# 中国科学院学部 科学与技术前沿论坛简报 第112次

学部工作局学术与文化处 编报 《中国科学》杂志社

2021年2月8日

## "离子液体科学与工程"论坛综述

### 一、国内外研究现状

离子液体作为新一代绿色介质和功能材料,为创造物质转化的反应/分离绿色新体系提供了重大机遇,已经引起学术界、工业界和各国政府的高度关注,成为当前国际科学前沿和工程研发热点。自 2000 年来,与离子液体相关的 SCI 论文以级数递增,包括 Nature 39 篇、Science 32 篇、Chem Rev 105 篇,目前年发表 SCI 论文数大于 11000 篇。欧洲、美国、日本、中国等都在离子液体研究方面取得了许多重大进展,如美国 R. D. Rogers 教授因发现离子液体溶解纤维素而获得"美国绿色化学总统挑战奖",美国空军研究所研发了比传统火箭燃料肼更加安全、环保、能量高的离子液体推进剂 AF-M315E。

我国科学界和工业界在离子液体领域的研究也十分活跃,年发表论文数大于4200篇,占全球36%,说明我国在离子液体领域的科学研究与工程应用都走在世界前列。我国科学家提出了离子液体Z键、离子簇、准液体、绿色度等新概念和新认识,推动了离子液体碳四烷基化、CO2合成碳酸酯、含NH3废气吸收分离、锂电池电解液、青蒿

素规模化生产等绿色技术的产业化,获得国际同行的广泛关注和高度评价。

纵观离子液体的发展历程,从 20 世纪 90 年代至今,相关研究逐步从早期的电化学、催化逐步拓展到当前的能源材料、生物医药和节能环保等领域,种类也从常规离子液体向功能化离子液体、聚合离子液体、离子液体多孔材料等拓展,赋予了离子液体更多的功能和应用,离子液体发展进入了从基础研究到工业化突破的崭新阶段。

#### 二、论坛概况

2020年12月3~4日,以"离子液体科学与工程"为主题的第112次中国科学院学部科学与技术前沿论坛在中国科学院过程工程研究所召开。论坛由中国科学院学部主办,中国科学院化学学部和学部学术与出版工作委员会承办,中国科学院过程工程研究所、中国科学院绿色过程创造创新研究院、《中国科学》杂志社、中国化工学会离子液体专委会和《绿色能源与环境》期刊共同协办。中国科学院过程工程研究所所长张锁江院士担任论坛执行主席,中国科学院大连化学物理研究所张玉奎院士、中国科学院化学研究所韩布兴院士、中国石油大学(北京)徐春明院士、清华大学李景虹院士、河南师范大学王键吉教授、中国化工学会华炜副理事长兼秘书长、石油化工规划院白颐副院长以及来自全国各地50余所高校、研究所及企业的100余位专家学者出席了本次论坛。

#### 三、论坛的重要性及重点关注问题

当今世界正面临着能源资源锐减、节能减排及产业结构调整的局面,工业过程的绿色化成为热点和趋势。我国是全球第一工业大国,其中涉及化工、冶金、能源、环境等行业的过程工业占工业总产值的约 50%,但普遍存在能耗高、污染重、效率低的问题。2015 年我国《政府工作报告》中强调工业过程的创新驱动、绿色化和智能化,成为科

技界和产业界共同面临的重大挑战。

尽管目前离子液体研究已有大量报道,产业化应用成果也不断涌现,但无论是基础研究或是工程应用仍有很大的发展潜力和空间,也存在巨大挑战,迫切需要加快离子液体领域的原创性研究,推动重大产出,深化学术界和行业间的交流。因此,召开以"离子液体科学与工程"为主题的高层次学科发展战略研究学术论坛十分必要。此次论坛汇聚了化学化工、能源材料、环保等领域的顶级专家,通过学术界和产业界的深度对话,总结了我国学者和企业界在离子液体领域的重要成果,分析了国内外离子液体领域的发展现状及未来趋势,凝练并提出了未来我国在该领域急需关注和解决的重大基础科学和共性工程技术难题,研讨了今后5~10年的重点发展方向,为改变传统工业发展模式、支撑工业过程的可持续发展提供了有力支撑,推动了离子液体基础科学和工程应用的共同发展。

论坛重点关注但不限于以下几方面的问题:

- (1) 离子液体科学本质与功能设计和制备;
- (2) 离子液体及其材料的工程放大和应用;
- (3) 离子液体交叉科学前沿及重大变革性技术;
- (4) 离子液体国家级平台及产学研合作新模式。

#### 四、报告内容

本次论坛采取专家报告和对话研讨结合的交流形式,与会专家从基础研究、技术创新和工业应用等多角度展示和探讨了离子液体在新能源、新材料、生物质、模拟计算、绿色反应/分离过程等领域的最新成果和前沿科学进展,会议形式新颖,专家发言积极,讨论充分深入,除离子液体领域专家外,还有交叉领域专家和产业界代表,充分彰显了学科交叉和产学研融合的特色。

