



国家自然科学基金2022~2024年度化学理论与机制项目评审综述

李子玉^{1,2}, 沈祥建^{1*}

1. 国家自然科学基金委员会化学科学部, 北京 100085

2. 中国科学院化学研究所, 北京 100190

*通讯作者, E-mail: shenxj@nsfc.gov.cn

收稿日期: 2025-01-07; 接受日期: 2025-04-07; 网络版发表日期: 2025-05-27

摘要 本文统计和分析了2022~2024年度国家自然科学基金委员会化学科学部化学理论与机制学科(B03)面上项目、青年科学基金项目、地区科学基金项目、人才类项目(包括优秀青年、杰出青年科学基金项目)和重点项目的申请和资助情况及申请中存在的主要共性问题,总结了本学科加强基础研究举措及实施成效,并介绍了2025年学科重点资助领域及对未来工作的思考.旨在为广大科研人员了解该学科领域的资助现状、人才成长规律和未来发展方向提供参考.

关键词 国家自然科学基金委员会, 化学理论与机制学科, 项目评审, 加强基础研究举措, 未来工作思考

1 引言

化学理论与机制是化学研究中的一个重要分支,其核心在于利用理论方法和实验手段揭示化学反应的本质和规律,建立普适的化学理论,并为预测和设计新化学过程提供科学依据.这一学科横跨物理、数学、生物和材料科学,与多个学科高度交叉,是现代化学发展的理论基石.

2018年,为顺应化学理论与机制研究领域的快速发展需求,国家自然科学基金委员会(以下简称“自然科学基金委”)化学科学部对学科布局进行了优化调整,设立了“化学理论与机制”学科(学科申请代码: B03)^[1],并于2021年对该学科代码进行优化布局,取消三级代码,采用新的二级代码体系^[2].当前,化学与

理论机制学科旨在推动新的化学理论和实验方法的创建,深入揭示化学反应及相关过程的基本规律和内在机制.支持的研究方向包括化学理论与方法(B0301)、化学模拟与应用(B0302)、化学热力学(B0303)、化学动力学(B0304)、结构化学(B0305)、光化学与光谱学(B0306)、化学反应机制(B0307)、分子电子学与分子磁学(B0308)、高分子物理与高分子物理化学(B0309)、化学信息学和人工智能(B0310)和化学程序与软件(B0311)^[2].为深入了解学科调整和改革后的运行成效,本文对2022~2024年间接收的4544项面青地(面上、青年、地区)、杰青、优青和重点项目申请以及778项资助项目进行全面统计与分析,同时针对项目评审管理及学科未来发展提出了若干思考与建议.

引用格式: Li Z, Shen X. Review of programs by NSFC in chemical theory and mechanism from 2022 to 2024. *Sci Sin Chim*, 2025, 55: 1805–1815, doi: 10.1360/SSC-2025-0005

2 各类项目申请及资助情况

2.1 面上项目

面上项目旨在支持科学技术人员围绕基础研究领域中的重要科学问题开展自主选题和创新研究. 通过面上项目的资助, 科学基金鼓励科研人员探索未知领域、推进学科发展, 为我国科学技术水平的整体提升提供基础支撑. 从2022年至2024年, 化学理论与机制学科分别接收面上项目申请568、567和883项(表1), 其中, 2022年和2023年申请量持平, 2024年由于政策调整出现申请量显著增加的现象, 相较于上一年申请项目数增加了316项, 增幅55.73%. 在项目资助方面, 面上项目在三年中的资助数量分别为123、118和118项, 资助率分别为21.65%、20.81%和13.36%. 受申请量显著增加的影响, 2024年的资助率比2023年资助率下降7.45%, 但与化学学部2024年度面上项目的资助率持平(13.36%).

表2展示了2022~2024年度各学科二级代码的面上项目申请与资助情况. 在申请数量方面, 2022~2024年间, 申请项目数量最多的三个二级代码均为B0302 (化学模拟与应用)、B0304 (化学动力学)和B0309 (高分子物理与高分子物理化学), 这三类代码的申请总数分别占当年面上项目申请数量的49.65%、50.97%和51.75%. 值得注意的是, 如图1A所示, 2024年项目申请情况相比于2022年, 除了B0301 (化学理论与方法)和B0311 (化学程序与软件)出现负增长和无明显增长外, 其余代码下的项目申请量都呈现较为稳定增长, 其中增长量最为显著的是B0305 (结构化学)、B0310 (化学信息学和人工智能)和B0302 (化学模拟与应用), 分别增长了215.38%、111.54%和67.67%. 这一变化可能受

到多个因素的影响, 包括国家科技政策的调整 and 战略导向、研究热点和学术前沿的转移等. 其中, B0305 (结构化学)爆发式的增长与国家同步辐射光源等大科学装置的高效利用以及先进科学仪器的快速发展密切相关. B0310 (化学信息学和人工智能)的高速增长反映了国家人工智能战略的延伸效应, 2022年科技部会同基金委启动了“人工智能驱动的科学”(AI for Science)专项部署工作, 引领学者探索人工智能与科学研究的深度融合. B0302 (化学模拟与应用)的持续增长得益于计算资源的普及以及材料科学和分子模拟技术的飞速发展. 此外, B0301 (化学理论与方法)的负增长可能源于该研究领域成熟度高、原创理论突破难度大、部分学者转向更具应用潜力的交叉方向. B0311 (化学程序与软件)的停滞反映了国产计算化学软件生态的薄弱, 申请者受限于商业软件依赖度高和自主开发的高门槛.

