

文章编号:1008-1534(2015)02-0161-05

基团贡献法预测离子液体性质及酸性气体溶解度

刘雅茹^{1,2}, 刘宝友^{1,2}

(1. 河北科技大学环境科学与工程学院, 河北石家庄 050018; 2. 河北省污染防治生物技术实验室, 河北石家庄 050018)

摘要:基团贡献法是预测化合物物化性质的有效方法, 被广泛应用于纯物质及混合体系的物性估算。介绍了基团贡献法对离子液体的密度、黏度、电导率及对 CO₂ 和 SO₂ 气体吸收的预测。分析表明, 通过建立基团贡献法的参数模型, 可以定向设计离子液体, 推动离子液体在气体吸收方面的工业化应用。对基团贡献法主要优势进行总结, 对 ILs 吸收气体的工业化应用进行了展望。

关键词:大气污染防治工程; 基团贡献法; 离子液体; 预测; 性质

中图分类号:X511

文献标志码:A

doi: 10.7535/hbgykj.2015yx02013

Group contribution method for prediction of ionic liquids properties and flue gas absorption

LIU Yaru^{1,2}, LIU Baoyou^{1,2}

(1. School of Environmental Science and Engineering, Hebei University of Science and Technology, Shijiazhuang, Hebei 050018, China; 2. Pollution Prevention Biotechnology Laboratory of Hebei Province, Shijiazhuang, Hebei 050018, China)

Abstract: Group contribution method is an effective method to predict the physicochemical properties of the compounds, and is widely used in the estimation of physical properties of pure substances and mixed system. This paper introduces the application of group contribution method in the prediction of ionic liquid's density, viscosity, conductivity and CO₂, SO₂ gas absorption. The analysis shows that, through establishment of group contribution method parameter model, ionic liquids can be directionally designed to promote the industrial application in gas absorption area. The main advantage of group contribution method is summarized and the industrial application trend of ionic liquid for absorbing gas is prospected.

Keywords: air pollution prevention and control engineering; group contribution method; ionic liquid; prediction; properties

离子液体(ILs)作为一种新型绿色溶剂,已在能源、环境、材料等领域中展现出广阔的应用前景^[1]。但 ILs 的种类繁多, 性质多种多样, 而工业应用过程中需要完整的数据资料, 完全依赖实验测定性质既不可能也没必要。因此, 开发合适的预测模型估算

ILs 的热物理性质显得极为迫切。基团贡献法是预测化合物物化性质的有效方法, 被广泛应用于纯物质及混合体系的物性估算。该方法可以通过少量的实验数据来预测大量未知化合物的物性数值。相比于其他方法, 基团贡献法具有预测 ILs 较为全面; 预

收稿日期:2014-09-03;修回日期:2014-10-27;责任编辑:王海云

基金项目:河北省教育厅高等学校青年基金(2012007)

作者简介:刘雅茹(1990—),女,河北石家庄人,硕士研究生,主要从事绿色化学应用技术方面的研究。

通讯作者:刘宝友教授。E-mail:lby7150@sina.com

刘雅茹,刘宝友. 基团贡献法预测离子液体性质及酸性气体溶解度[J]. 河北工业科技, 2015, 32(2): 161-165.

LIU Yaru, LIU Baoyou. Group contribution method for prediction of ionic liquids properties and flue gas absorption[J]. Hebei Journal of Industrial Science and Technology, 2015, 32(2): 161-165.

