“碳基能源转化利用的催化科学”重大研究计划2020年项目指南

碳基能源转化利用的催化科学重大研究计划面向碳基能源高效利用的国家重大战略需求，针对催化表界面化学所涉及的关键科学问题开展系统深入的研究。本重大研究计划注重催化剂结构、表界面特性，以及外场环境对催化剂表界面电子态的影响和调控，重点关注能源小分子高效转化相关的C-H键和C-O键的催化活化及C-C偶联等反应；创新碳基能源利用的化工过程，优化反应历程，以达到高效、环保和CO2低排放的目标；建立和发展高分辨表征手段，实现在实际催化反应条件下对反应过程进行精准表征；发展新的理论方法，实现在接近真实催化反应条件下的理论模拟和预见，为未来在分子、原子水平上对催化剂活性中心进行理性设计提供指导。

　　一、科学目标

　　本重大研究计划拟通过化学、化工、数理、材料等多学科交叉融合，针对碳基能源分子的高效转化，在催化相关的理论和实验的创新上取得突破，充分发挥和放大我国在微纳米和表界面研究领域的优势，力争在催化表界面理论研究方面形成特色；着重解决涉碳化学键催化活化、合成气高效转化和碳基小分子电催化转化等过程的关键科学问题，推动碳基能源的产业革命；造就高水平、结构合理的研究队伍，培养精于理论和实验科学研究的优秀青年学者，大力提升我国在这一领域的竞争力和国际地位。

　　二、核心科学问题

　　本计划针对碳基能源转化利用的催化科学，围绕以下三个核心科学问题展开研究：

　　（一）催化剂固体表界面局域原子和电子结构的精准设计与构建。

　　（二）碳基载能分子在表界面的选择活化和定向转化。

　　（三）催化剂固体表界面特性与环境和外场的相互作用机制及调控规律。

　　三、2020年度重点资助研究方向

　　进一步聚焦碳基能源转化利用的关键催化科学问题，针对合成气直接转化、CO2和甲烷催化转化等过程，加强理论研究并与实验相结合，注重发展和利用原位表征新技术和新方法。2020年拟在前5年资助项目的基础上，对以下方向进行集成：

　　（一）研究电催化剂和电解质的构效关系，认识相关表界面电催化反应机理，揭示电催化过程中多相多尺度作用机制和调控规律，实现CO2和CH4活化和定向转化为烯烃或其它高值化学品的高效电催化过程，并达到工业级电流密度（不小于0.5 A/cm2）。

　　（二）针对甲烷活化反应，发展催化剂表界面结构调控催化特性的新方法，认识C-H高效活化、C-C可控偶联的新机制，创制新催化剂和新反应过程，实现甲烷直接转化，高效制取高值化学品和液体燃料。

　　（三）发展理论和实验研究方法，在原子尺度上研究氧化物催化剂表界面缺陷结构的调控规律和碳基小分子的活化机理，揭示C-O和C-H等化学键活化、以及中间体形成和转化的热力学和动力学规律，系统探索和深入认识纳米限域催化和单原子催化的本质，形成化学键精准构建的催化新概念和新理论。

　　四、项目遴选的基本原则

　　为确保实现总体目标，本重大研究计划项目遴选的基本原则如下：

　　（一）鼓励开展前沿领域探索性研究，优先支持具有原创性的催化表界面新概念、新理论、新体系、新方法、新技术的研究。

　　（二）鼓励多学科实质性交叉合作研究，特别鼓励和优先考虑来自于数理和材料等学科的申请,以及其他学科与化学学科的交叉合作；注重理论与实验的有机结合。

　　（三）鼓励开展国际合作研究。

　　五、2020年度资助计划

　　2020年度拟资助集成项目3-4项，直接费用的平均资助强度约为1000-1500万元/项（由指导专家和评审专家组根据评议情况确定资助额度），资助期限为3年，申请书中研究期限应填写“2021年1月1日-2023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。

　　具有高级专业技术职务（职称）的人员，申请或参与申请本次发布的重大研究计划集成项目不限项。

　　（三）申请注意事项。

　　1.本重大研究计划2020年度项目申请书报送日期为2020年10月9日 - 10月13日16时。本重大研究计划项目申请采取无纸化申请。

　　2.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《2020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/（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），按照重大研究计划申请书的撰写提纲及相关要求撰写申请书。

　　（4）申请书中的资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“集成项目”，附注说明选择“碳基能源转化利用的催化科学”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。

　　集成项目的合作研究单位不得超过4个，主要参与者必须是集成项目的实际贡献者。

　　（5）申请人应当在“立项依据与研究内容”部分首先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重大研究计划总体目标的贡献。

　　项目申请书选题应符合本重大研究计划的实施原则，具有明确的关键科学问题。申请书的目标和内容应瞄准核心科学问题，突出有限目标，强调创新点与前沿基础科学问题的研究。

　　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。

　　（6）申请人应当认真阅读《2020年度国家自然科学基金项目指南》中预算编报须知的内容，严格按照《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》、《关于国家自然科学基金资助项目资金管理有关问题的补充通知》（财科教〔2016〕19号）以及《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的要求，认真如实编报《国家自然科学基金项目资金预算表》。

　　（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。申请材料中所需的附件材料（有关证明信、推荐信和其他特别说明要求提交的纸质材料原件），全部以电子扫描件上传。

　　3.依托单位应对本单位申请人所提交申请材料的真实性、完整性和合规性进行审核。具体要求如下：

　　（1）应在项目集中接收工作截止时间前（2020年10月13日16时）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，无需报送纸质申请书。项目获批准后，将申请书的纸质签字盖章页装订在《资助项目计划书》最后，一并提交。签字盖章的信息应与电子申请书严格保持一致。

　　（2）依托单位完成电子申请书及附件材料的逐项确认后，应于申请材料提交截止时间前通过信息系统上传本单位科研诚信承诺书的电子扫描件（请在信息系统中下载模板，打印填写后由法定代表人亲笔签字、依托单位加盖公章），无需提供纸质材料。

　　4.本重大研究计划咨询方式：

　　国家自然科学基金委员会化学科学部二处

　　联系电话：010-62327035

　　（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1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，并认真开展学术交流。