[首页](http://www.nsfc.gov.cn/publish/portal0)  [项目指南](http://www.nsfc.gov.cn/publish/portal0/tab568)  [2018年项目指南](http://www.nsfc.gov.cn/publish/portal0/tab568)

# **“离子液体功能调控及在反应分离新过程中的应用”重大项目指南**

　作为一类新型介质，离子液体具有酸碱性可调、正负离子协同、结构可设计等特点，为化工过程绿色化提供了重大机遇。深入认识离子-离子、离子-分子作用机制及工程放大规律，是实现离子液体工业化应用的基础。本项目拟围绕典型化工反应/分离体系，重点解决离子液体特殊氢键与离子簇调控、离子液体微环境中反应与传递耦合规律等关键科学问题，突破离子液体工业应用在离子液体结构设计、反应器放大和工艺优化集成方面的瓶颈，推动离子液体技术的工业化进程，促进化工过程的绿色化与可持续发展。

　　**一、科学目标**

　　针对离子液体特性及工程放大的挑战性，揭示离子液体结构-特殊氢键-离子簇间本征规律及其与分子作用的科学机制，发展适用于典型化工过程的新型功能化离子液体；阐明离子液体微环境中反应-传递耦合规律及调控机制，建立离子液体体系的工程放大新方法，构建具有重要工业应用前景的反应/分离新体系，开发2-3个绿色反应与分离新工艺，引领该领域的发展。

　　**二、研究内容**

　　（一）离子液体化工热力学性质及功能设计。

　　针对典型化工反应/分离体系，设计合成具有特殊结构的功能化离子液体，解析其构效关系；研究离子液体在催化反应与分离过程中的化工热力学特性，阐明其正负离子结构对反应/分离性能的影响规律和调控机制，建立预测模型及分子设计方法。

　　（二）离子液体多相体系界面结构及传递机制。

　　研究离子液体多相体系的界面及动态纳微结构对流动行为及传递过程的影响机制，发展与之匹配的模拟方法；建立离子液体界面、流动及传递规律的原位研究方法，获得其传递规律及调控机制，为反应/分离设备的设计和工程放大提供理论基础。

　　（三）离子液体协同催化反应机理及新过程。

　　针对烷基化、CO2转化等反应，设计合成具有多活性位点的新型功能化离子液体及材料，揭示离子液体正负离子对结构、氢键-静电、离子簇强化反应的新机制，阐明离子液体协同催化机理及调控规律，开辟工业催化反应新途径。

　　（四）离子液体强化分离机制及新过程。

　　针对分子结构高度相似等难分离体系，利用离子-离子、离子-分子协同效应，设计制备功能化离子液体及杂化材料，强化分子辨识能力，提高分离选择性；研究离子液体强化分离新方法及其放大规律，开发绿色节能的分离新工艺。

　　**三、申请注意事项**

　　（一）申请书的附注说明选择“离子液体功能调控及在反应分离新过程中的应用”。

　　（二）申请人申请的直接费用预算不得超过2000万元/项（含2000万元/项）。

　　（三）本项目由化学科学部负责受理。