

中国石油大学（北京）

成果登记表

项目名称:	催化C4烷基化的离子液体及其反应机理分子模拟研究		
项目来源:	国家自然科学基金委员会	甲方单位:	国家自然科学基金委员会
合同开始时间:	2004年01月	合同完成时间:	2006年12月
鉴定批准日期:	2007年7月16日	项目验收单位:	国家自然科学基金委员会
项目类型:	自然科学基金	项目执行情况:	按期完成
成果评价方式:	结题	成果水平:	结题
成果类别:	应用基础	应用情况:	基础研究无应用
应用专业:	化学工艺	我校负责人:	高金森
所在院系:	化工学院	转让范围:	允许出口
第一完成单位:	石油大学（北京）	第二完成单位:	/
第三完成单位:	/	第四完成单位:	/
成果保密程度:	非秘		
我校参加人员:	高金森 王大喜 任鲲 董坤 黄崇品 黄栋风 陈秋芬 曹斌 赵亮 王荷蕾		
备注:	/		

项目内容摘要:

离子液体具有很好的催化活性和选择性，并能催化烷基化反应，可望能成为生产高辛烷值清洁汽油的异丁烷与正丁稀烷基化的优良催化剂。大量实验研究表明，由于没有从理论上弄清离子液体催化C4烃烷基化反应的机理和离子液体分子结构特征与其催化性能的关系，研究中难以从理论上正确解释实验结果，难以找到与合成出具有良好的催化活性和选择性的离子液体。因此，本课题将采用量子化学计算和实验相结合的方

法，研究离子液体结构和催化C4烃烷基化反应机理，从分子水平、电子结构层次上揭示由不同正离子和负离子构成的离子液体分子的静态结构、电荷分布和前线分子轨道的性质和变化规律、正负离子及反应物给体与受体之间电子转移机理及前线分子轨道作用方式等方面的动态行为与其C4烃烷基化反应催化性能及催化反应机理的内在规律，为设计合成新的性能更好的离子液体提供理论依据，并对依据研究结果设计的离子液体进行合成和C4烃烷基化催化性能表征测试。

[\[上一步\]](#) [\[打印\]](#) [\[下一步\]](#)