

研究论文

超临界丙烷分级聚苯乙烯

王靖岱 陈纪忠 阳永荣

(浙江大学化学工程与生物工程学系, 浙江 杭州 310027)

**摘 要** 利用超临界流体的溶剂强度随温度、压力的变化而变化 and 超临界流体泄压至常压时溶质完全析出的特点, 采用超临界丙烷取代常规溶剂对聚苯乙烯进行分级研究, 以期柔性地调节操作温度和压力, 获得分子量分布较窄的聚合物级分。结果表明, 对多分散系数为 4.225 的聚苯乙烯进行等温超临界分级和等压超临界分级实验能够得到多分散系数分别为 1.0~2.0 和 1.3~2.0 的级分。并且发现, 压力和温度越高, 溶剂的溶解能力越大, 分级得到的级分分子量越大。同时, 从高聚物溶液理论出发, 结合超临界溶液的溶解特性, 建立了超临界流体分级高聚物的级分分子量的预测模型。利用实验数据对模型参数优化结果表明, 当压力大于 25 MPa 时, 超临界等温分级模型的平均相对误差为 5.32%; 当温度大于 413.15 K 时, 超临界等压分级模型的平均相对误差为 18.03%。

**关键词** 超临界流体 丙烷 聚苯乙烯 分级 模型

**中图分类号** O 658

**文献标识码** A

**文章编号** 0438-1157 (2004) 05-0689-06

POLYSTYRENE FRACTIONATION WITH SUPERCRITICAL PROPANE

WANG Jingdai, CHEN Jizhong and YANG Yongrong

(Department of Chemical and Biochemical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, Zhejiang, China)

**Abstract** Polystyrene can be fractionated with supercritical propane. The main advantage of supercritical fluid fractionation is that large polymer fractions with a narrow molecular mass distribution can be obtained without using hazardous organic solvent. Isothermal fractionation was performed using increasing pressure profiling that provided milligram-size fractions with  $M_w$  distribution of 1.0—2.0 as compared to parent polymer with polydispersity 4.225. At the same time, isobaric fractionation was performed using increasing temperature profiling that provided fractions with  $M_w$  distribution of 1.3—2.0 from the same parent polymer. The molecular mass of fraction increases with increasing operating pressure and temperature as the solvent power of SCF increases. The major benefit of SCF solvent relative to a liquid solvent is that the solvent power of SCF can be finely tuned by controlling operating conditions. It is recommended that pressure should be controlled to tune the solvent power of SCF effectively. With a SCF solvent, the solubility of a polymer drops to essentially zero if the pressure is reduced to near ambient condition, thus facilitating the recovery of a solvent-free polymer fraction. A model relating the molecular mass of fraction to operating variables was deduced on the basis of the theory of polymer solution. The model parameters were estimated by using experimental data. The average relative deviation was below 18%.

**Keywords** supercritical fluid, propane, polystyrene, fractionation, model

2002-12-19 收到初稿, 2004-01-05 收到修改稿。

**联系人及第一作者:** 王靖岱, 男, 30 岁, 博士。

**基金项目:** 国家重点基础研究发展规划项目 (No. G1999064801) 和国家自然科学基金资助项目 (No. 20376069)。

**Received date:** 2002-12-19.

**Corresponding author:** Dr. WANG Jingdai. **E-mail:** wangjd@zju.edu.cn

**Foundation item:** supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. G1999064801) and the National Natural Science Foundation of China (No. 20376069).

## 引 言

无论是材料的物理机械性能还是聚合物的基础研究,高聚物的分子量大小和分布的宽窄都是一个非常重要的物性.因此,将高聚物试样有效地分成许多分子量大小不同但分布较均一的级分是非常必要的.目前,高聚物分级的常规方法主要有沉淀分级法、溶液抽提分级法、梯度淋洗层析分级法和凝胶渗透色谱分级法等<sup>[1]</sup>.这些方法遵循的原则是在给定的溶剂下聚合物的溶解度随分子量的增加而降低.溶剂强度依赖于溶剂的温度和两相体系中溶剂与非溶剂的比例.其缺点是所采用的溶剂通常是有毒有害的.

