



国家自然科学基金2021年度化学理论与机制学科项目评审综述(二)

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@nsc.gov.cn

收稿日期: 2022-02-11; 接受日期: 2022-03-01; 网络版发表日期: 2022-03-09

摘要 本文概述了2021年度化学科学部二处化学理论与机制学科的优秀青年科学基金、杰出青年科学基金、创新研究群体和基础科学研究中心项目, 以及重点项目、重大项目、国家重大科研仪器研制项目的申请和资助情况. 结合2018~2020年度这几类项目的申请与资助情况, 学科进行了统计分析并提出相应的发展建议, 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

人才是创新的第一资源, 也是创新活动中最为活跃、最为积极的因素. 党的十九大报告明确指出, 强化基础研究, 要培养造就一大批具有国际水平的战略科学人才、科技领军人才、青年科技人才和高水平创新团队. 为了实现新时代人才战略目标, 国家自然科学基金委员会(以下简称自然科学基金委)全面系统化推进以“明确资助导向、完善评审机制和优化学科布局”为核心的科学基金深化改革^[1-2]. 为了全面了解学科重组后项目申请和评审情况, 我们已完成对2019~2021年所接收申请的面上项目、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”)申请和资助情况的综述, 并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, 通过统计与分析, 提出了当前化学理论与机制学科日后在面青地项目评审与资助工作中的思考与建议^[3]. 进一步地, 本文在化学理论与机制学科(以下简称学科)“十四五”发展规划和2021年度面青地项目评审总结的基础上, 对人才项目包括优秀青年科学基金、杰出青年科学基金、创新研究群体和基础科学中心项目, 以及重点项目、重大项目和国家重大科研仪器研制项目进行详细的统计与分析, 并提出相应的学科发展建议.

2 项目的申请和资助

为了优化学科布局, 学科于2021年度启用了全新二级申请代码, 取消了三级申请代码, 共设11个资助

引用格式: Shen X, Xiong XG, Gao F. Review of application and funding of chemical theory and mechanism by NSFC in 2021 (II). *Sci Sin Chim*, 2022, 52: 600-607, doi: [10.1360/SSC-2022-0026](https://doi.org/10.1360/SSC-2022-0026)

方向, 即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). 本文所概述的项目申请和资助均基于此新二级代码进行统计与分析.

2.1 优秀青年科学基金项目

优秀青年科学基金项目支持在基础研究方面已取得较好成绩的青年学者自主选择研究方向开展创新研究, 促进青年科学技术人才的快速成长, 培养一批有望进入世界科技前沿的优秀学术骨干. 表1为学科在

2018~2021年度优秀青年科学基金项目(包括优秀青年科学基金(港澳)项目)的申请和资助情况. 近四年来, 学科共接收优秀青年科学基金项目申请302项, 获批资助31项, 其资助率为10.3%, 略高于化学科学部近四年的优秀青年科学基金项目资助率(9.8%). 具体表现为, 学科在2018~2021年接收优秀青年科学基金项目申请数量分别为68项、76项、84项和74项; 在资助数量方面, 学科在2018~2021年分别获批5项、8项、10项和8项. 本学科优秀青年科学基金项目的资助率在2018~2021年分别为7.4%、10.5%、11.9%和10.8%. 值得注意的是, 表2列出了优秀青年科学基金项目申请人性别的分布情况. 可以看出, 女性科学家在近四年优秀青年科学基金项目的申请量逐步上升, 获批资助率也在保持良好的发展趋势.