测过程较为简单;能够反向设计 ILs;相对偏差较小等特点。本文结合近几年的文献报道,按 ILs 性质及吸收酸性气体进行综述,以期为新型 ILs 的设计及实现工业化应用提供指导。

1 基团贡献法预测离子液体的物性

有关预测 ILs 物性的方法有很多,可分为实验模型和理论模型两类。其中实验类有基团贡献法、定量结构性质(QSPR)法等,理论类包括分子设计法、状态方程(EoS)法、统计关联式(Corr)法等^[2]。QSPR 法很难为具体要求提供需要 ILs 的最佳性质。分子设计法是复杂而漫长的计算过程^[3-4],因此,对研究人员来说不是一种合适的预测模型。EoS 法仅适合于理想气体的模型,所以,对实际气体只能近似地应用于低压力范围^[5]。基团贡献法已应用于各类 ILs 的研究,具有通用性强、预测过程简单等特点。

1.1 密度

近几年,国内外文献中报道了多种有关预测 ILs 密度的基团贡献法^[6-14]。其预测方式由需要多个温度点下的数据进行预测发展到有一个温度点就可以预测其他温度下的 ILs 密度。

2010 年,QIAO^[11]等报道了一种预测 ILs 密度的基团贡献法,将离子液体按阴阳离子划分。其中阳离子均含有一个中心和取代基,将取代基的烷基链切断成单个烷基。他们共预测了 123 种纯 ILs 和 13 种混合 ILs(包含咪唑类、吡啶类、季铵盐类等 ILs),其平均偏差分别为 0.88% 和 1.27%。再挑选 188 个数据点利用最小二乘法,计算了 3 种典型的 ILs 的密度,其相对平均偏差为 0.27%。其数学模型见式(1):

$$\rho = A + BP + CT \quad (1)$$

式中: ρ 表示密度(g/cm^3); P 表示压强(MPa); T 表示温度(K), A, B, C 是 3 个参数(各个基团贡献值的总和)。与人工神经网络(ANN)相比,该模型的平均相对偏差较小、应用范围较广。其不仅能预测纯 ILs 的密度,也能预测二元混合 ILs 的密度。

2011 年,SHAHBAZ^[13]等提出了一种改进的 Lydersen-Joback-Reid 基团贡献模型,该模型综合了 Lydersen 模型对临界压力、体积及 Joback-Reid 模型对临界温度和沸点温度估算精度较高的优势。用该模型预测了 9 种低共熔离子液体在不同温度(298.15~368.15 K)下的密度,其相对偏差为 1.9%。该模型的优点在于仅需测定一个温度点下的密度,就可以预测其他各个温度下的 ILs 密度,且

计算精度较高。2014 年,EVANGELISTA^[14]等研究了一种新的基团贡献法(GCVOL)来预测纯 ILs 的密度。相比与之前的研究,该研究更为广泛。他们在温度为 251.62~473.15 K,压力为 0.1~300 MPa 的条件下,选取了 864 种 ILs 共 21 845 个数据点进行预测,其平均相对偏差为 0.83%。该模型的预测精度较好,可用来预测 ILs 密度。

1.2 黏度

黏度的测量是实现安全生产、节约和开发能源的重要手段。其在理论研究中对 ILs 其他性质(电导率等)也有影响。工业的发展和大量设备的使用,润滑问题越来越受到关注,液体黏度研究受到人们的广泛重视。已经有文章^[15-20]报道了用基团贡献法预测 ILs 的黏度。

2008 年,GARDAS^[18]等在温度为 293~393 K 和黏度为 4~21 000 $\text{Pa} \cdot \text{S}$ 范围内,用基团贡献法预测了 29 种 ILs(包含咪唑类、吡啶类、吡咯类)的黏度,对大约 500 个数据点进行研究,结果表明平均相对偏差为 7.78%。使用的 Orrick-Erbar 估算模型见式(2):

$$\ln \frac{\eta}{\rho M} = A + \frac{B}{T}; \rho = \frac{M}{NV(a + bT + cP)} \quad (2)$$

式中: ρ 和 η 分别表示 ILs 的密度和黏度; M 和 T 分别代表相对分子质量和温度; N 是阿伏伽德罗常数, V 是分子体积; a, b, c 是各个基团的贡献值; A, B 是 a, b 贡献值的总和。该模型的基团划分:将 ILs 中的阳离子中心与阴离子划分为 2 个基团,剩下的烷基取代基切成甲基或亚甲基。

