
FCSE 前沿研究：从煤直接液化石脑油中萃取精馏环烷烃单体

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/30693.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：从煤直接液化石脑油中萃取精馏环烷烃单体。 论文标题：Extractive distillation of cycloalkane monomers from the direct coal liquefaction fraction

期刊：Frontiers of Chemical Science and Engineering

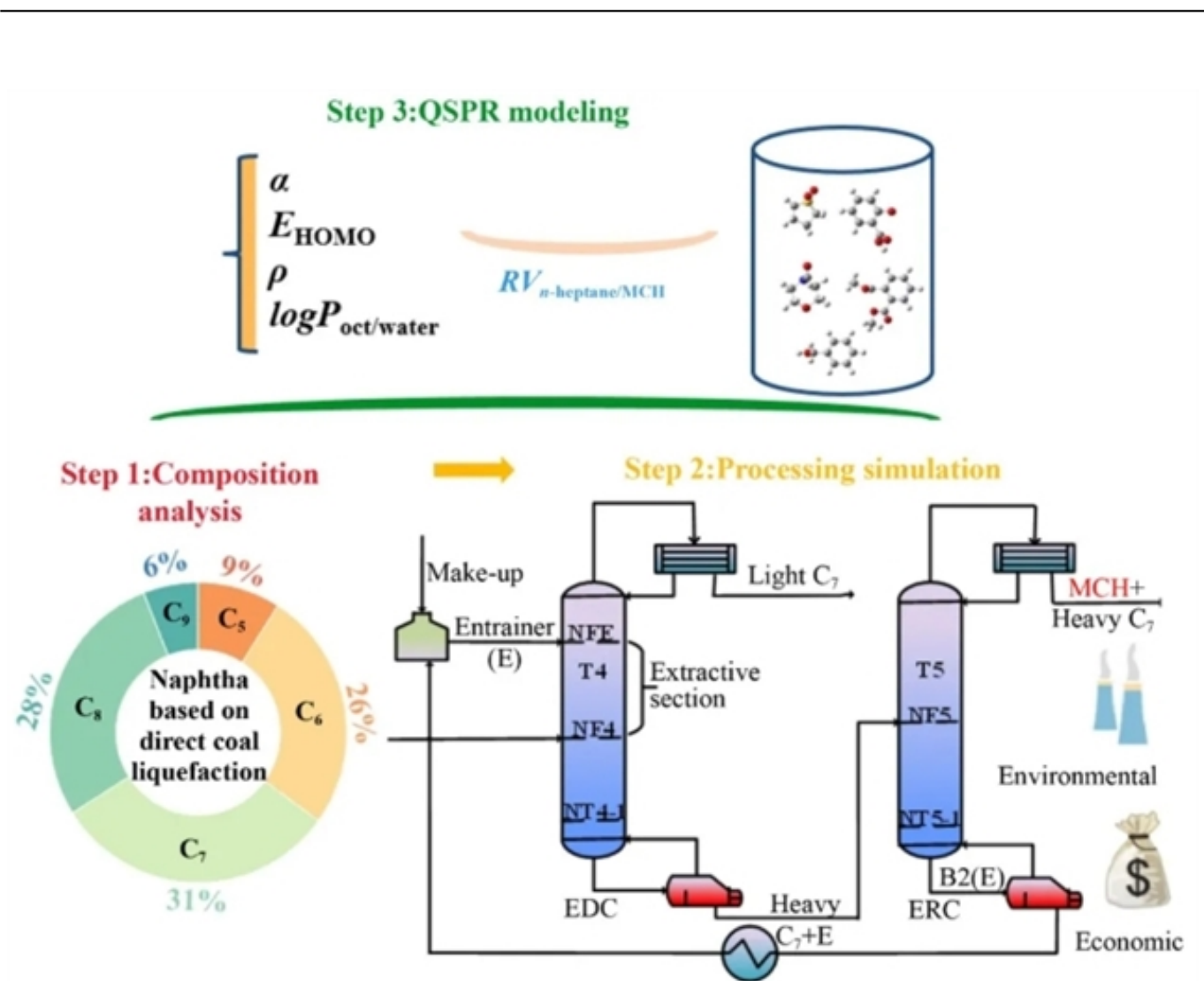
作者：Shuo-Shuo Zhang, Xing-Bao Wang, Wen-Ying Li

