国家自然科学基金2021年度化学理论与机制项目 评审综述

沈祥建^{1,2}, 熊孝根^{1,3}, 高飞雪^{1*}

1. 国家自然科学基金委员会化学科学部, 北京100085

2. 郑州大学化工学院, 郑州 450001

3. 中山大学中法核工程与技术学院, 珠海519082

*通讯作者, Email: gaofx@nsfc.gov.cn

收稿日期: 2021-09-29; 接受日期: 2021-10-13; 网络版发表日期: 2021-10-14

摘要 本文概述了2021年度国家自然科学基金委员会化学科学部二处化学理论与机制学科面上项目、青年科学基金项目 and 地区科学基金项目(以下简称面青地项目)申请和资助情况. 按照科学基金项目的申请领域代码、科学问题属性、负责人职称、性别与年龄等特征, 通过统计并分析近三年申请和资助的项目数, 提出当前化学理论与机制学科在面青地项目评审与资助工作中的思考与建议, 供相关人员参考.

关键词 国家自然科学基金, 化学理论与机制, 项目评审

1 引言

为了系统推进科学基金深化改革, 更好地发挥科学基金在国家创新体系中的基础引领作用^[1], 2018年国家自然科学基金委员会(以下简称自然科学基金委, NSFC)化学科学部根据化学科学发展态势和前沿研究领域, 进行了学科重组. 化学理论与机制(基金申请代码: B03)是重组后化学部设置的九大学科之一. 化学理论与机制学科(以下简称学科)旨在建立和发展新的化学理论和实验方法, 揭示化学反应和相关过程的机制和基本规律. 根据自然科学基金委简化学科代码改革要求, 学科进一步优化学科布局, 调整基金申请代码, 并于2021年开始取消三级代码, 实施新的二级代码^[2]. 同时, 为了明确资助导向, 学科从2019年主要对面上

项目开展了基于四类科学问题属性的分类申请与评审工作^[2-4]. 为了全面了解学科重组后项目申请和评审情况, 本文对2019~2021年所接收申请的面青地项目共3267项和获得资助项目646项进行详细的统计与分析, 并提出了项目评审与管理的一些建议.

2 项目的申请受理和资助

2.1 申请受理和资助概况

表1为学科在2019~2021年度面青地项目的申请和资助情况. 从2019年至2021年, 学科年度接收面青地申请项目数量分别为1037项、1092项和1138项, 申请总数呈现稳步增长趋势. 其中, 青年科学基金项目申请数量增长较快, 面上项目和地区科学基金项目的申请

引用格式: Shen X, Xiong X, Gao F. Review of general program, young scientists fund program and fund for less developed regions by NSFC in chemical theory and mechanism in 2021. *Sci Sin Chim*, 2022, 52: 465–472, doi: [10.1360/SSC-2021-0217](https://doi.org/10.1360/SSC-2021-0217)

表 1 2019~2021年度面上项目申请和资助情况

Table 1 Numbers of the applications and funding of general program, young scientists fund program and fund for less developed regions by NSFC in 2019–2021

年度	面上项目(项)			青年科学基金(项)			地区科学基金(项)		
	申请	资助	资助率(%)	申请	资助	资助率(%)	申请	资助	资助率(%)
2019	533	113	21.20	447	89	19.91	57	10	17.54
2020	558	115	20.60	471	80	16.99	63	10	15.87
2021	547	118	21.57	527	99	18.97	64	12	18.75

数量在三年里保持相对稳定. 同时, 面上项目的资助数量稳步增加, 且资助率与化学科学部整体面上项目的平均资助率保持一致.