首先,中国科学院大连化学物理研究所张玉奎院士作了题为"基 于离子液体提取的蛋白质组分析"的报告,从两方面介绍了离子液体 在蛋白质分析上的应用。对于单一蛋白,介绍了离子液体溶解蛋白、机理分析、保持蛋白稳定性、蛋白质重折叠/复性、蛋白质结晶、蛋白萃取分离、双水相萃取体系等的研究历史。对于蛋白质组学分析,建立了基于离子液体的细胞中蛋白质提取和原位处理新方法,可应用于血液透析、蛋白质提取分析、蛋白质复合物提取等方面。报告肯定了离子液体在蛋白质精准、定性定量分析上发挥的重要作用。

中国科学院化学研究所韩布兴院士作了题为"离子液体物理化学性质与应用研究"的报告,深化了绿色化学概念,强调实现绿色化和可持续化的重要性。重点介绍了近些年课题组在功能离子液体及其混合物体系在化学反应和材料合成中的重要进展,如 CO<sub>2</sub> 资源化利用、生物质转化利用等。希望相关领域的研究人员能进一步拓展离子液体在不同领域的应用,充分发挥离子液体特性解决传统方法难以解决的问题。

中国科学院过程工程研究所张锁江院士作了题为"离子液体重大变革性技术"的主题报告。报告提出,离子液体在解决我国当前卡脖子问题、绿色发展、国防空天/潜艇等诸多重大领域均展现了广阔的应用潜力和前景。报告结合研究团队工业应用典型实例及面向未来的重大应用,阐述了生物质转化高值利用、CO2活化转化、替代有毒有害的 MMA 绿色生产新技术、锂浆料储能等系列离子液体绿色变革性技术中发现的过程科学新的理论突破点,并与重大应用技术相互迭代,引领推动绿色技术和学科的大发展。

中国科学院大连化学物理研究所邵志刚研究员作了题为"离子液体电解质膜用于燃料电池的研究"的报告,介绍了燃料电池的发展现状,提出发展氢燃料电池是国家重大战略需求和国际发展热潮。质子交换膜燃料电池(PEMFC)尽管优点很多,但目前仍以低温型(<80°C)为主,存在Pt基催化剂易受CO毒害、水热管理系统复杂及Nafion®系列质子膜成本高并严重依赖湿度和温度等问题。离子液体具有难挥

发性、高热稳定性和电化学稳定性、优异离子导电性、不燃性及能在 100 °C以上温度下工作等优点。因此,可将其作为高温(100~200°C)质子交换膜燃料电池的电解质膜。当采用离子液体作为电解质时,大多数电子设备需要膜状电解质材料,因此离子电解质必须处于固态膜状态。一种方法是将离子液体与普通聚合物进行混合,另一种方法是离子液体单体的聚合。报告还展望了聚合离子液体在燃料电池应用中的新方向,主要解决催化剂中毒和高导电性、离子液体流失等问题。目前,离子液体在燃料电池中的应用尚处于初期阶段,仍需对这些化合物在燃料电池环境中的性能进一步研究与探讨。

北京大学沈兴海教授作了题为"离子液体诱导宏观组装实现离子分离的新策略"的报告。针对放射性元素铀分离,传统萃取流程繁琐复杂,需要进行反萃和进一步浓缩等后续处理才能达到最终分离富集目标金属离子的目的。涉及放射性元素的萃取过程往往伴随大量放射性废液的产生。将宏观超分子自组装(MSA)的思路设计在分离过程中,并解决了MSA中马拉戈尼效应(Marangoni effect)持续时间短的难题。基于羟基功能化离子液体的诱导效应,开发了一种全新的组离子分离方法,通过该方法成功实现了铀酰离子的一步法分离和固化。研究成果在核燃料循环中具有重要的潜在应用前景,在超分子组、研究成果在核燃料循环中具有重要的潜在应用前景,在超分子组装体这一独特现象,有望发展为金属离子分离的新策略。报告同时对从微观到宏观的多步骤自发组装机理、宏观超分子组装全新分离流程等研究内容进行了展望。

中国科学院过程工程研究所万印华研究员作了题为"高性能膜分离材料与膜过程强化关键技术及装备"的报告。膜分离技术作为一种绿色分离技术,因其操作简单、高效、节能、环保等诸多优势,已广泛应用于化工、医药、食品及环保等领域。然而,膜材料的性能还难以满足实际应用需要以及膜分离过程中膜污染等因素,限制了膜分离

技术大规模的工业应用,解决问题的关键是研发高性能的膜材料和膜分离装备。报告介绍了课题组在新型膜研制、膜污染控制技术、膜清洗技术、过程优化技术、自检和在线检测技术等方面的进展,建立了高性能膜分离和发酵-膜分离耦合技术研究平台,讨论了膜分离在穿心莲醇提取、酱油脱色、中药提纯、反渗透海水淡化和膜法绿色制糖等技术中的应用。