发表时间：15 Nov 2024

DOI：10.1007/s11705-024-2482-5

微信链接：[点击此处阅读微信文章](#)

阅读原文请点击[Extractive distillation of cycloalkane monomers from the direct coal liquefaction fraction](#)



背景及意义

石脑油是从原油中提取的主要炼油产品，其沸点范围为30至200 ° C。该产品含有多种C5至C11的碳氢化合物，包括正构烷烃、异链烷烃、烯烃、环烷烃和芳烃，其组成取决于原油类型和炼油工艺。神华鄂尔多斯煤直接液化工业设备每年生产约186,840吨石脑油，其中超过73%的成分是环烷烃。石脑油的传统加工方法主要是通过催化脱氢或与汽油混合作为溶剂制备混合芳烃。这种方法不仅面临着与传统石油产品的市场竞争，限制了其经济价值，而且无法充分利用煤直接液化石脑油中高浓度的环烷烃。此外，高纯度环烷烃单体的制备主要依赖合成方法，这些方法通常需要特定的催化剂和复杂的反应条件，导致设备投资和原料成本较高，难以满足国内对环烷烃单体的大量需求。因此，从煤直接液化石脑油中分离环烷烃单体变得尤为重要，这对于石脑油的高值化利用和缓解环烷烃单体的需求压力具有重要意义。

内容及主要结论

本研究利用定量结构-性质关系模型有效地预测了各种萃取剂中的RVn-heptane/MCH。该模型的统计分析显示了良好的性能指标，包括决定系数(R²)为0.88，交叉验证系数(Q²)为0.94，均方根误差(RMSE)为0.02。RVn-heptane/MCH预测模型是以 α , E_{HOMO} , ρ , 和 $\log P_{\text{oct/water}}$ 作为分子结构描述符，通过逐步回归的方法建立的。该模型揭示了RVn-heptane/MCH与萃取剂分子结构之

间的密切联系，并强调密度是一个关键的描述因子。由于分子间的立体阻碍减少，缺乏支链的萃取剂表现出更高的密度和相对挥发性。此外，还使用 Aspen Plus 软件模拟了从煤直接液化石脑油中分离单体环烷的过程。模拟得到的环己烷和甲基环己烷纯度超过 0.99，产率超过 0.90，为工业化应用提供了基本参数。经济分析表明，使用水杨酸作为萃取剂，每年的总成本最低，分离效率明显提高，这归功于RVn-heptane/MCH的显著变化。总之，本研究提出了一种从石脑油中分离环烷烃单体的科学而经济的方法，为相关工业流程的设计和优化提供了启示。