2012 年,GHARAGHEIZI^[19]等发现了一种在常压下预测 ILs 黏度的基团贡献法,比 GARDAS^[18]等的模型更有通用性。他们研究了 443 种离子液体的 1 672 个具有黏度贡献值的基团数据点。为了区别阴、阳离子结构对黏度的影响,故将阴阳离子划分开。预测结果发现,该模型的平均相对偏差低于 6.4%,优于 MOUSAVISAFAVI^[20]等在 2013 年提出的 QSPR 模型,其预测结果的平均相对偏差为 9%。

2014 年,BAJIC^[21]等研究了预测 ILs 黏度的基团贡献法。与 GARDAS^[18]等和 GHARAGHEIZI^[19]等的研究相比,主要预测 ILs 与有机相混合体系的黏度。运用两种不同的基团贡献法 UNIFAC-VISCO 和 ASOG-VISCO 对 10 种混合体系进行预测,加入新影响参数的 UNIFAC-VISCO 模型相对偏差较高(0.27%~11.76%),而 ASOG-VISCO 模型预测结果比 UNIFAC-VISCO 模型好。该模型可用于预测某些 ILs 的二元体系,对于其他体系的相对偏差在

11%以上。

1.3 电导率

电导率是 ILs 的重要性质之一,其可以帮助研究人员了解离子的结构,以便控制设计工业进程。在电化学领域方面,高电导率的 ILs 可以用来制作高性能的电池。随着 ILs 的快速发展,其在许多科学领域得到广泛应用。因此,预测电导率对科学地设计 ILs 非常重要^[21-24]。

2007 年,MATSUDA^[22] 等提出了预测 ILs 电导率的基团贡献模型。这次研究在温度为 -30~70 °C 范围内,共选取 206 个数据点作为参数对 ILs 进行预测,发现其实验值与计算值之间的相关系数 R^2 为 0.909 4。该模型主要依靠阳离子的类型、侧链长度及阴离子类型,即可预测 ILs 的性质。他们还利用该模型对 ILs 进行反向设计,可根据需要,设计出具有理想电导率的 ILs。

2009 年,GARDAS^[23] 等应用基团贡献法预测 ILs 的电导率。他们在温度为 258.10~433.15 K,电导率为 0.01~12.68 S/m 进行研究。利用 300 个数据点预测了 15 种 ILs(包括咪唑类、吡啶类、毗

咯类、季铵盐类)的电导率。其数学模型(VTF 方程)见式(3):

$$\ln \lambda = \ln A_\lambda + \frac{B_\lambda}{(T - T_{0\lambda})}; \\ A_\lambda = \sum_{i=1}^k n_i a_{i,\lambda}, B_\lambda = \sum_{i=1}^k n_i b_{i,\lambda}. \quad (3)$$

式中: λ 是 ILs 的电导率; n_i 为基团 i 出现的次数; k 为基团 i 出现的总数; $a_{i,\lambda}, b_{i,\lambda}$ 分别为对应基团的贡献值; $T_{0\lambda} = 165.06$ K。该模型与 MARSUDA 提出的模型均适用于预测黏度。两种模型相比,VTF 方程更为简单,且精度高。2014 年,GHARAGHEIZI^[24] 等将最小二乘向量机与基团贡献法联用,选取 1 077 个实验数据点,对 54 种 ILs 的电导率进行预测,其平均相对偏差低于 3.3%。

表 1 列出了基团贡献法对 ILs 密度、黏度、电导率预测的一些参数及相对偏差。可以看出,基团贡献法对比于其他方法有明显优势:预测范围广,适用条件要求低,相对偏差较小(即预测结果准确)。

表 1 不同模型对 ILs 物性预测的典型对比

Tab. 1 A typical comparison of different models for the prediction of the physical properties of ILs

性质	模型类型	ILs 数量	T/K	P/MPa	相对偏差/%	参考文献
密度	GC	220	273~423	0.1	0.48	[25]
	Corr	146	270~360	0.1	2.6	[26]
	QSPR	—	258~393	0.09~207	2.0	[27]
黏度	GC	29	293~393	0.1	7.78	[18]
	Empirical Cor	1	283~363	0.1	1.37	[28]
电导率	GC	15	258.1~433.15	0.1	4.57	[23]
	Hole-Theory	24	298	0.1	2.2	[29]

