石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室

2023年开放课题申请指南

石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室由原“石油化工催化材料与反应工程国家重点实验室”优化调整后成立，依托“中石化石油化工科学研究院有限公司”（以下简称“石科院”）和华东师范大学，联合中国科学院过程工程研究所运行与管理。实验室设置三个研究方向：（1）分子水平炼油技术；（2）原子经济化工技术；（3）绿色低碳能源技术。以这三个研究方向为基础，以石油化工分子转化为核心，开展催化材料的设计与合成、绿色化学与工程和绿色过程系统集成的应用基础研究，解决关键科学问题和工程技术难题，为我国石油化工行业实现产业转型和“双碳”目标提供基础理论和方法，为构建我国独特高效-低碳-绿色石油化工分子转化和绿色低碳能源体系提供科技支撑，形成原创性的石油化工低碳绿色过程知识平台和技术平台。

根据“开放、联合、流动、竞争”的运行机制，实验室重视多学科、多专业的相互渗透，鼓励相关学科的相互结合和集成。所以，实验室热忱欢迎和邀请各有关领域的国内外科研人员进行合作研究，共同推动我国石油化工催化材料和反应工程科学的发展。
 1、开放基金申请对象

课题申请者一般应具有高级专业技术职称或具有博士学位，在与本实验室研究方向的相关领域取得一定的科研成果，所申请的课题已具备相应的前期研究工作基础。

申请人不具有高级专业技术职务或博士学位，须有两名具有高级专业技术职务的同行专家书面推荐，申请人申报的课题须经所在单位同意并签章。

2、开放基金说明

(1)开放基金主要资助与本实验室研究方向相关的课题，具体方向参见本指南附表。

(2)本年度每项目课题研究期限一般不超过两年。

(3)经费支持额度原则上为每项不超过20万元。

(4) 申请人每半年提交执行情况报告，开展工作满一年，提交研究工作总结，内容包括年度进展情况报告，成果和论著的书面材料及下一阶段研究计划。开放课题结束后，应于两个月内结题，提交结题报告。如发表论文、申请专利，提供相关材料复印件。必要时到实验室做结题/学术报告。本实验室将根据进展情况有权终止资助进展不好的研究课题。

(5)凡经本实验室开放基金资助的课题，其研究成果由本实验室及研究者所在单位共享。由开放基金资助课题发表的研究论文、学位论文应注明第一资助单位“石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室（中石化石油化工科学研究院有限公司）开放基金课题资助，Supported by State Key Laboratory of Petroleum Molecular & Process Engineering（RIPP, SINOPEC）”。

3、开放基金申请程序
 (1)申请人根据实验室开放基金的主要资助方向(见附表)填写“开题报告”和“查新报告”一式两份。经所在单位盖章推荐，向本实验室提出申请，同时提交电子版。本年度开放基金申请截止日期为2023年10月30日。
 (2)实验室组织有关专家对提交的申请书进行评审，确定资助项目和金额，并通知获得资助的申请人。

