DOI: 10.19666/j.rlfd.202601027

胺基分子与二氧化碳微观反应机理量子力学模拟

王超伟[1,2,3]，张津铭[1]，王 苗[1]，吴咏婷[1]，曹勤峰[4]，
王长安[1]，徐党旗[2,3]，车得福[1]
（1. 西安交通大学绿色氢电全国重点实验室，陕西 西安 710049；
2. 西安热工研究院有限公司，陕西 西安 710054；
3. 高效灵活煤电及碳捕集利用封存全国重点实验室，陕西 西安 710054；
4. 浙江省能源集团有限公司，浙江 杭州 310000）

［摘 要］【目的】基于固态胺吸附剂的直接空气捕集（direct air capture，DAC）技术是一种可实现灵活部署的负碳技术，对于实现我国的“双碳”目标具有重要意义。本文旨在探究胺基分子与二氧化碳的微观反应机理，明确各影响因素对 CO_2 吸附过程的作用规律。【方法】通过量子力学模拟探究了胺基分子与 CO_2 的微观反应机理，明确了其反应路径；计算了不同胺修饰剂与 CO_2 反应活性位点的吸附能级分布，定量表征了 CO_2 吸附反应的能量变化，深入剖析了官能团电子特性与空间位阻效应对 CO_2 吸附的协同调控机制；探究了 CO_2 与 N_2、H_2O 的竞争吸附行为，分析了各类因素对吸附选择性的影响。【结果】胺基分子与 CO_2 的反应遵循两性离子机理，即胺基先与 CO_2 反应生成带正负电荷的两性离子中间体，再通过脱质子反应生成羧基或其他形态产物；无胺基分子或其他辅助条件时，乙醇胺（monoethanolamine，MEA）与 CO_2 反应的能垒高达 147.18 kJ/mol，有额外 MEA 协助质子转移时，反应能垒降至 21.86 kJ/mol，有水分子协助时，能垒降至 54.50 kJ/mol；直链结构因减缓了位阻效应进而增加了化学吸附点位，所以在提升与 CO_2 的反应性能方面表现最突出；尽管 MEA 与 CO_2 界面相互作用未形成化学键，但二者仍存在较强的范德华力相互作用。【结论】研究结果可为 DAC 吸附剂的胺修饰改性及吸附性能提升提供理论支撑。

［关 键 词］直接空气捕集；胺修饰树脂；吸附；量子力学模拟

［引用本文格式］王超伟，张津铭，王苗，等. 胺基分子与二氧化碳微观反应机理量子力学模拟[J]. 热力发电，2026，55(9)：159. Wang C W, Zhang J M, Wang M, et al. Quantum mechanical simulation of the microscopic reaction mechanism between amine molecules and carbon dioxide[J]. Thermal Power Generation, 2026, 55(9): 159.

Quantum mechanical simulation of the microscopic reaction mechanism between amine molecules and carbon dioxide

Wang Chaowei[1,2,3], Zhang Jinming[1], Wang Miao[1], Wu Yongting[1], Cao Qinfeng[4],
Wang Chang'an[1], Xu Dangqi[2,3], Che Defu[1]
(1. State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;
2. Xi'an Thermal Power Research Institute Co., Ltd., Xi'an 710054, China;
3. National Key Laboratory of High-Efficiency Flexible Coal Power Generation and Carbon Capture Utilization and Storage, Xi'an 710054, China;
4. Zhejiang Energy Group Co., Ltd., Hangzhou 310000, China)

Abstract: [Objective] Direct air capture (DAC) technology based on solid amine adsorbents represents a promising negative carbon emission technology that offers the advantage of flexible deployment across diverse geographical

收 稿 日 期：2026-01-12 修 回 日 期：2026-03-24 接 受 日 期：2026-03-30
基 金 项 目：国家自然科学基金项目（52176129）
Supported by: National Natural Science Foundation of China (52176129)
第一作者简介：王超伟（1995），男，博士，工程师，主要研究方向为煤电灵活性与低碳化，wangchaowei@tpri.com.cn。
通信作者简介：王长安（1986），男，博士，教授，主要研究方向为新一代煤电技术，changanwang@mail.xjtu.edu.cn。

and operational settings, which is of great significance for achieving China's "dual-carbon" goal. The primary objective of this study is to elucidate the underlying microscopic mechanisms governing the interaction between amine-based molecules and carbon dioxide (CO_2), thereby providing a theoretical foundation for the rational design and performance optimization of DAC adsorbents. [Methods] To achieve this goal, quantum mechanical simulations were employed to systematically investigate the microscopic reaction mechanisms between amine molecules and CO_2, with a particular focus on identifying the detailed reaction pathways and intermediate species involved. The distribution of adsorption energy levels at the reactive sites of various amine modifiers interacting with CO_2 was computationally determined, enabling a quantitative characterization of the energy variations associated with the CO_2 adsorption reaction. Furthermore, the synergistic regulatory mechanisms by which the electronic properties of functional groups and steric hindrance effects influence CO_2 adsorption were thoroughly analyzed. In addition, the competitive adsorption behavior among CO_2, nitrogen (N_2), and water (H_2O) was examined, and the influence of multiple factors, including the chemical nature of the amine species, the presence of moisture, and the local steric environment, on adsorption selectivity was systematically assessed. [Results] The simulation results reveal that the reaction between amine molecules and CO_2 proceeds via a zwitterion mechanism. In this pathway, the amine group first reacts with CO_2 to form a zwitterionic intermediate that carries both positive and negative charges; this intermediate subsequently undergoes a deprotonation step to yield a carbamate or other stabilized products. When monoethanolamine (MEA) reacts with CO_2 in the absence of additional amine molecules or other auxiliary proton-transfer agents, the calculated energy barrier is as high as 147.18 kJ/mol. However, when an additional MEA molecule participates in the proton transfer process, the reaction energy barrier is substantially reduced to 21.86 kJ/mol. In the presence of water molecules acting as proton-transfer mediators, the energy barrier decreases to 54.50 kJ/mol. Among the different amine structures investigated, the linear-chain configuration exhibits the most pronounced enhancement in CO_2 reaction performance, primarily because its reduced steric hindrance increases the availability of chemisorption sites. Notably, even though no chemical bond is formed at the interface between MEA and CO_2, a strong van der Waals interaction persists between them, contributing to the overall adsorption affinity. [Conclusion] The findings of this study provide a comprehensive mechanistic understanding of the amine-CO_2 reaction at the molecular level, highlighting the critical roles of proton transfer assistance, steric hindrance, and electronic effects in determining adsorption performance. These insights offer theoretical support for the amine modification and performance enhancement of DAC adsorbents, thereby facilitating the development of more efficient and robust direct air capture technologies.