自然科学基金委从2020年开始启动优秀青年科学

表1 2018~2021年度优秀青年科学基金按学科代码申请与资助情况

Table 1 Numbers of the applications and funding of excellent young scientists fund by NSFC according to application codes in 2018–2021

申请代码	2018年		2019年		2020年		2021年		合计	
	申请项数	资助率 (%)	申请项数	资助率 (%)						
B0301	9(0)*	0.0	17(1)	5.88	15(2)	13.3	9(2)	22.2	50(5)	10.0
B0302	8(0)	0.0	8(1)	12.5	7(2)	28.6	12(0)	0.0	35(3)	8.6
B0303	2(0)	0.0	4(0)	0.0	2(1)	50.0	1(0)	0.0	9(1)	11.1
B0304	10(1)	10.0	11(2)	18.2	16(3)	18.7	17(3)	17.6	54(9)	16.7
B0305	2(0)	0.0	7(1)	14.3	6(1)	16.7	5(0)	0.0	20(2)	10.0
B0306	8(0)	0.0	5(1)	20.0	5(0)	0.0	4(0)	0.0	22(1)	4.5
B0307	9(2)	22.2	5(0)	0.0	6(0)	0.0	5(1)	20.0	25(3)	12.0
B0308	2(1)	50	4(0)	0.0	1(0)	0.0	2(0)	0.0	9(1)	11.1
B0309	17(1)	5.88	14(2)	14.3	22(1)	4.5	14(1)	7.1	67(5)	7.5
B0310	1(0)	0.0	0(0)	0.0	1(0)	0.0	2(0)	0.0	4(0)	0.0
B0311	0(0)	0.0	1(0)	0.0	1(0)	0.0	3(1)	33.3	5(1)	20.0
合计	68(5)	7.4	76(8)	10.5	84(10)	11.9	74(8)	10.8	302(31)	10.3
学部	750(57)	7.6	829(88)	10.6	879(89)	10.0	822(88)	10.7	3280(322)	9.8

*括号里为资助数.

表2 2018~2021年度优秀青年科学基金、国家杰出青年基金和重点项目申请与资助负责人性别分布

Table 2 Numbers of the applications and funding of excellent young scientists fund, National Science Fund for Distinguished Young Scholars and Key Program by NSFC according to sex of applicants in 2018–2021

项目类型	2018年			2019年			2020年			2021年		
	优青	杰青	重点	优青	杰青	重点	优青	杰青	重点	优青	杰青	重点
男性	50(5)*	42(3)	23(7)	59(7)	42(3)	20(5)	66(7)	51(4)	17(3)	54(6)	44(4)	16(6)
女性	18(0)	4(0)	4(1)	17(1)	3(0)	3(1)	18(3)	3(0)	5(3)	20(2)	4(0)	1(0)

*括号里为资助数.

基金(港澳)项目, 以便支持香港特别行政区和澳门特别行政区科技创新发展, 鼓励爱国爱港爱澳高素质科技人才参与中央财政科技计划。学科在2018~2021年度优秀青年科学基金(港澳)项目的申请数量分别为0项、1项、2项和2项, 其中2020年获批2项优秀青年科学基金(港澳)项目。

2.2 国家杰出青年科学基金项目

国家杰出青年科学基金项目是国家自然科学基金委人才项目中的重要组成部分。国家杰出青年科学基金项目支持在基础研究方面已取得突出成绩的青年学者自主选择研究方向开展创新研究, 促进青年科学技术人才的成长, 吸引海外人才, 培养和造就一批进入世界科技前沿的优秀学术带头人。表3列出学科在2018~2021年度国家杰出青年科学基金项目的申请与资助情况。近四年里, 学科共接收国家杰出青年科学基金项目申请193项, 获批资助项目数14项, 其资助率为7.3%, 略低于化学科学部近四年的平均资助率(8.5%)。学科在2018~2021年接收国家杰出青年科学基金申请数量分别为46项、45项、54项和48项, 获批资助数量分别为3项、3项、4项和4项, 其获批准资助率分别为6.5%、6.7%、7.4%和8.3%。值得注意的是, 表2也列出了国家杰出科学基金

申请人性别的分布情况。可以看出, 女性科学家在近四年国家杰出青年科学基金的申请量偏少, 目前尚未有申请人获批资助。

2.3 创新研究群体和基础科学研究中心项目

创新研究群体项目支持国内外优秀学术带头人自主选择研究方向、自主组建和带领研究团队开展创新性的基础研究, 攻坚克难, 培养和造就在国际科学前沿占有一席之地研究团队。学科在2018~2021年度创新研究群体项目的申请和资助情况见表4。近四年来, 学科在创新研究群体项目的申请和资助情况均不理想, 仅2021年批准一项, 即“绿色溶剂体系设计、性质与功能”, 由中国科学院化学研究所刘志敏教授主持, 资助直接经费1000万元。