南京工业大学陆小华教授作了题为"离子液体的界面热力学和传递性质"的报告,报告中指出纳微界面介入导致的系列反常现象:如超高压下(90000 MPa)才能导电的硫,在界面存在下,常压下就能具有导电性;对于费托合成反应,反应选择性的理论极限值在界面存在下(94%)相对体相(58%)大幅提高;与传统的膜相比,界面存在下的生物膜通道通量和选择性均大幅提高,能够突破 Robeson 上限。因此,纳微界面的介入导致流体分子传递过程发生数量级的变化,其根本原因是界面引入后的非对称相互作用改变了流体分子的热力学极限。报告指出纳微界面与离子液体间的非对称相互作用是突破离子液体相性能的关键,纳微界面存在下的离子液体热力学性质是定量化描述其热力学与动力学极限变化的前提。

华东理工大学刘洪来教授作了题为"基于深度学习的离子液体设计和表征"的报告,提出人工智能技术的发展能够帮助解决更多复杂逻辑问题,也为热力学预测模型的开发提供了新的发展方向。对于复杂化合物,目前都需要逐个通过量化计算获得 COSMO 数据,耗时耗力。对于高分子、核酸分子、蛋白质等复杂分子不能直接计算;对于药物分子,分子构象的不同会导致药效的巨大差异,但无法获得每个构象的 COSMO 数据。针对量子化学不能计算复杂分子结构,而对分子结构进行简化又会降低模型预测精度的矛盾,报告提出通过COSMO 分子指纹描述符及其内在关系,拓宽与提升 COSMO-SAC 模型的应用范围和预测效果,构建系列 COSMO 分子指纹基因序列图谱,

通过深度学习方法预测溶液的热力学性质。此方法也可拓展到离子液体系统,考虑阴阳离子在空间组合相对位置对分子表面电荷密度的影响,从而准确预测离子液体热力学性质,建立离子液体功能设计方法和高通量表征方法。

天津工业大学仲崇立教授作了题为"基于基因组学的离子液体高通量设计"的报告。目前虽已存在较大的离子液体数据库,但离子液体种类繁多,如何针对具体应用(吸附分离、催化反应等)定向构筑高效离子液体体系仍存在很大的挑战。该团队前期针对 MOFs/COFs 材料进行了基因组学方面的研究,包括材料基因片段的划分与基因库的建立、材料构筑方法的建立、材料结构数据库的建立与新材料的发现与实验合成,研发了相关计算方法,编制了材料构筑与筛选软件,并获得了软件著作权。报告提出了离子液体基因组学方法构筑的研究思路,并尝试将人工智能引入到离子液体的高通量设计中,提高研发效率与效果。

浙江大学李浩然教授作了题为"基于基因组学的离子液体簇结构表征和数据库"的报告,他提出基于基因组学的离子液体功能设计及高通量表征,从应用需求出发,通过高通量的第一性原理计算,结合已知、可靠的实验数据与表征技术平台、数据预测计算模拟平台和数据库系统,采用理论和计算模拟尝试符合相应功能离子液体设计。这种设计思路将大大提高离子液体研发效率,但是需要对离子液体有足够多的认识和积累,包括离子单元、相互作用、溶剂簇、宏观性质及实际应用等,然而目前在溶剂簇表征和调控规律方面尚缺乏深入研究。该课题组系统研究离子液体溶剂簇的表征方法:(1)小角/广角 X 射线散射(SAXS/WAXS)表征其结构特征;(2)电子顺磁共振探针技术研究分子在簇中的运动状况;(3)通过电导率研究溶剂簇对溶质迁移性质的影响。此外还建立离子液体溶剂簇的数据库平台,为离子液体功能设计提供理论指导。

北京化工大学邱介山教授作了题为"基于离子液体的功能碳材料之创制及应用"的报告,指出新结构功能碳材料在储能、多相催化等技术领域有着不可替代的重要应用。基于结构和性能独特的离子液体创制功能碳材料是值得关注的有发展前景的领域。报告主要涉及以下四部分:(1)离子液体作为介质,助力功能碳材料的合成;(2)离子液体作为前驱体,实现杂原子掺杂的功能碳材料的精细合成;(3)离子液体作为新型电解质,设计构筑高性能储能器件;(4)基于离子液体固载化,设计合成新型功能催化剂。通过上述研究揭示了目标功能碳材料及催化剂的性能与离子液体结构与组成性质之间的本征构效关系。

中国人民大学王亚培教授作了题为"基于离子液体的热电转换"的报告。相较于传统基于无机半导体的固态电子热电材料,离子液体因其极高的塞贝克系数和更低的热导率逐渐受到关注。离子液体的热电转换不依赖于电路中电子的流动,而是通过阴阳离子在电极附近的累积和重排在冷热电极间产生电势差。同时,离子液体兼具柔性、廉价、绿色和自修复等优势,在热能回收、可穿戴电子设备等领域都有良好的应用前景。