2 基团贡献法预测 ILs 对烟道气体的吸收

烟道气的主要成分为 CO₂,CO,NO,NO₂,SO₂,H₂S 等,对环境有较严重的破坏。ILs 是一种环境友好的绿色材料,它对气体有较好的分离吸收功能。因此,对烟道气的治理提供了一种绿色环保的替代方案。预测烟道气的主要成分在 ILs 中的溶解度,设计理想的吸收过程显得尤为重要。截至目前,对于采用基团贡献法对 H₂S,NO₂,CO,NO 的溶解性还未见有文献报道,以下仅对 CO₂ 和 SO₂ 的预测进行综述。

2.1 对 CO₂ 气体吸收

CO₂ 作为重要的温室气体,与其他气体的分离在工业应用上尤为重要。实验表明,ILs 对 CO₂ 有较好的吸收分离效果。

2011 年,伍艳辉^[30] 等利用基团贡献法预测了常压下 CO₂ 在含极性基团的咪唑类离子液体中的溶解度。通过计算得到亨利系数,进而得到气体在该类离子液体中的溶解选择性。预测结果表明,极性基团的引入提高了 ILs 对 CO₂ 的吸收,计算值与实验结果一致。其数学模型见式(4)和式(5):

$$P_i = H_i x_i; \ln H_i = \ln f_i^o + \frac{V\Phi_{IL}^2}{RT} (\delta_{IL} - \delta_i)^2 = \\ A + B(\delta_{IL} - \delta_i)^2. \quad (4)$$

$$a_{ij} = \frac{x_i}{x_j} = \frac{H_j}{H_i}; \delta_{IL} = \frac{\sum_i F_i}{V_m}. \quad (5)$$

其中, A 是取决于气体和离子液体的种类,不随体系温度和压力变化的参数, B 是与气体和离子液体的种类以及温度有关的参数。在给定的温度下,

A, B 均可以视为常数。 δ_{IL}, δ_i 分别为气体和离子液体的溶解度参数。 H_i 是亨利常数， a_{ij} 是气体在离子液体中的溶解度， F_j 是基团 j 的物质的量吸引常数。该模型可以用于预测多种气体在一种离子液体中的溶解选择性，可根据基团贡献来设计离子液体，从而使其更好地应用在工业中。

2012 年，ASHRAFMANSOURI^[31] 等报道了一种估算气体在 ILs 中的溶解度的基团贡献模型，该模型是基于统计缔合流体理论(SAFT- γ)。在温度为 313.15~353.15 K，压力达 10 MPa 时，该模型能较好地描述 ILs 与气体的相行为。他们通过对参数的优化设计预测了一些 ILs 与 CO₂ 系统，取得了较好的预测结果，其平均相对偏差为 1.309 7%。该模型能够很好地预测这种系统的相行为，可用于未来的 ILs 研究中。

2.2 对 SO₂ 气体吸收

SO₂ 是大气中数量最大的有害成分，80% 的 SO₂ 来源于烟道气排放。为了减少或消除其危害，开发了各种治理方法。其中将 ILs 吸收 SO₂ 应用到工业中，实现清洁生产，具有广泛的应用前景^[32-37]。

2010 年，MARTIN^[32] 等应用一种基团贡献状态方程对二元体系(SO₂+ILs)的热力学模型进行优化。他们认为气体溶解度是吸引力相和自由体积相的加和。其中自由体积相由临界直径 d_c 和标准范德华体积关联计算，吸引力相由纯 ILs 基团常数、纯基团能参数和基团相互影响参数决定。这些参数可从文献[33]中查到，为了计算简单，假设基团间的相互影响参数为 1 或 0。在温度为 283~323 K 范围内，选取 11 个数据点对(SO₂+[bmpyrr][Tf₂N])进行预测，其平均相对压力偏差为 6.2%。同年，CARVALHO^[34] 等用 Flory-Huggins 模型对 SO₂ 在 ILs 中的溶解度进行预测，预测结果出现正负 2 种偏差，在 -0.042~0.059 之间。两种模型相比，基团贡献法实验次数少，更为简单，且准确度较高。

