# 多相反应过程中的介尺度机制及调控重大研究计划2018年度项目指南

　　过程工业涵盖能源和资源转化利用等重要基础产业，但效率低、污染重、资源浪费严重，多数过程的工艺技术开发周期长、风险和费用高，这些问题已成为可持续发展的瓶颈。多相反应是其中最普遍与最核心的过程，探索这些过程中介尺度结构的形成机理、实现其科学定量描述与定向调控已成为过程工业发展的前沿。

　　多相反应过程中的介尺度机制是指由大量单元组成的系统在个体单元与整体系统之间的尺度范围内复杂时空结构的形成与演化规律。主要包括两个层次的介尺度问题，其一，分子尺度到颗粒（包括气泡、液滴等离散单元）尺度间的材料结构或表界面时空尺度；其二，颗粒尺度到反应器尺度间形成的非均匀结构的时空尺度。本重大研究计划将阐明其机理，发展模拟计算与实验表征方法，进而建立相关模型与理论，重点揭示介尺度结构对流动-传递-反应行为的影响及其耦合规律，建立多相反应过程定量设计、优化和调控的方法，形成以介尺度科学为基础的过程工程学科新方向，服务于相关工艺和过程的开发。

**一、科学目标**

　　针对多相反应过程中的材料和反应器两个层次中普遍存在的介尺度问题，明确不同系统中介尺度结构的定义和特征，阐明多尺度过程的介尺度作用机制，寻找量化规律，建立共性理论；鼓励学科交叉，突破传统方法的局限性，解决重大工程应用中的关键问题。

**二、核心科学问题**

　　本重大研究计划将重点针对多相反应过程中介尺度行为和效应显著的气固、气液、气液固和复杂流体等系统，瞄准相关应用过程中的共性基础问题，在深入剖析现有典型工艺的基础上，对材料表界面和颗粒聚团两个介尺度问题以及它们在颗粒尺度进行流动-传递-反应耦合的规律进行研究，解决以下三个关键科学问题：

　　（一）材料及表界面介尺度结构的形成机理与反应的定向调控；

　　（二）反应器中介尺度流动-传递过程的多机制耦合与调控；

　　（三）上述两个层次间关联的理论与方法。

**三、2018年度重点资助研究方向**

　　为进一步聚焦介尺度核心科学问题，在原资助项目的基础上，本重大研究计划2018年拟进行集成,主要针对重大应用过程中材料/表界面层次和反应器层次的具体介尺度实例问题，发展和验证介尺度机制的基本原理，建立基于介科学原理的先进智能化计算方法，解决重大应用中的瓶颈科学问题。所有集成项目须包含以下五个研究内容：

　　（一）典型过程中介尺度结构对传递和反应的影响;

　　（二）介尺度机制的基本原理;

　　（三）两个层次介尺度问题的耦合;

　　（四）基于介科学的模型化和计算方法;

　　（五）重大工业应用范例。

**四、遴选项目的基本原则**

　　集成项目要在重大研究计划支持下已经取得的重要进展基础上，进一步聚焦介尺度核心科学问题，明确对实现重大研究计划总体目标和解决核心科学问题的贡献。为确保形成介尺度科学的总体目标，本重大研究计划要求所有申请应针对介尺度行为的本质机理，旨在揭示规律、建立物理模型和预测方法，并实现工业应用。具体要求如下：

　　（一）集成项目须明确所研究过程的控制机制及对应的极值趋势，致力于阐明两个或多个机制间“竞争中的协调”的物理和数学表达；

　　（二）具有原创性的介尺度理论和方法，能深刻揭示介尺度过程中不同机制相互作用的规律，提出严密的理论模型和可行方法；

　　（三）针对多相反应过程中材料表界面和反应器两个层次中介尺度问题及其关联的研究；

　　（四）鼓励融合化学化工、物理及数学等不同学科的交叉合作研究，特别是对介尺度科学共性数学和物理问题的研究，整合相关力量、组建优势互补的科研队伍，开展更加有针对性的联合攻关研究的集成项目；

　　（五）希望通过本重大研究计划，形成新的理论和方法，解决我国过程工业中具有代表性的重大应用问题。

**五、2018年度资助计划**

　　2018年度拟资助集成项目3-5项，直接费用的平均资助强度约为1000万元/项（由指导专家和评审专家组根据评议情况确定资助额度），资助期限为3年，申请书中研究期限应填写“2019年1月1日-2021年12月31日”。