浙江大学杨启炜研究员作了题为"离子材料选择性分离结构相似物质"的报告,提出高端化学品的先进制造是化学工业的热点与前沿,其重要特征之一是产品的高纯度。同系物、同分异构体等结构相似物质的选择性分离是决定产品品质的关键环节之一,离子液体、离子液晶、离子多孔材料等离子型材料在微观水平高效辨识分子结构微小变化所引起的物化性质差异。针对天然活性物质单体的高纯制备难题,发展了以离子液体和离子液晶为介质的同系物选择性萃取分离方法,利用阴离子的氢键辨识能力和阴、阳离子协同作用能力,实现了疏水、亲水、表面活性、疏水疏油等四大类、十余种天然活性同系物的高效分离。针对稀有气体混合物、低碳烃混合物等结构相似气体的分离难

题,构建了拓扑结构多变、孔径可精细调控的离子杂化超微孔材料,利用亚纳米受限空间对分子辨识作用的强化能力及尺寸筛分能力,显著提升了吸附分离过程的选择性和吸附容量,为清洁、高效分离新工艺的开发提供了支撑。

中国石油大学(北京)徐春明院士作了题为"双金属阴离子作用机理再探索"的报告,介绍了双金属络合阴离子([AlCuCl<sub>5</sub>]<sup>-</sup>)在C4烷基化反应中的重要作用。采用X射线精细光谱和DFT计算确定了[AlCuCl<sub>5</sub>]<sup>-</sup>的结构,在[AlCuCl<sub>5</sub>]<sup>-</sup>中[AlCl<sub>4</sub>]<sup>-</sup>仅作为单齿配体。通过DFT计算研究了复合物种变迁过程,考察了不同配比、不同温度下双金属复合离子液体密度、黏度等数据,建立了物性模型。基于CuAlCl<sub>4</sub>与芳烃络合物,可应用于油品体系中芳烃和烷烃的分离,同时根据CuAlCl<sub>4</sub>与轻芳烃络合物晶体的结晶点不同,有可能进一步将其应用于混合二甲苯分离。

中国化工学会副理事长兼秘书长、教授级高工华炜作了题为"基础研究向重大应用转化的壁垒及合作模式"的报告,介绍了目前我国科技创新能力显著增强,整体科技水平处于从量的积累向质的飞跃、点的突破向系统能力提升的重要时期,国家创新能力稳步提升,但重要应用转化方面仍存在壁垒。化工领域创新有三个重要关键:催化剂、反应工程以及工艺技术和装备。在基础研究、应用基础研究方面,应确定催化剂及催化体系、反应工艺及条件、反应器主要设备参数等,通过模拟计算降低成本、提高效率;在中试或工业侧线研究阶段,需要获取热平衡、物料平衡基础数据、催化剂稳定性、反应工艺及条件优化、原料适应性、控制方案等,开发工艺包、优化全工程系统,为"基础研究-重大应用转化"过程的安全、高效、节能、经济提供保障;最终完成工程设计、装备制造、施工建设及工业运转、考核标定。在产学研合作新模式中,科研单位与合作企业应本着信任坦诚、风险共担的态度,通过合作开发、合同管理等模式,实现基础研究向工业应

用的转变。

苏州大学路建美教授作了题为"限域反应空间构建及低浓度污染物深度治理",介绍了三维网络高效吸附材料的构建及其在环境治理中的应用,实现了面向石油化工生产过程中的污染物深度处理及资源化技术的应用。针对低浓度污染物驱动力低、过程传质效率低,传统的物理吸附、化学催化等技术无法实现高效、低成本治理的难题,提出对污染物限域反应的三维网络空间新材料创建的新思路,主要包括"强化吸附/限域催化"双功能净化材料,多组分 VOCs 高敏/快速/同时检测传感器件,吸附浓缩、限域催化、精准检测三元协同创制智能化模块装备,深度处理低浓度复杂污染物"吸附/限域催化"新方法等工作,实现污染物"变废为宝"的理想目标。

华东理工大学李春忠教授作了题为"微区限域反应:晶态能量转换材料构筑与调控"的报告,介绍了晶态能量转换材料在光电化学能转换及能量存储等领域的重要应用。尽管目前对于晶态能量转换材料合成机理和应用性能进行了大量研究,但是仍难于精准控制晶面、界面及缺陷等原子尺度上的结构。而限域反应可使材料生长限制在特定微区内,为多级结构材料设计和精确控制提供了可能。该研究从合成过程反应动力学和热力学出发,基于对微区环境混合、传递和反应特征的认识,提出了微区限域反应调控晶态能量转换材料原子尺度结构的策略,合成了结构新颖、性能优异的晶态能量转换材料及其与碳协同耦合新体系,提出了光电化学能转换及储能新机制。

北京航空航天大学郭林教授作了题为"无机非晶微纳米材料的可控合成及特性"的报告,介绍了非晶微纳米材料的特性、普适制备方法及其应用。非晶微纳米材料特殊的结构使其具有独特的催化、力学和光学特性,但合成可控性差和结构的复杂性严重制约了其发展和应用。通过发展多种具有普适性的制备方法,如配位刻蚀法、自水解刻蚀-沉淀法、光刻蚀法等,实现了一维、二维和三维规则形貌的纳米材

料的可控制备;利用同步辐射 XAFS 谱研究了样品的局域微结构和应用过程中的局域结构变化信息;探讨了相关材料的催化、力学和光学等特性,建立了科学的构效关系,推动了非晶微纳米材料的发展和应用。