表3展示了面上项目基金申请人性别分布情况. 从数据上可以看出, 2022~2024年间, 女性科技人员的申请比例分别为26.45%、27.86%和30.01%, 呈现稳定的增长趋势; 在资助方面, 项目负责人中的女性科技人员的占比分别为当年资助项目总数的25.20%、24.58%和29.66%, 该比例在2024年出现显著增长, 这表明基金委对于支持女性科研人员成长的一系列举措取得了显著的成效.

表4和图2呈现了面上项目申请人及获资助项目负责人的年龄分布情况. 数据显示, 2022~2024年度, 年龄在45周岁及以下的申请人占当年面上项目申请总量的77.29%、73.32%和72.59%; 而在资助方面, 该年龄段的项目获资助项目的比例则分别为76.42%、73.73%和72.03%. 这表明, 该年龄段的科研人员是推动学科

表1 2022~2024年度化学反应理论与机制学科(B03)各类型项目申请与资助情况

Table 1 Numbers of the application and funding of programs in Chemical Theory and Mechanism from 2022 to 2024

序号	项目类型	2022		2023		2024	
		申请(资助)项数	资助率(%)	申请(资助)项数	资助率(%)	申请(资助)项数	资助率(%)
1	面上项目	568(123)	21.65	567(118)	20.81	883(118)	13.36
2	青年科学基金项目	558(105)	18.82	607(114)	18.78	646(109)	16.87
3	地区科学基金项目	65(11)	16.92	73(12)	16.44	96(13)	13.54
4	优秀青年科学基金项目	62(8)	12.90	79(7)	8.86	97(8)	8.25
5	国家杰出青年科学基金项目	48(5)	10.42	51(5)	9.80	64(3)	4.69
6	重点项目	25(6)	24.00	33(6)	18.18	22(7)	31.82

表 2 2022~2024年度面上项目和青年科学基金按学科代码申请与资助情况

Table 2 Numbers of the application and funding of General Program and Young Scientists Fund Program according to application code from 2022 to 2024

申请代码	2022				2023				2024			
	面上		青年		面上		青年		面上		青年	
	申请(资助)数	资助率(%)										
B0301	72(18)	25.00	65(15)	23.08	48(17)	35.42	49(15)	30.61	64(13)	20.31	51(9)	17.65
B0302	133(23)	17.29	141(24)	17.02	141(26)	18.44	175(27)	15.43	223(21)	9.42	171(22)	12.86
B0303	49(10)	20.41	43(7)	16.28	51(6)	11.76	49(7)	14.28	72(9)	12.50	44(8)	18.18
B0304	76(28)	36.84	76(16)	21.05	73(17)	23.29	70(17)	24.28	125(27)	21.60	81(17)	20.99
B0305	13(3)	23.08	14(2)	14.28	35(7)	20.00	33(5)	15.15	41(4)	9.76	36(7)	19.44
B0306	38(7)	18.42	50(8)	16.00	30(6)	20.00	41(8)	19.51	62(6)	9.68	52(10)	19.23
B0307	58(3)	5.17	70(12)	17.14	49(7)	14.28	66(8)	12.12	89(9)	10.11	76(11)	14.47
B0308	22(7)	31.82	24(4)	16.67	24(6)	25.00	19(3)	15.79	34(6)	17.65	27(4)	14.81
B0309	73(18)	24.66	55(14)	25.45	75(16)	21.33	73(17)	23.29	109(16)	14.68	71(17)	23.94
B0310	26(3)	11.54	20(3)	15.00	34(7)	20.49	31(6)	19.35	55(6)	10.91	34(2)	5.88
B0311	8(3)	37.50	0(0)	—	7(3)	42.86	2(1)	50.00	9(1)	11.11	3(2)	66.67