2013 年，王卫^[35] 拟合了 ILs-SO₂ 体系的 UNIFAC 模型。在 298.15 K 下，对 5 种离子液体与 SO₂ 用 UNIFAC 模型进行模拟，并与 COSMO-RS 模型以及 COSMO-thermX 模型进行对比，发现只有 UNIFAC 模型有较好的实验结果，[EMIM]^[BF₄] 的平均相对偏差为 3.25%。在 298.15 K 下，不同压力下不同 ILs 对 SO₂ 的吸收差别不大。其计算气体溶解度模型见式(6)：

$$x_1 P \phi(T, P, x_1) = x_2 \gamma P^* \quad (6)$$

x_1 和 x_2 分别代表气体在液相和气相中的物质的量分数； $\phi(T, P, x_1)$ 表示气相中气体的逸度系数； P 是系统的压力； P^* 是气体的饱和蒸汽压， γ 是气

体在液相中的活度系数，可以由基团贡献 UNIFAC 模型求得。

3 结语

目前，已有大量的文献报道采用基团贡献法对 ILs 性质进行预测，并取得了良好的预期效果。与其他方法相比，基团贡献法具有应用范围广、与计算机联用预测过程更简单、通用性强等优点。基团贡献法的核心应是基团的划分方式，因此，对基团划分的策略统一是未来研究的重点。对于同一性质的预测模型较多，因此，建立在统一尺度上的模型及参数的选取，显得尤为重要。模拟预测与实验验证的结合，才能更好地指导进行 ILs 结构设计，实现由“经验研究”到“定向优化”的研究飞跃。对烟道气在 ILs 溶解度的预测研究还处于早期阶段，研究设计基于基团贡献法的通用的气体吸收模型，必将有利地推动 ILs 应用于烟道气治理的工业化进程。

参考文献/References:

- [1] PENA-PEREIRA F, NAMIESNIK J. Ionic liquids and deep eutectic mixtures: Sustainable solvents for extraction processes[J]. Chem Sus Chem, 2014, 7(7): 1784-1800.
- [2] COUTINHO J A P, CARVALHO P J, OLIVEIRA N M C. Predictive methods for the estimation of thermophysical properties of ionic liquids [J]. RSC Advances, 2012, 2 (19): 7322-7346.
- [3] MAGINN E J, ELLIOTT J R. Historical perspective and current outlook for molecular dynamics as a chemical engineering tool[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2010, 49(7): 3059-3078.
- [4] RAI N, MAGINN E J. Vapor-liquid coexistence and critical behavior of ionic liquids via molecular simulations[J]. Journal of Physical Chemistry Letters, 2011, 2(12): 1439-1443.
- [5] VEGA L F, VILASECA O, LLOVELL F, et al. Modeling ionic liquids and the solubility of gases in them: Recent advances and perspectives[J]. Fluid Phase Equilibria, 2010, 294(1/2): 15-30.
- [6] LARRIBA M, GARCIA S, NAVARRO P, et al. Physical properties of *n*-butylpyridinium tetrafluoroborate and *n*-butyl pyridinium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide binary ionic liquid mixtures[J]. Journal of Chemical & Engineering Data, 2012, 57(4): 1318-1325.
- [7] PADUSZYNSKI K, DOMANSKA U. A new group contribution method for prediction of density of pure ionic liquids over a wide range of temperature and pressure[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2012, 51(1): 591-604.
- [8] BHATTACHARJEE A, VARANDA C, FREIRE M G, et al. Density and viscosity data for binary mixtures of 1-alkyl-3-methylimidazolium alkylsulfates+water[J]. Journal of Chemical & Engineering Data, 2012, 57(12): 3473-3482.
- [9] LAZZUS J A. A group contribution method to predict ρ - T - P of ionic liquids [J]. Chemical Engineering, 2010, 197 (7): 974-1015.
- [10] 乔燕. 离子液体/二氧化碳体系密度黏度和相平衡研究[D]. 天