Key words: direct air capture; amine-modified resin; adsorption; quantum mechanical simulation

我国明确提出 2030 年"碳达峰"与 2060 年"碳中和"的战略目标[1-4]。当前，负碳排放技术虽然应用范围有限，但减排潜力巨大[5]，其中 CO_2 捕集利用与封存（CCUS）技术是具备大规模减排能力的核心技术之一。据统计，2020—2070 年全球累计 CO_2 减排量的 15%需依靠 CCUS 技术实现[6]。然而，交通运输、日常生活等领域的碳排放具有分散源基数大、分布广的特点，难以在排放端集中管控，因此直接空气碳捕集与封存（direct air capture and storage，DACS）技术的独特优势逐渐凸显。实际应用中，吸附剂再生过程的高能耗导致直接空气捕集（direct air capture，DAC）技术成本过高，制约其发展[7]。因此，提升捕集效率、降低运行成本对 DAC 技术支撑"双碳"目标实现至关重要。

DAC 技术中，吸附法凭借高吸附容量、易再生等特点，在低浓度 CO_2 捕集领域展现显著优势。固态胺吸附剂可通过胺基功能化修饰多孔吸附剂制备，作为弱碱性材料，相较于液相 DAC 技术，无需高温煅烧即可实现材料再生，且材料挥发率低、抗降解性强、设备腐蚀性小，能有效缓解胺类挥发与水损耗[8]。

通过胺基功能化改性制备的介孔硅基固态胺吸附材料具有高效的 CO_2 选择性捕集能力[9]。Wang 等人[10]发现 SBA-15 载体的模板去除工艺对胺基接枝效率具有关键调控作用。Huang 等人[11]的研究表明改性后的 MCM-48 分子筛对二氧化碳与硫化氢的吸附效果均有所提升。Belmabkhout 等人[12]通过表面接枝策略，将 3-［2-（2-氨基乙氨基）乙氨基］丙基三甲氧基硅烷（TRI）固载于孔结构优化的 MCM-41 基质上，该改性材料在低浓度 CO_2 混合气分离场景中表现出优异的吸附选择性。Hao 等人[13]研究发现加入适量 NH_4F 可改善 CO_2 吸附性能；此外，将 PEI 固载于 MCM-41 分子筛基质，在固碳方面有良好效果。Qi 等人[14]成功制备出胺基功能化固态胺吸附材料，该材料具有 CO_2 吸附量大和循环性能好等特点。Sayari 等人[15]研究发现短孔道吸附剂在低温条件下性能更优。在硅基与碳基介孔体系改性研究中，Wang 等人[16]改善了材料在低温下的 CO_2

吸附性能。林日嘉等[17]研究表明合成固态胺功能材料的 CO_2 吸附性能与胺负载率呈显著正相关。Zhu 等人[18]的研究结果显示 CO_2 捕集效率与载体粒径呈负相关关系。以上学者的研究结果表明，固态胺吸附材料具有良好的 CO_2 捕集性能。

胺吸附剂在超稀源 CO_2（例如空气等）捕获中的应用受到学者广泛关注。Bali 等人[19]研究表明胺修饰剂在低 CO_2 浓度环境中更具应用优势。在胺修饰吸附剂方面，Goeppert 等人[20-21]以 SiO_2 为载体基质，系统探究了聚乙烯亚胺（polyethyleneimine，PEI）负载率、吸附解吸温度、PEI 分子量及水分等因素对吸附特性与吸附行为的影响。Chen 等人[22]开发了 PEI 功能化树脂材料，发现胺负载率为 50%时该材料的吸附量达到最高。计算模拟已成为解析 CO_2 与吸附剂界面作用机制及功能化吸附剂表面优势吸附位点的核心研究手段。Zang 等人[23]利用密度泛函理论（density functional theory，DFT）计算阐明了有机胺与载体之间的界面相互作用强度及其对 CO_2 吸附性能的影响。Moon 等人[24]采用分子动力学（molecular dynamics，MD）模拟揭示了聚乙二醇添加剂在 PEI/硅基固态胺吸附剂中促进 CO_2 捕获的微观机制。

直接空气碳捕集技术能够突破排放源分散的限制，但目前仍面临低浓度 CO_2 下吸附效率低、材料作用机理不明确等挑战。当前，针对低浓度 CO_2 工况的直接空气捕集模拟研究匮乏；吸附剂方面，现有研究多聚焦于同种胺修饰剂不同负载量的影响，并且所采取的模拟研究多局限于微观分子层面或宏观吸附系统层面，缺乏二者的关联分析与动力学分析。

因此，本文通过量子力学模拟探究胺修饰官能团与 CO_2 的反应路径，推导胺基分子与 CO_2 的反应机理，从分子动力学角度分析各类辅助条件对吸附反应的促进作用及反应机理；针对部分反应因能垒过高无法生成最终产物的问题，从电子结构层面解析胺基官能团与 CO_2 分子的化学相互作用机制，建立构效关系模型，明确各影响因素对 CO_2 吸附过程的作用规律。本研究具有重要的理论意义与学术价值，同时能够为我国碳捕集技术的开发与应用提供支撑，具备明确的实际应用背景。

1 量子力学模拟方法及模型选择

量子化学的核心原理是借助量子力学的基本准则构建化学体系的数学模型。该方法通过求解含时或定态薛定谔方程，定量描述分子体系中的电子关联效应，进而精准推导物质的结构参数与电子行为特征。量子化学方法主要划分为 3 类：从头算（*Ab Initio*）方法、半经验轨道（semi-empirical orbit）方法以及 DFT 方法。

1.1 密度泛函理论介绍

DFT 理论的核心思想是通过电子密度分布函数解析包含原子、分子及凝聚态物质的多粒子体系的电子结构特性。DFT 将体系总能量转化为电荷密度分布的泛函形式，大幅降低了计算维度。在非简并量子基态体系中，体系的能量本征值、电子波函数分布等关键性质均可通过其电子概率密度分布实现唯一表征。DFT 的核心理论框架建立在 Hohenberg-Kohn 定理之上，基于该定理能够精确求解出系统的基态总能量及对应的电荷密度分布。

1.2 量子力学模拟模型选择

B3LYP 泛函是当前的主流泛函，属于杂化密度泛函，优势在于实现了计算效率与精度的平衡——通过融合 20%的 Hartree-Fock 精确交换能和密度泛函交换−相关能，在有机分子基态几何优化等计算中表现稳定可靠。然而 B3LYP 泛函对范德华力中色散部分的描述效果极差，在应用过程中需要添加 DFT-D3 色散校正。因此，本文开展量子力学模拟时选用 B3LYP-D3（BJ）泛函，该泛函在计算主族元素的分子振动、几何优化及过渡态搜索等方面均具备良好表现，同时能够准确描述弱相互作用，可有效模拟胺基分子与 CO_2 的反应过程。

基组方面，本文选取 6-31++G 基组，该基组是中等规模基组中应用最广泛的选项之一，尤其适用于有机分子的相关计算。通过引入弥散函数，6-31++G 基组显著增强了对弱束缚电子的描述能力，避免了电子云过度局域化的问题，在主族元素有机分子、阴离子体系及非共价相互作用的计算中效果优异。弥散函数能够优化电子云分布，减少因基组过紧导致的电子局域化误差。而极化函数则允许轨道形状发生变化（例如 d 轨道参与杂化），有助于提升对键角、偶极矩等性质的预测精度。与 aug-cc-pVTZ 等更大规模的基组相比，6-31++G 基组在计算精度与计算成本之间达成了良好平衡，满足本研究的需求。

2 结果与讨论

2.1 单个 MEA 与 CO_2 的反应路径

单个 MEA 与 CO_2 在非溶液环境下反应的能量演

化和路径分别如图 1、图 2 所示。图 1 中纵坐标标注的“能量”指反应物的总能量，而图中曲线则表明了反应过程中总能量的演化过程：MEA 首先与 CO_2 结合生成两性离子中间体，能量变化为–23.82 kJ/mol；随后反应体系跨越能垒为 147.18 kJ/mol 的过渡态，形成中间产物 2，中间产物 1 至中间产物 2 的能量变化为–6.57 kJ/mol；经分子内重排后，体系能量进一步降低 35.77 kJ/mol，最终生成稳定产物，整个吸附反应的总能量变化为–66.15 kJ/mol。

反应过程中，MEA 分子中胺基的 N 原子对 CO_2 分子的 C 原子发起亲核攻击，形成 N—C 键，随后胺基中的一个 H 原子转移至 CO_2 的 O 原子上。结合图 2 可知，CO_2 分子逐步向 N 原子靠近，其键角持续减小，从中间产物 1 的 170.8 °变为过渡态的 135.9 °，最终降至中间产物 2 的 119.4 °。在单个 MEA 与 CO_2 的反应体系中，CO_2 分子的形变程度较小，电荷分布区域差异不明显，中间产物 1 的两性离子特性较弱。CO_2 分子中 C—O 键长从初始 1.19 Å 增至过渡态的 1.22 Å，此过程中胺基上的 H 原子通过形成过渡态中的 N—H—O—C 四元环发生大范围位移，最终转移至 CO_2 的 O 原子上形成羧基。上述过程导致过渡态势垒极高，该反应难以自发进行。