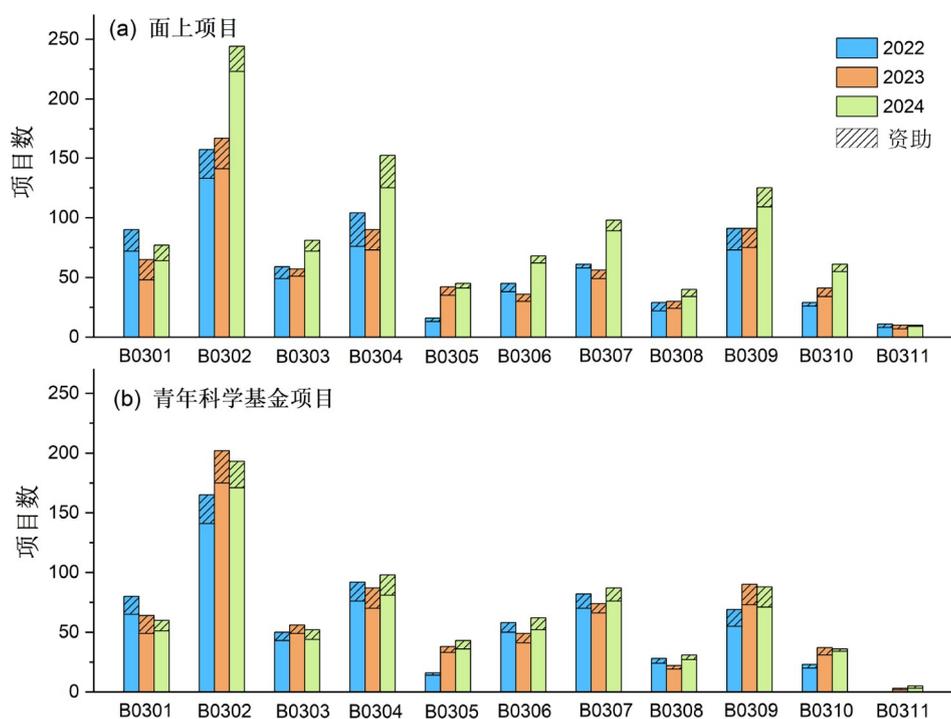


图 1 (网络版彩图) 2022~2024年度不同代码的面上项目(a)和青年科学基金项目(b)申请与资助情况

Figure 1 (Color online) Numbers of the application and funding of General Program (a) and Young Scientists Fund Program (b) according to application code from 2022 to 2024.

持续、健康和稳定发展的中坚力量. 此外, 35周岁以下申请人占面上项目申请数量的比例分别为14.26%、

13.40%和13.02%, 其获资助的项目数量在当年面上项目的资助总数中的占比则分别为23.58%、15.25%和

表 3 2022~2024年度各类型项目申请与资助负责人性别分布^{a)}Table 3 Numbers of the application and funding of programs in Chemical Theory and Mechanism according to sex of applicants from 2022 to 2024^{a)}

项目类型	2022		2023		2024	
	男性	女性	男性	女性	男性	女性
面上项目	417(92)	150(31)	409(89)	158(29)	618(83)	265(35)
青年项目	265(71)	293(34)	281(76)	326(38)	283(58)	363(51)
地区项目	45(8)	20(3)	51(10)	22(2)	56(11)	40(2)
杰青项目	43(5)	5(0)	42(4)	9(1)	55(3)	9(0)
优青项目	46(6)	16(2)	66(5)	13(2)	81(6)	16(2)
重点项目	22(5)	3(1)	28(6)	5(0)	21(7)	1(0)

a) 括号里数字为资助数

表 4 2022~2024年度面上项目申请与资助项目负责人年龄分布

Table 4 Numbers of the application and funding of General Program according to age of applicants from 2022 to 2024

年龄段	2022		2023		2024	
	申请	资助	申请	资助	申请	资助
35周岁以下	81	29	76	18	115	22
35~40周岁	197	38	168	36	267	38
41~45周岁	161	27	174	33	259	25
46~50周岁	65	16	61	10	138	20
51~55周岁	41	4	40	9	61	9
55周岁以上	23	9	48	12	43	4

18.64%。这表明该年龄段的科研人员在申请面上项目时具有显著优势。

2.2 青年科学基金项目(青年科学基金项目(C)类)

青年科学基金项目专门面向青年科研人员设立的资助项目,旨在鼓励他们开展创新性基础研究,提升科研能力,为其独立科研生涯奠定基础。值得注意的是,自2025年起,将青年科学基金项目更名为青年科学基金项目(C类)。从2022年至2024年,化学理论与机制学科接收青年科学基金项目数量分别为558、607和646项,申请量稳步增长。资助项目数分别为105、114和109项,资助率分别为18.82%、18.78%和16.87%。2024年的资助率比2023年资助率下降了1.91%,但与化学学部2024年度青年科学基金项目的资助率基本持平(16.84%)。

从青年科学基金在各代码中的申请与资助情况上看(表2和图1B),2022和2024年,申请数量排名前三的

二级代码是B0302(化学模拟与应用)、B0304(化学动力学)和B0307(化学反应机制),而2023年度接收申请数量前三位的申请代码与面上项目相一致。值得关注的是,B0301(化学理论与方法)代码下的项目申请量出现明显萎缩,从2022年的65项下降至2024年的51项,下降了21.54%。此外,B0302(化学模拟与应用)、B0305(结构化学)、B0309(高分子物理与高分子物理化学)和B0310(化学信息学和人工智能)在2024年的申请量相较于2022年出现了显著增加,分别增加了21.28%、157.14%、29.09%和70.00%。其余代码下的项目申请量在2022年和2024年相比差别不大。

2.3 地区项目

地区科学基金项目支持特定地区科研人员开展创新性基础研究,旨在培养和扶持区域科研人才,为区域创新体系建设和经济、社会发展提供重要支撑,推动实现科研力量的均衡分布与提升。从2022年至2024年,

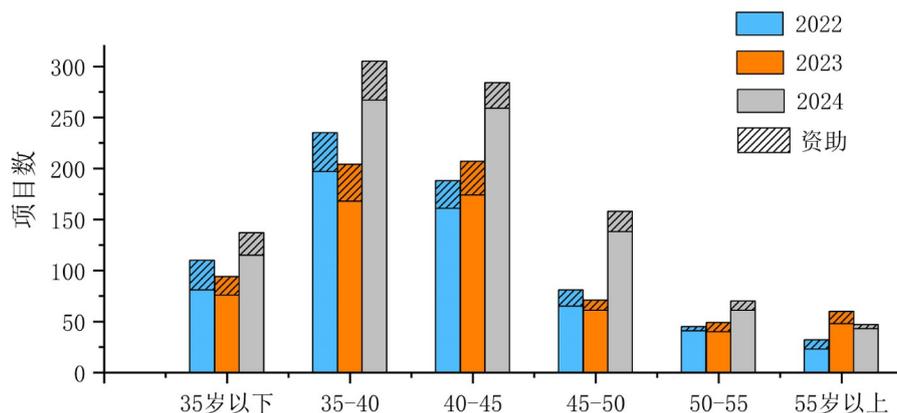


图2 (网络版彩图) 2022~2024年度面上项目申请人与资助项目负责人的年龄分布情况

Figure 2 (Color online) Numbers of the application and funding of General Program according to age of applicants from 2022 to 2024.