4、联系人：

周丽娜

中国石油化工股份有限公司石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室

通信地址：北京市海淀区学院路18号石油化工科学研究院有限公司

邮编：100083

电话：010-82368301

手机：15810547410

电子邮件： zhouln.ripp@sinopec.com

附表 实验室开放基金项目申报指南

| 序号 | 项目名称 | 鼓励研究方向 | 建议研究目标 |
| --- | --- | --- | --- |
| 1 | 重油催化裂解反再体系催化剂失活与反应性能构效关系 | 水热失活以及主要金属Ni、V污染对催化剂基质、分子筛结构、酸性和孔道的影响；利用各种现代表征手段对具体各种失活过程进行表征；建立失活关键参数和反应性能的关系。 | 建立催化裂解体系微观条件下催化剂的失活模型，模型可给出催化剂酸性、孔道等物化性质与活性指数、污染金属量、反再操作条件等之间的定量关系。 |
| 2 | 不同流化床结构气固接触效率研究 | 研究催化裂化非均相体系中表征气固接触效率的参数；模拟催化裂化体积增大对气固接触的影响；考察稀相输送、快速床、湍流床中气固接触效率。 | 基于冷模试验，模拟催化裂化体积增大体系，建立不同流化床中气固接触效率数值计算方法。 |
| 3 | 己内酰胺结晶过程强化技术研究 | 利用计算流体动力学方法研究结晶器中流体力学和非理想混合型态；研究结构化反应器（结晶器）过程强化设计方法。 | 建立模拟工业结晶器内结晶过程的Fluent方程，明晰结晶条件对成核、生长速率的影响因素。 |
| 4 | 以烷烃为原料一步氧化合成肟过程研究 | 研究以环己烷和十二烷为原料直接氧化肟化制备环己酮肟、十二酮肟催化剂和工艺过程。 | 提供一种以价格低廉、制备简便的配位锰为催化剂用于催化选择性碳氢键氧化合成环状烷基酮肟的方法。烷烃转化率大于90%，选择性大于95%。 |
| 5 | 均相催化剂合成及在甲酰化技术中的应用 | 研究多酸稳定的金属单原子离子液体催化的烯烃氢甲酰化反应，实现惰性、憎水混合烯烃氢甲酰化反应过程，解决催化剂与高沸点产物的分离和循环使用问题。探索CO2为原料的甲酰化反应。 | 发展可用于丙烯、C8烯烃等甲酰化反应的多酸稳定的均相甲酰化催化剂，在低Rh含量时，催化剂活性为TOF大于3000h-1和化学选择性>95%。 |
| 6 | Pd纳米簇催化剂制备及在蒽醌加氢的应用 | 研究Pd原子配位环境和活性位密度可控的催化材料制备方法；研究原子配位微环境对金属-载体电子相互作用、氢溢流效应和催化反应活性/选择性的影响和调控规律。 | 创新高活性Pd纳米簇催化剂制备方法，在原子和分子尺度获得活性位微环境结构在反应过程中的动态演化规律，实现活性/选择性/稳定性等性能优于现有的催化剂体系，节约贵金属资源10%以上。 |
| 7 | 新型MOFs材料的合成及在烷-烯烃分离中的应用 | 研究根据不同物性差异物理分离、高选择性化学反应分离的新理论，研究MOFs材料的精准设计与结构调控、溶剂渗透模型与分离机理、分离材料在服役过程中结构演变与性能退化之间的规律。 | 创新一种用于丙烷（乙烷）-丙烯（乙烯）分离MOFs材料，构建低碳烯烃生产高效分离新路线。 |
| 8 | 乙醇催化转化制备高值含氧化学品 | 研究C-C、C-H和O-H健的选择性活化、短裂或重组可实现乙醇的定向催化转化，探索乙醇高效转化制备乙醛、高碳脂肪醇和芳香醛等反应过程催化材料的合成及应用。 | 开发乙醇直接脱氢制乙醛的负载型Cu催化剂及工艺过程；开发乙醇经C-C偶联制高碳醇镁铝混合氧化物催化剂及工艺过程；开发乙醇催化转化制芳香醇/醛的双功能催化剂及工艺过程。为推进乙醇的提质利用提供重要的理论基础和借鉴指导。 |
| 9 | 催化烃活化、烃氧化、烃氮化反应催化材料的原位表征、DFT模拟技术 | 采用近原位、原位动态分析表征方法（如原位固体核磁）和DFT模拟，研究烃分子（含杂原子）在催化剂表面的反应机理和转化路径，研究催化剂载体与活性组分、助剂之间的协同关联效应，阐明催化构效关系，创制新型高效定向转化催化材料，支撑烷基化、苯羟基化、氨肟化及重排技术开发。 | 获得催化剂作用下相关反应机理认识，支撑固体酸烷基化、苯酚（苯二酚）合成、环氧丙烷、环氧氯丙烷、氨肟化及重排技术开发。 |
| 10 | 有机多孔晶态催化材料光电协同催化制氢性能研究 | 基于有机多孔晶态催化材料的结构可设计性，研究开发具有高效光电催化产氢活性的复合催化剂体系，阐述有机多孔晶态催化材料的分子结构、电子结构、介观结构与光电协同催化性能之间的构效关系。采用谱学技术及理论计算，阐明催化材料的光激发动力学过程、光电协同制氢机制，为发展新型高效的制氢催化体系提供材料基础和理论支撑。 | 揭示有机多孔晶态催化的光电协同制氢反应机理，阐明有机多孔晶态催化材料的分子结构与光电协同制氢催化性能的构效关系、催化机理。 |

