

国家自然科学基金资助项目批准通知

(包干制项目)

徐慧 先生/女士:

根据《国家自然科学基金条例》、相关项目管理办法规定和专家评审意见,国家自然科学基金委员会(以下简称自然科学基金委)决定资助您申请的项目。项目批准号: 22408026, 项目名称: 基于碳捕集过程极性杂质与二氧化碳共吸附理论研究与多孔碳材料结构设计, 资助经费: 30.00万元, 项目起止年月: 2025年01月至 2027年12月, 有关项目的评审意见及修改意见附后。

请您尽快登录科学基金网络信息系统(<https://grants.nsfc.gov.cn>), **认真阅读《国家自然科学基金资助项目计划书填报说明》并按要求填写《国家自然科学基金资助项目计划书》(以下简称计划书)**。对于有修改意见的项目,请您按修改意见及时调整计划书相关内容;如您对修改意见有异议,须在电子版计划书报送截止日期前向相关科学处提出。

请您将电子版计划书通过科学基金网络信息系统(<https://grants.nsfc.gov.cn>)提交,由依托单位审核后提交至自然科学基金委。自然科学基金委审核未通过者,将退回的电子版计划书修改后再行提交;审核通过者,打印纸质版计划书(一式两份,双面打印)并在项目负责人承诺栏签字,由依托单位在承诺栏加盖依托单位公章,且将申请书纸质签字盖章页订在其中一份计划书之后,一并报送至自然科学基金委项目材料接收工作组。纸质版计划书应当保证与审核通过的电子版计划书内容一致。**自然科学基金委将对申请书纸质签字盖章页进行审核,对存在问题的,允许依托单位进行一次修改或补齐。**

向自然科学基金委提交电子版计划书、报送纸质版计划书并补交申请书纸质签字盖章页截止时间节点如下:

1. **2024年9月9日16点:** 提交电子版计划书的截止时间;
2. **2024年9月16日16点:** 提交修改后电子版计划书的截止时间;
3. **2024年9月23日:** 报送纸质版计划书(一式两份,其中一份包含申请书纸质签字盖章页)的截止时间。
4. **2024年10月8日:** 报送修改后的申请书纸质签字盖章页的截止时间。

请按照以上规定及时提交电子版计划书，并报送纸质版计划书和申请书纸质签字盖章页，逾期不报计划书或申请书纸质签字盖章页且未说明理由的，视为自动放弃接受资助；未按要求修改或逾期提交申请书纸质签字盖章页者，将视情况给予暂缓拨付经费等处理。