超临界流体具有溶剂强度随温度、压力的变化而变化以及泄压至常压时溶质完全析出的特点,用来替代常规的有毒有害溶剂对聚合物进行分级具有操作方便、绿色环保和循环利用等特点.一般采取升温升压或降温降压两种方式.在国外,已有研究者用超临界二氧化碳对聚二甲基硅氧烷、乙烯-丙烯酸共聚物、乙烯-甲基丙烯酸共聚物等聚合物进行了分级实验<sup>[2~7]</sup>,得到了分布较窄的聚合物级分.但对聚合物分级的操作变量与级分分子量的定量关系尚未见报道.本文建立了超临界分级的实验装置,以超临界丙烷作为分级溶剂,在等温和等压条件下对多聚合分散度为 4.225、重均相对分子质量为 256800 的聚苯乙烯树脂进行了超临界分级,得到了分布较窄的聚合物级分.同时,从聚合物溶液理论出发,结合超临界流体的溶解特性,建立了超临界分级的级分分子量预测模型.并经实验数据检验,提出了模型的适用范围.

## 1 实 验

## 1.1 实验装置及方法

超临界流体的聚合物分级的实验装置如图 1 所示,可分 4 个部分:①进料系统,由高压柱塞式计量泵、过滤器、低温浴槽和缓冲罐组成;②萃取柱,通过缠在柱外表面的电热丝加热并控制在  $\pm 1$  K,柱内温度由插在柱内的热电偶测得;③收集部分,由两个 U 形管组成,出口用玻璃纤维塞住,以防聚合物带出;④控制与测量系统,采用热电偶测量温度,精度为  $\pm 1$  K;压力由精密压力表读取,精度为  $\pm 0.1$  MPa;流量由转子流量计和湿式流量计计量.柱塞泵和 U 形管之间的所有连接

管线都由电热丝缠绕加热.本装置的设计温度和压力分别为 293~773 K 和 50 MPa.

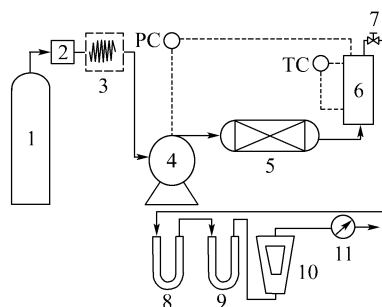


Fig. 1 Experimental set-up used during fractionations

- 1—gas cylinder; 2—filter; 3—cooler; 4—compressor;  
5—surge tank; 6—extractor; 7—valve; 8,9—collectors;  
10—rotameter; 11—dry test meter

实验为半间歇式操作.液态丙烷先经冰水浴降温,然后由高压计量泵增压进入预先加入足量聚苯乙烯的萃取柱内,用电热丝加热成为超临界流体.溶解足够长时间后,打开阀 7,同时开泵加压,使得压力维持恒定,即在恒温恒压下流体经电热丝缠绕加热的下流管子(温度远高于萃取柱内温度),到达浸泡在冰水中冷却的 U 形管,气体挥发,聚合物析出.待 U 形管中聚合物不再析出时,停泵关阀,并用定量的四氢呋喃溶液冲洗 U 形管,所得溶液采用凝胶渗透色谱测定分子量及其分布(Wyatt Technology Corporation,测试温度:35 °C, THF 流率:1 ml·min<sup>-1</sup>,柱子:TSK GEL 2500、4000).然后,在等温或等压条件下,升高萃取柱内压力(超临界等温分级)或升高温度(超临界等压分级)制备下一级分.

为使聚合物级分成分的波动减小到最低,本文采用大幅度降低气体的流率(0.02~0.1 L·min<sup>-1</sup>)和在聚苯乙烯成为饱和超临界丙烷溶液后才开始收集样品两个措施.对于前者,实验过程中通过控制阀的开度来实现;对于后者,通过预实验发现聚苯乙烯的溶解平衡时间为 2 h,因此分级操作时间间隔采用 2 h,以保证取样时都为饱和溶液,且不会浪费时间.