2023版

石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室开放课题

开 题 报 告

|  |  |
| --- | --- |
| **项目名称：** |  |
| **负责单位：** |  |
| **项目负责人：** |  |
| **职 称：** |  |
| **学 历：** |  |
| **电 话：** |  |
| **手 机：** |  |
| **电子邮箱：** |  |
| **通讯地址：** |  |
| **邮政编码：** |  |

**研究开发年限：\_\_\_\_\_\_\_\_年\_\_\_月至\_\_\_\_\_\_\_年\_\_\_月**

编 制 须 知

一、申请承担开放课题时，应先向石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室申报本开题报告。

二、申报开题者均须同时附送查新报告、文献调查总结及探索试验情况介绍。

三、石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室根据收到的开题报告及其相应附件进行审议，经审议选定的项目可签订技术开发（委托）合同。

四、本开题报告版本自2018年1月起启用。

五、注意事项：

1. 项目名称不得超过20个汉字。

2. 项目负责人一般应具有高级专业技术职称或具有博士学位，申请人不具有高级专业技术职务或博士学位的，须有两名具有高级专业技术职务的同行专家书面推荐。申请人申报的课题须经所在单位同意并签章。一个项目原则上只设一名负责人，特殊情况下可设两名负责人。

3.开题报告经申请单位初审，加盖申请单位（或其科技处）公章后，报石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室（一式贰份）。

4.本报告纸张规格为A4。

一、国内外现状、发展趋势及开题意义

（一）国外相关产业和技术现状、发展趋势

（二）国内相关产业和技术现状、发展趋势

（三）项目的创新性

二、研究开发的目标、内容、技术方法和路线、技术经济指标

（一）技术目标

（二）技术内容和技术关键

（三）技术方法、路线及其可行性分析

（四）技术经济指标(如为基础性研究课题，此项可不填写)

三、知识产权状况

（一）已有知识产权情况（专利号、专利申请号、申请人、专利名称）

（二）相关国内外专利检索结果（检索主题词、检索数据库名称、相关专利号、专利申请号、申请人、专利名称）

（三）国内外文献查询结果（文献名称、来源、发表人）

（四）中国授权或公开的相关专利分析（给出本研究目前是否和国内已公开专利相冲突的分析结论，对有相冲突可能的专利，给出专利号、专利申请号、申请人、专利名称，法律状态、专利权利要求，提出的创新或规避对策）