基础科学中心项目旨在集中和整合国内优势科研资源, 瞄准国际科学前沿, 超前部署, 充分发挥科学基金制的优势和特色, 依靠高水平学术带头人, 吸引和凝聚不同领域和不同学科方向优秀科技人才, 着力推动学科深度交叉融合, 相对长期稳定地支持科研人员潜心研究和探索, 致力科学前沿突破, 产出一批国际领先水平的原创成果, 抢占国际科学发展的制高点, 形成若干具有重要国际影响的学术高地。学科在

表3 2018~2021年度国家杰出青年科学基金按学科代码申请与资助情况

Table 3 Numbers of the applications and funding of National Science Fund for Distinguished Young Scholars by NSFC according to application codes in 2018–2021

申请代码	2018年		2019年		2020年		2021年		合计	
	申请项数	资助率 (%)	申请项数	资助率 (%)						
B0301	16(2)*	12.5	19(0)	0.0	17(1)	5.9	13(1)	7.7	65(4)	6.2
B0302	3(0)	0.0	2(0)	0.0	5(0)	0.0	6(0)	0.0	16(0)	0.0
B0303	0(0)	0.0	0(0)	0.0	0(0)	0.0	0(0)	0.0	0(0)	0.0
B0304	4(1)	25.0	5(1)	20.0	7(1)	14.2	8(2)	25.0	24(5)	20.8
B0305	5(0)	0.0	5(1)	20.0	7(1)	14.2	4(1)	25.0	21(3)	14.2
B0306	2(0)	0.0	1(0)	0.0	3(0)	0.0	3(0)	0.0	9(0)	0.0
B0307	1(0)	0.0	2(0)	0.0	6(0)	0.0	3(0)	0.0	12(0)	0.0
B0308	3(0)	0.0	2(0)	0.0	2(0)	0.0	3(0)	0.0	10(0)	0.0
B0309	11(0)	0.0	8(1)	12.5	7(1)	14.2	8(0)	0.0	34(2)	5.9
B0310	0(0)	0.0	0(0)	0.0	0(0)	0.0	0(0)	0.0	0(0)	0.0
B0311	1(0)	0.0	1(0)	0.0	0(0)	0.0	0(0)	0.0	2(0)	0.0
合计	46(3)	6.5	45(3)	6.7	54(4)	7.4	48(4)	8.3	193(14)	7.3
学部	433(30)	6.9	439(45)	10.3	528(45)	8.5	548(45)	8.2	1948(165)	8.5

*括号里为资助数。

表 4 2018~2021年度创新研究群体和基础科学研究中心项目申请和资助情况**Table 4** Numbers of the applications and funding of Science Fund for Creative Research Groups and Basic Science Center Program by NSFC in 2018–2021

项目类型	2018年			2019年			2020年			2021年		
	申请	资助	学部	申请	资助	学部	申请	资助	学部	申请	资助	学部
创新研究群体项目	1	0	29(6)*	1	0	27(6)	3	0	32(5)	3	1	32(5)
基础科学研究中心	0	0	1(0)	1	0	10(2)	0	0	8(2)	0	0	5(2)

*括号里为资助数。

2018~2021年度基础科学研究中心项目的申请和资助情况见表4。自然科学基金委2016年试点实施获批的由中国科学院大连化学物理研究所杨学明院士主持的“动态化学前沿研究”基础科学研究中心,已于2021年12月31日(5年)结题,待延续资助。