- 津:天津大学,2010.
- QIAO Yan. Study on the Densities, Viscosities and Phase Equilibria of Ionic Liquids/Carbon Dioxide System[D]. Tianjin: Tianjin University, 2010.
- [11] QIAO Yan, MA Youguang, HUO Yan, et al. A group contribution method to estimate the densities of ionic liquids[J]. Journal of Chemical Thermodynamics, 2010, 42(7): 852-855.
- [12] 沈冲. 甲醇-乙醇-水-离子液体体系汽液平衡的测定及热力学模型研究[D]. 北京:北京化工大学,2011.
- SHEN Chong. Measurement and Thermodynamic Modeling of Vapor-Liquid Equilibria for Systems Containing Methanol, Ethanol, Water and Ionic Liquids[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2011.
- [13] SHAHBAZ K, MJALLI F S, HASHIM M A, et al. Prediction of deep eutectic solvents densities at different temperatures[J]. Thermochimica Acta, 2011, 515(1/2): 67-72.
- [14] EVANGELISTA N S, do CARMO F R, de SANTIAGO AGUIAR R S, et al. Development of a new group contribution method based on GCVOL model for the estimation of pure ionic liquid density over a wide range of temperature and pressure[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2014, 53(22): 9506-9512.
- [15] ADAMOVA G, GARDAS R L, NIEUWENHUYZEN M, et al. Alkyltributylphosphonium chloride ionic liquids: Synthesis, physicochemical properties and crystal structure[J]. Dalton Transactions, 2012, 41(27): 8316-8332.
- [16] ADAMOVA G, GARDAS R L, REBELO L P N, et al. Alkytriocetylphosphonium chloride ionic liquids: Synthesis and physicochemical properties[J]. Dalton Transactions, 2011, 40(47): 12750-12764.
- [17] COSTA A J L, ESPERANCA J M S S, MARRUCHO I M, et al. Densities and viscosities of 1-ethyl-3-methylimidazolium *n*-alkyl sulfates[J]. Journal of Chemical & Engineering Data, 2011, 56(8): 3433-3441.
- [18] GARDAS R L, COUTINHO J A P. A group contribution method for viscosity estimation of ionic liquids[J]. Fluid Phase Equilibria, 2008, 266(1/2): 195-201.
- [19] GHARAGHEIZI F, IIANI-KASHKOULI P, MOHAMMADI A H, et al. Development of a group contribution method for determination of viscosity of ionic liquids at atmospheric pressure [J]. Chemical Engineering Science, 2012, 80: 326-333.
- [20] MOUSAVIDAFVI S, MIRKHANI S, GHARAGHEIZI F, et al. A predictive quantitative structure-property relationship for glass transition temperature of 1,3-dialkyl imidazolium ionic liquids(Part 1): The linear approach[J]. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 2013, 111(1): 235-246.
- [21] BAJIC D M, SERBANOVIC S P, ZIVKOVIC E M, et al. Prediction and correlation of viscosity of binary mixtures of ionic liquids with organic solvents[J]. Journal of Molecular Liquids, 2014, 197: 1-6.
- [22] MATSUDA H, YAMAMOTO H, KURIHARA K, et al. Computer-aided reverse design for ionic liquids by QSPR using descriptors of group contribution type for ionic conductivities and viscosities[J]. Fluid Phase Equilibria, 2007, 261(1/2): 434-443.
- [23] GARDAS R L, COUTINHO J A P. Group contribution methods for the prediction of thermophysical and transport properties of ionic liquids[J]. AIChE Journal, 2009, 55(5): 1274-1290.