（五）国外公开文献和未在中国申请的相关国外专利分析（概述这些文献和专利的创新和效果，提出本课题予以借鉴、利用的设想）

四、市场前景分析（如果为基础性研究课题，此项可不填写）

（一）国内外市场现状和需求分析

（二）经济效益和社会效益预测

五、开题条件

（一）技术准备

（二）人员情况

（三）现有仪器设备及实验室条件

\*人员情况系指专题负责人和主要参加人的姓名、职务、专业技术职称及主要科技成就。

六、计划进度和考核目标（时间段2024年1月-2025年12月）

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 起止时间（ 月- 月） | 序 号 | 工 作 内 容 | 试验规模及应达到的指标 | 试验地点 | 验收方式 | 备注 | 负责单位及负责人 |
| 2024.1-2024.12 | 1 |  |  |  | 年度报告审查 |  |  |
|  | 2 |  |  |  | 年度报告审查 |  |  |
|  | 3 |  |  |  | 年度报告审查 |  |  |
|  | …… |  |  |  | 年度报告审查 |  |  |
| 2025.1-2025.12 | 1 |  |  |  | 结题报告审查 |  |  |
|  | 2 |  |  |  | 结题报告审查 |  |  |
|  | 3 |  |  |  | 结题报告审查 |  |  |
|  | …… |  |  |  | 结题报告审查 |  |  |

\* 除备注外的各栏目应全部填报。

|  |
| --- |
| **七 项目经费预算** 受托方(一)：  |
| **表1 项目经费预算表** |
| **单位:万元** |
| **支出类别** | **科目** | **预算金额** | **备注** |
| **费****用****性****支****出** | **材料** |  |  |
| **分析计量测试费** |  |  |
| **差旅费** |  |  |
| **其他费用** |  |  |
| **合计** | 　 | 　 |

表2 预计经费来源表

单位：万元

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 来 源 | 委托方支付 | 其 它\* | 合 计 |
|  |  |
| 金 额 |  |  |  |  |

\*：其它是指国家（国家重点研发计划、国家自然科学基金等）支持的与本项目有关的经费以及项目负责单位自筹部分的经费。

八、经费使用计划

申请委托方拨款计划表

 单位：万元

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 单 位 名 称 | 用款总额 | 第1年 | 第2年 |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
|  |  |  |  |
| 合 计  |  |  |  |

九、申请单位审查意见

 申请单位科技处处长

（签字）

 年 月 日

 申请单位科技负责人

(签字)

 申请单位盖章

年 月 日

**附件： 关于项目经费预算表科目的定义**

**费用性支出：**

**1、材料费：研发过程中消耗的直接材料、化学试剂等。**

**2、分析计量测试费：委托外部****机构进行分析计量测试费用支出。**

**3、差旅费：职工因公外出发生的交通费、住宿费、出差补助等费用支出。**

**4、其他费用：除上述费用以外的其他费用化支出。**

 **编号：**

**石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室**

**开放课题**

**国内外文献和专利检索、分析报告**

课题名称：

申报单位：

申报时间： 年 月 日

编制说明

1.向石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室申报科学研究、技术开发课题前需先填报“石油化工分子转化与反应工程全国重点实验室开放课题国内外文献和专利检索、分析报告书”，并作为开题报告必要附件上报有关审核部门。

|  |  |
| --- | --- |
| 课题名称 |  |
| 承担单位 |  |
| 检索单位 |  |
| 检索的数据库或文献名 | 手检（ ） 机检（√） | 时 区 | 结果 |
| 输入项 | 检索逻辑表达式 |
|  |  |  |  |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 与本课题研究有关的非专利文献 | 文 献 来 源 | 文 献 名 称 | 文献发表人或单位名 |
|  |  |  |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 与本课题研究有关的专利 | 专 利 号（含中国专利号） | 专 利 名 称 | 专利权人或公司名 |
|  |  |  |

|  |
| --- |
| 1. 公开文献和国内外专利情况分析

（研究与本课题有关的公开文献和公开、授权的国外专利，分析其发明构思、技术特点、发明效果、存在问题，提出可为本课题开发所借鉴的发明构思。） |
|  |

|  |
| --- |
| 1. 中国公开和授权专利情况分析

（研究与课题有关的中国专利情况、分析国内外公司在中国公开、授权的专利的发明构思、技术特点、发明效果、存在问题、法律保护范围，研究对该课题的影响，提出避开他人专利保护范围、创新技术开发的构思。） |
|  |

|  |
| --- |
|  三、本课题要解决的主要技术问题和解决方案 |
|  |