化学理论与机制学科接收地区科学基金项目数量分别为65、73和96项, 申请量稳步增长. 其中, 2024年申请量较2023年新增23项, 增幅31.51%. 资助项目数分别为11、12和13项, 资助率分别为16.92%、16.44%和13.54%. 2024年的资助率相较于2023年下降2.90%, 但与化学学部2024年度地区科学基金项目的资助率基本持平(13.71%).

表3显示了地区科学基金申请人性别的分布情况. 从数据可以看出, 2022~2024年间, 女性科技工作者在申请数量中所占比例分别为30.77%、30.14%和41.67%; 而在资助项目中, 女性项目负责人的比例呈逐年下降趋势, 分别占当年资助数量的27.27%、16.67%和15.38%.

2.4 优秀青年科学基金项目(青年科学基金项目(B类))

优秀青年科学基金项目支持基础研究领域中已有较好成果的青年学者, 鼓励他们聚焦全球科学前沿和国家重大需求, 自主开展创新性研究, 深入探索科学问题. 值得注意的是, 自2025年起, 将优秀青年科学基金项目更名为青年科学基金项目(B类). 从2022年至2024年, 本学科共接收238项优秀青年科学基金项目申请, 并资助了23项, 三年的平均资助率为9.66%, 略高于化学学部近三年的同类型项目的资助率(9.39%). 具体而言, 2022~2024年, 本学科分别接到62、79和97项优秀青年科学基金项目的申请, 而资助数量分别为8、7和8项, 因此资助率分别为12.90%、8.86%

和8.25%.

表3展示了优秀青年基金申请人的性别分布情况. 数据显示, 2022~2024年间, 女性科技人员申请优秀青年基金的比例有所下降, 分别占当年申请量的25.81%、16.45%和16.49%; 然而, 在资助数量上, 女性项目负责人的比例基本保持稳定, 分别占2022~2024年资助数量的25.00%、28.57%和25.00%.

2.5 国家杰出青年科学基金项目(青年科学基金项目(A类))

国家杰出青年科学基金项目(以下简称“杰青项目”)是基金委人才项目中的重要组成部分, 旨在支持在基础研究领域已有显著成就的青年学者. 该项目聚焦全球科技前沿与国家关键需求, 鼓励学者自主选定研究方向并开展创新性探索^[3]. 值得注意的是, 自2025年起, 将国家杰出青年科学基金项目更名为青年科学基金项目(A类). 化学理论与机制学科在2022~2024年间共接收163项国家杰青项目申请, 其中13项获得资助, 三年的平均资助率为7.97%, 略低于化学学部近三年同类型项目的平均资助率(8.46%). 具体来看, 2022~2024年杰青项目的申请数量分别为48、51和64项, 申请量稳定增长, 而在资助方面, 这三年资助的杰青项目数分别为5、5和3项, 资助率分别为10.42%、9.80%和4.69%. 在杰青项目申请人的性别方面, 如表3所示, 近三年女性科学家的申请数量较少, 分别占当年学科杰青项目总申请数量的比例为10.42%、17.65%和14.06%, 而从获资助情况来看, 女性科学家获资助

的比例非常低, 在近三年中, 仅有一名女性科学家于2023年获得杰青项目资助。

2.6 重点项目

重点项目旨在资助基础研究领域的科学技术人员, 支持他们在已有较好研究基础的领域或学科热点上进行深入且系统的创新性研究, 助力重要领域和科学前沿取得突破性进展^[3]。2022~2024年度, 化学理论与机制学科分别在项目指南中公布了10、10、9个重点项目资助领域(表5)。其中, 2022年的有效申请项目数为25项, 获资助项目数6项, 资助率为24.00%, 平均资助强度为280万元。2023年的申请量相比上一年有显著增长, 有效申请项目数为33项, 获资助6项, 资助率下降至18.18%, 平均资助强度下降至230万元。2024年的项目申请数为22项, 获资助7项, 资助率为31.82%, 平均资助强度为230万元。表3显示了重点项目申请人性别的分布情况, 结果表明, 女性科学家在过去三年中的重点项目申请量较少, 而获资助项目数也有待提高。

2.7 项目申请中的共性问题

2022~2024年度, 化学理论与机制学科在项目评审中发现申请书中存在以下共性问题: (1) 研究目标不清晰。对研究目标定义模糊, 未能准确提炼核心科学问题或关键技术突破点, 难以凸显理论化学研究在化学科学关键问题上的作用。(2) 科学问题挖掘不足。在背景阐述中缺乏对科学问题的深入分析, 未能有效展示研

