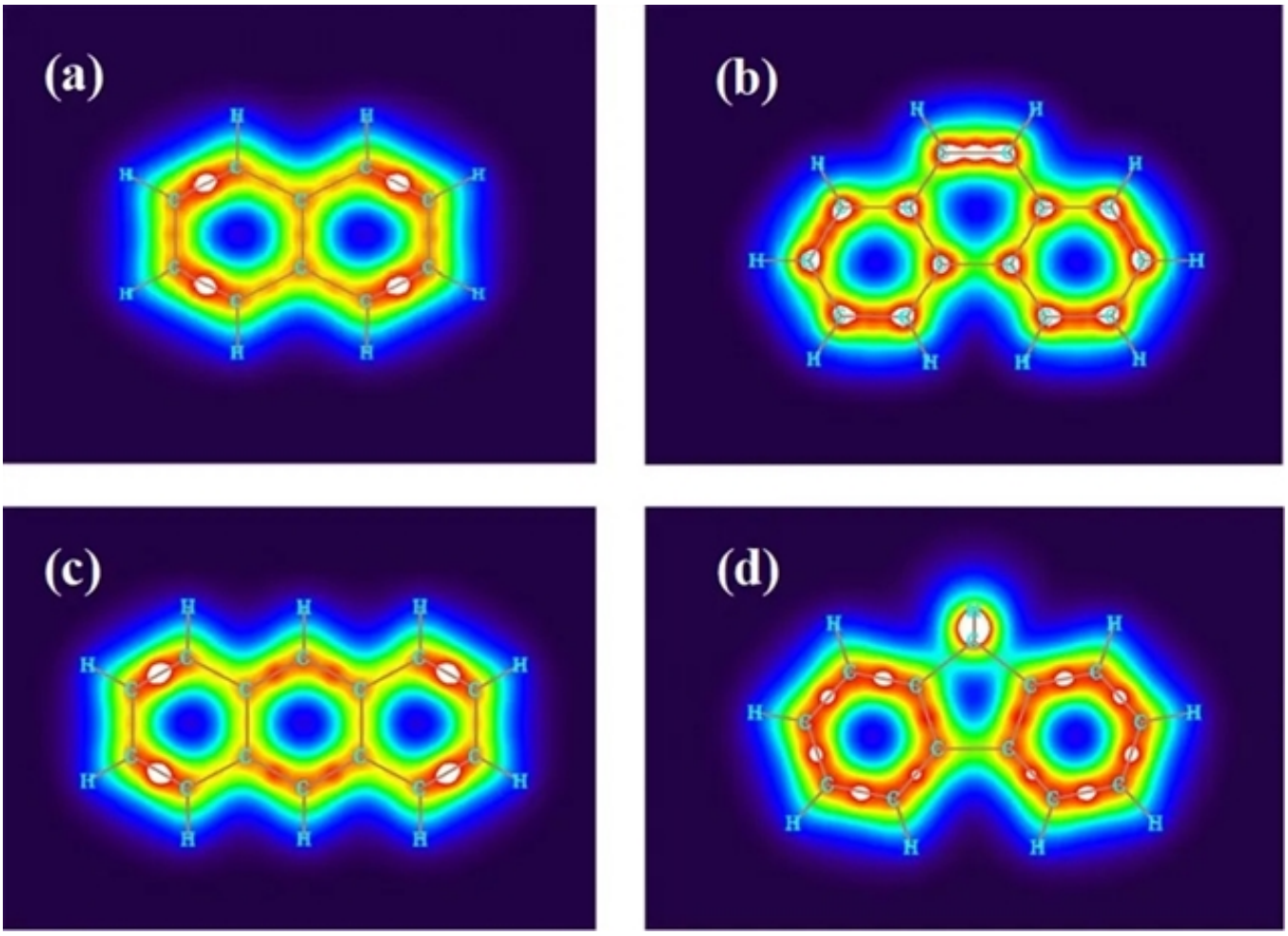


图1 萘分子（a）、菲分子（b）、蒽分子（c）和芴分子（d）的定域化轨道指示函数图

2. 根据所考察的不同萘基结构，通过调整取代基及其诱导效应的强弱来影响色散相互作用的强度。研究发现，萘甲醇溶剂在最优条件下展现出最佳的分离效果，结果如图2所示。此外，利用正己烷进行反萃取操作，也能够较好地实现溶剂的循环再生过程。

