



项目批准号	52474206
申请代码	E0408
归口管理部门	
依托单位代码	21316408A0553-0202



524742061004559

# 国家自然科学基金 资助项目计划书 (预算制项目)

资助类别：面上项目

亚类说明：

附注说明：

项目名称：掺氢瓦斯水合物稳定储氢与燃爆性能弱化的结构调控机制

直接费用：48万元 执行年限：2025.01-2028.12

负责人：王兰云 BRID：08369.00.08736

通讯地址：江苏省常州市武进区滆湖中路21号

邮政编码：213164 电 话：15993737902

电子邮件：lanyun.wang@cczu.edu.cn

依托单位：常州大学

联系人：倪杰 电 话：051986339596

填表日期：2024年08月27日

国家自然科学基金委员会制



## 国家自然科学基金资助项目计划书填报说明 （预算制项目）

- 一、项目负责人收到《国家自然科学基金资助项目批准通知》（以下简称《批准通知》）后，请认真阅读本填报说明，参照国家自然科学基金相关项目管理办​​法和新修订的《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》（以下简称《资金管理办法》，请查阅国家自然科学基金委员会官方网站首页“政策法规”栏目），按《批准通知》的要求认真填写和提交《国家自然科学基金资助项目计划书》（以下简称《计划书》）。
- 二、填写《计划书》时要科学严谨、实事求是、表述清晰、准确。《计划书》经国家自然科学基金委员会相关项目管理部门审核批准后，将作为项目研究计划执行、检查和验收的依据。
- 三、《计划书》各部分填写要求如下：
  - （一）简表：由系统自动生成。
  - （二）摘要及关键词：各类获资助项目都应当填写中、英文摘要及关键词。
  - （三）项目组主要成员：计划书中列出姓名的项目组主要成员由系统自动生成，与申请书原成员保持一致，不可随意调整。如果《批准通知》所附“项目评审意见及修改意见表”中“修改意见”栏目有调整项目组成员相关要求的，待项目开始执行后，按照项目成员变更程序另行办理。
  - （四）资金预算表：根据批准的项目资助额度，按规定调整项目预算，并按照《国家自然科学基金项目计划书预算表编制说明》填报资金预算表和预算说明书。
  - （五）正文：
    1. 面上项目、地区科学基金项目：如果《批准通知》所附“项目评审意见及修改意见表”中“修改意见”栏目没有修改要求的，只需选择“研究内容和研究目标按照申请书执行”即可；如果《批准通知》中上述栏目明确要求调整研究期限或研究内容等的，须选择“根据研究方案修改意见更改”并填报相关修改内容。
    2. 重点项目、重点国际（地区）合作研究项目、重大项目、重大研究计划重点支持项目、重大研究计划集成项目、国家重大科研仪器研制项目、联合基金项目、原创探索计划项目：须选择“根据研究方案修改意见更改”，根据《批准通知》的要求填写研究（研制）内容，不得自行降低、更改研究目标（或仪器研制的技术性能与主要技术指标、验收技术指标等）或缩减研究（研制）内容。此外，还要突出以下几点：
      - （1）研究的难点和在实施过程中可能遇到的问题（或仪器研制风险），拟采用的研究（研制）方案和技术路线；
      - （2）项目主要参与者分工，合作研究单位（如有）之间的关系与分工，重大项目还需说明课题之间的关联；
      - （3）详细的年度研究（研制）计划。
    3. 创新研究群体项目：须选择“根据研究方案修改意见更改”，按下列提纲撰写：



- (1) 研究方向；
  - (2) 结合国内外研究现状，说明研究工作的学术思想和科学意义（限两个页面）；
  - (3) 研究内容、研究方案及预期目标（限两个页面）；
  - (4) 年度研究计划；
  - (5) 研究队伍的组成情况。
4. 基础科学中心项目：须选择“根据研究方案修改意见更改”，根据《批准通知》的要求和现场考察专家组的意见和建议，进一步完善并细化研究计划，按下列提纲撰写：
- (1) 五年拟开展的研究工作（包括主要研究方向、关键科学问题与研究内容）；
  - (2) 研究方案（包括骨干成员之间的分工及合作方式、学科交叉融合研究计划等）；
  - (3) 年度研究计划；
  - (4) 五年预期目标和可能取得的重大突破等；
  - (5) 研究队伍的组成情况。
5. 数学天元基金项目：天元前沿重点专项项目和数学与其他学科交叉联合资助项目，参照重点项目的方式进行选择和填写；其他类型项目，参照面上项目的方式进行选择和填写。
6. 对于其他类型项目，参照面上项目的方式进行选择和填写。



