



合成化学发展规划概述

张绍东^{1,2}, 卢红成^{1,3}, 康强¹, 黄艳¹, 付雪峰^{1*}

1. 国家自然科学基金委员会化学科学部, 北京 100085

2. 上海交通大学化学化工学院, 上海 200240

3. 华中科技大学化学与化工学院, 武汉 430074

*通讯作者, E-mail: fuxf@nsfc.gov.cn

收稿日期: 2021-02-25; 接受日期: 2021-02-25; 网络版发表日期: 2021-03-01

摘要 合成化学是化学科学的核心, 其根本任务在于创造新物质, 并为其他相关学科的发展提供强大支撑. 本文简要介绍了国家自然科学基金委员会化学科学部化学科学一处(合成化学)“十四五”及中长期发展规划、学科布局、申请代码和研究方向, 供相关人员参考. 新申请代码于2021年启用.

关键词 国家自然科学基金, 合成化学, 发展规划, 学科布局, 申请代码

1 引言

化学学科为物质科学提供新的研究对象与模型, 同时又为材料科学与工程、生命科学和健康技术、工程科学与应用等提供强大的物质保障与认知工具^[1]. 化学对其他学科承前启后的贡献, 得益于其创造物质的能力, 源于合成化学的创造力和支撑性. 合成化学在促进人类认识、利用和改造自然、推动国民经济和社会发展方面具有不可替代的作用.

合成化学是利用化学反应构筑具有特定结构和功能物质的科学, 为新物质的创制提供方法、技术和工程化原理. 人类已经开启了绿色、智能、共享与可持续发展的时代, 在包括生命健康、清洁能源、生态环境、人工智能、智能制造等领域存在诸多机遇与挑战. 这一经济社会发展新形势, 不仅对合成化学提出了新的要求, 也为推动合成化学的创新发展提供不竭动力^[2]. 为此, 国家自然科学基金委员会(以下简称自然

科学基金委)化学科学部组织开展了合成化学发展规划编制和申请代码优化工作, 引导合成化学相关研究聚焦源头创新和国家重大需求, 推崇前瞻性、原创性、引领性的科研理念, 避免“盲目追求热点、同质类模仿”, 关注“小众特色领域”, 构建以科学问题为导向的资助方式. 本文将对上述相关情况进行简要介绍, 供从事相关研究的广大科研人员参考.

2 合成化学“十四五”及中长期发展规划

根据2021~2035年国家中长期科技发展规划基础科学发展战略的总体目标, 遵循习近平总书记向我国广大科技工作者提出的面向世界科技前沿、面向经济主战场、面向国家重大需求、面向人民生命健康的“四个面向”科技创新方向^[3], 自然科学基金委化学科学部组织编制了合成化学“十四五”及中长期发展规划, 明确了学科内涵、目标和特征, 分析了学科现状,

引用格式: Zhang S, Lu H, Kang Q, Huang Y, Fu X. Layout of development and discipline of Synthetic Chemistry of National Natural Science Foundation of China. *Sci Sin Chim*, 2021, 51: 538–546, doi: 10.1360/SSC-2021-0047

提出了未来学科发展布局和优先发展领域。

2.1 合成化学的学科内涵、目标与发展逻辑

作为现代社会发展的重要支撑, 合成化学一直受到广泛的关注和重视。合成化学的内涵不再是传统意义上的无机、有机、高分子和超分子化学, 而是指广义上的以“改变原子、分子、结构(功能)基元的组成和排布”为手段“创制新物质”, 不仅涉及化学键的断裂和形成, 还包括分子间相互作用及协同机制, 以及不同分子之间的相互作用和反馈的网络, 因此是跨尺度、跨维度、跨学科、深层次“大交叉”研究领域, 是由具体科学问题和应用需求牵引并相互促进的。

合成化学以“理性、高效、高选择性、原子经济性、环境友好、低能耗、可持续地创造具有无限可能的分子结构和具有丰富功能的新物质”为总体目标, 着重关注前沿科学及技术发展需求, 解决与国计民生相关的重大基础科学问题, 探索物质结构与性能的关系和内秉规律, 为建立完善的物质科学知识体系提供丰富的研究对象和手段, 为发展变革性与战略性功能材料提供物质基础, 为推动我国相关产业升级提供创新原动力。

合成化学发展的重大挑战来自于以下方面: 一是精准创制具有新颖结构和先进功能的新物质; 二是拓展高效的合成反应、方法和工艺; 三是发展合成化学中通用性的理论框架。

2.2 合成化学的研究内容与发展布局

合成化学围绕“新物质的创制”、“新反应、新方法与新技术”以及“物质合成的机制、规律和理论”进行布局和展开, 这三条主线有机融合、相互促进(图1)。

2.2.1 新物质的创制

新物质创制的内涵是利用原子外层电子排布重组化学键或利用分子相互作用来构筑新的分子体系, 其魅力和核心在于新分子构建的无尽可能, 其外延则在于新功能的探索和拓展, 其范畴或可突破人类想象力。

合成化学不仅需要开发实现各种新反应的强大的化学键“工具库”(如常温常压下的惰性体系活化、极端条件或外场调控下的合成、生物合成和仿生合成等), 还需要发展新方法和新技术, 以实现对分子堆积、多级结构及相态结构的精准控制, 进而实现物质

性质和功能的可控调节。这既是构效关系研究的基础, 也是对结构认知极限的探索。

新物质的创制包括:

(1) **元素化学(或元素化合物)**. 以元素的特异物理化学性质为基础, 探索新的元素与元素之间成键、断键反应与控制策略, 实现元素化合物的精准、高效和绿色合成与转化。