2.2 申请项目学科代码情况

2021年启用的二级申请代码分为11个资助方向, 分别为B0301(化学理论与方法)、B0302(化学模拟与应用)、B0303(化学热力学)、B0304(化学动力学)、B0305(结构化学)、B0306(光化学与光谱学)、B0307(化学反应机制)、B0308(分子电子学与分子磁学)、B0309(高分子物理与高分子物理化学)、B0310(化学信息学和人工智能)和B0311(化学程序与软件)^[2]. 表2列出学科在2019~2021年度面上项目和青年科学基金项目在各个代码中的申请与资助情况. 在申请数量上, 在2019~2021年, 面上项目所接收申请数量前三位的二级申请代码分别是B0301(化学理论与方法)、B0302(化学模拟与应用)和B0309(高分子物理与高分子物理化学), 其三者申请总数分别占当年面上项目申请数量的46.5%、51.0%和47.5%. 在2019~2021年度青年科学基金项目接收申请数量前三位的二级申请代码之和分别占当年申请总量的51.4%、55.4%和55.4%. 在资助率方面, 各二级申请代码在2019~2021年度的面上项目和青年科学基金项目均呈现出不同程度的浮动变化, 也体现了自然科学基金委对各二级申请代码所对应不同研究方向的均衡资助, 有利于学科各方向的健康平稳发展.

值得注意的是, 申请数量前三位的二级申请代码的项目竞争是十分激烈的. 二级申请代码B0303(化学热力学)、B0304(化学动力学)、B0306(光化学与光谱学)和B0307(化学反应机制)在近三年均保持较稳定的资助率. 其中, B0304(化学动力学)在2019~2021年面上项目资助率分别为25%、29.5%和33.3%; 在青年科学

基金项目资助率分别为32.6%、25%和29.1%, 均超过当年项目平均资助率.

新设置的B0311(化学程序与软件)的面上项目虽然近三年申请数量较少, 均为个位数, 尤其是青年科学基金项目申请数量和资助数量, 但是在资助率方面, 该二级申请代码在2019~2021年面上项目的资助率分别为33.3%、33.3%和40%, 得到了学科的一定支持. 同样, 二级申请代码B0310(化学信息学和人工智能)在面上项目和青年科学基金申请数量上也在稳步发展, 但其资助率低于平均资助率, 希望努力提高申请质量, 以提升其资助率.

2.3 申请项目科学问题属性情况

根据新时代科学基金的资助导向, 自然科学基金委提出了基于“鼓励探索、突出原创”(A类)、“聚焦前沿、独辟蹊径”(B类)、“需求牵引、突破瓶颈”(C类)和“共性导向、交叉融通”(D类)四类科学问题属性的分类评审机制. 根据2019~2021年度国家自然科学基金委项目指南^[2-4], 表3列出学科在2019~2021年面上项目按科学问题属性分类申请和资助情况. 从表中可以看出, 科学问题属性“聚焦前沿、独辟蹊径”(B类)的申请和资助数量均占当年面上项目申请和资助数量的最高比例, 且该比例逐年升高. 在申请数量方面, B类项目在2019~2021年分别为58.5%、64.8%和68.4%; 在资助率方面, B类项目在2019~2021年获资助率分别为24.0%、20.7%和24.0%, 均略高于当年面上项目平均资助率. “需求牵引、突破瓶颈”(C类)面上项目申请数量在2019~2021年稳定在每年80项左右, 其资助率分别为14.8%、20.3%和17.5%. 值得注意的是, “鼓励探索、突出原创”(A类)和“共性导向、交叉融通”(D类)在2019~2021年面上项目申请数量和资助数量占当年的申请和资助数量的比例均呈现下降趋势. A类在

表 2 2019~2021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 applications and funding of general program and young scientists fund program by NSFC according to application code in 2019–2021