南开大学何良年教授作了题为"离子液体团簇效应:面向碳中和的 CO2 捕集与转化"的报告,该团队将离子液体独特可调特性应用于 CO2 原位转化反应,实现 CO2 温和条件下高值转化。重点介绍了两类 CO2 原位转化反应催化剂: (1) 离子液体改性的金属有机铼配合物 Re-POMP-IL 光催化剂,基于离子液体团簇与 CO2 之间相互作用,离子液体改性的金属有机铼聚合物荧光寿命延长,还原能力增强,拥有更多自由电荷参与光反应,展示出离子液体对光催化活性和 CO2 选择性的促进作用,可望发展多样化离子液体调控催化体系,实现多种类型 CO2选择性转化利用; (2) 第二配位层结构优化的光催化剂,基于第二配位层的离子基团效应,在联吡啶氯化铼第二配位层上引入不同离子基团时,三乙醇胺阳离子可有效地增强催化剂对可见光的吸收能力。通过对铼催化剂的第二配位层进行修饰,显著提高了光还原 CO2 的催化效率,为 CO2 光还原催化剂设计提供了新思路。

中国科学院化学研究所刘志敏研究员作了题为"离子液体氢键催化反应机制研究"的报告,介绍了 CO2 和生物质在温和条件下通过离子液体催化反应体系绿色转化制备化学品和功能材料的重要进展。该团队提出了离子液体氢键供体和受体协同催化化学反应的新策略,实现无金属条件下脂肪二醚的复分解反应、醇脱水醚化反应等,为制备氧杂环类化合物开辟了绿色高效的新途径。同时也设计了多种化学捕获 CO2 的功能离子液体,实现无金属条件下 CO2 化学转化,获得不同种类的高附加值化学品,揭示了催化反应机制。另外,构建了离子液体/金属耦合催化体系,通过离子液体室温下氢键活化反应底物,实现CO2 温和转化制备化学品。

中国科学院过程工程研究所张香平研究员作了题为"离子液体体系界面结构及传递机制"的报告,介绍了离子液体作为一类新型绿色介质,在创建反应/分离新体系方面提供的重大机遇。在工程放大和产业化过程中,离子液体特殊的阴阳离子结构、特殊氢键以及由此导致特殊的物化性质、多相体系界面结构,使该体系的传递和放大规律与传统介质有本质差异,成为化工领域传统方法难以参考且亟需攻克的难题。该报告针对离子液体应用中工程放大规律不清的难题,重点阐述了离子液体多相复杂体系的界面形成机制及纳微结构,反应器中离子液体体系的流动/传递机制和工程放大规律,并在 CO2 羰基化、离子液体体系的流动/传递机制和工程放大规律,并在 CO2 羰基化、离子液体每回收等工业放大装置上进行了验证。离子液体体系界面结构及流动传递机制的研究为离子液体反应分离新体系的过程强化和工程放大提供了支撑。

浙江大学邢华斌教授作了题为"聚离子液体结构设计及其分离性能研究"的报告,介绍了聚离子液体的结构设计和分离性能研究方面的最新进展,以及现有分离强化机制中存在的挑战和有待攻克的科学问题。对于结构高度相似化合物如烃类化合物和天然活性同系物的分离过程,其瓶颈在于分离介质/材料对结构相似物的分子识别能力弱、分离选择性低,导致分离过程投资和能耗巨大。离子液体具有内在的强静电场、可控的酸碱性及氢键作用、多重溶剂化作用等特性,能实现有分离介质/材料选择性低的瓶颈。聚离子液体是以离子液体作为重复单元、兼具离子液体和聚合物双重特性的新型材料,其三维多孔结构的空间效应与限域效应,可强化离子液体的表面化学性质,可实现择形选择性分离,提高分离效率。调节多孔聚离子液体的表面化学性质,可实现择形选择性分离。以聚离子液体为介质的分离技术有望充分发挥离子液体的优良特性,强化分离过程,有望成为结构相似物分离的新方法。

中国科学院高能物理研究所石伟群研究员作了题为"基于分子设

计的锕系元素分离策略"的报告,介绍了软硬配体结合和多尺度模拟 策略在锕系元素萃取剂设计及合成锕系组分离配体的最新进展。乏燃 料后处理(核废料处理)对于核环境安全和核能的可持续发展意义重 大,而其主要使命之一即是锕系元素分离回收。以磷酸三丁脂为萃取 剂的分离过程,排放出的高放废液含有较大量的超铀元素(Np、Am、 Cm 等)和释热量大的裂变产物,集中了乏燃料中90%以上放射性, 操作和运输难度较高。由法国 CEA 开发的 GANEX (Group Actinides) Extraction) 流程, 实现包括少量铀前元素和超铀元素在内的多种价态 锕系元素的共同萃取。为了拓展可应用于 GANEX 流程并实现锕系组 分分离的新型萃取剂,根据"软硬酸碱理论",结合多尺度模拟计算, 该团队成功设计并研究了软硬原子结合的四齿邻菲罗啉二酰胺配体。 该配体对不同价态的锕系离子均有良好的萃取能力, 而对稀土元素却 几乎不萃取, 实现了良好的镧锕分离效果。另一方面, 该团队在多年 锕系配位超分子研究的基础上,首次提出了一种采用配位组装纳米团 簇作为萃合物种态的锕系元素分离新策略,即使用大环邻苯三酚芳烃 作为萃取剂,在水相/有机相界面捕获螯合铀酰离子,并原位组装形成 铀酰配位纳米笼,实现铀酰离子的高效萃取分离。研究表明,每个配 位纳米笼是由6个邻苯三酚芳烃大环和24个铀酰离子组装而成,多种 组分在组装过程中具有多价协同效应,可实现铀酰离子高效高选择性 分离。