2.4 重点项目

重点项目支持从事基础研究的科学技术人员针对已有较好基础的研究方向或学科生长点开展深入、系统的创新性研究,促进学科发展,推动若干重要领域或科学前沿取得突破。表5为学科在2018~2021年度重点项目的研究领域或方向的申请和资助情况。总体而言,重点项目的申请数量逐年微降,但是资助数量保持相对稳定。具体表现为,学科在2018~2021年接收重点项目申请数量分别为27项、23项、22项和17项;其获批资助数量分别为8项、6项、6项和6项;其获批资助率分别为29.6%、26.1%、27.3%和35.3%,逐年略显提升。重点项目须体现有限目标、有限规模、重点突出的原则,重视学科交叉与渗透,有效利用国家和部门现有重要科学研究基地的条件,积极开展实质性的国际合作与交流。值得注意的是,表2也列出了重点项目申请人性别的分布情况。可以看出,女性科学家在近四年重点项目的申请量偏少,获批资助数仍然需要努力保持。

2.5 重大项目

重大项目应面向科学前沿和国家经济、社会、科技发展及国家安全的重大需求中的重大科学问题,超前部署,开展多学科交叉研究和综合性研究,充分发挥支撑与引领作用,提升我国基础研究源头创新能力。学科在2018~2021年度重大项目的申请和资助情况见表6。近四年来,学科权限管理范围内的重大项目为

2020年度“分子光子学材料与激发态过程调控”,由中国科学院化学研究所姚建年院士主持;2021年批准“新型无机倍频晶体材料的化学创制”,由北京师范大学陈玲教授主持。

2.6 国家重大科研仪器研制项目

国家重大科研仪器研制项目面向科学前沿和国家需求,以科学目标为导向,资助对促进科学发展、探索自然规律和开拓研究领域具有重要作用的原创性科研仪器与核心部件的研制,以提升我国的原始创新能力。国家重大科研仪器研制项目包括部门推荐和自由申请两个亚类。表6列出学科在2018~2021年度国家重大科研仪器研制项目(自由申请)的申请和资助情况。总体而言,学科近四年来共收到申请45项,其中资助6项,资助率为13.3%。具体表现为,从申请数量来看,学科在2018~2021年度国家重大仪器研制项目的申请数分别为6项、15项、15项和9项,其中资助数分别为3项、0项、2项和1项,资助率分别为50.0%、0.0%、13.3%和11.1%。近四年来获批具体情况为:2018年度获批三项分别为“基于受激亏蚀的宽带飞秒时间分辨光谱装置”、“用于研究瞬态分子指纹区红外光谱的高灵敏高分辨谱仪”和“用于单分子力化学研究的光调制-力耦合相关谱探测系统”;2020年度获批的两项分别为“新型气溶胶光镊光谱仪的研制”和“飞秒时间分辨光参量荧光放大瞬态荧光光谱测量装置”;2021年度获批一项为“碳氢燃料热化学过程分布式实时测控系统研制”。

3 建议与思考

3.1 人才类项目体系的优化管理

自2020年起,自然科学基金委按照中央人才工作协调小组的统一部署,规定同层次国家科技人才计划

表 5 2018~2021年度重点项目申请和资助情况

Table 5 Numbers of the applications and funding of key programs by NSFC in 2018–2021

年度	拟资助领域	申请数	资助数	年度	拟资助领域	申请数	资助数
2018	(1) 反应机理及计算化学	4	1	2019	(1) 电子结构理论与方法	4	1
	(2) 功能导向的结构化学实验研究	1	1		(2) 生物大分子动态结构及相互作用的理论与模拟	3	1
	(3) 化学谱学新方法	0	0		(3) 凝聚相超快动力学研究	0	0
	(4) 复杂体系的理论与计算化学新方法	3	2		(4) 激发态分子反应动力学	7	2
	(5) 理论与计算化学应用研究	5	0		(5) 化学反应理论与机制研究	7	2
	(6) 激发态分子反应动力学	6	1		(6) 非平衡态高分子体系理论计算与模拟	2	0
	(7) 复杂体系化学热力学理论和方法	0	0				
	(8) 功能材料的光化学与光物理过程	3	1				
	(9) 微纳尺度的物理与化学机制	2	1				
	(10) 非平衡态高分子体系理论计算与模拟	3	1				
	合计	27	8		合计	23	6
2020	(1) 电子结构理论与方法	5	1	2021	(1) 化学中的量子理论与方法	4	1
	(2) 化学动力学实验方法与应用	0	0		(2) 复杂分子体系超快化学动力学	1	1
	(3) 谱学新方法及应用	3	1		(3) 高分子聚集态结构与演化机制	1	1
	(4) 功能材料结构的设计与机制	4	2		(4) 光功能材料的设计及机理研究	4	2
	(5) 高分子聚集态的结构演变机制	5	0		(5) 限域空间的结构化学	0	0
	(6) 凝聚相与功能材料的光化学与光物理	3	1		(6) 跨尺度体系的理论与模拟	4	1
	(7) 复杂体系的化学热力学	2	1		(7) 新型发光及光转换材料与机制	0	0
	(8) 化学成像新方法	0	0		(8) 复杂体系的化学热力学	0	0
					(9) 溶剂化电子相关的化学过程	2	0
					(10) 分子尺度输运性质与器件	1	0
	合计	22	6		合计	17	6