申请代码	2019年度				2020年度				2021年度			
	面上项目(项)		青年基金(项)		面上项目(项)		青年基金(项)		面上项目(项)		青年基金(项)	
	申请	资助	申请	资助	申请	资助	申请	资助	申请	资助	申请	资助
B0301化学理论与方法	85	17	109	24	104	25	107	16	66	18	54	14
B0302 化学模拟与应用	93	13	67	7	98	19	94	10	119	19	139	22
B0303 化学热力学	54	9	28	4	65	14	36	11	57	10	34	3
B0304化学动力学	60	15	49	16	58	17	44	11	63	21	72	21
B0305结构化学	17	6	22	4	19	6	19	4	10	1	18	3
B0306光化学与光谱学	44	8	37	5	45	9	27	3	39	8	45	9
B0307化学反应机制	52	7	46	10	47	4	52	9	63	7	81	8
B0308分子电子学与分子磁学	19	7	11	3	14	3	10	1	19	7	10	4
B0309高分子物理与高分子物理化学	70	26	54	15	83	15	60	11	75	20	53	14
B0310化学信息学与人工智能	30	2	23	1	19	1	16	1	31	5	19	1
B0311化学程序与软件	9	3	1	0	6	2	6	3	5	2	2	0

表 3 2019~2021年度面上项目按科学问题属性分类申请与资助情况**Table 3** Numbers of the applications and funding of general program by NSFC according to scientific nature of research in 2019–2021

科学属性	2019			2020			2021		
	申请	资助	资助率(%)	申请	资助	资助率(%)	申请	资助	资助率(%)
A类	58	13	22.4	63	13	20.6	34	6	17.6
B类	312	75	24.0	362	75	20.7	374	90	24.0
C类	81	12	14.8	79	16	20.3	80	14	17.5
D类	82	13	15.8	54	11	20.4	59	8	13.6

2019~2021年面上项目申请数量占当年申请数量的比例分别为10.8%、11.3%和6.2%，其资助率分别为22.4%、20.6%和17.6%；D类项目在2019~2021年面上项目申请数量占当年申请数量的比例分别为15.4%、9.6%和10.7%，其资助率分别为15.8%、20.4%和13.6%。学科旨在建立和发展新的化学理论和实验方法，揭示化学反应和相关过程的机制和基本规律，具有鲜明的学科特色。因此，新时代科学基金的资助导向对学科的发展也提出了新的要求。

2.4 申请单位与申请人情况

科学基金的作用不仅是资助基础研究的开展，更

重要的是通过项目支持从事基础研究的人才队伍建设和发展。学科对2019~2021年面青地申请与资助项目负责人的职称、性别与年龄的分布情况进行了统计分析。在2019~2021年面青地项目中，依托单位数量分别为381家、397家和422家，逐年稳步增长。同时，物理化学领域强势的高校和科研院所依然保持着强劲的发展优势，如中国科学院化学研究所、中国科学技术大学和中国科学院大连化学物理研究所等。面青地项目资助数超过10项的依托单位从2019年的1家，增加到2021年的4家。

表4列出学科在2019~2021年面青地申请与资助项目负责人的职称分布情况。从表中可以看出，无论从申

表 4 2019~2021年度面青地申请与资助项目负责人职称分布

Table 4 Numbers of the applications and funding of general program, young scientists fund program and fund for less developed regions by NSFC according to title of applicants in 2019~2021

职称	2019			2020			2021		
	面上项目	青年基金	地区基金	面上项目	青年基金	地区基金	面上项目	青年基金	地区基金
博士后	1(0)*	44(17)	0(0)	1(0)	61(19)	0(0)	1(0)	82(22)	0(0)
中级	29(4)	262(37)	3(1)	38(1)	307(35)	10(2)	47(2)	336(43)	11(3)
副高级	238(40)	109(20)	30(6)	272(40)	80(17)	28(3)	267(40)	84(24)	31(5)
正高级	265(69)	28(15)	24(3)	247(74)	19(9)	25(5)	232(76)	20(10)	22(4)