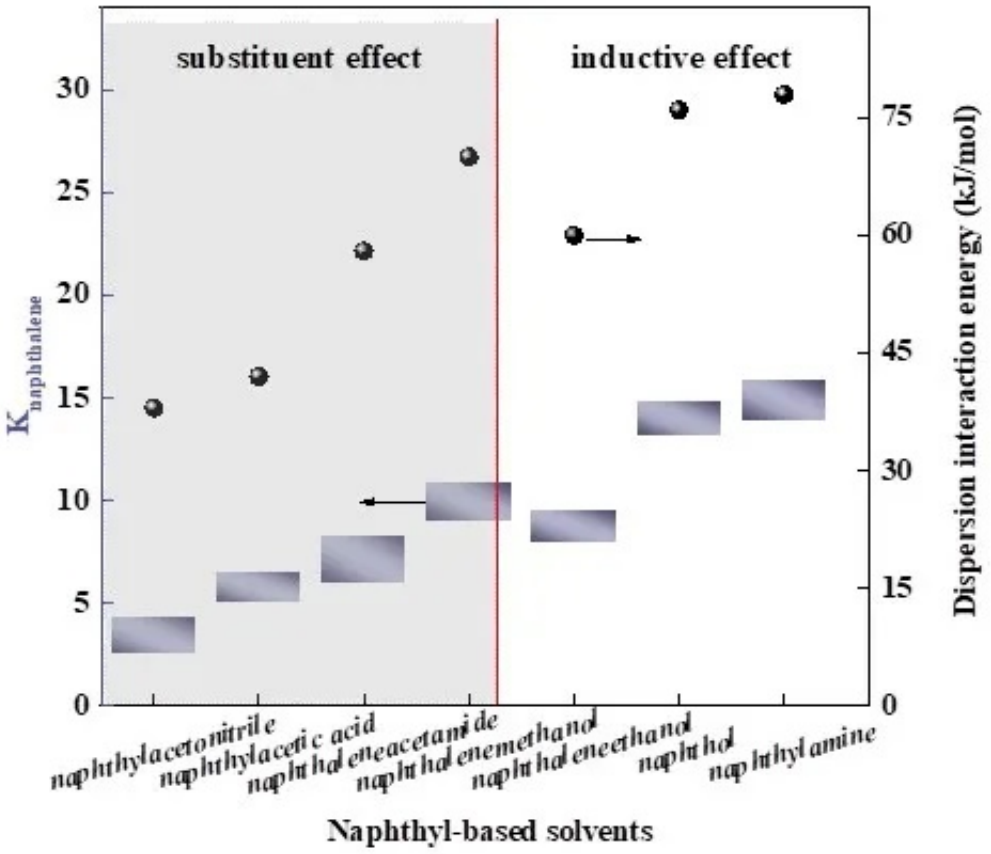


图2 不同萘基溶剂的取代基效应和诱导效应

3. 能量分解结果显示，萘甲醇与萘之间的色散相互作用能高于萘甲醇与菲之间的色散相互作用能，这种色散相互作用能量的差异便是分离过程的有效的分离驱动力。

亮点

本研究揭示了不同分子结构对色散相互作用的影响，通过调控取代基效应和诱导效应进行了双环芳烃和三环芳烃之间的分离研究，拓宽了分子间弱相互作用在稠环芳烃化合物分离领域的应用。

引用格式：Pengzhi Bei, Antony Rajendran, Jie Feng, Wen-Ying Li. Deciphering the intermolecular interactions for separating bicyclic and tricyclic aromatics via different naphthalene-based solvents. Front. Chem. Sci. Eng., 2024, 18(10): 111 https://doi.org/10.1007/s11705-024-2462-9

作者及团队介绍



贝鹏志（第一作者）太原理工大学省部共建煤基能源清洁高效利用国家重点实验室博士研究生，研究方向为煤焦油中稠环芳烃化合物的分离。



李文英（通讯作者）太原理工大学教授，国家级人才，先后主持国家重点研发计划、国家自然科学基金等重要项目。

团队介绍：煤炭清洁高效利用课题组由李文英教授、冯杰教授带领，隶属于省部共建煤基能源清洁高效利用国家重点实验室，依托单位为太原理工大学。课题组一直围绕煤炭清洁高效转化利用方向，包括煤的物理化学结构与煤热解气化反应性，低阶煤热解与高效转化过程设计，煤基液体产物深加工精制，煤制清洁燃料/化学品催化剂研制及工艺开发，煤基多联产系统设计等方向持续进行深入的探索与研究。



《前沿》系列英文学术期刊

由教育部主管、高等教育出版社主办的《前沿》（Frontiers）系列英文学术期刊，于2006年正式创刊，以网络版和印刷版向全球发行。系列期刊包括基础科学、生命科学、工程技术和人文社会科学四个主题，是我国覆盖学科最广泛的英文学术期刊群，其中12种被SCI收录，其他也被AHCI、Ei、MEDLINE或相应学科国际权威检索系统收录，具有一定的国际学术影响力。系列期刊采用在线优先出版方。

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发