简表

项目负责人信息	姓 名	王兰云	性 别	女	出生年月	1983年04月	民 族	汉族
	学 位	博士			职称	副教授		
	是否在站博士后	否			电子邮件	lanyun.wang@cczu.edu.cn		
	电 话	15993737902			个人网页			
	工 作 单 位	常州大学						
	所 在 院 系 所	安全科学与工程学院、应急管理科学与工程学院						
依托单位信息	名 称	常州大学					代码	21316408A0553
	联 系 人	倪杰			电子邮件	nijie@cczu.edu.cn		
	电 话	051986339596			网站地址	www.cczu.edu.cn		
合作单位信息	单 位 名 称							
项目基本信息	项 目 名 称	掺氢瓦斯水合物稳定储氢与燃爆性能弱化的结构调控机制						
	资 助 类 别	面上项目				亚 类 说 明		
	附 注 说 明							
	申 请 代 码	E0408:安全科学与工程						
	基 地 类 别							
	执 行 年 限	2025.01-2028.12						
	直 接 费 用	48万元						



## 项目摘要

### 中文摘要:

矿井瓦斯掺氢是推动瓦斯和氢能协同利用的重要方式。利用水合物法储运掺氢瓦斯需解决储氢性能、结构稳定性和燃爆性能等关键问题。本项目拟联合结构分析、量热测试和MD模拟计算技术，分析不同晶型、笼型和孔隙结构掺氢瓦斯水合物的储氢性能，揭示掺氢瓦斯水合物成核机理，建立增强掺氢瓦斯水合物储氢性能的结构调控机制；根据水合物分解动力学参数和结构变化分析其自保护效应，阐释自保护行为对H<sub>2</sub>、CH<sub>4</sub>等客体分子扩散并穿透冰层的路径和速率的约束作用，建立强化掺氢瓦斯水合物稳定性的结构调控机制；基于燃爆特性测试、DFT和Reaxff-MD模拟计算，分析结构性因素对掺氢瓦斯水合物燃烧动力学过程和爆炸性能的影响规律，揭示掺氢瓦斯水合物燃爆反应微观机理，构建掺氢瓦斯水合物燃爆性能弱化机制。本项目将为寻求储氢性能提升和燃爆风险减弱之间的平衡提供协同调控策略，以期基于内源结构设计实现掺氢瓦斯水合物安全高效储运。

### Abstract:

Mixing hydrogen with mine gas is an important way to promote the synergistic utilization of mine gas and hydrogen energy. The safe storage and transportation of hydrogen-doped gas hydrates urgently need to address key issues such as hydrogen storage performance, structural stability, and combustion and explosion characteristics. Using structural analysis, calorimetry tests, and MD simulations, this project will analyze the hydrogen storage performance of hydrogen doped gas hydrates with different crystal forms, cage structures, and pore structures, revealing the nucleation mechanism of hydrogen-doped gas hydrates, and establishing a structural regulating mechanism to enhance the hydrogen storage in the hydrogen-doped gas hydrates. Based on the dynamic parameters of the dissociating process of hydrogen-doped gas hydrates and the changes of structures, the self-preservation effect will be analyzed, and the constraint effect of self-preservation behaviors on the path and rate during diffusion and penetration of guest molecules such as H<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> through the ice layer will be explained, and a structural regulating mechanism will be established to enhance the stability of hydrogen-doped gas hydrates. Also, using the combustion and explosion characteristics tests, DFT and Reaxff-MD simulations, this project will analyze the influences of structural factors on the combustion kinetics and explosion performance of hydrogen-doped gas hydrates, reveal the micro-mechanism of hydrogen doped gas hydrate combustion and explosion reaction, and finally construct a mechanism for weakening the combustion and explosion performances of hydrogen-doped gas hydrates. It will provide a collaborative regulating strategy for seeking a balance between hydrogen storage improvement and risk weakening of combustion and explosion, with an aim of achieving efficient hydrogen storage and safe transportation of hydrogen-doped gas hydrates based on an endogenous structural designing.