究的理论价值或实际应用潜力。特别是在理论化学领域, 部分申请者未能结合化学科学核心问题进行创新性探索, 忽视了理论化学与实验研究密切合作的必要性。(3) 研究方案缺乏可行性。研究方法设计过于笼统或不切实际, 未能细化技术路线或合理论证核心方法的可操作性。尤其是在化学理论与机制研究中, 缺乏针对复杂体系建模、算法开发与实验验证协同推进的详细方案, 难以确保项目的科学性和可操作性。(4) 创新性体现不足。在描述创新性时, 未能明确展现项目与已有研究的差异化或独创性, 使项目的科学价值和技术创新性不突出。理论化学研究应围绕化学科学的核心科学问题, 提出具有前瞻性和引领性的原创理论和方法, 避免同质化研究。(5) 预算编制不合理。在经费预算编制中存在不合理现象, 如设备购置费、材料费和劳务费估算过高, 未能结合项目实际需求进行合理规划。(6) 预期成果不合理。目标成果设定过于宏大或笼统, 缺乏针对性和可操作性, 尤其是目标导向类项目仍以论文发表为主, 忽视了对成果转化和学科发展的推动作用。

针对以上问题, 建议改进方向如下: (1) 紧密围绕化学科学的核心科学问题, 深入挖掘理论化学研究的创新点和应用潜力, 注重理论与实验协同, 推动理论化学在解决关键化学问题中的作用。(2) 强化研究目标的科学性和可行性, 细化技术路线和时间节点, 明确研究方法和核心技术的合理性与操作性。(3) 注重提出原创性科学问题和创新性解决方案, 凸显研究工

表5 2022~2024年度化学理论与机制学科重点项目申请和资助情况

Table 5 Numbers of the application and funding of Key Program in Chemical Theory and Mechanism from 2022 to 2024

2022年度重点资助领域	申请/资助	2023年度重点资助领域	申请/资助	2024年度重点资助领域	申请/资助
化学中的量子理论与方法	7/2	化学中的量子理论与方法	2/0	电子结构理论与方法	2/1
复杂分子体系的化学动力学	4/1	复杂分子体系的化学动力学	3/1	复杂分子体系的化学动力学	3/2
高分子聚集态结构与演化机制	2/0	多尺度体系的理论与模拟	8/1	多尺度体系的理论与模拟	4/0
跨尺度体系的理论与模拟	2/1	高分子聚集态结构与演化机制	4/1	高分子聚集态结构与演化机制	3/1
光功能材料的设计及机理	2/0	基于人工智能的化学理论与机制	2/1	光谱学新方法与应用	4/0
光谱学新方法与应用	4/1	光功能材料的设计及机理	2/0	基于人工智能的化学理论	2/1
结构化学的基础与前沿	1/0	光谱学新方法与应用	7/1	非绝热动力学	2/1
蛋白质相互作用的高精度计算	1/0	结构化学的实验与理论	3/0	非平衡态分子模拟	1/0
分子尺度输运性质与自旋调控	1/0	分子尺度输运性质与自旋调控	1/0	基于张量网络态的理论化学新方法发展	1/1
复杂体系的化学热力学	1/1	激发态理论与应用	1/1		
合计	25/6	合计	33/6	合计	22/7

作与已有成果的差异化。(4) 结合研究需求和实施方案, 科学合理编制经费预算。(5) 明确项目预期成果的合理性与可操作性, 注重成果转化和学科发展价值, 提升项目研究对科学问题突破和理论创新的实际贡献。

3 本学科有关改革的具体举措及实施成效

3.1 加强学科战略布局重点领域

学科战略是推动源头创新和引领学科发展的关键动力。化学理论与机制学科通过加强战略思维、全局视野和系统性思考, 组织战略研讨, 增强对重大科学问题的识别与凝练能力, 积极把握战略突破的契机, 推动重点研究方向的布局。2022~2024年度, 学科以科技活动专项项目为载体, 通过组织量子计算机时代的理论化学、新时代理论与计算化学的挑战和机遇、高分子及其纳米复合体系分子流变学、超快化学面临的挑战和新机遇、复杂体系激发态结构与动力学过程、电子结构理论的挑战和新机遇、多尺度材料模拟与计算: 跨越理论与实验的鸿沟、科学驱动的物理化学仪器创制等一系列战略和专题研讨, 从战略层面全面梳理各学科方向的发展趋势和前沿动态, 对化学理论与机制学科重点发展领域进行前瞻性的规划与布局。面向前沿材料科学、人工智能等战略性新兴产业, 组织召开“单分子新奇物理化学现象的精准表征及调控”、“基于谱学大模型的物质科学认知”双清论坛, 推动设立了“面向智能和量子计算时代的电子结构新方法及应用”重大项目 and “高分子及其复合体系的分子流变学与调控机制”重点专项, 为化学理论方法发展、自主知识产权的电子结构软件及量子计算平台、先进制造领域以及新型功能材料研究提供科学支撑。

3.2 培养基础研究学术高地和学术群体

基础科学中心项目旨在整合国内科研资源, 聚焦国际科学前沿和国家重大需求, 吸引和凝聚来自不同领域和学科的优秀科研人才, 推动学科交叉融合与原创突破, 打造具有全球影响力的学术高地^[3]。2022~2024年度化学理论与机制学科申请基础科学中心项目3项, 其中2022年化学学部在化学理论与机制领域1项基础科学中心项目“动态化学前沿研究”获得延续资助。值得注意的是, 从2025年起, 基础科学中心项目更名为卓越研究群体项目, 继续分为A类和B类两