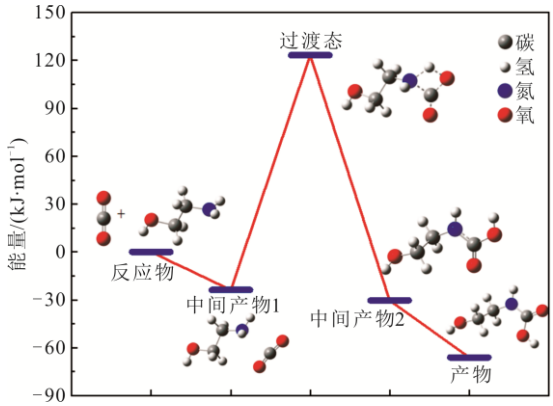


图 1 单个 MEA 与 CO_2 在非溶液环境下反应的能量演化

Fig.1 Energy evolution of the reaction of a single MEA with CO_2 in a non-solution environment

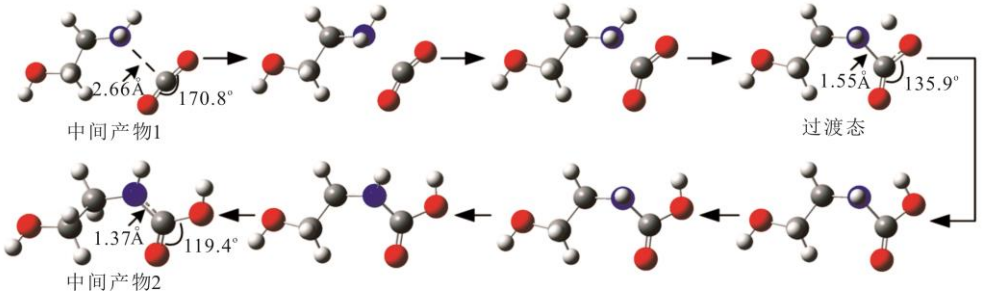


图 2 单个 MEA 与 CO_2 在非溶液环境下的反应路径示意

Fig.2 Schematic diagram of the reaction pathway of a single MEA with CO_2 in a non-solution environment

2.2 多个 MEA 与 CO_2 的反应路径

实际过程中，MEA 与 CO_2 的反应存在多种辅助路径，例如其他胺基分子参与、水分子介入等，这些因素均会改变反应路径。MEA 与 CO_2 在有额外 MEA 辅助下的反应能量演化及路径如图 3、图 4 所示。

反应初期，2 个孤立的 MEA 分子先形成团簇以降低体系能量，能量变化为–27.24 kJ/mol；随后 MEA 团簇与 CO_2 结合生成中间产物 1，能量变化达–47.28 kJ/mol。MEA 团簇与 CO_2 的相互作用更强，能量变化更显著，且 CO_2 分子的键角发生更大幅度改变，C—O 键角的减小使分子内电荷分布差异加剧，呈现明显两性离子中间体特征。

随后反应体系跨越能垒为 21.86 kJ/mol 的过渡态，形成中间产物 2，中间产物 1 至中间产物 2 的能量变化为–25.63 kJ/mol；经分子内重排后生成稳定产物，同时辅助 MEA 脱离体系——该过程中能量升高，源于辅助 MEA 与产物间存在较强的氢键相互作用，剥离需消耗额外能量。整个反应的总能量变化为–66.15 kJ/mol，与单个 MEA 与 CO_2 的反应总能量变化一致。

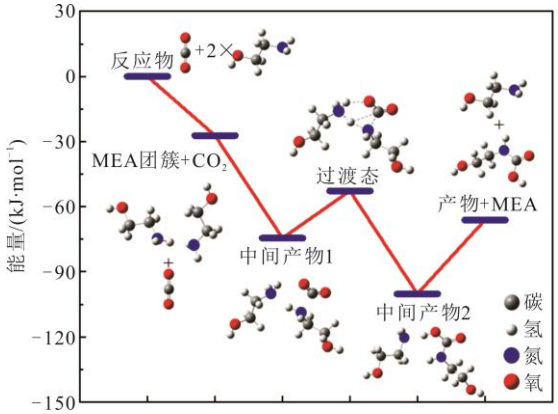


图 3 MEA 与 CO_2 在有额外 MEA 辅助下反应的能量演化

Fig.3 Energy evolution of the reaction between MEA and CO_2 with the assistance of additional MEA

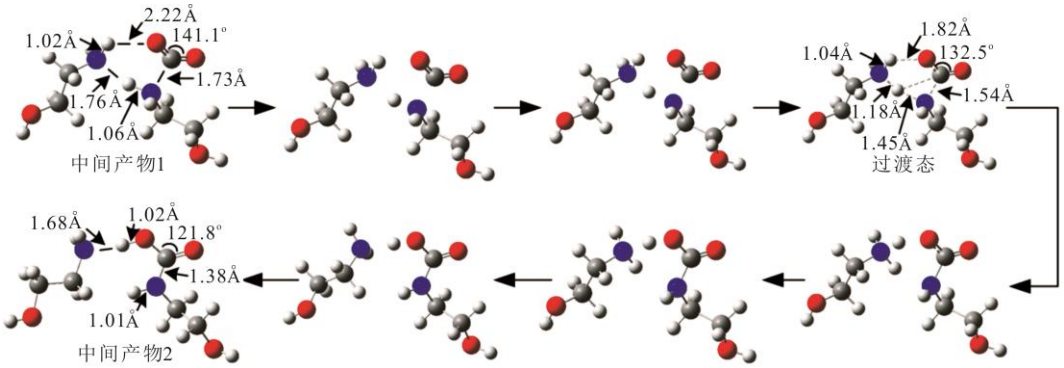


图 4 MEA 与 CO_2 有额外 MEA 辅助下的反应路径示意

Fig.4 Schematic diagram of the reaction pathway between MEA and CO_2 with additional MEA assistance

反应过程中，MEA 胺基的 N 原子对 CO_2 的 C 原子进行亲核攻击形成 N—C 键，胺基中的 H 原子不直接转移至 CO_2 的 O 原子上，而是在过渡态中形成 N—H—N—H—O—C 六元环，辅助 MEA 的作用是承接反应物给出的 H 原子，并将自身的 H 原子转移至 CO_2 的 O 原子上形成羰基。分析可知，与无额外 MEA 辅助的反应相比，该体系中 MEA 与 CO_2 的分子位移更小，CO_2 键角变化幅度也有所减小（从中间产物 1 的 141.1°变为过渡态的 132.5°，再到中间产物 2 的 121.8°），角应力降低；同时 C—O 键角较小使电荷分布区域差异更明显，中间产物 1 的两性离子特性更强。过渡态中 N—H—N—H—O—C 六元环的形成使 H 原子始终在小范围内移动，通过与辅助 MEA 交换 H 原子实现转移并形成羧基，大幅降低了过渡态势垒。该反应机理与路径与前人[25]计算结果相近，证实额外胺基分子的辅助可有效降低反应能垒。尽管实际固态胺负载吸附剂中难以形成图 3 的理想结构，但基于该机理可通过调控反应条件减小反应能垒，促进反应发生。