**关键词(用分号分开):** 矿井瓦斯; 掺氢瓦斯; 水合物; 稳定性; 燃爆性能

**Keywords(用分号分开):** Mine gases; hydrogen-doped gases; hydrates; stability; combustion and explosion characteristics



项目组主要成员

编号	姓名	出生年月	性别	职称	学位	单位名称	电话	证件号码	项目分工	每年工作时间（月）
1	王兰云	1983.04	女	副教授	博士	常州大学	15993737902	321202198304194525	项目负责人	10
2	徐永亮	1983.04	男	副教授	博士	常州大学		412825198304290533	数值计算和微观模拟	6
3	王新颖	1976.02	女	副教授	硕士	常州大学	051986330086	232303197602030445	燃烧爆炸性能测试分析	6
4	左杭冬	1988.01	男	讲师	博士	常州大学	15250997984	320682198801073110	水合物实验优化设计	6
总人数			高级		中级	初级	博士后	博士生	硕士生	
10			3		1			2	4	



## 国家自然科学基金预算制项目预算表

项目批准号：52474206

项目负责人：王兰云

金额单位：万元

序号	科目名称	金额
1	一、科学基金资助项目直接费用合计	48.0000
2	1、设备费	8.0000
3	其中：设备购置费	6.0000
4	2、业务费	27.0000
5	3、劳务费	13.0000
6	二、其他来源资金	0.0000
7	三、合计	48.0000

注：请按照项目研究实际需要合理填写各科目预算金额。



## 预算说明书

### 一、科学基金资助项目直接费用

请按照《国家自然科学基金项目计划书预算编制说明》等有关要求，按照政策相符性、目标相关性和经济合理性原则，实事求是编制项目预算。填报时，直接费用应按设备费、业务费、劳务费三个科目填报，每个科目结合科研任务按支出用途进行说明。

1.设备费（是指在项目实施过程中购置或试制专用仪器设备，对现有仪器设备进行升级改造，以及租赁外单位仪器设备而发生的费用。计算类仪器设备和软件工具可在设备费科目列支。填报时，应对设备费支出的必要性和测算的合理性等内容进行说明。单价大于50万元（含50万元）的设备需补充说明设备的主要性能指标、主要技术参数等内容；单价小于50万元的设备仅需按照设备购置费、试制改造费和租赁使用费分类进行说明即可。）

**设备费：共计8.00万元。**

- ①防爆型增压泵、动态稳定配气装置等设备购置费需6.00万元；
- ②与拉曼仪联用的可视低温高压反应系统的升级改造需2.00万元。

2.业务费（是指项目实施过程中消耗的各种材料、辅助材料等低值易耗品的采购、运输、装卸、整理等费用，发生的测试化验加工、燃料动力、出版/文献/信息传播/知识产权事务、会议/差旅/国际合作交流等费用，以及其他相关支出。）

**业务费：共计27.00万元。**

**（1）材料费：用于购买制备掺氢瓦斯水合物的实验耗材，共计12.00万元。**

- ①制备掺氢瓦斯水合物样品的模拟气样、多孔载体、添加剂、液氮等，按每年1.0万元计，4年共需4.00万元；
- ②掺氢瓦斯水合物合成实验和燃爆性能测试实验的易耗品，如电磁阀、减压阀、冷冻液、温度传感器、压力传感器、高精度流量计等，按每年2.00万元计，4年共需8.00万元。

**（2）测试化验加工费：主要用于水合物结构测试和模拟机时费，共计3.00万元。**

- ①以10个水合物样品计，工业CT扫描费0.1万元/样，NMR测试费0.10万元/样，共需2.00万元；
- ②微观模拟计算费计0.25万元/年，4年共需1.00万元。

**（3）出版/文献/信息传播/知识产权事务费：用于支付版面费、出版费、资料费、文献检索费、专利申请和维护等费用，共计8.00万元。**

- ①拟发表学术论文10篇，按平均0.20万元/篇计，预计2.00万元；
- ②拟申请发明专利2项，按0.50万元/项，预计1.00万元；
- ③拟出版专著1部，预计5.00万元。