表 6 2018~2021年度重大项目和国家重大科研仪器研制项目申请和资助情况

Table 6 Numbers of the applications and funding of Key Program and Special Fund for Research on National Major Research Instruments by NSFC in 2018–2021

项目类型	2018年			2019年			2020年			2021年		
	申请	资助	学部	申请	资助	学部	申请	资助	学部	申请	资助	学部
重大项目	1	1	10(6)*	1	1	8(8)	1	1	8(6)	1	1	10(7)
国家重大科研仪器研制	6	3	90(15)	15	0	105(16)	15	2	82(11)	9	1	63(13)

*括号里为资助数。

只能申请或承担一项。申请优秀青年科学基金项目的申请人不能为国家“千人计划”青年项目、国家“万人计划”青年拔尖人才项目、“长江学者奖励计划”青年学者项目等人才计划项目任何一类, 以及获得上述人才计划项目任何一类支持且在支持期内的, 不能逆层次申请。申报国家杰出青年基金项目的申请人不能为

国家“千人计划”创新人才长期项目、外国专家项目、国家“万人计划”科技创新领军人才、“长江学者奖励计划”特聘教授等人才计划项目任何一类, 以及获得上述人才计划项目任何一类支持且在支持期内的。为此, 广大申请人需要认真阅读当年项目指南, 并贯彻相关政策。近几年, 优秀青年科学基金项目和杰出青

年科学基金项目的申请量相对稳定,项目研究工作更注重其独立性和独特性.依照中央人才工作会议精神,深化科学基金改革措施,激发科技人才的积极性和主动性,人才项目均实行项目经费包干制.同时,2022年开始,自然科学基金委员会在申请书撰写方面也有新的调整,如省略代表作通讯作者的标识符等,请申请者密切关注国家自然科学基金年度项目指南.

自2022年起,自然科学基金委将陆续开展对基础科学研究中心项目进行期满考核评估与延续资助工作.作为2016年第一批试点实施的“动态化学前沿研究”基础科学研究中心已顺利通过考核评估和延续资助的评审.基础科学研究中心总体要求是准确把握基础科学中心项目的战略定位,充分体现“原创导向、聚焦前沿、交叉融合、科学评价、稳定支持、动态调整”的原则,注重考察基础科学中心把握重要发展方向和引领世界科学前沿的能力,团队协同创新的质量和跨学科、跨领域交叉融合的程度,标志性成果的创新价值等.在考核评估方面,重点考察以下内容:项目计划执行情况;研究成果的原创性、科学价值和国际影响力;国际科学前沿竞争力和满足国家重大战略需求的效能;学科交叉融合的深度和团队成员之间交叉融合的实质性合作;优秀科技人才的培养;资助经费的使用以及依托单位支撑和保障情况等.第一个资助周期考核评估结果为“优秀”的基础科学中心项目,学术带头人可以根据研究工作需要提出延续资助申请.延续资助申请的研究领域、方向和计划原则上应与原申请书的十年总体目标保持一致.基础科学中心项目延续资助周期为5年,项目资金实行预算制管理方式,直接费用不超过6000万元.为保持核心队伍稳定,延续资助项目的研究团队应由第一个资助周期的项目成员组成.学术带头人原则上保持不变,骨干成员可以根据工作需要适当调减,但不得增加新的骨干成员.学术带头人和骨干成员合计不得少于5人.延续资助项目的学术带头人及骨干成员在项目资助期内不得申请或参与申请国家杰出青年科学基金项目、优秀青年科学基金项目以外的其他类型项目,但资助期满当年可以申请或参与申请.