2.3 水分子辅助下 MEA 与 CO_2 的反应路径

水分子也可作为辅助介质参与 MEA 与 CO_2 的反应。MEA 与 CO_2 在有额外 H_2O 辅助下的反应能量演化及路径如图 5、图 6 所示。

反应初期，MEA 与 CO_2 结合生成两性离子中间体，能量变化为–23.82 kJ/mol；随后与 H_2O 结合形成中间产物 1，能量变化为–62.22 kJ/mol。分析可知，水分子参与形成的中间产物 1 能量更低，因此 H_2O 与 MEA、CO_2 的相互作用更强，能量变化更显著，且 CO_2 分子键角改变幅度更大，C—O 键角减小使分子内电荷分布差异加剧，两性离子中间体特征更突出。随后反应体系跨越能垒为 54.50 kJ/mol 的过渡态，形成中间产物 2，能量变化为–30.24 kJ/mol；经分子内重排后生成稳定产物，同时 H_2O 脱离体系——该过程能量升高，原因是 H_2O 与产物间存在较强的氢键相互作用，剥离需消耗额外能量。整个反应的总能量变化为–66.15 kJ/mol，与单个 MEA 与 CO_2 的反应总能量变化保持一致。

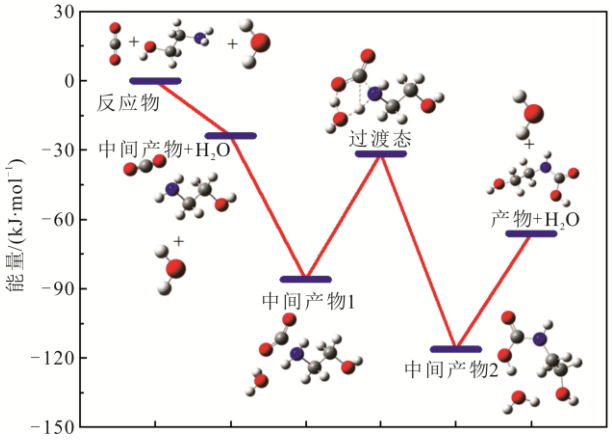


图 5 MEA 与 CO_2 在有额外 H_2O 辅助下反应的能量演化

Fig.5 Energy evolution of the reaction between MEA and CO_2 with the assistance of additional H_2O

反应过程中，MEA 胺基的 N 原子对 CO_2 的 C 原子进行亲核攻击形成 N—C 键，氢原子转移过程与单个 MEA 反应体系不同：胺基中的 H 原子不直接转移至 CO_2 的 O 原子上，而是在过渡态中形成 N—H—O—H—O—C 六元环，H_2O 的作用是承接反应物给出的 H 原子，并将自身的 H 原子转移至 CO_2 的 O 原子上形成羰基。该体系中 MEA 与 CO_2 的分子位移更小，CO_2 键角变化幅度减小（从中间产物 1 的 140.1°变为过渡态的 129.0°，再到中间产物 2 的 121.0°），角应力降低；同时 C—O 键角较小使电荷分布区域差异更明显，中间产物 1 的两性离子特性更强。过渡态中 N—H—O—H—O—C 六元环的形成使 H 原子在小范围内移动，通过与 H_2O 交

换实现转移并形成羧基，显著降低了过渡态势垒。该反应机理与路径证实水分子辅助可降低反应能垒，说明水分子辅助反应的能垒高于其他胺分子辅助反应的能垒。

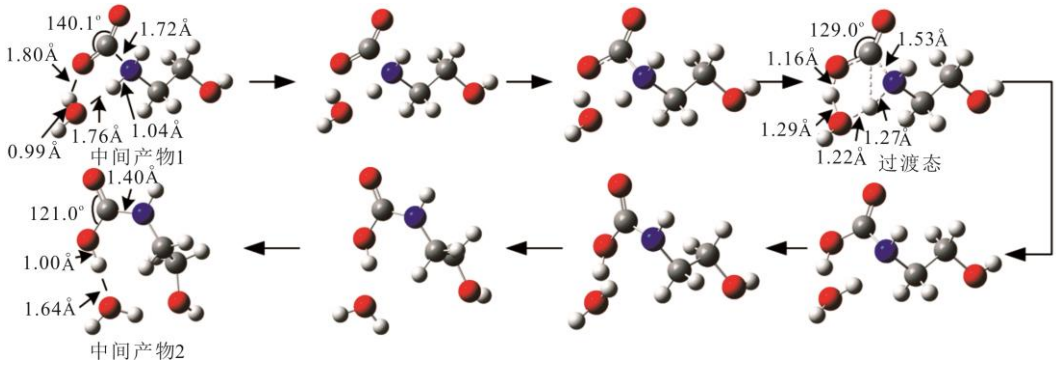


图 6 MEA 与 CO_2 在有额外 H_2O 辅助下的反应路径示意

Fig.6 Schematic diagram of the reaction pathway between MEA and CO_2 with the assistance of additional H_2O

2.4 胺基分子与 CO_2 反应路径与机理

研究推断，胺基分子与 CO_2 的反应遵循两性离子机理，核心步骤（图 7）包括：第 1 步，胺与 CO_2 反应生成带正负电荷的两性离子中间体；第 2 步，脱质子反应——两性离子与碱作用脱去质子，生成稳定的胺基甲酸盐，水可促进质子转移并形成碳酸氢盐类物质。结合前文，MEA 与 CO_2 的反应机制可明确：CO_2 分子作为亲电试剂，其碳原子受到胺基（-NH_2）中 N 原子的亲核攻击，形成 C—N 键并生成两性离子中间体，随后发生质子转移。质子转移方式受多种因素影响，分为分子内质子转移与分子间质子转移：分子内质子转移是指质子从带正电的氨基转移至相邻氨基，生成氨基甲酸盐，或未反应氨基作为质子受体促进质子转移；分子间质子转移则是指两性离子在溶液环境中将质子转移至其他胺分子，生成氨基甲酸盐和质子化胺，如图 8、图 9 所示。

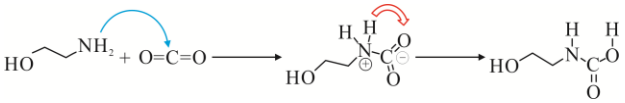


图 7 单个 MEA 与 CO_2 的反应机理

Fig.7 Reaction mechanism of a single MEA with CO_2

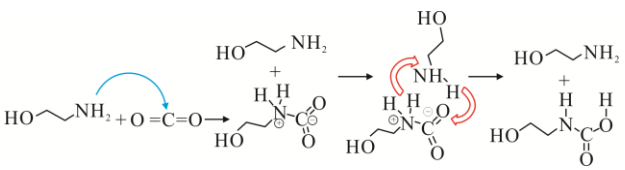


图 8 MEA 与 CO_2 在有额外 MEA 辅助下的反应机理

Fig.8 Reaction mechanism between MEA and CO_2 with additional MEA assistance

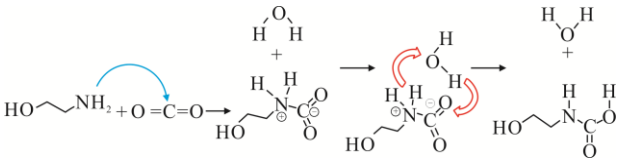


图 9 MEA 与 CO_2 在有额外 H_2O 辅助下的反应机理

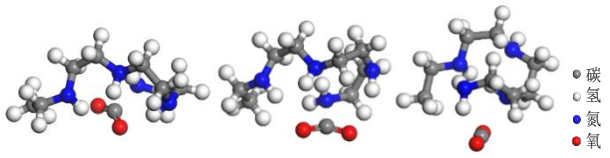
Fig.9 Reaction mechanism between MEA and CO_2 with additional H_2O assistance

较大分子质量的胺基分子与 CO_2 的反应机理与此类似，但大分子胺的静电吸引与轨道作用更强，且存在明显的空间效应——立体位阻导致部分位置产生空间排斥，引导底物形成特定构象。前文研究表明，胺修饰树脂吸附剂与 CO_2 反应时，借助静电力较易形成两性离子中间体[25]，但无辅助分子参与时，质子转移的能垒较高；且固态胺不具备胺溶液的溶剂效应，质子转移后续步骤更难发生。因此，本研究将重点围绕固态胺环境下两性离子中间体的形成反应展开深入探讨。