*括号里数字为资助数
*Numbers in brackets are for funding

请数量还是资助数量上,面上项目的负责人均以高级职称(副高级和正高级)为主,青年科学基金的负责人以中级职称和博士后为主,地区科学基金的负责人以高级职称(副高级和正高级)为主。从面上项目申请人的职称分布来看,具有副高级职称的项目负责人所占比例有增大趋势,但在获资助数目来看,具有正高级职称的项目负责人仍占据主导地位, 占在2019~2021年学科资助面上项目总数的61.1%、64.3%和64.4%,保持着相对平稳的趋势;在青年科学基金的申请与资助方面,具有中级职称(讲师和助理研究员)的项目负责人在青年科学基金的申请数量上起着绝对主导地位,同时项目负责人获资助的比例也保持着稳定态势, 占在2019~2021年学科资助青年科学基金项目总数的42.0%、43.7%和43.4%。博士后在青年科学基金项目的申请和资助中也起着不可或缺的作用, 且其在项目负责人的分布比例中呈现上升趋势。在申请数量方面,负责人为博士后的申请项目在2019~2021年青年科学基金申请项目中的比例分别为9.8%、10.9%和15.0%;在资助数量方面,博士后在2019~2021年占据青年科学基金资助数的19.3%、23.7%和22.2%。在地区科学基金申请与资助方面,2019~2021年项目负责人具有高级职称的总数基本保持平稳,但中级职称的占比呈现一定的上升趋势,尤其在2019~2021年占资助总数的比例分别为10%、20%和25%。该趋势主要由两个主要因素引起:一是自然科学基金委针对项目负责人进行了限两项的新限项规定;二是自2016年起,作为项目负责人获得地区科学基金资助数累计不超过3次。

表5为学科在2019~2021年面青地申请与资助项目负责人的性别分布情况。在申请与资助方面,女性科技

人员在面青地项目申请与资助上呈现不一样的特征。在面上项目的申请数量上,女性科技人员在2019~2021年占当年面上项目申请数量的比例分别为28.5%、28.6%和26.0%,获得资助的比例分别为25.7%、24.4%和19.5%。在青年科学基金的申请数量上,女性科技人员的申请数量超过男性科技人员,其在2019~2021年当年项目申请总量中所占的比例分别为54.6%、56.0%和53.9%。在资助数量上,女性科技人员的资助数占在2019~2021年当年项目资助总量的比例分别为37.1%、38.7%和32.4%。在地区科学基金的申请与资助方面,男性科技人员的申请与资助数均超过女性科技人员。在申请数量上,女性科技人员在2019~2021年占当年申请量的比例分别为33.3%、27%和36%;在资助数量上,女性项目负责人的比例有所提高, 占在2019~2021年当年资助数量的40%、30%和41.7%。

科研创造力与科技工作者年龄的相关性一直被科技界所重视。表6是学科对2019~2021年面上项目的申请和资助的项目负责人的年龄分布情况(因青年基金的申请人有相应的年龄限制,故未对其申请者的年龄构成作统计)。从表中可以看出,45周岁是面上项目申请人重要的年龄分水岭。在2019~2021年,面上项目申请人年龄在45周岁及以下占当年面上项目申请数量的77.7%、79.9%和79.3%,获资助数量占当年面上项目资助数量的比例分别为66.4%、62.6%和71.1%,是学科能够保持持续、健康和稳定发展的主力军。同时,35周岁以下的申请者占面上项目申请数量的23.5%、24.5%和24.7%,历年比例基本持平;从资助数量来看,该年龄段在2019~2021年每年获资助数约20项,说明该年龄段的青年科研人员在学术研究中保持较高的活跃

表 5 2019~2021年度面青地申请与资助项目负责人性别分布

Table 5 Numbers of the applications and funding of general program, young scientists fund program and fund for less developed regions by NSFC according to sex of applicants in 2019~2021

职称	2019			2020			2021		
	面上项目	青年基金	地区基金	面上项目	青年基金	地区基金	面上项目	青年基金	地区基金
男性	381(84)*	203(56)	38(6)	398(87)	207(49)	46(7)	405(95)	243(67)	41(7)
女性	152(29)	244(33)	19(4)	160(28)	264(31)	17(3)	142(23)	284(32)	23(5)