3.2 重点(大)类项目立项机制的完善

近四年来,重点项目的资助成果对学科的发展提供了长足的动力,但是也存在一些薄弱方面,例如年

度申请数量在逐步下降,学科薄弱研究方向的学术竞争力不强,有些年度出现某些研究方向没有申请量或只有一人申请等现象,这些均将对学科的长远发展产生一定的影响.为此,为了提升学科优势领域和研究方向,扶持薄弱领域和研究方向,一方面学科鼓励科学家们积极申请或参与,另一方面学科也将邀请领域专家进一步凝练当前学科各个领域和研究方向的关键科学问题.同时,加强对项目指南内容的宽泛化与创新性,从而资助更多优秀的申请项目.

自然科学基金委近两年来一直不断探索重大科学问题的凝练机制和重大项目的立项机制.每年八月份学部发布征集下一年度化学科学领域重大项目立项建议的通告,并提出重大项目立项领域应突出“面向世界科学前沿、面向经济主战场、面向国家重大需求、面向人民生命健康”,鼓励根据科学发展趋势提出前瞻性研究方向.学部在征集得到重大项目立项建议书后,将组织学部主任扩大会议,邀请专家进行初筛和推荐,并提交至学部咨询委员会进行讨论并投票,最终确定下一年度化学科学部重大项目立项领域.学部组织专门重大项目指南编制专家组,进行项目指南的讨论和制定,重点是提高重大项目指南的宽泛性和包容性,避免出现“对号入座”现象,提高学术竞争力.为了避免“谁建议谁申请、谁编制谁申请”的现象,重大项目立项建议征集将遵循回避制度,现任学部咨询委员会委员不得作为项目建议人提出立项建议;参与重大项目指南编制的专家,不得申请或参与申请该重大项目.重大项目立项与评审机制等程序的改革,将不断完善自然科学基金项目的评审机制,进一步落实新时代科学基金改革的措施.

3.3 重视仪器研制项目的申请和后续管理

化学理论与机制是最有可能产生原创性重大科学仪器研制项目的学科.国家重大科学仪器的研制不是项目负责人简单购买进口相关部件进行组装或简单的改装,而是需要进行原创性科研仪器与核心部件的研制,以提升我国的原始创新能力.根据目前资助项目的情况来看,虽然国家重大科研仪器研制项目(自由申请)的项目申请数量不多,完成情况也较好,但是结题优秀率却有待提高.根据国家重大科研仪器研制项目管理办法,所有国家重大科学仪器研制项目自项目资助期满之日起60日内,依托单位应当向自然科学基金

委提交验收申请材料。验收申请材料包括项目负责人撰写的结题报告、验收申请书、资金决算报告、研究成果报告、仪器测试手册, 专家组或者具有资质的第三方机构出具的仪器技术指标测试报告, 以及具有科技审计资质的第三方资金决算审计报告。会议验收包括项目验收和财务验收, 项目验收以项目计划书、年度进展报告、中期检查报告、结题报告、验收申请书、研究成果报告、仪器测试手册、仪器技术指标测试报告和项目档案为依据; 财务验收以项目计划书中确定的资金预算、资金预算报告和第三方资金决算审计报告为依据。建议项目负责人按照管理规定和要求, 分门别类地对各项材料进行整理成册, 形成规范的目录表, 避免前后混淆, 以便提升验收效率和质量。特别指出的是, 在项目验收中的项目档案是对项目实施过程中的真实记录, 应当由依托单位的档案管理人员进行协助建档, 规范化管理。会议验收通过后3年内, 自然科学基金委将根据需要组织专家对项目进行后评估。这一点, 特别需要引起项目负责人的重视, 加强成果管理与后评估。依托单位应当按照项目计划书确定的成果使用方案和目标, 加强与使用仪器单位的联系与合作, 建立开放共享机制, 提高科研仪器的试用效益和水平, 推动项目成果转化。