2.5 聚合度为 4 的 PEI 与 CO_2 的界面作用行为

本研究聚焦固态胺体系中两性离子中间体的形成机制，采用系统性构象采样策略：首先构建 PEI-CO_2 复合体系分子模型，开展多维度构象空间探索；然后进行扩展动力学模拟，通过热扰动促使体系跨越势能面能垒；采用等间隔采样策略提取动力学轨迹中的代表性构型作为初猜结构；借助梯度优化算法对各构型进行几何优化，收敛至邻近势能面极小点；最终构建包含优化构型及其相对能量的构象数据库。通过能级排序确定最低能量构型集合，定量分析优势构象的电子结构特征及构型稳定性差异。

经构型筛选分析，获得聚乙烯亚胺 L4（PEI-L4，直链型）与 CO_2 相互作用的部分低能量稳定构型，如图 10 所示。表 1 则展示了 3 种吸附构型各部分能量以及吸附能。由图 10 可以看出，构型 1、构型 2 具有显著的化学吸附特征，吸附能分别达–175.38、–175.09 kJ/mol，符合典型化学吸附能的范围；构型 3 的吸附能明显更低，因此难以将其判定为化学吸附过程。进一步分析发现，构型 1 和构型 2 中，CO_2 分子发生明显的键长变化与角度畸变，形成碳端化学吸附的两性离子中间体结构；而构型 3 中的 CO_2 分子保持线性构型，未呈现明显化学吸附特征，这与吸附能计算结果高度一致。



a) 构型 1　　b) 构型 2　　c) 构型 3

图 10 3 种 PEI-L4（直链）吸附 CO_2 构型分子模型
Fig.10 Three molecular models of CO_2 adsorption configurations of PEI-L4 (straight chain)

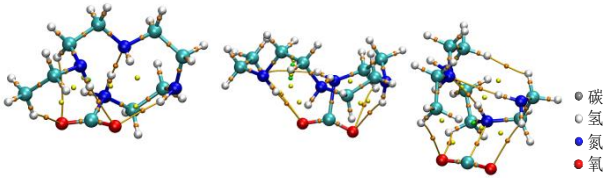
表 1 3 种 PEI-L4（直链）吸附 CO_2 构型各部分能量及吸附能
单位：kJ/mol
Tab.1 Energy of each part of the three CO_2 adsorption configurations of PEI-L4 (straight chain) and the adsorption energy

构型	E_{sum}	E_{PEI-L4}	$E(CO_2)$	吸附能
1	–1 905 257.667	–1 410 111.297	–494 970.995	–175.375
2	–1 905 257.292	–1 410 105.449	–494 976.749	–175.094
3	–1 905 246.850	–1 410 133.743	–495 051.973	–61.134

化学键分析是解析吸附机制的关键，胺基-CO_2 吸附机制的解析需结合量子化学波函数分析与键临界点拓扑研究，基于 Bader 的量子理论化学中的原子（AIM）理论，通过电子密度分布函数$\rho(r)$及其二阶导数（拉普拉斯量$\nabla^2\rho(r)$）可定量表征化学键本质特征。电子密度临界点按 Hessian 矩阵特征值符号分为 4 类：（3, –3）核临界点、（3, –1）键临界点（BCP）、（3, +1）环临界点及（3, +3）笼临界点。

橙色（3, –1）键临界点、黄色（3, +1）环临界点及绿色（3, +3）笼临界点的空间构型（图 11）揭示了 PEI-CO_2 复合体系的电子结构特征。

表 2 列出了 PEI-L4（直链）与 CO_2 间 C—N 键径上 BCP 处的各种属性。由表 2 可见，电子密度$\rho(r)$与势能密度 $V(r)$的数值特征与共价键强度呈显著正相关，且$\nabla^2\rho(r)$<0 的判据表明该区域存在电子局域化的共价作用特征。H(BCP)<0 时，共价相互作用占主导地位，且 H(BCP)/$\rho(r)$的绝对值越大，键强越高；而在非共价体系中，二者呈负相关。本研究采用 Mayer 键级进行键级分析，其物理本质反映原子间电子共享程度，对于符合 Lewis 理论描述的化学键，Mayer 键级与形式键级具有良好一致性，但该参数仅适用于同类型化学键的定量比较，无法直接用于不同类型化学键的对比分析。



a) 构型 1　　b) 构型 2　　c) 构型 3

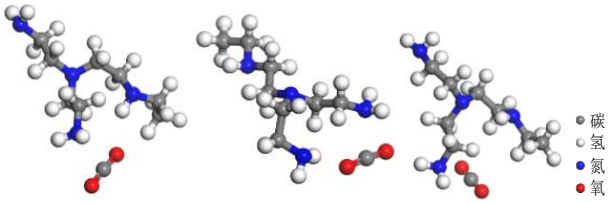
图 11 PEI-L4（直链）与 CO_2 吸附构型基于 AIM 的拓扑分析图
Fig.11 Topological analysis diagram of PEI-L4 (linear chain) and CO_2 adsorption configuration based on AIM

由表 2 可见，构型 1 与构型 2 在 C—N 键径上展现更高的电子密度与势能密度绝对值，平均局部静电势绝对值也显著高于构型 3，证实前两者的 C—N 键相互作用强度更具优势。电子密度拉普拉斯函数判定键形式存在理论局限性，本质源于共价键形成需满足电子密度在键径区域的显著局域化特征，而 BCP 位置的$\nabla^2\rho(r)$符号仅反映该点曲率特性。构型 1 与构型 2 的 H(BCP)均小于 0，而构型 3 的 H(BCP)趋近于 0 且量级显著降低，表明其作用机制以弱非共价相互作用为主。Mayer 键级分析结果与此一致，构型 3 的键级值（<0.15）表明其以范德华力作用为主导。因此，构型 1 与构型 2 在热力学上具有显著稳定性优势，这也解释了吸附过程中二者构象占据主导地位的实验现象。

表 2 PEI-L4（直链）与 CO_2 间 C－N 键径上 BCP 处的各种属性
Tab.2 Various properties at the BCP on the C－N bond path between PEI-L4 (straight chain) and CO_2

构型	电子密度$\rho(r)$	势能密度 $V(r)$	平均局部静电势 $H(r)/V(r)$	电子密度拉普拉斯函数$\nabla^2\rho(r)$	能量密度 $H(r)$	Mayer 键级
1	0.139 0	–0.140 0	–0.465 0	0.042 2	–0.064 800	0.433
2	0.132 0	–0.130 0	–0.434 0	0.062 6	–0.057 200	0.420
3	0.030 4	–0.021 6	–0.012 3	0.083 3	–0.000 375	0.117

对于 PEI 分子存在不同聚合度及不同分子链结构（直链、支化），研究 PEI 自身性质对吸附 CO_2 的影响，得到不同结构 PEI 吸附 CO_2 的性质并进行对比，从而可选择适合的 PEI 结构作为胺修饰剂。部分能量较低的 PEI-B4 与 CO_2 结合的构型如图 12 所示。进一步研究了不同聚合度、不同分子链结构（直链、支化）PEI 的 CO_2 吸附性能（表 3）。



a) 构型 1　　b) 构型 2　　c) 构型 3

图 12 3 种 PEI-B4（支化）吸附 CO_2 构型分子模型

Fig.12 Three molecular models of CO_2 adsorption configurations of PEI-B4 (branched)