个亚类, 其中A类申请条件与往年一致, B类专门用于资助优秀青年科研人员(55周岁以下)组成的团队, 培养具有突破性创新潜力的科学家和研究团队。

创新研究群体项目旨在支持国内外杰出的学术领袖组建并领导研究团队, 开展具有创新性的基础研究, 攻克科学难题, 培养具有重要国际影响力的科研力量^[3]。针对当前化学理论与机制研究热点领域, 2022~2024年度化学理论与机制学科共申请创新群体项目13项, 其中2023年化学学部在化学理论与机制领域立项“瞬态分子光谱及反应动力学”创新研究群体项目, 旨在发展谱学动力学探测技术和精确的隧穿理论计算方法, 揭示重原子隧穿反应的规律和调控机制。值得注意的是, 从2025年起, 创新研究群体项目分为A类和B类两个亚类, 其中A类申请条件与往年一致, B类专门用于资助优秀青年科研人才组成的团队, 为青年科研人员提供专属赛道, 使其能独立领导或参与团队研究, 展示科研能力和创新思维, 为未来学术发展打下坚实基础。

3.3 加大培养并遴选优秀青年评审专家

加大培养并遴选优秀青年评审专家, 推进通讯评审专家年轻化、评阅数量扁平化, 是提升评审质量、优化评审体系的重要举措。近年来, 学科在优青、“面青地”等项目的评审专家遴选中, 显著增加了青年专家的比例, 着重增强战略把关能力; 同时, 积极邀请青年学者参与学科战略规划, 全面推动青年人才培养并提升其对学科活动的参与度。青年评审专家具有较强的学术前沿意识和创新视野, 他们活跃在科研一线, 对最新研究动态、热点问题及技术发展有更敏锐的洞察力和评判能力。通过遴选并吸纳更多优秀的青年专家参与评审工作, 不仅能够为评审团队注入新鲜活力, 还能够提高项目评审的科学性和公平性, 进一步优化评审结果的合理性。与此同时, 在评审体系中推动评阅数量扁平化改革, 通过合理分配每位评审专家的评阅数量, 可以避免个别专家因评审任务过重而影响评审质量, 确保每份评审意见都能够经过充分思考与审慎判断。此外, 扁平化的评审模式还可以扩大评审覆盖面, 让更多专家的专业意见得到体现, 进一步提升评审的客观性和准确性。这些改革举措, 不仅有助于完善评审机制, 还将推动形成更加多元、公正、高效的科学基金评审体系, 为科研创新注入更多动力, 为

国家科技事业发展提供更强支撑。

4 2025年工作计划及思考

4.1 重点资助领域

2025年化学理论与机制学科将聚焦能源、环境及生命健康等国家战略需求和前沿科学问题, 秉持目标导向与自由探索相结合的原则, 重点资助领域为: (1) 电子结构理论与方法; (2) 复杂分子体系的化学动力学; (3) 多尺度体系的理论与模拟; (4) 高分子聚集态结构与演化机制; (5) 光谱学新方法与应用; (6) 基于人工智能的化学理论; (7) 非绝热动力学; (8) 非平衡态分子模拟; (9) 面向极端条件防护装备聚合物复合材料的流变力学机制研究。

4.2 未来工作思考

新的一年, 新的起点, 在接下来的工作中, 化学学部化学理论与机制学科将响应自然科学基金委党组要求^[4], 在深刻理解加强基础研究的战略价值和重大意义的基础上, 牢牢把握自然科学基金战略定位, 坚持“四个面向”(面向世界科技前沿、面向经济主战场、面向国家重大需求、面向人民生命健康), 全面引领科技创新方向。同时, 坚持“两条腿走路”(目标导向和自由探索并重)的发展策略, 既注重解决国家和社会发展的重大需求, 又鼓励科研工作者在基础研究领域自由探索、追求科学突破。结合学科发展的特点和优势, 持续优化资助布局, 落实科学基金改革, 推动化学理论与机制领域基础研究的高质量发展。具体举措如下。

(1) 完善学科研究方向及相应关键词。2020年10月自然科学基金委发布《国家自然科学基金申请代码(2020年版)》, 并于2021年1月正式发布。申请代码层级统一为两层, 代码名称进一步规范, 形成了“两级申请代码-研究方向-关键词”的代码体系。为方便申请人找准自己的研究方向和定位, 本文将详细介绍化学理论与机制学科11个二级代码的研究方向。1) 化学理论与方法(B0301): 聚焦新理论、新算法的发展及其在化学体系中的应用, 涵盖电子结构、非平衡过程、多体量子力学、谱学模拟与量子计算, 重点关注原创计算方法与软件的开发。具体研究方向包括: 电化学过程、速率过程、量子耗散、催化反应动力学、非绝热动力学、团簇、凝聚态化学理论, 密度泛函、相对论