*括号里数字为资助数

*Numbers in brackets are for funding

表 6 2019~2021年度面上项目申请与资助项目负责人年龄分布

Table 6 Numbers of the applications and funding of general program, young scientists fund program and fund for less developed regions by NSFC according to age of applicants in 2019~2021

年龄段	2019		2020		2021	
	申请	资助	申请	资助	申请	资助
35周岁以下	125	19	137	19	135	20
35~40周岁	205	38	201	27	189	37
41~45周岁	84	18	108	26	110	27
46~50周岁	65	16	56	10	55	11
51~55周岁	31	12	36	13	27	7
55周岁以上	23	9	20	10	31	16

度. 根据面上项目资助的导向, 申请人应当充分了解国内外相关研究领域发展现状与动态, 具有领导一个研究组开展创新性研究工作的学术能力. 为此, 处于35~45周岁之间的申请人能够在前期青年科学基金的资助下, 逐步形成自身特色的学术思想和研究方式, 开展学科领域内的研究工作, 并取得一定学术价值的研究成果, 是获得面上资助的必备条件. 从统计结果上来看, 在2019~2021年, 35~45岁的申请者在面上项目申请与资助方面是占据主导的, 反映了当前学科的科研队伍的年龄结构处于良性发展阶段. 而与之相对应地是, 46~55周岁这个年龄段的申请人在总数中的比重呈现下降趋势. 在申请数量方面, 46~55周岁年龄段的申请数量在2019~2021年占当年面上项目申请数量的18%、16.4%和15.0%; 在资助数量方面, 该年龄段的资助数量在2019~2021年占当年面上项目资助数量的比例分别为24.8%、20%和15.3%. 该年龄段的科研人员正处于发挥自身才能, 培养和发展年轻一代科研队伍的重要时期, 需要相应的基金支持和鼓励, 以使其继续保持科研活力.

3 几点思考和建议

3.1 项目申请存在的问题

项目申请初审情况逐年好转. 随着新冠疫情的爆发, 2020年起自然科学基金委全面扩大无纸化申请并简化材料报送. 在项目初审工作阶段, 遵行自然科学基金委计划局要求, 对照当年项目指南, 对各类型申请项目进行严格筛查. 在2019~2021年学科面青地项目初审情况逐年好转, 但依然存在不予受理的申请项目. 2019年学科共初审32项申请不予受理, 其中面上项目19项, 青年科学基金项目12项, 地区科学基金项目1项. 不予受理原因主要为“未如实填写研究生导师或博士后合作导师姓名”. 2020年学科共初审3项申请不予受理, 其中面上项目2项, 不予受理原因为“未如实填写研究生导师或博士后合作导师姓名”和“未按要求提供证明材料”; 青年科学基金项目1项, 不予受理原因为“研究期限填写错误”; 2021年学科共初审2项申请不予受理, 仅为面上项目, 不予受理原因为“未如实填写研究生导师或博士后合作导师姓名”和“其他可认定

的不予受理情形”。因此, 申请人应重视申请书内容和质量的同时需及时完善自己在自然科学基金信息系统中的“个人信息维护”里“个人简介”, 规范填写本人的教育经历和工作经历。

女性科技人员在青年科学基金的竞争较为激烈。基于在2019~2021年面青地申请与资助项目负责人的性别分布情况的基础上, 学科进一步统计分析了女性科技人员在35~40周岁年龄段的青年科学基金申请与资助情况。该年龄段的女性科技人员在2019年青年科学基金申请数量为91项, 资助数量为12项, 资助率为13.2%; 在2020年青年科学基金申请数量为87项, 资助数量为8项, 资助率为9.2%; 在2021年青年科学基金申请数量为91项, 资助数量仅为4项, 资助率仅为4.4%。统计数据充分说明该年龄段的女性科技人员申请青年科学基金是十分激烈的, 且资助率明显低于平均资助率, 需要引起相关申请人的高度重视。2021年自然科学基金委与多部委联合下发《关于支持女性科技人才在科技创新中发挥更大作用的若干措施》, 也将进一步提高女性科技人员在自然科学基金申请上的获资助率, 从而不断发展和壮大女性科技人员的研究队伍。