**六、申请要求及注意事项**

　　（一）申请条件。

　　本重大研究计划项目申请人应当具备以下条件：

　　1.具有承担基础研究课题的经历；

　　2.具有高级专业技术职务（职称）。

　　在站博士后研究人员、正在攻读研究生学位以及无工作单位或者所在单位不是依托单位的人员不得作为申请人进行申请。

　　（二）限项规定。

　　具有高级专业技术职务（职称）的人员，申请或参与申请本次发布的重大研究计划集成项目不限项。

　　（三）申请注意事项。

　　1.申请书报送日期为2018年9月15日-20日16时。

　　2.项目申请书采用在线方式撰写。对申请人具体要求如下：

　　（1）申请人在填报申请书前，应当认真阅读本项目指南和《2018年度国家自然科学基金项目指南》中申请须知和限项申请规定的相关内容，不符合项目指南和相关要求的申请项目不予受理。

　　（2）本重大研究计划旨在紧密围绕核心科学问题，将对多学科相关研究进行战略性的方向引导和优势整合，成为一个项目集群。申请人应根据本重大研究计划拟解决的具体科学问题和项目指南公布的拟资助研究方向，自行拟定项目名称、科学目标、研究内容、技术路线和相应的研究经费等。

　　（3）申请人登录科学基金网络信息系统https://isisn.nsfc.gov.cn/（没有系统账号的申请人请向依托单位基金管理联系人申请开户），按照重大研究计划申请书的撰写提纲及相关要求撰写申请书。

　　（4）申请书中的资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“集成项目”，附注说明选择“多相反应过程中的介尺度机制及调控”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。

**集成项目的合作研究单位不得超过4个，主要参与者必须是集成项目的实际贡献者。**

　　（5）申请人应当在“立项依据与研究内容”部分首先论述与项目指南最接近的科学问题的关系，以及对解决核心科学问题和重大研究计划总体目标的贡献。

　　项目申请书选题应符合本重大研究计划的实施原则，具有明确的关键科学问题。申请书的目标和内容应瞄准核心科学问题，突出有限目标，强调创新点与前沿基础科学问题的研究。

　　如果申请人已经承担与本重大研究计划相关的其他科技计划项目，应当在申请书正文的“研究基础与工作条件”部分论述申请项目与其他相关项目的区别与联系。

　　（6）申请人应当认真阅读《2018年度国家自然科学基金项目指南》中预算编报须知的内容，严格按照《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》《关于国家自然科学基金资助项目资金管理有关问题的补充通知》（财科教〔2016〕19号）以及《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的要求，认真如实编报《国家自然科学基金项目资金预算表》。

　　（7）申请人完成申请书撰写后，在线提交电子申请书及附件材料，下载打印最终PDF版本申请书，并保证纸质申请书与电子版内容一致。

　　（8）申请人应及时向依托单位提交签字后的纸质申请书原件以及其他特别说明要求提交的纸质材料原件等附件。

　　3.依托单位应对本单位申请人所提交申请材料的真实性、完整性和合规性进行审核，并在规定时间内将申请材料报送国家自然科学基金委员会。具体要求如下：

　　（1）应在规定的项目申请截止日期（2018年9月20日16时）前提交本单位电子版申请书及附件材料，并统一报送经单位签字盖章后的纸质申请书原件（一式一份）及要求报送的纸质附件材料。

　　（2）提交电子版申请书时，应通过信息系统逐项确认。

　　（3）报送纸质申请材料时，还应包括本单位公函和申请项目清单，材料不完整不予接收。

　　（4）可将纸质申请材料直接送达或邮寄至国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组。采用邮寄方式的，请在项目申请截止时间前（以发信邮戳日期为准）以快递方式邮寄，以免延误申请，并在信封左下角注明“重大研究计划项目申请材料”。

　　4.申请书由国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组负责接收，材料接收工作组联系方式如下：

　　通讯地址：北京市海淀区双清路83号国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组（行政楼101房间）

　　邮　　编：100085

　　联系电话：010-62328591

　　5.本重大研究计划咨询方式：

　　国家自然科学基金委员会化学科学部五处

　　联系电话：010-62327168

　　（四）其他注意事项。

　　1.为实现重大研究计划总体科学目标和多学科集成，获得资助的项目负责人应当承诺遵守相关数据和资料管理与共享的规定，项目执行过程中应关注与本重大研究计划其他项目之间的相互支撑关系。

　　2.为加强项目的学术交流，促进项目群的形成和多学科交叉与集成，本重大研究计划将每年举办一次资助项目的年度学术交流会，并将不定期地组织相关领域的学术研讨会。获资助项目负责人有义务参加本重大研究计划指导专家组和管理工作组所组织的上述学术交流活动，并认真开展学术交流。