表 3 3 种 PEI-B4（支化）吸附 CO_2 构型各部分能量及吸附能

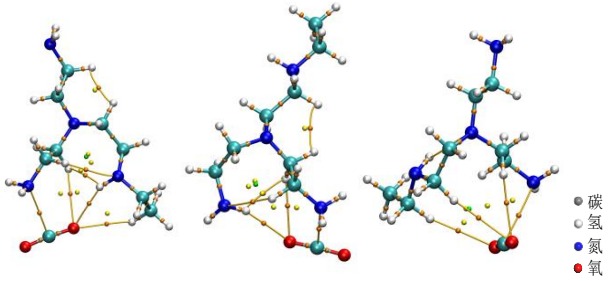
单位：kJ/mol

Tab.3 Energy of each part of the three CO_2 adsorption configurations of PEI-B4 (branched) and the adsorption energy

构型	E_{sum}	E_{PEI-B4}	$E(CO_2)$	吸附能
1	–1 905 201.780	–1 410 099.848	–495 056.926	–45.006
2	–1 905 202.087	–1 410 101.917	–495 056.875	–43.295
3	–1 905 208.403	–1 410 114.459	–495 058.117	–35.828

由图 12 与表 3 可见：构型 1—构型 3 的吸附能介于–45.006~–35.828 kJ/mol，数值较小，可判定基本不存在化学吸附；从 CO_2 的形态看，3 种构型中 CO_2 均未发生形变，未呈现明显的两性离子中间体特征，表明胺基分子与 CO_2 发生反应的概率较低。

PEI-B4（支化）与 CO_2 吸附构型基于 AIM 的拓扑分析图如图 13 所示。PEI-B4（支化）与 CO_2 间 C—N 键径上 BCP 处的各种属性见表 4。可见，构型 1、构型 2 更倾向于 CO_2 中一端的氧原子朝向 PEI 分子内部，形成更多氢键；构型 3 中 2 个氧原子均与相邻 H 形成氢键，但构型 1、2 的吸附能更大。



a) 构型 1　　b) 构型 2　　c) 构型 3

注：图中桔黄、黄色及绿色小球分别代表电子密度的（3, -1）、（3, +1）及（3, +3）临界点，紫色小球代表（3, –3）临界点。

图 13 PEI-B4（支化）与 CO_2 吸附构型基于 AIM 的拓扑分析图

Fig.13 Topological analysis diagrams of PEI-B4 (branched) and CO_2 adsorption configurations based on AIM

由表 4 可知，构型 1—构型 3 中电子密度、势能密度绝对值、平均局部静电势均接近 0，表明 3 种构型中 C—N 键径上的相互作用比 PEI-L4 更小，但构型 1、构型 2 的相互作用强度大于构型 3。电子密度拉普拉斯函数与能量密度均大于 0，表明未形成化学键，3 种构型的共价相互作用成分较弱，非键相互作用占绝对优势地位。

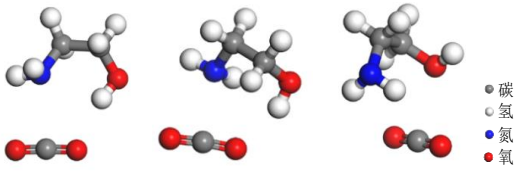
表 4 PEI-B4（支化）与 CO_2 间 C—N 键径上 BCP 处的各种属性

Tab.4 Various properties at the BCP on the C—N bond path between PEI-B4 (branched) and CO_2

构型	电子密度 $\rho(r)$/Bohr^{-3}（Bohr=5.29×10^{-11} m）	势能密度 $V(r)$/(Hartree/Bohr^3, Hartree=4.36×10^{-18} J)	平均局部静电势 $H(r)/V(r)$/(Hartree/e, e=1.60×10^{-19} C)	电子密度拉普拉斯函数 $\nabla^2\rho(r)$/Bohr^{-5}	能量密度 $H(r)$/(Hartree/Bohr^3)	Mayer 键级
1	0.019 0	–0.013 1	0.051 0	0.060 3	0.000 97	0.068 5
2	0.018 8	–0.013 0	0.052 8	0.059 8	0.000 99	0.065 7
3	0.014 5	–0.009 9	0.097 7	0.050 7	0.001 42	<0.050 0

2.6 MEA 与 CO_2 的界面作用行为

3 种 MEA 吸附 CO_2 构型分子模型以及各部分能量和吸附能如图 14、表 5 所示。可以看出，构型 1—构型 3 的吸附能为–43.802~ –27.809 kJ/mol，数值较小，可判定不存在化学吸附；3 种构型中 CO_2 均未发生形变，未呈现明显的化学吸附形态。



a) 构型 1　　b) 构型 2　　c) 构型 3

图 14 3 种 MEA 吸附 CO_2 构型分子模型

Fig.14 Three MEA-CO_2 adsorption molecular models

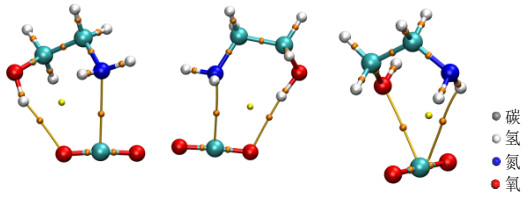
表 5 3 种 MEA 吸附 CO_2 构型各部分能量以及吸附能

单位：kJ/mol

Tab.5 Energy of each part of the three MEA-CO_2 adsorption configurations and the adsorption energy

构型	E_{sum}	E_{MEA}	$E(CO_2)$	吸附能
1	–1 047 462.033	–552 361.210	–495 057.021	–43.802
2	–1 047 460.610	–552 370.658	–495 058.084	–31.868
3	–1 047 447.658	–552 361.420	–495 058.429	–27.809

MEA 与 CO_2 吸附构型基于 AIM 的拓扑分析图如图 15 所示。MEA 上 N 原子与 CO_2 的 C 原子间 C—N 键径上临界点处的数据详见表 6。



a) 构型 1　　b) 构型 2　　c) 构型 3

注：桔黄、黄色及绿色小球分别代表电子密度的（3, -1）、（3, +1）及（3, +3）临界点，紫色小球代表（3, -3）临界点（位于原子核附近，被原子小球遮盖）。

图 15 MEA 与 CO_2 吸附构型基于 AIM 的拓扑分析图

Fig.15 Topological analysis diagrams of MEA-CO_2 adsorption configurations based on AIM

表 6 MEA 与 CO_2 间 C—N 键径上 BCP 处的各种属性

Tab.6 Various properties at the BCP on the C－N bond between MEA and CO_2

构型	电子密度 $\rho(r)$/Bohr^{-3}（Bohr=5.29×10^{-11} m）	势能密度 $V(r)$/(Hartree/Bohr^3, Hartree=4.36×10^{-18} J)	平均局部静电势 $H(r)/V(r)$/(Hartree/e, e=1.60×10^{-19} C)	电子密度拉普拉斯函数$\nabla^2\rho(r)$/Bohr^{-5}	能量密度 $H(r)$/(Hartree/Bohr^3)	Mayer 键级
1	0.182 2	−0.125 4	−0.082 1	0.583 5	0.010 3	0.063 9
2	0.153 0	−0.103 1	−0.112 5	0.504 7	0.011 6	0.059 3
3	0.148 3	−0.118 4	−0.036 0	0.602 4	0.016 1	<0.050 0