量化学、准确量子态演化数值方法, 生物大分子结构模拟, 软物质、表界面、谱学理论与模拟, 非平衡动力学, 随机热力学, 成键分析, 化学反应网络, 单分子动力学与谱学, 分子间相互作用和力场, 量子算法应用。2) 化学模拟与应用(B0302): 注重复杂体系的建模与模拟, 推动多尺度方法在化学反应、材料、生物和能源等交叉领域的应用。具体研究方向包括: 热、光、电化学反应的模拟与设计, 碳材料、电极材料、孔材料、新材料、蛋白质、分子抑制剂模拟与设计, 药物设计, 生物体系模拟, 分子力场、分子动力学模拟、多尺度模拟、蒙特卡罗模拟新方法, 化学模拟在交叉领域中的应用。3) 化学热力学(B0303): 发展适用于真实体系的化学热力学理论和测量方法, 探索体系热力学性质与微观结构的内在联系, 特别是在交叉领域中的应用研究。具体研究方向包括: 复杂流体、化学反应、微纳、材料、非平衡态、能源、统计、生物、极端条件热力学, 热动力学, 化学热力学理论, 溶液化学, 离子液体, 高分子溶液体系, 电解质溶液, 量热学与热分析。4) 化学动力学(B0304): 围绕反应过程的过渡态、非绝热效应、超快过程等, 发展理论与实验方法, 关注反应机理与动态演化, 并拓展研究体系。具体研究方向包括: 燃烧反应、表面反应、气相化学、凝聚态化学、团簇化学、生物分子化学、离子和自由基化学、界面化学、统计、非绝热、超快与激发态、基于大科学装置的化学动力学, 星际和大气、冷分子化学, 分子光谱及动力学, 分子动态学新方法, 化学动力学在交叉领域中的应用。5) 结构化学(B0305): 关注复杂功能体系的结构特征研究、理论预测、可控合成与自组装方法及动态转化与结构调控。具体研究方向包括: 纳米及介观结构, 手性、超分子、团簇、催化剂、纳米材料、多孔材料、光学材料、交叉、溶液、能源、表面结构化学, 结构化学新理论、表征新技术、在交叉领域中的应用。6) 光化学与光谱学(B0306): 结合短脉冲激光技术和空间分辨与时间分辨光谱技术, 研究化学体系中光激发过程的动力学机制和结构变化。具体研究方向包括: 超快、超分子光化学和光物理, 天然和人工体系光合作用, 光催化, 辐射与等离子体/激发态化学, 有机、无机、材料、大气、稀土、生物光化学, 光化学理论, 光化学传感, 光致变色和分子开关, 发光材料及器件, 光子学, 分子光谱学, 光谱新方法, 单分子、磷光、时间分辨光谱, 光谱学在

交叉领域中的应用. 7) 化学反应机制(B0307): 系统解析化学反应微观机理和基本规律, 推动化学反应过程的深入理解. 具体研究方向包括: 人工智能与反应机制, 无机、有机、高分子、分析、环境、能源、物理有机、生物、药物化学反应机制, 新化学反应机制, 反应机制新表征方法. 8) 分子电子学与分子磁学(B0308): 研究分子尺度下的电学和磁学行为, 发展相应理论与实验技术, 探索其在器件材料中的功能应用. 具体研究方向包括: 分子电子学和磁学理论及其在交叉领域中的应用, 自旋化学, 分子磁学合成, 分子电子学实验. 9) 高分子物理与高分子物理化学(B0309): 关注高分子链行为、相互作用机制、多尺度结构的形成与演变, 以及微观结构与宏观性质的关联与控制. 具体研究方向包括: 共轭聚合物电子结构理论, 高分子凝聚态新理论, 软物质理论与模拟, 高分子物理模拟与计算新方法, 高分子溶液与熔体热力学, 高分子流变学, 高分子表界面物理化学, 高分子加工机制、玻璃化机制、链动力学与相互作用、结晶与玻璃化机制、多层次结构与性能、多尺度结构演变机制, 高分子结构表征方法学, 高分子物理在交叉领域中的应用. 10) 化学信息学和人工智能(B0310): 推动人工智能、大数据与化学的融合, 推动基于系统原理的分子结构信息存储、检索和变换的新理论与新算法研究. 具体研究方向包括: 人工智能算法和软件, 化学数据库, 人工智能在药物和材料设计、合成和催化反应、能源、谱学中的应用, 计算机辅助化工模拟, 分子和化学反应过程信息学, 化学计量学, 化学信息学在交叉领域中的应用. 11) 化学程序与软件(B0311): 专注高效化学计算程序和化学软件的开发, 支撑理论化学研究基础. 具体研究方向包括: 电子结构、量子计算、分子动力学算法和计算软件, 化学软件工程. 为进一步提升申请人选题的精准性和申请的规范性, 学科将持续推进研究方向下关键词的优化和完善工作, 努力使其更好契合学科发展趋势, 为科研人员提供更加清晰、合理的研究定位参考.

(2) 继续鼓励自由探索, 加强基础研究. 在过去三年中, 学科在各个领域和研究方向取得了显著成果, 尤其在理论与算法方面得到了长期项目的支持. 然而, 仍有许多关键的基础理论领域亟待进一步深化和突破. 例如, 电子激发态理论、高精度与高维反应势能面构建、精确量子动力学理论、强关联体系的电子结构、

纳米体系表界面热力学理论等领域, 仍然需要更多的关注和投入. 同时, 高分子非平衡态模拟与理论、复杂体系增强采样与统计力学理论、人工智能在理论化学中的应用等也亟需进一步拓展. 此外, 光化学与光物理机制、谱学方法与理论、非绝热体系研究、量子计算理论、跨尺度体系模拟、分子电子学与磁学理论以及生物大分子模拟与计算方法等方向, 未来也将是学科发展的重点领域. 在自由探索的指引下, 学科将积极支持科研人员提出创新性、颠覆性的新理论与新方法, 强化对原创性科学问题的关注. 同时, 加强基础研究的投入与支持, 助力研究者在科学难题上实现突破, 为化学理论与机制学科注入新的活力, 并在全球化学研究领域持续保持竞争力和影响力.