评审专家与申请人在科学问题属性分类的理解上存在偏差。在各类型项目资助数量方面, 学科结合学部下达项目类型的平均资助率和当年项目四类属性的申请数量, 仔细核定属于每个科学问题属性所规定的资助数量, 同时符合自然科学基金委规定的重点讨论项目数的比例为130%~160%的整体上会要求。在专家会议评审过程中, 对重点讨论项目进行详细讨论, 最终评审出不得超过额定资助数的项目。学科在会评评审过程中, 注意到专家与申请人在少数项目的科学问题属性的理解上存在一定的偏差, 尤其对“鼓励探索、突出原创”(A类)和“共性导向、交叉融通”(D类)属性的项目。同时, 在通讯评审意见里, 评审专家也以书面形式表达出类似的意见。因此, 建议申请人应当根据要解决的关键科学问题和研究内容, 选择最相符、最侧重、最能体现申请项目特点的科学问题属性, 并阐明选择该科学问题属性的理由。

“负责任, 讲信誉, 计贡献”(RCC)评审机制开展试点工作。2021年学科根据自然科学基金委要求, 以面上科学基金项目为试点, 开展了“负责任, 讲信誉, 计贡献”(RCC)评审机制工作。以RCC试点问卷调查截止日期为止, 已收集到的数据统计分析表明, 绝大部分参

与问卷调查的申请人认为评审专家的函评意见是“很有帮助”或“有帮助”, 少数申请人认为评审专家的函评意见是“帮助不大”或“没有帮助”。RCC评审机制工作, 将进一步激励评审专家更加积极主动遴选创新项目的责任意识, 坚持正面引导和正向激励, 不断提升项目评审质量, 促进学科发展。

3.2 学科发展的几点建议

结合2019~2021年面青地项目申请与资助情况, 对学科发展存在的“理论与算法的发展略显薄弱”、“人工智能技术在理论化学中的应用还不成熟”、“具有自主知识产权的大型通用计算化学软件仍然空白”和“已有大科学装置的有效利用仍需进一步加强”四个问题进行跟踪分析。

电子结构理论的发展依然需要大力支持。化学理论与算法的发展对整个学科的发展起着关键作用, 其中电子结构理论是重中之重, 需要进一步发展和加强。学科在2019~2021年面青地项目申请和资助上对电子结构理论的支持明显加强, 其中面上项目资助率分别为50%; 38.4%和64.3%, 青年科学基金资助率分别为50%, 33%和33%, 均明显高于当年各类项目平均资助率。但是青年科学基金的申请数量依然处于个位, 面临着严峻的持续发展问题。学科呼吁青年科研人员能够继续保持长期从事基础研究的热情, 也希望在强关联电子体系、电子激发态理论和密度泛函方法等领域方向有所新突破, 从而加强化学理论与算法的发展。

人工智能技术在理论与计算化学中的应用需定位发展。近年来, 人工智能技术尤其是机器学习方法方兴未艾, 与众多传统研究领域相结合, 突破理论化学瓶颈, 解决不少以前理论解决不了的难题。然而, 该热点研究领域的项目质量与资助率却不高。同时, 在项目评审中也逐步显现出共性问题, 归纳起来有以下几点: 一是当前人工智能技术仅停留在简单“应用”上, 并没有针对化学研究方法发展所需的人工智能技术; 二是作为人工智能的基础, 构建数据库是最基本的, 但因缺少统一标准, 导致通讯评审专家很难判断出申请人能否完成并给出肯定的评价; 三是选择准确的描述符是人工智能技术在应用方面得以突破的关键。因此, 希望在电子结构、势能面构建、催化剂的理性设计、谱图解析和分子动力学方法等应用方面加强人工智能基