MEA 吸附 CO_2 构型 1 与构型 3 中 CO_2 与最近的 N 原子间的 LOL 填色图如图 16 所示。

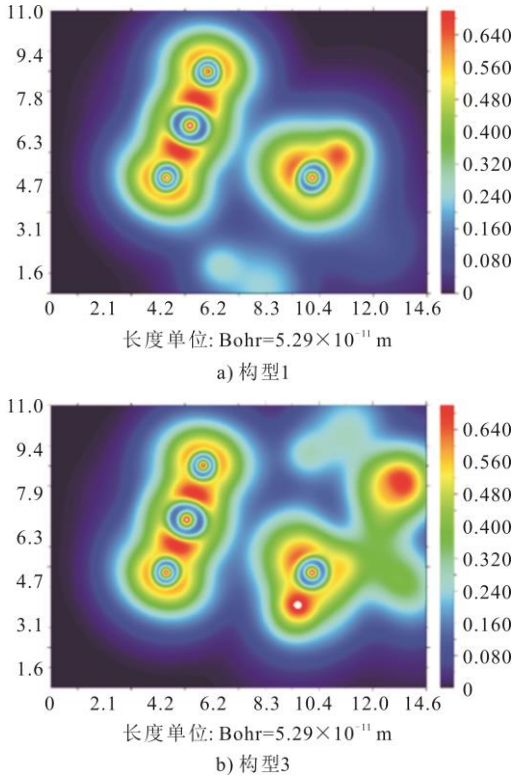


图 16 MEA 吸附 CO_2 构型 1 与构型 3 中 CO_2 与最近的 N 原子间的 LOL 填色图

Fig.16 LOL-filled diagrams showing the relationship between CO_2 and the nearest N atom in MEA adsorption configurations 1 and 3

由图 16 可见，CO_2 中碳原子与氮原子间未出现明显电子聚集，无定域性较高的区域，未形成化学键，仅依靠分子间范德华力实现约束。

IRI 填色图在 MEA 吸附构型 1 中可视化等值图如图 17 所示。由图 17 可以看出：CO_2 与 MEA 分子间存在显著弱相互作用，其中 MEA 分子中氮原子与 CO_2 分子中碳原子的相互作用最突出；此外，MEA 分子中其他邻近 CO_2 的原子与 CO_2 之间的相互作用区域内，主要存在较弱的范德华作用。因此，MEA 与 CO_2 之间存在明显的分子间相互作用。

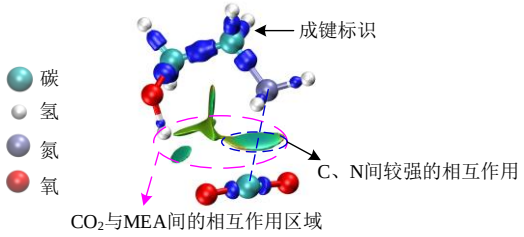


图 17 IRI 填色图在 MEA 吸附构型 1 中可视化等值图

Fig.17 IRI color-coded contour plots visualized in MEA adsorption configuration 1

MEA 吸附构型 1 分子间相互作用的 IGMH 填色图以及各原子在相互作用中的占比如图 18 所示。由图 18 可以看出：在 MEA 吸附构型 1 中，CO_2 的碳原子与其中一个氧原子及 MEA 分子间的相互作用指数占比超过 80%；CO_2 的 2 个氧原子表现出明显电子分布不对称性，距离 MEA 较近的氧原子通过氢键等作用与 MEA 形成更强的相互作用。分析表明，MEA 与 CO_2 的结合并非由单一强相互作用

主导，而是多种弱相互作用的协同效应——CO_2 的碳原子与 MEA 的氮原子之间的相互作用在吸附过程中起关键作用（具体占比标注于图中），同时 CO_2 的 2 个氧原子也做出显著相互作用贡献。

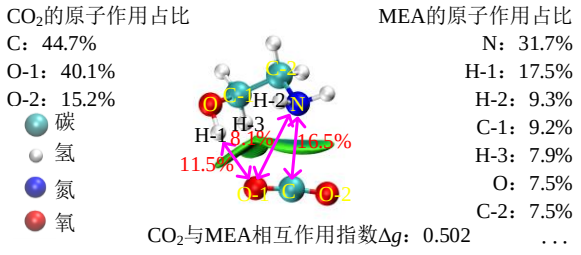


图 18 MEA 吸附构型 1 分子间相互作用的 IGMH 填色图以及各原子在相互作用中的占比

Fig.18 MEA adsorption configuration 1: IGMH color-coded diagram of intermolecular interactions and the proportion of each atom in the interaction

IRI 填色图在 MEA 吸附构型 2 中可视化等值图如图 19 所示。由图 19 可以看出：CO_2 与 MEA 分子间存在显著弱相互作用，其中 MEA 分子中氮原子与 CO_2 碳原子的相互作用最为突出，但低于 PEI-L4 吸附构型 3 的相互作用强度；此外，MEA 分子中其他邻近 CO_2 的原子与 CO_2 之间的相互作用区域内，主要存在较弱的范德华作用。该分析证实，构型 2 中 MEA 与 CO_2 存在较强非键相互作用，主要由静电作用和范德华力共同贡献。因此，要生成最终产物需跨越极高能垒；若不依赖其他胺分子或水分子辅助，仅依靠分子间静电力或范德瓦尔斯力，该反应难以自发进行。

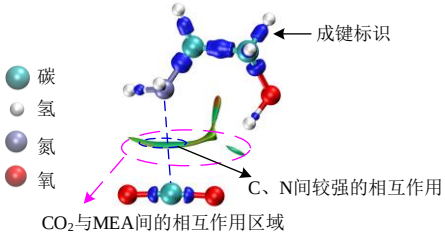


图 19 IRI 填色图在 MEA 吸附构型 2 中可视化等值图

Fig.19 IRI color-coded contour plots visualized in MEA adsorption configuration 2

MEA 吸附构型 2 分子间相互作用的 IGMH 填色图以及各原子在相互作用中的占比如图 20 所示。由图 20 可以看出：碳原子与 MEA 之间的相互作用指数占比接近一半；与吸附构型 1 不同，构型 2 中 CO_2 的 2 个氧原子相互作用差异相对较小。碳原子与氮原子间的作用占总相互作用指数的 17.5%，其余相互作用指数由氢键、范德华力等综合原子间相互作用占据。各原子的相互作用占比详见图 20，可见 CO_2 中的碳原子与 MEA 中的氮原子在相互作用中占据重要地位，CO_2 中氧原子也存在较强相互作用。

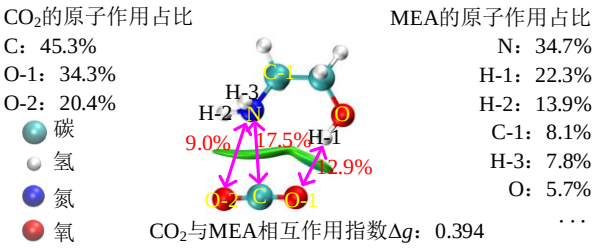


图 20 MEA 吸附构型 2 分子间相互作用的 IGMH 填色图以及各原子在相互作用中的占比

Fig.20 MEA adsorption configuration 2: IGMH color-filled diagram of intermolecular interactions and the proportion of each atom in the interaction

3 结 论

1）MEA 与 CO_2 的反应符合两性离子机理，核心反应过程分为 2 个阶段。首先，MEA 中的氨基（–NH_2）作为亲核位点，攻击 CO_2 的亲电碳原子，进而形成带正负电荷的两性离子中间体；然后，两性离子通过分子内或分子间质子转移实现脱质子，最终生成稳定的氨基甲酸盐。质子受体可包括其他 MEA 分子、水或羟基离子（OH^-），其中水分子借助氢键作用能显著降低反应能垒，但同时可能与 CO_2 竞争吸附位点，需在实际应用中予以关注。

2）质子转移路径受环境条件调控，无辅助条件时，质子转移主要依赖分子内过程；当存在额外 MEA 或 H_2O 时，分子间质子转移占据主导地位，可加速脱质子化进程。无胺基分子或其他辅助条件时，MEA 与 CO_2 反应的能垒高达 147.18 kJ/mol；有额外 MEA 协助质子转移时，能垒可降至 21.86 kJ/mol；有水分子协助时，能垒则降至 54.50 kJ/mol。水具有双重作用：在湿润环境中，水虽能促进质子转移并生成碳酸氢盐，但它与 CO_2 的竞争吸附可能削弱反应效率。协同质子受体（如邻近胺分子或水）可降低两性离子脱质子化能垒。