**雇房大学吴有庭教授**作了题为"离子液体强化酯类合成的集成过程研究"的报告,介绍了离子液体的多任务定向设计在反应分离集成或过程强化中的应用。传统合成酯类产品的催化剂主要是无机强酸、固体酸、金属盐等,反应和分离分步进行,导致能耗高、工艺流程复杂、产品纯度低等缺点。该团队着眼于离子液体的多任务定向设计,让离子液体集多任务于一身,兼顾反应和分离两方面,从而完成酯类产品生产中的反应-分离耦合或过程强化,使过程更绿色、更节能、更

清洁。离子液体催化酯类合成的反应分离集成研究已取得重要进展,如合成碳酸二甲酯、环状碳酸酯、环状亚硫酸酯、有机酸酯、香料酯等。同时开发了离子液体催化反应-萃取-精馏耦合生产醋酸乙酯新工艺,在江苏索普化工股份有限公司建成年产2万吨中试生产线且已成功开车运行6个月。

中国科学技术大学闫立峰教授作了题为"DESs (Deep Eutectic Solvents)在生物质绿色转化中的应用"的报告,对 DESs 在生物质转化领域中的最新应用进展进行了综述,探讨了关键科学问题及未来发展趋势。DESs 因其组成简单及原料便宜,已经引起大家的广泛关注,利用其对生物质进行预处理、溶解、反应和加工是一个很有前途的方向。近年来 DESs 在生物质转化过程中的相关研究突飞猛进,内容涉及新的 DES 体系,生物质的预处理,DESs 与木质素、纤维素和半纤维素的相互作用规律及调控机制,新型分离与溶解体系,新型转化反应与新材料,新的绿色加工过程及生物质全绿色转化等。

为了拓展学术传播,论坛还邀请了 Green Chemical Engineering (GreenChE) 编辑部田媛作了题为"Green Chemical Engineering 从无到有"的报告,详细介绍了创刊初心、办刊特色、期刊现状和发展举措四方面内容。 GreenChE 以绿色化工为学科基础,聚焦"绿色",立足"工程",注重学科交叉与绿色化工前沿问题,关注原料安全性和可替代性、反应过程原子经济性、分离过程节能性和产物环境友好性等问题,紧紧围绕低碳化、清洁化和节能化的发展要求,重点刊登原始创新论文和引领技术重大变革的文章,致力于构建以绿色化为核心的变革性理论和技术体系的展示平台,促进科研成果转化为生产力,促进国内外学术成果的交流与探讨。

最后,张锁江院士总结时指出,此次论坛学术界和工业界专家学者齐聚一堂,展现了很多新思想,碰撞出了诸多新火花,呈现了离子液体领域研究的蓬勃发展态势及多学科高度交叉融合的趋势,希望继

续加强学术研究和会议交流形式创新,协同政府、企业、科研院所,共同推动离子液体国家级平台建设,推进离子液体基础与工程科技前沿的创新发展。

#### 五、共识和建议

通过两天的大会/主题报告交流,不同领域的专家、学者和企业家 从离子液体最新进展及重大应用等方面作了汇报和总结,并对离子液 体的科学本质与功能设计、交叉科学前沿、重大变革技术、国家级平 台建设和产业孵化及产学研合作新模式五个议题进行了深度对话交 流,对离子液体未来发展方向和趋势提出了展望,具体如下:

议题一: 离子液体科学本质与功能设计。本议题由河南师范大学 原校长王键吉教授主持。中国科学院化学研究所韩布兴院士首先指出. 与传统介质和溶剂相比, 离子液体最科学本质问题在于电荷和离子性 以及有效电荷的大小。在应用过程中,需要将静电作用考虑在内,对 比离子液体局部极性与传统溶剂之间的差别:考虑结构与性能之间的 关系,将大数据与定量描述离子液体的构效关系相结合是其未来发展 的大趋势。南京工业大学陆小华教授补充到,在静电作用基础上,化 学工程方法和界面方法对于了解离子液体的科学本质至关重要。通过 借助大数据和机械学习建立模型化方法深入认识离子液体的本质,对 离子液体发展尤为关键。华东理工大学刘洪来教授指出,离子液体作 为熔融盐,由于其正负离子结构差异较大,在低温下无法形成晶体结 构,导致其微观层面的不均匀性,形成不同微区。目前很多分子热力 学模型并没有考虑微区对宏观性能的影响规律,构建机理模型、深入 微观机理研究及深度机械学习将会对离子液体的发展有更好的预测 性。北京化工大学吴卫泽教授补充到,通过预测离子液体结构与性能 之间的关系可完成特定功能离子液体设计。天津科技大学邓天龙教授 也提出可从热力学模型入手,解释并突破结构与性质之间的关系,有 效推动离子液体工程应用。苏州大学严峰教授指出,在碱性和电场条