(3) 坚持激励原创基础研究. 学科高度重视从“0到1”的创新突破, 鼓励科研人员围绕基础研究中的关键难题、研究瓶颈和新兴领域提出原创性理论模型和关键技术方法, 积极探索颠覆性、高风险的研究方向. 近年来, 学科资助的原创项目包括“有机微晶光腔中光自旋霍尔效应的研究(2021年)”以及“突破摩尔定律的新型单分子场效应晶体管的研制(2021年)”“量子演化的随机场表示(2024年)”等, 有望在理论框架构建或谱学前沿方法方面实现了关键突破, 展现出强劲的创新潜力与前沿引领力. 未来, 学科将持续加大对具有非共识性、颠覆性和高风险特征项目的支持力度, 重点推动原创理论体系构建与谱学方法创新, 努力发现和揭示新的科学规律, 赋能我国在化学基础研究领域实现从“跟跑”到“领跑”的跨越, 提升我国化学理论与机制研究在国际科学体系中的影响力与话语权.

(4) 突出青年科技人才培养. 加强培养青年人才是推动科学研究持续创新和学科繁荣发展的重要基础, 尤其在化学理论与机制学科中, 青年人才肩负着开拓新领域和攻克关键科学问题的重任. 通过优化科学基金项目的资助布局, 为青年研究者提供早期支持; 探索并改进以创新价值、能力和贡献为核心的分类评价体系, 强调研究的原创性和长期影响, 鼓励青年科学家在基础科学研究中进行深入探索. 此外, 通过搭建多层次、多形式的交流与培训平台, 为青年学者提供更多展示与学习的机会. 同时, 将邀请青年科研人员参与学科发展战略的制定、项目评审等关键环节, 充分信任并赋予他们更大的学术自主权, 增强青年科研人员的归属感与认同感. 学科将通过细致的关注和有力的

引导, 激发青年人的创新潜力, 帮助他们在科学探索中脱颖而出, 培养一批具有国际竞争力的优秀青年科技人才, 为学科的可持续发展注入新鲜动力。

(5) 重视重大类型项目管理. 重大类型项目通常以解决基础科学问题和关键技术难题为目标, 具有高投入、高复杂性和高风险的特点. 在学科管理方面, 一方面要重视立项的科学性和前瞻性, 围绕国家重大需求和学科发展前沿, 遴选具有战略意义的研究方向和团队. 另一方面应强化全周期管理, 从项目启动、过程监督到成果验收, 建立规范化的管理体系, 确保资源高效配置和任务协同推进. 此外, 还需注重中期评估和动态调整, 通过持续优化资源投入和研究方向,

提升项目的实施成效. 重大类型项目管理的成效直接关系到科学基金的资助效能和国家科技竞争力的提升, 因此必须给予高度重视.

(6) 加强学科学风建设. 强化科研诚信教育, 提高科研人员的学术道德意识, 营造风清气正的科研环境; 健全自然科学基金评审机制, 确保评审过程公平、公正、透明; 加强对学术不端行为的防范与查处, 畅通举报渠道, 完善核查机制, 对违背学术规范的行为零容忍. 与此同时, 将进一步倡导严谨治学、求真务实的科研作风, 引导科研人员聚焦原始创新, 摒弃浮躁, 提升研究质量和学术水平. 通过多层次、多维度的努力, 为科学研究的健康有序发展奠定坚实的基础.

参考文献

- 1 Shen X, Xiong X, Gao F. *Sci Sin Chim*, 2022, 52: 465–472 (in Chinese) [沈祥建, 熊孝根, 高飞雪. 中国科学: 化学, 2022, 52: 465–472]
- 2 Shen X, Xiong XG, Gao F. *Sci Sin Chim*, 2022, 52: 600–607 (in Chinese) [沈祥建, 熊孝根, 高飞雪. 中国科学: 化学, 2022, 52: 600–607]
- 3 National Natural Science Foundation of China. National Natural Science Fund Guide to Programs 2024 (in Chinese). Beijing: Science Press, 2024 [国家自然科学基金委员会. 2024年度国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2024]
- 4 Dou XK. *Sci Found China*, 2024, 38: 727–731 (in Chinese) [窦贤康. 中国科学基金, 2024, 38: 727–731]

Review of programs by NSFC in chemical theory and mechanism from 2022 to 2024

Ziyu Li^{1,2}, Xiangjian Shen^{1*}

¹ Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085, China

² Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

*Corresponding author (email: shenxj@nsfc.gov.cn)

Abstract: This article summarized the applications and funding of various grant programs, including General Program, Young Scientists Fund Program, and Fund for Less Developed Regions, talent project (including Fund for Distinguished Young Scholars and Excellent Young Scholars) and Key Program, supported by the National Natural Science Foundation of China (NSFC) in Chemical Theory and Mechanism from 2022 to 2024. The analysis identifies major common issues in project applications, summarizes the measures taken to strengthen fundamental research and their outcomes, and highlights the priority funding areas for 2025 as well as reflections on future work. This study aims to offer insights into the funding landscape, talent development patterns, and future directions in the field, serving as a valuable reference for researchers in the discipline.

Keywords: National Natural Science Foundation of China, chemical theory and mechanism, project review, measures to strengthen fundamental research, reflections on future work

doi: [10.1360/SSC-2025-0005](https://doi.org/10.1360/SSC-2025-0005)