## 1.2 实验材料

丙烷(质量分数>95%)由无锡科学气体产品公司提供;聚苯乙烯(PS)由齐鲁塑料厂提供( $M_w=256800$ ,多分散系数为 4.225,  $T_g=99.44$  °C);四氢呋喃由浙江杭州双林化工试剂厂提供(质量分数>99%).

## 2 结果和讨论

### 2.1 超临界分级热力学分析<sup>[8]</sup>

因为高聚物的分子量具有多分散性, 即使把它溶解在单一溶剂中, 严格说来, 也属于多组分体系. 对于这种体系, 理论处理较为复杂. 本文假定每一级分为单分散性的, 设其聚合度为  $x$ , 溶解在超临界溶液中形成的溶液看成二组分体系. 对于这种体系, 溶液是否分相要视溶剂的化学位  $u_1$  与溶液浓度的关系如何而定: 假定  $u_1$  随溶液浓度  $\phi_2$  的增加单调下降, 则聚合物与溶剂将在全部浓度范围内互溶; 假定  $u_1$  随溶液浓度  $\phi_2$  的增加出现一极小值和极大值, 则处于两种不同浓度下的溶剂的化学位具有相同的数值. 这就是相分离的必要和充分条件.

根据 Flory-Huggins 高分子溶液理论, 溶剂的化学位变化  $\Delta u$  与溶液浓度  $\phi_2$  的关系为

$$\Delta u_1 = RT \left[ \ln(1 - \phi_2) + \left(1 - \frac{1}{x}\right) \phi_2 + \chi_1 \phi_2^2 \right] \quad (1)$$

式中  $x$ 、 $\phi_2$ 、 $\chi_1$  分别为聚合物聚合度、溶液浓度和 Huggins 参数. 当  $\chi_1$  比较小时,  $\Delta u$  随  $\phi_2$  单调下降; 当  $\chi_1$  比较大时,  $\Delta u$  具有极大值和极小值. 在临界点, 溶液的两个相的浓度相等, 两个极值合成一个拐点. 因此, 相分离的条件为

$$\begin{cases} \left[ \frac{\partial(\Delta u_1)}{\partial \phi_2} \right]_{T,p} = 0 \\ \left[ \frac{\partial^2(\Delta u_1)}{\partial \phi_2^2} \right]_{T,p} = 0 \end{cases} \quad (2)$$

将式 (1) 代入式 (2), 求导可得

$$\begin{cases} \frac{1}{1-\phi_2} - 1 + \frac{1}{x} - 2\chi_1 \phi_2 = 0 \\ \frac{1}{(1-\phi_2)^2} - 2\chi_1 = 0 \end{cases} \quad (3)$$

解联立方程, 得到临界浓度  $\phi_{2c}$

$$\phi_{2c} = \frac{1}{1+x^{0.5}} \quad (4)$$

当  $x \gg 1$  时

$$\phi_{2c} = \frac{1}{x^{0.5}} \quad (5)$$

将式 (5) 代入式 (3), 得临界 Huggins 参数  $\chi_{1c}$

$$\chi_{1c} = \frac{1}{2(1-x^{-0.5})^2} = \frac{(1+x^{-0.5})^2}{2(1-x^{-1})^2} = \frac{x^2(1+x^{-0.5})^2}{2(x-1)^2} \quad (6)$$

当  $x \gg 1$  时,  $x-1 \approx x$ , 则

$$\chi_{1c} = \frac{1}{2}(1+x^{-0.5})^2 \quad (7)$$

式 (7) 即为相分离临界点时 Huggins 参数表

达式. 而 Huggins 从溶液的格子模型的角度出发, 证明了溶液中各组分的热力学作用参数  $\chi_1$  的定义式如下<sup>[9]</sup>

$$\chi_1 = \chi_s + \frac{v_1}{RT} (\delta_1 - \delta_2)^2 \quad (8)$$

式 (8) 中, 溶剂的溶度参数  $\delta_1$  由下式得到<sup>[10]</sup>

$$\delta_1 = C_0 \rho_c^{0.5} \frac{\rho_{R_1}}{\rho_{R_{1,1}}} \quad (9)$$

代入式 (8), 得到

$$\chi_1 = \chi_s + \frac{v_1}{RT} \left( C_0 \rho_c^{0.5} \frac{\rho_{R_1}}{\rho_{R_{1,1}}} - \delta_2 \right)^2 \quad (10)$$