**（4）差旅/会议/国际合作与交流费：共计4.00万元。**

科学实验（试验）、科学考察、设备调研、学术交流等所产生的差旅费按0.50万元/次/人计，每年预计2人次，4年共需 $0.50 \times 2 \times 4 = 4.00$ 万元。

3.劳务费（是指在项目实施过程中支付给参与项目研究的研究生、博士后、访问学者以及项目聘用的研究人员、科研辅助人员等的劳务性费用，以及支付给临时聘请的咨询专家的费用等。填报时，应综合考量劳务费支出对象所承担研究任务的必要性、投入本项目的工作时长、费用标准的合理性等因素。）

**劳务费：共计13.00万元。**

- ①参与该项目的研究生共6名，研究生助研补贴0.05万元/人/月，每年工作10个月，4年共需 $0.05 \times 10 \times 6 \times 4 = 12.00$ 万元；
- ②专家咨询费预计1.00万元。





## 二、其他来源资金

对其他来源资金的经费来源、主要用途、支出预算做简要说明。

无。

## 三、合作研究外拨资金

对合作研究单位承担研究任务及资金外拨情况进行必要说明。如存在多个合作研究单位，请逐一说明。如存在资金外拨的情况，还需对外拨资金的金额进行重点说明。

无。



## 报告正文

研究内容和研究目标按照申请书执行。



## 国家自然科学基金项目负责人、依托单位承诺书

## 国家自然科学基金项目负责人承诺书

本人郑重承诺：我接受国家自然科学基金的资助，严格遵守中共中央办公厅、国务院办公厅《关于进一步加强科研诚信建设的若干意见》《关于进一步弘扬科学家精神加强作风和学风建设的意见》《关于加强科技伦理治理的意见》《科技伦理审查办法（试行）》等规定，和国家自然科学基金委员会关于资助项目管理、项目资金管理等各项规章，在《计划书》填写及项目执行过程中：

（一）按照《批准通知》《国家自然科学基金资助项目计划书填报说明》的要求填写《计划书》，未自行降低、更改目标任务或约定要求，或缩减研究（研制）内容；

（二）树立“红线”意识，严格履行科研合同义务，按照《计划书》负责实施本项目（批准号：52474206），切实保证研究工作时间，按时报送有关材料，及时报告重大情况变动，不违规将科研任务转包、分包他人，不以项目实施周期外或不相关成果充抵交差；

（三）遵守科研诚信、科技伦理规范和学术道德，认真开展研究工作，对资助项目发表的论著和取得的科研成果按规定进行标注，不在非本项目资助的成果或其他无关成果上标注本项目批准号，反对无实质学术贡献者“挂名”，不在成果署名、知识产权归属等方面侵占他人合法权益，并如实报告本人及项目组成员发生的违背科研诚信要求的任何行为；

（四）尊重科研规律，弘扬科学家精神，严谨求实，追求卓越，反对浮夸浮躁、投机取巧，不人为夸大学术或技术价值，不传播未经科学验证的现象和观点；

（五）将项目资金全部用于与本项目研究工作相关的支出，并结合科研活动需要，科学合理安排项目资金支出进度；

（六）做好项目组成员的教育和管理，确保遵守以上相关要求。

如违背上述承诺，本人愿接受国家自然科学基金委员会和相关部门做出的各项处理决定。

项目负责人（签字）：

年 月 日

依托单位科研管理部门：

负责人（签章）：

年 月 日

依托单位财务管理部门：

负责人（签章）：

年 月 日

## 国家自然科学基金项目依托单位承诺书

我单位同意承担上述国家自然科学基金项目，将保证项目负责人及其研究队伍的稳定和研究项目实施所需的条件，严格遵守中共中央办公厅、国务院办公厅《关于进一步加强科研诚信建设的若干意见》《关于进一步弘扬科学家精神加强作风和学风建设的意见》《关于加强科技伦理治理的意见》《科技伦理审查办法（试行）》等规定，和国家自然科学基金委员会有关资助项目管理、项目资金管理、科研诚信管理和科技伦理管理等各项规定，并督促实施。

依托单位（公章）

年 月 日



国家自然科学基金资助项目签批审核表

科学处审查意见：

负责人（签章）：  
年 月 日

科学部审查意见：

负责人（签章）：  
年 月 日

本  
栏  
目  
由  
自  
然  
科  
学  
基  
金  
委  
填  
写