件下,探究离子液体的分子结构与其稳定性之间的关系是离子液体作为绿色可回收溶剂的关键,离子液体分子结构对生物毒性的影响也是需要考虑的问题。同时还指出,离子液体设计和筛选是离子液体应用的核心问题,对于离子液体设计的方法,如基因簇和人工智能的高通量筛选是未来趋势,离子液体自身的纯度问题是其参与实验数据建模的关键。

议题二: 离子液体在交叉科学前沿中的机遇与挑战。本议题由北 京化工大学邱介山教授主持。首先,北京航空航天大学郭林教授就能 否开发出对人体无害的离子液体提出疑问,同时希望离子液体可以如 同表面活性剂以调控纳米材料的尺寸及其形貌。华东理工大学彭昌军 教授指出,研究离子液体构效关系及开发高纯度、性能优良的离子液 体需要从不同背景看待,高纯离子液体规模制备未来能否工业化值得 期待。清华大学罗三中教授强调, 离子液体作为催化剂与其他催化剂 最大的区别就是离子作用,离子作用影响反应物的催化活性及选择性, 同时离子液体空间效应、范德华力、排斥力等对催化效应有明显的影 响。反应中需要考虑离子液体的溶剂效应,但离子液体种类多达 1018 种, 因此, 离子液体数据库的建立对理解离子液体的溶剂化效应非常 重要。华南理工大学李雪辉教授指出,从热力学基础研究到应用,在 压力存在情况下, 离子液体自身结构变化对生物质转化的影响, 值得 不同领域的科研学者研讨。华东理工大学漆志文教授提出,利用人工 智能与机器深度学习可弥补离子液体在表征研究方法上的缺陷, 从应 用角度出发,通过人工智能与机器深度学习开发离子液体的应用是可 靠的研究方向。厦门大学廖洪钢教授提出,通过电子显微镜在线观察 离子液体中纳米材料原位合成过程的方法, 未来可结合电子显微镜从 微观层次认识离子液体科学本质。

**议题三:离子液体重大变革性技术。**本议题由浙江大学李浩然教授主持。中北大学刘有智教授指出,在工业分离与催化中,精馏能耗

相对较大。运用离子液体技术代替精馏必将是工业上的重大变革。苏州大学路建美教授指出,利用离子液体定向吸收及催化,通过配位笼技术,将离子液体装进结晶聚合物中做成柔性皮肤进行传感,将有重大的变革意义。中国石油大学(北京)陈光进教授提议,离子液体与MOFs 材料存在共性,将离子液体运用到 MOFs 材料设计做成数字货币或者医药器件值得进一步探究。中国石油大学(北京)刘植昌教授指出,与固体酸相比,离子液体工业应用中不存在区域限制,其均匀的化学修饰性在化工应用中具有更大前景。合肥工业大学丁运生教授指出,传统阻燃剂的加入会降低高分子材料的力学性能,利用离子液体作为高分子材料助剂会弥补这方面的缺陷,同时,离子液体在多形,高分子材料助剂会弥补这方面的缺陷,同时,离子液体在生物质分离的应用前景广泛,但是降低离子液体成本及解决其回收过程中容易分解的问题也是需要研究的重点内容。

**议题四:离子液体国家级平台建设。**本议题由天津大学夏淑倩教授主持。南开大学何良年教授指出,离子液体国家级平台建设应符合学科和技术发展的需要,以国家需求为导向,从基础研究、技术攻关到工业应用方面都需要全局规划。同时了解离子液体的真正前沿所在,实现学科超前与技术研究自由,探索服务国家战略和经济的主战场,在北京市离子液体重点实验室的基础上继续推进,建立国家重点实验室。中国科学技术大学闫立峰教授提议,可借鉴中国科学技术大学高家验室平台建设,将目标定位于国家家农实验室平台建设,将目标定位于国家需求方向,通过前期基础积累,把理论与技术基础相结合,搭建成一个量子国家级实验室平台建设,将目标定位于国家需求方向,通过前期基础积累,把理论与技术基础相结合,搭建成市场的网络平台,推进产学研与成果转化并存共行的工业产业园建设。中国科学院化学所研究张建玲研究员指出,国家级平台应符合四个面间题:首先,平台的定位是什么?国家级平台应符合四个面间更大方面问题:首先,平台的定位是什么?国家级平台应符合四个方面问题:首先,平台的定位是什么?国家级平台应符合四个方面问题:首先,平台的规划是什么?在面面重大问题时,需要各位学者提出新的想法进行统筹布局:第三,需要怎样