在临界点时, 式 (8) 和式 (10) 相等, 即得到超临界条件下高聚物分级预测模型

$$\frac{1}{2}(1+x^{-0.5})^2 = \chi_s + \frac{v_1}{RT} \left( C_0 \rho_c^{0.5} \frac{\rho_{R_1}}{\rho_{R_{1,1}}} - \delta_2 \right)^2 \quad (11)$$

Huggins 认为, 在常规的高聚物溶液中  $\chi_1 = 0.34$ , Giddings 将  $C_0$  设置为 1.25. 本文认为  $\chi_s$  和  $C_0$  为特定体系的特性常数, 由式 (11) 回归得到; 聚合物的溶度参数  $\delta_2$  随温度、压力的变化不大, 认为是常数. 这样, 式 (11) 表明, 每一状态点 ( $T, p$ ) 对应着一定的溶解能力, 一定的溶解能力能溶解一定聚合度的聚合物.

### 2.2 模型参数优化

首先建立目标函数. 取  $n$  组数据, 令

$$f(i) = \frac{1}{2}(1+x^{-0.5})^2 - \left[ \chi_s + \frac{v_1}{RT} \left( C_0 \rho_c^{0.5} \frac{\rho_{R_1}}{\rho_{R_{1,1}}} - \delta_2 \right)^2 \right] \quad (12)$$

目标函数为

$$\min \sum_i^n f^2(i) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (13)$$

模型参数优化的方法很多, 例如牛顿梯度法、变尺度法、共轭梯度法和鲍维尔算法等. 本文主要利用 Matlab 提供的 SQP 算法, 采用实验数据对模型进行回归, 求得各参数.

### 2.3 超临界分级

超临界等温分级 (403.15 K) 和超临界等压分级 (20 MPa) 所得的 12 个级分实验结果和模型计算值如表 1、表 2 所示. 结果表明, 相比于多聚合分散度为 4.225 的聚合物母体, 通过超临界等温分级得到多聚合分散度为 1.0~2.0 的级分, 通过超临界等压分级得到多聚合分散度为 1.3~2.0 的级分, 各级分的多分散系数显著降低, 说明聚苯乙烯的超临界等温分级和超临界等压分级主要由分子

量控制. 各级分的 GPC 谱图如图 2、图 3 所示. 可以看出, 压力和温度越大, 超临界丙烷的溶解能力越大, 分级得到的聚合物的分子量越大, 级分的重均相对分子质量  $M_w$  与萃取压力和温度基本呈递增关系 (图 4、图 5). 同样可以得出, 一定压力/温度条件下的超临界流体只具有相对应的一定溶剂强度, 也只能溶解一定大小分子量的聚合物, 对于高分子量的聚合物则不能溶解.

**Table 1 PS fractionation with isothermal supercritical propane (403.15 K)**

No.	Experiment			Calculation
	$p/\text{MPa}$	$M_w$	$\text{PDI}(M_w/M_n)$	$M_w$
1	10.0	18862	2.036	49.9
2	15.0	61752	1.755	411.8
3	20.0	86200	1.396	3865.5
4	25.0	159900	1.065	170373.0
5	30.0	212300	1.244	226288.4
6	35.0	246870	1.298	239891.3
residue		256100	2.736	

**Table 2 PS fractionation with isobaric supercritical propane (20.0 MPa)**

No.	Experiment			Calculation
	$T/\text{K}$	$M_w$	$\text{PDI}(M_w/M_n)$	$M_w$
1	383.15	24164	1.973	5188.8
2	393.15	40497	1.566	11554.4
3	403.15	85100	1.852	30304.8
4	413.15	124224	1.368	89949.7
5	423.15	182052	1.398	212064.8
6	433.15	208624	1.344	187719.4
residue		241500	3.195	