附件：项目评审意见及修改意见表

国家自然科学基金委员会

2024年8月23日

附件：项目评审意见及修改意见表

项目批准号	22408026	项目负责人	徐慧	申请代码1	B0804
项目名称	基于碳捕集过程极性杂质与二氧化碳共吸附理论与多孔碳材料结构设计				
资助类别	青年科学基金项目		亚类说明		
附注说明					
依托单位	常州大学				
直接费用	30.00 万元		起止年月	2025年01月 至 2027年12月	
通讯评审意见： <1>具体评价意见： 一、请评述该申请项目是否面向经济社会发展需要或国家需求背后的基础科学问题。请详细阐述判断理由。 吸附法碳捕集是我国发展绿色低碳经济实现“双碳”目标的重要手段。传统能源与工业体系释放气源中含有极性杂质水蒸气与二氧化硫，严重影响碳捕集效率。在此背景下，该项目深入分析碳材料针对实际工业废气碳捕集过程中水蒸气、二氧化硫、二氧化碳、氮气之间的共吸附机制，开发低成本高效二氧化碳捕集吸附剂的绿色合成路线，项目面向经济社会发展需要和国家需求背后的基础科学问题，研究意义大。 二、请评述申请项目所提出的科学问题的创新性与预期成果的科学价值。 该项目提出了厘清CO2/H2O是竞争吸附还是协同吸附、阐明微观结构与分离效率关系2个关键科学问题，问题凝练精准、论述充分、创新性好，在研究方案部分也有对应的问题解决的策略。研究成果将有效推动吸附法碳捕集技术工业化应用，促进我国碳中和战略方针的有效实施。 三、请评述申请人的创新潜力与研究方案可行性；如有可能，请对完善研究方案提出建议。 申请人围绕气体吸附分离、分子模拟开展研究，积累了较好的理论研究基础和吸附理论储备，创新潜力好。项目的研究方案可行性好，建议可行性部分从理论、技术、基础等方面引用文献进行充分论证。 四、其他建议 无。 <2>具体评价意见： 一、请评述该申请项目是否面向经济社会发展需要或国家需求背后的基础科学问题。请详细阐述判断理由。 该项目针对我国碳中和战略方针的重大需求问题，试图解决传统能源与工业体系释放气源中含有的极性气体杂质对多孔碳材料吸附分离 CO2的影响机制研究不足的技术瓶颈，重点通过建立吸附剂微观结构与 CO2吸附分离性能之间的构效关系以及水蒸气、二氧化硫对 CO2吸附分离过程的影响机制研究，致力于解决多孔碳材料在湿性环境下高效捕集 CO2的问题，实现碳捕集效率的提高。项目旨在提出新型高 CO2吸附量与选择性的吸附剂分子结构模型，建立低成本高效捕集 CO2吸附剂的设计理论基础，并提出绿色合成路线，为吸附法碳捕集技术的工业化应用提供技术支持，推动我国碳中和战略方针的有效实施，有重要科学研究价值或应用前景。 二、请评述申请项目所提出的科学问题的创新性与预期成果的科学价值。 该项目通过分子模拟手段实时捕捉CO2/H2O共吸附特性，探究竞争吸附与协同吸附的关键临界点，为揭示CO2/H2O共吸附过程的机制提供了有效途径。关键科学问题在于界定竞争-协同吸附临界点及微观结构与吸附效率的构效关系。通过构建吸附剂物理模型，探索吸附剂微观结构与H2O、SO2对CO2吸附分离的影响机制，为实现CO2吸附分离效率提供理论指导。所提科学问题合理，预期成果具有较好的科学价值。 三、请评述申请人的创新潜力与研究方案可行性；如有可能，请对完善研究方案提出建议。 申请人所开展工作思路明确，关键科学问题针对性强，研究目标明确，所使用研究手段采用分					

子模拟与实验测量相结合，该项目的研究重点集中在工业废气CO₂捕集，从理论上揭示CO₂/N₂分离、工业废气H₂O、SO₂对CO₂吸附分离效率影响机制，阐明多组分气体在吸附过程中的微尺度扰动对共吸附体系的影响，同时与底层机理研究与实际需求应用相结合，实现废弃口罩为碳源制备多孔碳材料的绿色环保，研究思路较为完善。前期试验理论研究已经完成，具有较好的研究基础，很强的创新性，研究方案可行。

四、其他建议

无

<3>具体评价意见：

一、请评述该申请项目是否面向经济社会发展需要或国家需求背后的基础科学问题。请详细阐述判断理由。

吸附法碳捕集是我国发展绿色低碳经济实现“双碳”目标的重要手段。然而传统能源与工业体系释放气源中往往含有极性杂质水蒸气与二氧化硫，严重影响二氧化碳吸附分离过程。本申请项目拟以采用分子模拟手段深入分析多孔碳材料在碳捕集过程中水蒸气、二氧化硫、二氧化碳、氮气之间的共吸附机制。通过调控材料孔容、孔径分布、表面官能团种类和数量，建立吸附剂微观结构与其二氧化碳吸附分离性能间的构效关系，明确水蒸气、二氧化硫与二氧化碳之间的竞争-协同吸附关系。

二、请评述申请项目所提出的科学问题的创新性与预期成果的科学价值。

本申请项目拟研究CO₂/H₂O共吸附过程中，H₂O对CO₂是竞争吸附还是协同吸附；建立吸附剂微观结构与其对CO₂吸附分离效率之间的构效关系。拟开展的极性杂质与二氧化碳共吸附理论研究工作立意新颖，有较重要的科学研究价值。

三、请评述申请人的创新潜力与研究方案可行性；如有可能，请对完善研究方案提出建议。

本申请项目拟建立多组分气体吸附体系，研究CO₂/N₂多元气体吸附分离过程中的微观机理；研究H₂O、SO₂在吸附分离CO₂过程中的影响机制。通过分子模拟与实验验证相结合的手段，理解吸附剂表面化学性质、孔结构与CO₂捕集性能的关联，建立CO₂/H₂O共吸附机制，为CO₂高效捕集材料的设计提供理论基础。建议申请人考虑含N和O官能团的多孔碳材料如何设计获得。本申请项目提出多孔碳对杂质与二氧化碳共吸附理论的研究思想，建议优先资助。

四、其他建议

修改意见：

化学科学部

2024年8月23日