- [24] GHARAGHEIZI F, IIANI-KASHKOULI P, SATTARI M, et al. Development of a LSSVM-GC model for estimating the electrical conductivity of ionic liquids[J]. Chemical Engineering Research and Design, 2014, 92(1): 66-79.
- [25] JACQUEMIN J, GE R, NANCARROW P, et al. Prediction of ionic liquid properties(I): Volumetric properties as a function of temperature at 0.1 MPa[J]. Journal of Chemical & Engineering Data, 2008, 53(3): 716-726.
- [26] VALDERRAMA J O, ZARRICUETA K. A simple and generalized model for predicting the density of ionic liquids[J]. Fluid Phase Equilibria, 2009, 275(2): 145-151.
- [27] LAZZUS J A. $\rho(T, p)$ model for ionic liquids based on quantitative structure-property relationship calculations[J]. Journal of Physical Organic Chemistry, 2009, 22(12): 1193-1197.
- [28] KOLLER T, RAUSCH M H, SCHULZ P S, et al. Viscosity, interfacial tension, self-diffusion coefficient, density, and refractive index of the ionic liquid 1-ethyl-3-methylimidazolium tetracyanoborate as a function of temperature at atmospheric pressure[J]. Journal of Chemical & Engineering Data, 2012, 57(3): 828-835.
- [29] ZHAO He, LIANG Zhongcheng, LI Fang. An improved model for the conductivity of room-temperature ionic liquids based on hole theory[J]. Journal of Molecular Liquids, 2009, 149(3): 55-59.
- [30] 伍艳辉,于世昆,段永超,等. 基团贡献法预测含极性基团离子液体对气体的溶解选择性[J]. 化工学报, 2011, 62(10): 2684-2690.
- WU Yanhui, YU Shikun, DUAN Yongchao, et al. Determination of gas selectivity of solution in RTILs with polar group by group contribution method[J]. CIESC Journal, 2011, 62(10): 2684-2690.
- [31] ASHRAFMANSOURI S S, RAEISSI S. Modeling gas solubility in ionic liquids with the SAFT- γ group contribution method[J]. Journal of Supercritical Fluids, 2012, 63: 81-91.
- [32] MARTIN A, MENDEZ D, BERMEJO M D. Application of a group contribution equation of state for the thermodynamic modeling of binary systems (gas+ionic liquids) with bis[(trifluoromethyl) sulfonyl] imide anion[J]. Journal of Chemical Thermodynamics, 2010, 42(4): 524-529.
- [33] FORNARIA T. Revision and summary of the group contribution equation of state parameter table: Application to edible oil constituents[J]. Fluid Phase Equilibria, 2007, 262(1/2): 187-209.
- [34] CARVALHO P J, COUTINHO J A P. Non-ideality of solutions of NH_3 , SO_2 , and H_2S in ionic liquids and the prediction of their solubilities using the Flory - Huggins model[J]. Energy Fuels, 2010, 24(12): 6662-6666.
- [35] 王卫. UNIFAC 模型用于离子液体-气体体系的研究[D]. 北京:北京化工大学,2013.
- WANG Wei. UNIFAC Model for Ionic Liquid-Gas Systems [D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2013.
- [36] 杨会龙,刘宝友,王园园. 氨基功能化离子液体表征及吸收 SO_2 的实验研究[J]. 河北科技大学学报, 2011, 32(3): 220-224.
- YANG Huilong, LIU Baoyou, WANG Yuanyuan. Characterization of amino-functionalized ionic liquids and their application in SO_2 absorption[J]. Journal of Hebei University of Science and Technology, 2011, 32(3): 220-224.
- [37] 章森森,任爱玲,关亚楠,等. 离子液体乙醇溶液吸收 SO_2 的物性研究[J]. 河北科技大学学报, 2011, 32(5): 507-512.
- ZHANG Miaomiao, REN Ailing, GUAN Ya'nan, et al. Study on physical properties of ionic liquid and ethanol solution for absorbing SO_2 [J]. Journal of Hebei University of Science and Technology, 2011, 32(5): 507-512.