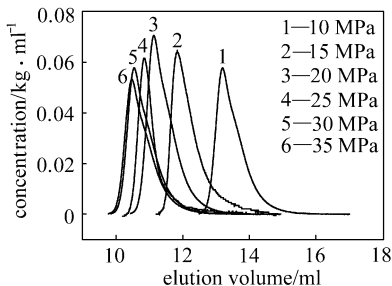


Fig. 2 GPC chromatograms of fractions obtained by isothermal SCF fractionation

通过对超临界等温分级的实验数据 (表 1) 和超临界等压分级的实验数据 (表 2) 优化, 分别得到超临界等温分级模型和超临界等压分级模型的表

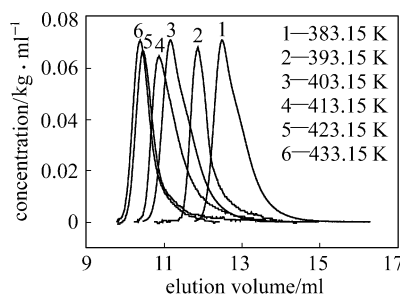


Fig. 3 GPC chromatograms of fractions obtained by isobaric SCF fractionation

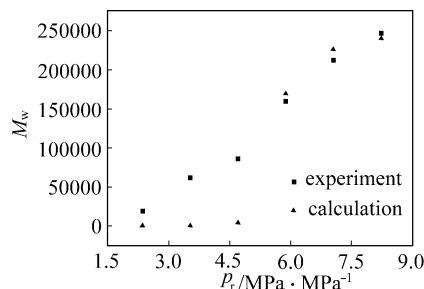


Fig. 4  $M_w$  of fractions vs pressure

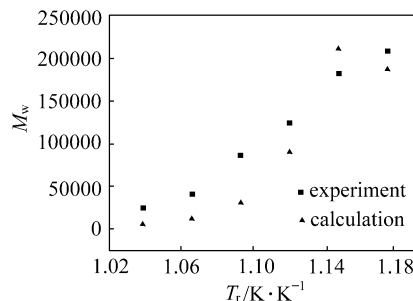


Fig. 5  $M_w$  of fractions vs temperature

达式. 超临界等温分级模型为

$$\frac{1}{2}(1+x^{-0.5})^2 = 0.4751 + \frac{v_1}{RT} \left( 4.0914 p_c^{0.5} \frac{\rho_{R_1}}{\rho_{R_{1,1}}} - \delta_2 \right)^2 \quad (14)$$

超临界等压分级模型为

$$\frac{1}{2}(1+x^{-0.5})^2 = 0.5213 + \frac{v_1}{RT} \left( 4.7915 p_c^{0.5} \frac{\rho_{R_1}}{\rho_{R_{1,1}}} - \delta_2 \right)^2 \quad (15)$$

超临界等温分级模型和超临界等压分级模型各级分分子量的计算值和实验值的平均相对误差分别为 51.76% 和 44.75%. 在超临界等温分级的低压下和超临界等压分级的低温下, 模型的计算值和实验值相差很大, 而在超临界等温分级的 25 MPa 以上和超临界等压分级的 413.15 K 以上的 3 个实验点的平均相对误差仅为 5.32% 和 18.03%. 究其原因

因, 模型推导时级分单分散性的假定在超临界等温分级的低压区和超临界等压分级的低温区与现实存在着相当的偏差, 分级是从压力较低的 10 MPa 或温度较低的 383.15 K 开始的, 具有一定溶解能力的低压超临界溶剂或低温超临界溶剂将原料中能溶解的各链长聚合物全部溶解下来, 即溶解在超临界丙烷溶液中的聚合物的多分散系数很大, 从而致使模型假定的单分散性与事实严重不符. 当压力升高到 25 MPa 以上或温度升高至 413.15 K 时, 釜中聚合物中各种各样低链长的聚合物已经被溶解除去, 相对于低压或低温状态下的超临界溶剂而言, 高压或高温下溶解下来的聚合物的链长基本趋向一致, 即多分散系数小, 与模型的单分散性假设相符, 所以模型的预测值较好. 从实验值也可以看出, 低压和低温下所得级分的多分散系数较高压和高温下大, 特别是等温超临界分级的 10 MPa 和等压超临界分级的 383.15 K 下的级分多分散系数更是高达 2.036 和 1.973, 也证实了低压和低温下操作所得的级分溶液与模型假设的单分散性有较大出入. 而在超临界等温分级的 35 MPa 下和超临界等压分级的 433.15 K 下的级分多分散系数分别仅为 1.298 和 1.344, 结合模型计算值表明, 级分的多分散系数越小, 模型的预测越精确. 因此, 本文所建的超临界等温分级模型只适用于压力大于 25 MPa 时的级分分子量预测, 而超临界等压分级模型只适用于温度大于 413.15 K 时的级分分子量预测.