基础研究,并取得更多的原创性突破。

具有自主知识产权的大型通用计算化学软件需要夯实基础。目前国内大部分从事计算化学的科研人员采用国外商业软件,如Gaussian、VASP、CP2K等,知识产权易被国外技术“卡脖子”。随着我国提出科技需要自主、独立、创新的目标,学科亟需大力鼓励青年科研人员静下心来从理论方法和超算框架上攻克计算化学软件的关键问题,真正地实现与我国的超算集群硬件兼容。当前,学科的“化学程序与软件”二级代码在申请和资助数量均较少。在2019~2021年面青地项目的申请和资助方面,共申请20项面上项目,其中7项获资助,分别是“高效率多用途能量分解分析新程序的开发”、“低秩近似算法加速密度泛函理论激发态电子结构低标度高性能并行计算”、“用于实际化学体系的密度矩阵重正化群量子化学方法和程序”、“基于低维纳米材料热力学性质预测的自主大规模高性能计算软件平台构建”、“高通量分子模拟驱动机器学习预测分子热力学和输运性质的算法、软件和数据库”、“大规模分布式并行从头算价键软件的开发”、“面向小分子光谱和反应动力学研究的量子分子动力学软件包”;共申请9项青年科学基金项目,其中获资助为3项,分别是“通过低秩近似在数值基组下开发低标度高性能的杂

化泛函计算程序”、“第一性原理电声耦合程序的开发与应用”、“分子势能面机器学习方法发展”。因此,学科呼吁我国青年科学家要有“坐冷板凳”的勇气和精神,为开发我国第一套自主产权、具备通用计算化学功能、可替代现在有国外商业计算软件的大型通用计算化学软件做出一份贡献。

已有大科学装置的有效利用将得到进一步加强。由自然科学基金委资助搭建的“大连极紫外相干光源”于2018年通过验收并开始投入运行。对依靠该大型科学装置申请的面青地项目,学科在资助力度上给予了一定的支持并不断加强。在2019~2021年,学科已资助面上项目3项,分别是“基于极紫外相干光源的催化反应动力学研究”、“基于“单色”真空紫外光技术的分子光解反应特征及微观机理研究”、“利用极紫外自由电子激光研究高碰撞能下氢原子和氢分子反应的态-态动力学”;青年科学基金项目2项,分别是“基于大连相干光源的中性水团簇红外光谱研究”和“基于相干光源的小分子高电子激发态衰变动力学研究”。该综合装置主要集中在原子和分子的量子调控方面,因此学科呼吁广大科研人员可依靠或充分利用可调极紫外相干光源进行相关化学动态前沿研究,从而进一步加强探索、发展和研制大型科学装置。

参考文献

- 1 Li JH. *Bulletin of National Natural Science Foundation of China*, 2019, 3: 209–214 (in Chinese) [李静海. 中国科学基金, 2019, 3: 209–214]
- 2 国家自然科学基金委员会. 2021年度国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2021
- 3 国家自然科学基金委员会. 2020年度国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2020
- 4 国家自然科学基金委员会. 2019年度国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2019

Review of general program, young scientists fund program and fund for less developed regions by NSFC in chemical theory and mechanism in 2021

Xiangjian Shen^{1,2}, Xiaogen Xiong³, Feixue Gao^{1*}

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

² College of Chemical Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China

³ Sino-French Institute of Nuclear Engineering and Technology, Sun Yat-sen University, Zhuhai 519082, China

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

Abstract: This article summarized the applications and funding of general program, young scientists fund program and fund for less developed regions by NSFC in chemical theory and mechanism in 2021. As one reference, we have given some helpful suggestions on the review and funding through the statistical analysis of the number of the applications and funding. The analyzed results are based on the application code, scientific nature of research, and title/sex/age of applicants.

Keywords: NSFC, chemical theory and mechanism, review

doi: [10.1360/SSC-2021-0217](https://engine.scichina.com/doi/10.1360/SSC-2021-0217)