的装备和人才?除了常规的测试手段,国家平台需要更高端的表征设备,同时,根据学科布局和方向引进特定人才。贵州大学谢海波教授也补充,国家级平台建设还需考虑如何发挥科学与技术的促进作用,以及如何聚集工程技术人才实现科研后备力量的培养。河南大学柏䶮教授提到,将离子液体国家级平台建设的发展规划和布局放到国家层面,通过国家和政府的支持,汇聚人才和接班人。接班人就是研究生,他们是未来离子液体领域从基础研究到应用研究的方向和着力点,对学科可持续发展非常重要。北京化工大学李春喜教授指出,离子液体的应用潜力巨大,在离子液体催化剂大规模应用潜力没有完全发挥出来,在理论和本征科学问题方面需要提出新的、颠覆性的观点。建立国家级实验室需要通过明确未来发展方向、凝练科学问题实现重大的理论突破、技术变革及应用产出。

**议题五:离子液体产业孵化及产学研合作新模式。**本议题由中北大学刘有智教授主持。中国化工学会副理事长兼秘书长、教授级短生华精指出,可从技术的先进性、经济性、稳定性及绿色发展等角度出发,打造离子液体产业平台在行业范围内的影响力,之后通过中国化大大会与各位学者的共同努力,推荐国家级重点实验室建设。深圳市田邦科技股份有限公司董事总裁、高级工程师周达文指出,对于离子液体的高附加值产品研发,研发机构与企业的合作交叉应聚焦国家,大发展战略需求和高端卡脖子工程,集中资源解决重大问题,发展或专长并进行突破,解决国家的短板和痛点。南京大学吴有庭教授指出,通过建立产学研孵化平台培养从技术、工程到产业的发援,有短队在国际上已经率先将离子液体运用到蛋白质分析中,发现离子液体在该领域的强大功能,同时希望与业内人合作共同开发基于高,该体提取蛋白质复合物的试剂盒。福州大学邱挺教授指出,固时针对

产学研新模式,应考虑到知识产权等方面的风险。郑州大学许群教授指出,时代背景需要我们关注绿色技术,关注离子液体技术。现在正处于传统化工技术和新兴技术的交汇期、多学科交叉的迸发期、产业技术对接期和创新体制机制思考期,面向重大问题和重点领域进行突破成为产学研合作新模式的关键。

#### 六、与国外同领域研究相比较的优劣

国外在离子液体制备、分离纯化及功能离子液体的开发应用研究 等方面做了很多原创性工作。北大西洋公约组织于 2000 年召开了有关 离子液体的会议, 欧盟制定了离子液体的研究计划: 日本有关离子液 体的研究也很活跃, 正在酝酿建立产学研联合研究体制。虽然我国离 子液体的研究总体起步较晚, 但现今已经引起众多科研院所和大学研 究机构的重视, 目前已经有二十多家研究所和大学, 如中国科学院兰 州化学物理研究所、中国科学院过程工程研究所、中国科学院化学研 究所、浙江大学、北京大学、中国科学技术大学、华东师范大学、中 国石油大学、北京化工大学等都在开展离子液体研究, 在合成、催化、 材料、分离方面各有侧重。可以预言, 离子液体的基础与应用研究将 会不断出现新突破,特别是如果能够在离子液体大规模制备成本和循 环利用问题上有重大突破, 离子液体的大规模工业应用将会迅速展开 而形成新的绿色产业。从20世纪90年代兴起至今,离子液体已经走 过了一条与其他新技术培育、成长和发展极其相似的"S曲线",正步 入从"探索"向"应用"的转折阶段,并正在孕育和迎来新的突破。 国内外有关离子液体的研究主要集中在离子液体制备、物理和化学性 质测定、催化合成反应、萃取分离及电化学等方面。为满足工业需要, 将定向设计合成具有独特性能的离子液体应用到工业生产各个领域是 实现绿色化工的关键。

#### 七、其他特色和创新

本次大会采取学术报告和深度对话结合的研讨交流形式,邀请了 100 余名学术界和产业界的跨学科的国内专家学者和企业家,围绕离 子液体基础研究和传统化工应用,并延伸到新能源、新材料、生命健 康以及 CO<sub>2</sub> 利用等前沿交叉领域,体现了离子液体与多学科的高度交 叉融合。此外,还针对离子液体未来发展如国家级平台建设、产业孵 化及产学研合作新模式等进行了深入探讨,希望未来可联合高校、科 研院所、政府和企业平台协同发展,构建基础-应用-产业化贯通式研 发新模式,建设国际一流的离子液体国家级平台,促进离子液体基础 与工程科技前沿的进展,引领离子液体学科创新及其技术重大变革。

(作者: 曾少娟, 副研究员, 中国科学院过程工程研究所, 离子液体清洁过程北京市重点实验室; 何宏艳, 研究员, 中国科学院过程工程研究所, 离子液体清洁过程北京市重点实验室; 张锁江, 中国科学院院士, 中国科学院过程工程研究所, 离子液体清洁过程北京市重点实验室)

联系方式:中国科学院学部工作局学术与文化处,010-59358366