本文也可从超临界溶剂化理论来解释所得到的实验现象. 超临界条件下, 丙烷分子在 PS 周围形成集聚体, 并在数量上大大超过 PS 分子, 大约在几千倍左右<sup>[11]</sup>. 这些丙烷分子参与了 PS 链的溶剂化过程. 压力或温度增大, 超临界丙烷在溶质周围形成的集聚体越多, PS 溶剂化程度就越强, 使得链更长的 PS 分子溶解在超临界丙烷中. 总之, 随着压力和温度的逐步增加, 超临界丙烷对 PS 的溶剂化能力也随之增加, 使得各分子量的 PS 级分能依次分级析出.

如果减少分级操作中压力或温度递增的间隔, 则可获得分子量分布更窄的级分. 也可对级分进行进一步分级, 获得分布更窄的级分.

### 3 结 论

对重均相对分子质量为 256800、多聚合分散度为 4.225 的聚苯乙烯成功地进行了超临界等温分

级和超临界等压分级, 得到了重均相对分子质量在 18000~240000 间、多聚合分散度在 1.0~2.0 间的一系列聚合物级分, 并得到以下结论.

(1) 相比于传统的分级方法, 超临界分级能方便地通过调节温度和压力对溶解进行控制, 获得分子量分布较窄的聚合物级分. 研究发现, 操作压力和温度越高, 溶剂的溶解能力越大, 级分的分子量越大, 级分的重均相对分子质量与操作变量(温度和压力)之间存在着递增关系. 同时超临界流体能循环使用, 不会产生有毒有害的废水.

(2) 从高聚物溶液理论出发, 结合超临界溶液的溶解特性, 建立了超临界流体分级高聚物的级分分子量预测模型. 利用实验数据对模型参数优化结果表明, 超临界等温分级模型只适用于压力大于 25 MPa 的分级操作, 而超临界等压分级模型只适用于温度大于 413.15 K 的分级操作, 其平均相对误差分别为 5.32% 和 18.03%.

(3) 在超临界分级实验时, 压力或温度递增的间隔减小, 可以得到分子量分布更窄的级分, 这对于标准 CCD (chemical composition distribution) 的制备提供了新的便捷途径.

在本文操作压力和温度下, 溶解度很小, 致使级分量较少. 因此提高操作温度和压力或加入助溶剂以提高级分量是今后研究的方向之一.

### 符 号 说 明

- $C_0$ ——常数
- $M_n$ ——数均相对分子质量
- $M_w$ ——重均相对分子质量
- $n$ ——实验数
- $p$ ——压力, Pa
- $R$ ——气体常数,  $\text{Pa} \cdot \text{m}^3 \cdot (\text{kmol} \cdot \text{K})^{-1}$
- $T$ ——温度, K
- $T_g$ ——玻璃化温度, K
- $u$ ——化学位
- $v$ ——摩尔体积,  $\text{L} \cdot \text{mol}^{-1}$
- $x$ ——聚合度
- $\delta$ ——溶度参数
- $\rho$ ——密度,  $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
- $\phi$ ——溶液浓度
- $\chi_s$ ——特性常数
- $\chi^1$ ——Huggins 参数

