**多相反应过程中的介尺度机制及调控重大研究计划2016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、2016年度拟重点资助研究方向**

　　围绕多相反应过程中材料层次和反应器层次的介尺度结构，鼓励以下几方面研究：

**（一）共性原理和方法。**

　　介尺度结构形成的物理机制，稳态介尺度结构的变分原理，不同条件下变分函数的具体确定，介尺度结构随时间演化的动力学。本计划的部分研究已经注意到探索有意义的共性规律，但尚需进一步加强、改进和完善。特别鼓励数学物理领域专家申请。

**（二）介尺度结构实例研究。**

　　用介尺度的概念研究多相反应过程中存在的复杂多尺度结构问题，发现新规律，归纳对介尺度结构的共性认识。聚焦材料层次上反应与扩散过程的耦合机制，反应器层次上介尺度结构的形成机理及其对传递和反应过程的影响，以及不同层次间的耦合连接。

**（三）介尺度结构的表征。**

　　建立介尺度时空结构的计算和实验表征方法，深化对介尺度动态结构形成和演化规律的理解，使相关研究由平均粗粒化方法逐步发展为介尺度方法导向的研究。

**（四）介尺度方法的应用研究。**

　　鼓励介尺度概念在多相反应相关过程中的应用，聚焦材料的理性设计、过程的直接放大、系统的智能优化，解决困扰学术界和产业界的瓶颈问题。

　　**四、2016年度资助计划**

　　2016年度对探索性强、开拓新方向的申请按“培育项目”予以资助，拟资助15-20项，直接费用的平均资助强度为80万元/项，资助期限为3年，申请书中研究期限应填写“2017年1月1日-2019年12月31日”；对有一定工作积累、有望在介尺度科学方面取得重要突破的申请将按“重点支持项目”予以资助，拟资助3-4项，直接费用的资助强度为300万元-400万元/项，资助期限为4年，申请书中研究期限应填写“2017年1月1日-2020年12月31日”。

　　**五、遴选项目的基本原则**

　　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）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；

　　（二）针对多相反应过程中材料表界面和颗粒聚团两个介尺度关联的研究；

　　（三）鼓励实质性的多学科交叉合作研究，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、开展更加有针对性的联合攻关研究的重点支持项目；

　　（四）希望通过本研究计划，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。

　　**六、申报要求及注意事项**

　　（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以及正在攻读研究生学位的人员不得申请。

　　（二）限项规定。

　　1. 具有高级专业技术职务（职称）的人员，申请（包括申请人和主要参与者）和正在承担（包括负责人和主要参与者）以下类型项目总数合计限为3项：面上项目、重点项目、重大项目、重大研究计划项目（不包括集成项目和战略研究项目）、联合基金项目、青年科学基金项目、地区科学基金项目、优秀青年科学基金项目、国家杰出青年科学基金项目、重点国际（地区）合作研究项目、直接费用大于200万元/项的组织间国际（地区）合作研究项目（仅限作为申请人申请和作为负责人承担，作为参与者不限）、国家重大科研仪器研制项目（含承担科学仪器基础研究专款项目和国家重大科研仪器设备研制专项项目）、优秀国家重点实验室研究项目，以及资助期限超过1年的应急管理项目。

　　2.申请人（不含参与者）同年只能申请1项重大研究计划项目。上一年度获得重大研究计划项目资助的项目负责人（不包括集成项目和战略研究项目），本年度不得再申请重大研究计划项目。

　　（三）申请注意事项。

**1.申请书报送日期为2016年9月23日。**

　　2.本重大研究计划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《2016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/（以下简称信息系统，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），按照撰写提纲要求撰写申请书。

　　（4）申请书中的资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“重点支持项目”或“培育项目”，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。以上选择不准确或未选择的项目申请将不予受理。

　　培育项目和重点支持项目的合作研究单位不得超过2个。

　　（5）申请人应当按照重大研究计划申请书的撰写提纲撰写申请书，应具有明确的关键科学问题，并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实现项目总体目标的贡献。

　　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，应当在报告正文的“研究基础”部分论述申请项目与其他相关项目的区别与联系。

　　（6）申请人应根据《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》的有关规定，以及《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的具体要求，按照“目标相关性、政策相符性、经济合理性”的基本原则，认真编制《国家自然科学基金项目资金预算表》。项目资金分为直接费用和间接费用，申请人仅需填写直接费用部分，间接费用由系统自动生成。多个单位共同承担一个项目的，项目申请人和合作研究单位的参与者应当分别编制项目资金预算，经所在单位审核后，由申请人汇总编制。

　　（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，下载并打印最终PDF版本申请书，向依托单位提交签字后的纸质申请书原件。

　　（8）申请人应保证纸质申请书与电子版内容一致。

　　3. 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

　　4. 本重大研究计划咨询方式：

　　国家自然科学基金委员会计划局交叉学科处

　　联系电话：010-62328484

　　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。