3）直链 PEI-L4 的 2 种低能量构型吸附能分别达–175.38、–175.09 kJ/mol，而支化 PEI-B4 各构型吸附能仅介于–45.006~–35.828 kJ/mol，无明显化学吸附迹象，以非键相互作用为主。直链结构在提升与 CO_2 的反应性能方面表现最突出，因为直链结构减少了位阻效应，进而增加了化学吸附点位。

4）本文模拟研究工况条件下，MEA 与 CO_2 的吸附能介于–43.802~–27.809 kJ/mol，无明显化学吸附特征，CO_2 未发生形变。MEA 与 CO_2 间未形成化学键，二者的相互作用以范德华力、静电作用及氢键等弱相互作用为主，其中 CO_2 的 C 原子与 MEA 的 N

原子相互作用最为突出。无其他胺分子或水分子辅助时，MEA 与 CO_2 难以跨越反应能垒形成最终产物。

5）理论计算基于理想化模型和简化的反应路径，反映的是本征热力学与动力学特性；而实验表征受实际材料形貌、表面缺陷、传质限制及测试条件等非理想因素影响，更容易呈现物理吸附或混合吸附特征。以上差异导致两者结果在吸附行为表述上存在不同。

[参 考 文 献]

[1] Liu Z, Deng Z, He G, et al. Challenges and opportunities for carbon neutrality in China[J]. Nature Reviews Earth & Environment, 2022, 3(2): 141.

[2] Zhang B, Niu N, Li H, et al. Assessing the efforts of coal phaseout for carbon neutrality in China[J]. Applied Energy, 2023, 352: 121924.

[3] Zhong Z Q, Chen Y Q, Fu M Y, et al. Role of CO_2 geological storage in China's pledge to carbon peak by 2030 and carbon neutrality by 2060[J]. Energy, 2023, 272: 127165.

[4] 柳待, 王宇旸, 吴嘉僖, 等. 直接空气碳捕集耦合二氧化碳光、热、电转化技术研究进展[J]. 热力发电, 2025, 54(6): 17.
Liu D, Wang Y Y, Wu J X, et al. Research progress on the technology of direct air carbon capture coupled with carbon dioxide photo-thermo-electric conversion[J]. Thermal Power Generation, 2025, 54(6): 17.

[5] 牛明博, 庞涵语, 吕友军, 等. 计及碳捕集和储氢容量协同优化的综合能源系统低碳调度[J]. 西安交通大学学报, 2025, 59(9): 41.
Niu M B, Pang H Y, Lü Y J, et al. Low-carbon scheduling of integrated energy systems considering synergistic optimization of carbon capture and hydrogen storage capacity[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2025, 59(9): 41.

[6] 罗晓宇. 大孔型离子聚合物材料吸附 CO_2 动力学影响机制研究[D]. 郑州: 华北水利水电大学, 2021.
Luo X Y. Kinetic mechanism of CO_2 adsorption on macroporous ionic polymer[D]. Zhengzhou: North China University of Water Resources and Electric Power, 2021.

[7] 赵俊德, 周爱国, 陈彦霖, 等. 吸附法 CO_2 直接空气捕集技术能耗现状[J]. 化工学报, 2025, 76(4): 1375.
Zhao J D, Zhou A G, Chen Y L, et al. Current status of energy consumption of adsorption CO_2 direct air capture[J]. CIESC Journal, 2025, 76(4): 1375.

[8] 陈彦霖, 郑家乐, 薛明, 等. 吸附法直接空气碳捕集技术产业化发展[J]. 热力发电, 2025, 54(6): 178.
Chen Y L, Zheng J L, Xue M, et al. Industrialization development of direct air carbon capture by adsorption[J]. Thermal Power Generation, 2025, 54(6): 178.

[9] 延卫, 高岁寒, 宋舒婷, 等. 面向 CO_2 捕集的吸附剂研究: 从传统设计到机器学习[J]. 西安交通大学学报, 2025, 59(11): 1.
Yan W, Gao S H, Song S T, et al. Research on adsorbents for CO_2 capture: from traditional design to machine learning[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2025, 59(11): 1.

[10] Wang L F, Yang R T. Increasing selective CO_2 adsorption on amine-grafted SBA-15 by increasing silanol density[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2011, 115(43): 21264.

[11] Huang H Y, Yang R T, Chinn D, et al. Amine-grafted MCM-48 and silica xerogel as superior sorbents for acidic gas removal from natural gas[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2003, 42(12): 2427.

[12] Belmabkhout Y, Serna-Guerrero R, Sayari A. Adsorption of CO_2-containing gas mixtures over amine-bearing pore-expanded MCM-41 silica: application for gas purification[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2010, 49(1): 359.

[13] Hao S Y, Chang H, Xiao Q, et al. One-pot synthesis and CO_2 adsorption properties of ordered mesoporous SBA-15 materials functionalized with APTMS[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2011, 115(26): 12873.

[14] Qi G G, Wang Y B, Estevez L, et al. High efficiency nanocomposite sorbents for CO_2 capture based on amine-functionalized mesoporous capsules[J]. Energy & Environmental Science, 2011, 4(2): 444.

[15] Heydari-Gorji A, Yang Y, Sayari A. Effect of the pore length on CO_2 adsorption over amine-modified mesoporous silicas[J]. Energy & Fuels, 2011, 25(9): 4206.

[16] Wang J T, Wang M, Zhao B B, et al. Mesoporous carbon-supported solid amine sorbents for low-temperature carbon dioxide capture[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2013, 52(15): 5437.

[17] 林日嘉, 许秀竹, 陈思宇, 等. 可再生固态胺纤维 PPAM 对 CO_2 的吸附性能[J]. 航天医学与医学工程, 2013, 26(3): 195.
Lin R J, Xu X Z, Chen S Y, et al. Investigation on CO_2 adsorption properties of a regenerative solid amine fiber PPAM[J]. Space Medicine & Medical Engineering, 2013, 26(3): 195.

[18] Zhu T, Yang S, Choi D K, et al. Adsorption of carbon dioxide using polyethyleneimine modified silica gel[J]. Korean Journal of Chemical Engineering, 2010, 27(6): 1910.

[19] Bali S, Sakwa-Novak M A, Jones C W. Potassium incorporated alumina based CO_2 capture sorbents: comparison with supported amine sorbents under ultra-dilute capture conditions[J]. Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 2015, 486: 78.

[20] Goeppert A, Czaun M, May R B, et al. Carbon dioxide capture from the air using a polyamine based regenerable solid adsorbent[J]. Journal of the American Chemical Society, 2011, 133(50): 20164.

[21] Goeppert A, Zhang H, Czaun M, et al. Easily regenerable solid adsorbents based on polyamines for carbon dioxide capture from the air[J]. ChemSusChem, 2014, 7(5): 1386.

[22] Chen Z H, Deng S B, Wei H R, et al. Polyethylenimine-impregnated resin for high CO_2 adsorption: an efficient adsorbent for CO_2 capture from simulated flue gas and ambient air[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2013, 5(15): 6937.

[23] Zang P C, Tang J Y, Zhang H, et al. Two-dimensional interfacial enhanced CO_2 adsorption performance of porous organic amine solids: structure-activity relationships and DFT calculations[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, 485: 149938.

[24] Moon H J, Carrillo J-M Y, Song M, et al. Underlying roles of polyol additives in promoting CO_2 capture in PEI/silica adsorbents[J]. ChemSusChem, 2024, 17(22): e202400967.

[25] Narimani M, Amjad-iranagh S, Modarress H. CO_2 absorption into aqueous solutions of monoethanolamine, piperazine and their blends: quantum mechanics and molecular dynamics studies[J]. Journal of Molecular Liquids, 2017, 233: 173.

（责任编辑　李园）