### 下角标

- $c$ ——临界值
- $l$ ——液体

1——溶剂

2——溶质

## References

- Lin Shang'an (林尚安), Lu Yun (陆耘), Liang Zhaoxi (梁兆熙). *Macromolecule Chemistry (高分子化学)*. Beijing: Science Press, 2000
- Britto L J D, Soares J B P, Penlidis A, Krukoni V. High-density Polyethylene Fractionation with Supercritical Propane. *Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics*, 1999, **37**: 553—560
- Iskender Yilgor, James E Mcgrath. Novel Supercritical Fluid Techniques for Polymer Fractionation and Purification • 2 • Fractionation and Characterization of Functional Siloxane Oligomers. *Polymer Bulletin*, 1984, **12**: 499—506
- Debjcet Pradhan, Chang-keng Chen, Maciej Radosz. Fractionation of Polystyrene with Supercritical Propane and Ethane: Characterization, Semibatch Solubility Experiments, and SAFT Simulations. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 1994, **33**: 1984
- Zhao X, Watkins R, Barton S W. Strategies for Supercritical CO<sub>2</sub> Fractionation of Polydimethylsiloxane. *Journal of Applied Polymer Science*, 1995, **55**: 773—778
- Partt J Alan, Sang-ho Lee, Mark A Mchugh. Supercritical Fluid Fractionation of Copolymers Based on Chemical Composition and Molecular Weight. *Journal of Applied Polymer Science*, 1993, **49**: 953—966
- Partt J Alan, Mark A Mchugh. Supercritical Fluid Fractionation of Poly (ethylene-co-acrylic acid). *Journal of Supercritical Fluids*, 1996, **9**: 61—66
- Zheng Changren (郑昌仁). *Polymer Molecular Weight and Molecular Weight Distribution (高聚物分子量及其分布)*. Beijing: Chemical Industry Press, 1986
- в. п. привалко, киев, наукова думка (A E 涅斯捷罗夫). *Handbook of Polymer Physics and Chemistry (聚合物物理化学手册)*. Beijing: China Petrochemical Press, 1995
- Giddings J C, Myers M N, McLaren L, Keller R A. High Pressure Gas Chromatography of Nonvolatile Species. *Science*, 1968, **162**: 67—73
- Lalanne P, Ray S, Cansell F, Tassaing T, Marcel Besnard. Attempt to Explain the Change in Solvation of Polystyrene in Supercritical CO<sub>2</sub>/Ethanol Mixtures Using Infrared and Raman Spectroscopy. *Journal of Supercritical Fluids*, 2001, **19**: 199—207

## 信息与交流

## 第 40 届世界化学大会明年在中国举行

从中国化学会第 24 届学术年会传出消息, 中国化学会已获准举办第 40 届 IUPAC 学术大会 (世界化学大会)。

经过中国化学会的积极申办和竞争, 受国际纯粹与应用化学联合会 (简称 IUPAC) 的委托, 第 40 届 IUPAC 学术大会将于 2005 年 8 月 14~19 日在北京举行, 同时还将举行第 43 届 IUPAC 全体会员会议。会议将由中国化学会联合科学部、中国科学院、教育部、国家自然科学基金委员会、中国科协、中国石油化工股份有限公司等单位共同主办。

第 40 届 IUPAC 学术大会的主题为“化学的创新”。届时将设立 8 个专题: 环境化学与绿色化学、生命科学中的化学与化学生物学、材料化学与纳米化学、信息技术在化学中的应用与计算化学、传统化学学科与方法的创新、分析方法及设备的创新、化学教育与教育方法的创新、化学工业与石油化工的创新及对社会的“责任与关怀”。

中国科学院副院长白春礼认为, IUPAC 选择中国, 充分表明了中国化学研究的实力, 体现了各国科学家对中国的高度重视和关注。他希望国内化学界同仁珍惜这一难得的机会, 积极参与, 全面展示我国的化学科学研究与教育的成果, 展示我国学者对世界化学科学进步所做的贡献。

IUPAC 是国际科联下属权威的国际化学组织, 成立于 1919 年, 其秘书处设在美国北卡罗来纳州。中国化学会于 1979 年以“中国化学会”的名义代表中国化学及化工界加入 IUPAC。IUPAC 每两年举行一次学术大会和全体会员大会。第 34 届学术大会曾于 1993 年在我国召开。