3.4 加强原创探索计划项目

为了引导和激励广大科研人员投身原创性基础研究工作, 自然科学基金委自2020年起实施了原创探索计划。2021年化学科学部批准五项原创探索计划项目, 其中专家推荐类原创探索计划项目两项, 即由首都师范大学廖清教授主持的“有机微晶光腔中光自旋霍尔效应的研究”(申请代码: B03)和北京大学郭雪峰教授主持的“突破摩尔定律的新型单分子场效应晶体管的研制”(申请代码: B03)。学科鼓励广大学者能够积极发挥智力优势, 提出具有非共识、颠覆性、高风险特征的原创新项目。同时, 自然科学基金委也将在梳理和总结实施经验的基础上, 持续优化项目管理, 适时开展结题评估, 探索建立对后续有望获得突破性原创成果项目的延续资助机制。

3.5 加强基础研究, 探索科研范式变革, 助力原创成果的产生

近四年来, 无论从人才项目的资助, 还是一般项目的获批, 学科各个领域和研究方向均取得了良好的发展, 尤其是在理论与算法方面得到了长周期项目的支持。然而, 依然有一些基础理论方向需要进一步加强, 如电子激发态理论、高精度且高维反应势能面构造与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、高分子体系非平衡态理论与模拟、复杂体系高效增强采样和统计力学理论、人工智能在理论化学中的应用、计算方法程序化和软件化、谱学方法与理论、光化学与光物理机制、非绝热体系理论与方法、量子计算理论与方法、跨尺度体系的理论与模拟、分子电子学与分子磁学理论和生物大分子体系模拟与计算方法等。新理论的提出与新方法的发展是化学理论与机制学科发展的重要支撑, 是学科未来重点关注的内容。

高分辨的谱学方法和技术是探究化学结构和反应的保证。目前学科在谱学方法和技术领域已经取得丰硕成果, 处在良性发展中。但是, 针对复杂反应体系的机制和动态过程, 依然需要进一步发展具备高时间、高空间、高能量分辨的谱学方法和技术, 充分研究化学反应动力学、表界面反应、高分子复杂体系和功能材料光化学与光物理等反应过程, 发展结构化学实验和理论研究新方法与新技术。一方面, 加强我国在先进科学仪器研制方面的投入与研究, 尤其是培养自主设计和研发方面的人才梯队; 另一方面, 加强已有大科学装置的高效利用, 充分发挥大型仪器设备优势, 加深复杂反应体系的机理研究, 并进一步尝试探索人工智能在实验探测方法中的应用。

化学理论与机制要抓住科研范式变革的重要机遇。用传统方法解决不了的问题, 可以通过转变科研范式来突破或破解难题。学科鼓励探索新的科研范式, 克服惯性思维, 摆脱跟踪模仿的科研理念, 大胆探索, 突出原创, 充分发挥化学理论与机制在整个化学学科中的基础作用。

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 Shen X, Xiong X, Gao F. *Sci Sin-Chim*, 2021, 52: 465–472 (in Chinese) [沈祥建, 熊孝根, 高飞雪. 中国科学: 化学, 2021, 52: 465–472].

Review of application and funding of chemical theory and mechanism by NSFC in 2021 (II)

Xiangjian Shen^{1,2}, Xiao-Gen Xiong^{1,3}, 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 application and funding of Excellent Young Scientists Fund, National Science Fund for Distinguished Young Scholars, Science Fund for Creative Research Groups and Basic Science Center Program, and Key Program, Special Fund for Research on National Major Research Instruments 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 application and funds by NSFC in 2018–2020.

Keywords: NSFC, chemical theory and mechanism, review of application and funding

doi: [10.1360/SSC-2022-0026](https://doi.org/10.1360/SSC-2022-0026)