

# 团簇构造、功能及多级演化重大研究计划2021年度项目指南

发布时间：2021年02月10日 来源：国家自然科学基金委员会

团簇是介于原子/分子与宏观物质之间的多核聚集体，具有确定的原子组成和化学结构，代表了凝聚态物质的初生态，是关联宏观性质和物质微观结构的理想模型，对深刻认识和理解物质转化的规律具有重大意义。

## 一、科学目标

通过化学、物理、生命、材料、环境、信息等多学科交叉，发展新型团簇及其多级结构构筑的新概念、新策略、新方法和新反应，建立团簇高精度和高分辨表征的新技术，在原子水平上揭示团簇特殊性质的结构基础与演变规律，理解团簇结构与功能的关联，制备功能团簇基材料与器件，解决基于团簇的变革性技术中的关键科学问题，促进相关学科的发展。

## 二、核心科学问题

本重大研究计划将聚焦团簇构效关系，探索物质结构与性能随团簇尺寸变化的规律，揭示团簇稳定性机制，理解多级团簇体系中主体与环境的作用机制，实现功能导向的多级团簇结构的精准构筑和宏量制备。

### （一）团簇的稳定性机制。

具有特殊结构与独特性能的新型团簇的发现、团簇形成机理和稳定化机制的理解、各种化学键及弱相互作用的认知。

### （二）团簇电子结构的规律。

团簇结构及稳定性随团簇尺寸的演变规律、团簇的“幻数”特性、团簇的构效关系。

### （三）多级团簇功能的调控原理。

多级团簇功能与团簇内聚集态、簇际相互作用、团簇与环境耦合的关系。

## 三、2021年度重点资助研究方向

针对原子团簇、分子团簇及其多级体系（特别是生物体系）中的重要科学问题，发展团簇研究的新方法和新理论，揭示团簇的形成机制、稳定性规律和构效关系，构造具有独特功能的团簇材料与器件。本重大研究计划2021年度重点资助以下研究方向：

### （一）团簇及其多级结构的精准构筑。

建立团簇的定向设计、高效合成策略和宏量制备方法，认识和理解团簇稳定性机制，揭示团簇制备的调控规律。理解团簇内聚集态、簇际相互作用、团簇与环境及外场间相互作用的规律，揭示团簇基功能材料的构效关系，进而实现功能复合。重点支持新型团簇体系的合成方法和多级组装结构的研究，特别注重模拟酶团簇、主族元素团簇、稀土和镧系元素团簇、中性团簇及团簇组装的功能材料体系。

### （二）团簇的电子结构及演化规律。

发展团簇的电子结构和稳定性理论，开发团簇体系的计算方法和软件，理解大尺寸团簇的化学成键和电子结构。建立团簇结构数据库，发展人工智能方法。发展先进的团簇束源技术，建立团簇物性表征新方法，揭示团簇成核机制、生长演化规律及其动力学性质。重点支持高核团簇和复杂团簇的电子结构理论和高效计算方法、高时空分辨的谱学方法与成像技术、团簇结构和动力学的原位研究方法。

### （三）团簇的功能与应用。

设计团簇基能源、信息与生物材料，揭示团簇内核结构、配位结构、簇际相互作用、表面、环境和外场等因素对材料性能的调控规律，实现团簇功能的理性设计，开展高性能原型器件的探索研究。重点支持团簇在量子计算、分子电子学、人工光合作用、温和固氮及机制、能量转换、原子制造、量子精密测量与传感、生物医药等领域的应用，特别注重具有重大应用前景的团簇组装材料如量子材料、信息材料、催化材料和生物医学材料等研究。

## 四、项目遴选的基本原则

本重大研究计划以原始创新为首要目标，以学科交叉研究为特征，旨在将相关研究项目联系起来，成为一个协调的综合“项目群”。申请书应论述与项目指南最接近的科学问题和创新目标，同时要体现交叉研究的特征以及对解决核心科学问题和实现项目总体目标的贡献。

科学问题明确、原始创新性强、学科交叉特征明显的申请项目，将以重点支持项目的方式予以资助；有创新研究思路、探索性强的申请项目，将以培育项目的方式予以资助。不支持跟踪性和简单拓展性研究。

## 五、2021年度资助计划

2021年度拟资助培育项目25—35项，直接费用平均资助强度约为80万元/项，资助期限为3年，申请书中研究期限应填写“2022年1月1日—2024年12月31日”；拟资助重点支持项目5—7项，直接费用平均资助强度约为300—400万元/项，资助期限为4年，申请书中研究期限应填写“2022年1月1日—2025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）限项申请规定。

执行《2021年度国家自然科学基金项目指南》“申请规定”中限项申请规定的相关要求。

### （三）申请注意事项。

申请人和依托单位应当认真阅读并执行本项目指南、《2021年度国家自然科学基金项目指南》和《关于2021年度国家自然科学基金项目申请与结题等有关事项的通告》中相关要求。

1. 本重大研究计划项目实行无纸化申请。申请书提交日期为2021年3月16日—3月20日16时。

（1）申请人应当按照科学基金网络信息系统中重大研究计划项目的填报说明与撰写提纲要求在线填写和提交电子申请书及附件材料。

（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）申请书中的资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“培育项目”或“重点支持项目”，附注说明选择“团簇构造、功能及多级演化”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。

**培育项目和重点支持项目的合作研究单位不得超过2个。**

（4）申请人在申请书“立项依据与研究内容”部分，应当首先说明申请符合本项目指南中的重点资助研究方向，以及对解决本重大研究计划核心科学问题、实现本重大研究计划科学目标的贡献。

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。

2. 依托单位应当按照要求完成依托单位承诺、组织申请以及审核申请材料等工作。在2021年3月20日16时前通过信息系统逐项确认提交本单位电子申请书及附件材料，并于3月21日16时前在线提交本单位项目申请清单。

### 3. 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。

### （四）咨询方式。

国家自然科学基金委员会

化学科学部三处

联系电话：010-62328253