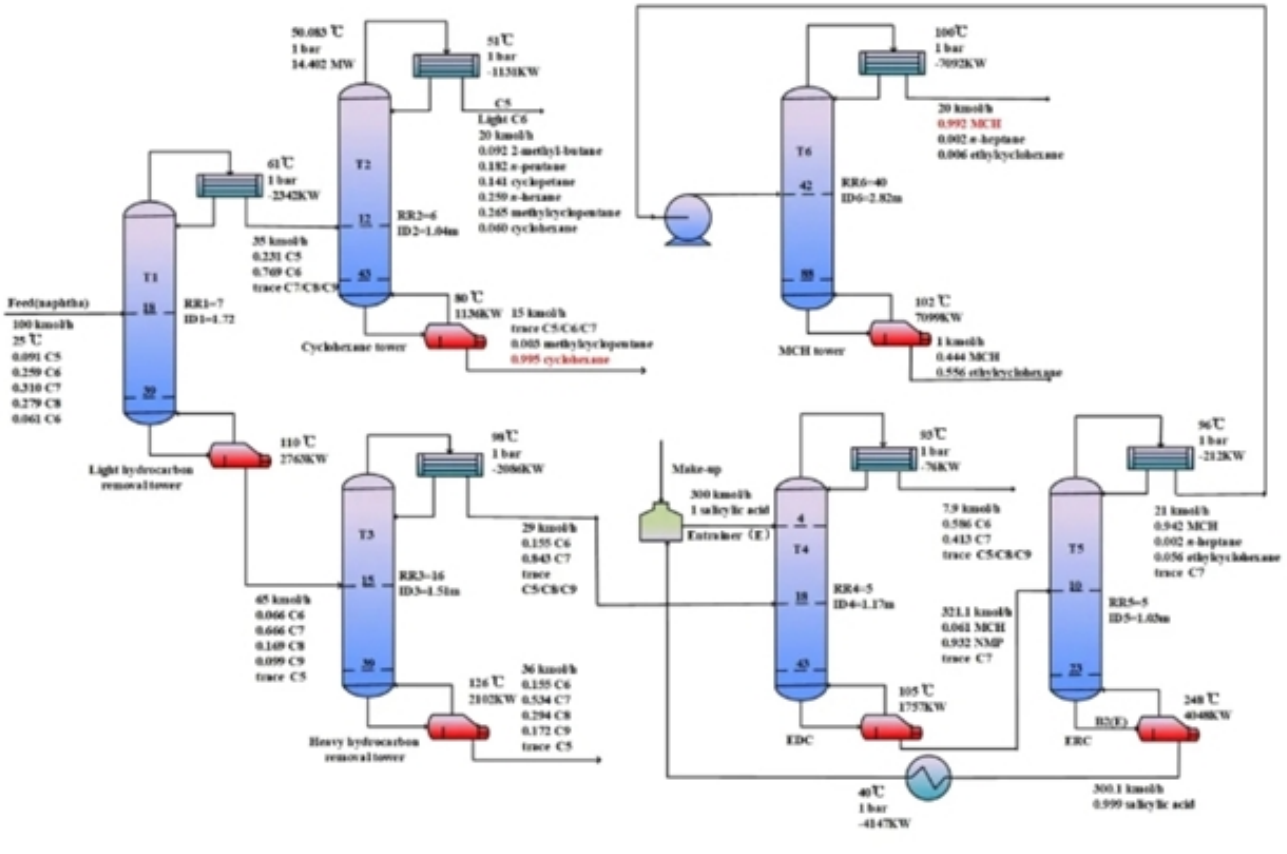


图1 从煤直接液化石脑油中萃取精馏环烷烃单体的工艺流程图

未来展望

李文英研究团队认为，论文仅针对单一溶剂进行了定量结构-性质关系模型的筛选，未考虑混合溶剂的可能性。在实际应用中，混合溶剂可能具有更好的分离效果和更广泛的适用性。因此，未来的研究可以进一步拓展至混合溶剂的筛选，并探索其在萃取精馏过程中的应用潜力。

引用格式：Shuo-Shuo Zhang, Xing-Bao Wang, Wen-Ying Li. Extractive distillation of cycloalkane monomers from the direct coal liquefaction fraction. *Front. Chem. Sci. Eng.*, 2024, 18(11): 130
<https://doi.org/10.1007/s11705-024-2482-5>

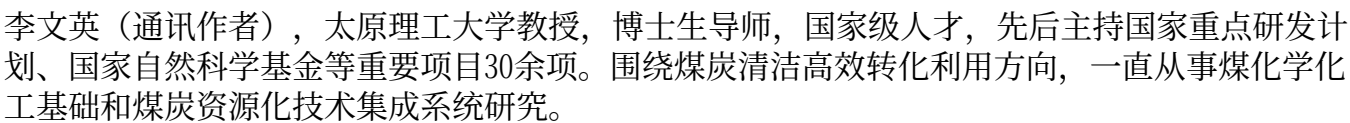
作者及团队介绍



张硕硕（第一作者），太原理工大学化学工程专业研究生，主要研究方向为煤直接液化领域的分离。



王兴宝（通讯作者），太原理工大学副教授。主要从事能源清洁高效转化的基础研究和工业应用方面的工作，主持国家自然科学基金、国家重点研发计划子课题、国家能源集团2030重大项目先导项目等，2018年获三晋英才青年优秀人才称号。目前已在Angewandte Chemie International Edition, Chemical Engineering Journal, ACS Catalysis等期刊上发表SCI论文60余篇。申请发明专利10件，已授权6件。



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式,保证文章以最快速度发表。

<http://journal.hep.com.cn>



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](https://www.iikx.com)转发