(2) **金属配合物**. 以构筑新结构与开发新功能为核心, 揭示金属-碳键、金属-氢键和金属-杂原子键的形成与调控规律, 发展金属配合物, 特别是稀土和铜系金属配合物的成键和基元反应新理论。

(3) **生物活性分子与天然产物**. 发展活性分子与天然产物合成的高效反应和普适的合成策略; 开发具有药用前景、特别是我国特有来源的、稀缺天然产物和高附加值药物分子的制备工艺; 促进机器学习、流动化学、生物合成与传统化学合成的融合, 推动活性分子和天然产物合成向“智能化、自动化、集成化”方向进步。

(4) **团簇化合物**. 开发具有未知结构与性能的新型团簇及其可控、有序组装和宏量制备方法; 揭示其形成机理、演化过程和稳定性机制, 建立系统、普适性的构效关系, 扩展理论基础, 推动其在纳米、催化、生命、环境等领域的应用。

(5) **高分子**. 精确控制高分子的单体序列、拓扑结构、立构规整度和不同维度结构, 开发新型、可持续聚合物; 通过对聚合反应机理的深入理解和认识, 发展新的聚合方法, 突破传统单体和聚合物结构与功能的局限和认知边界。

(6) **超分子组装体**. 开发具有精确结构、特殊物理化学性质与功能的新型组装基元; 精准调控非共价相互作用间的协同机制, 可控构筑结构明确的超分子组装体; 通过非平衡态自组装构筑具有特殊结构与功能的超分子体系; 完善超分子化学理论体系, 探索新型超分子性质与功能。

(7) **纳米结构**. 完善精确可控的纳米结构合成方法, 实现具有精密复杂结构和多层级纳米结构的构筑, 实现相关体系的多功能、动态化和智能化; 寻求超细、超薄、多组分、高精密、能形变、会运动等结构特征的控制策略; 发展新表征手段, 深化机制认知, 奠定理论基础; 探索非常规缺陷、晶相的生成和稳定方法, 控制其分布和比例。

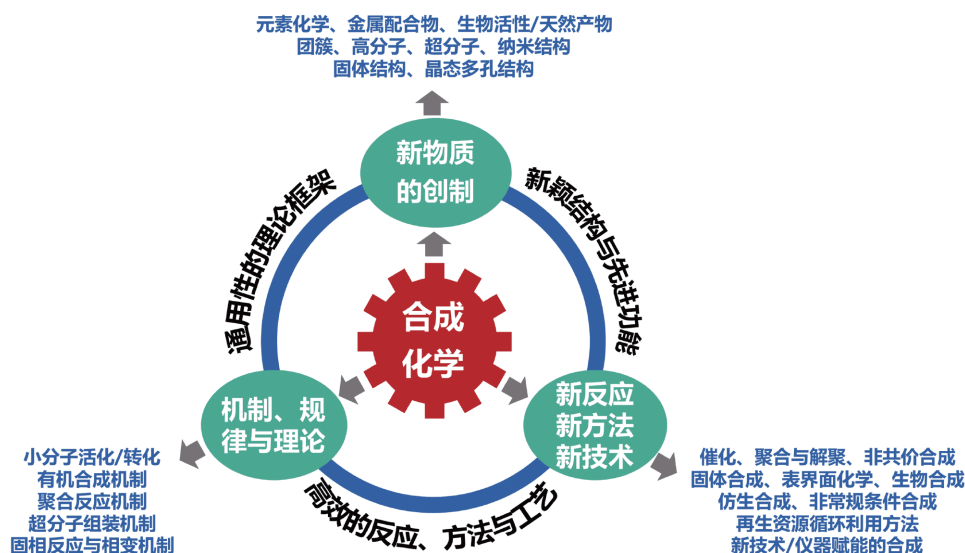


图 1 合成化学的三条主线与相关研究内容 (网络版彩图)

Figure 1 Fields of research of synthetic chemistry and the related topics (color online).

(8) **固体结构**. 通过对固体微观尺度结构的准确认识和精细调控, 实现以功能为导向的固体材料的理性设计及可控合成, 创制具有光、电、磁、热、声、力以及相互耦合等新颖功能的固体物质; 发展极端条件化学合成方法, 促进新型功能固体材料的开发和新性能的发见。

(9) **晶态多孔结构**. 设计和发展新功能基元、化学连接方式和合成手段, 探索复杂组分、等级孔结构的智能设计与高效合成; 构筑以催化、吸附分离、光、电、磁、声、热等功能为导向的孔道拓扑结构和化学环境; 拓展原位谱学和显微表征方法, 结合理论计算, 阐明孔道中的主客体相互作用、电子转移及物质传递机制。

2.2.2 新反应、新方法与新技术

高效精准的新反应、新方法和新技术是“理想合成”最核心的基石. 如何发展高效、经济、安全、绿色的合成新方法是合成化学的永恒主题. 新反应、新方法和新技术的出现往往可以改变合成化学的思路、方式和范畴, 是合成化学创新的源动力. 从物质科学的全局出发, 着力发展原创、独特的合成方法. 结合大数据分析与人机智能等先进技术, 借助多学科交叉的研究范式, 突破传统合成化学的局限, 向全新的杂化合

成、多元合成、跨尺度合成和智能合成过渡, 引领合成化学的发展潮流。

新反应、新方法与新技术包括:

(1) **催化合成反应**. 创制新型催化剂和催化体系, 开拓催化新思想、新策略和新方法; 发展分子高效催化转化新途径, 实现资源高效利用、精准合成和可持续物质循环创制; 阐明(分子)催化机制与规律; 借助大数据分析与人机智能等先进技术, 实现催化剂、催化体系和催化反应的理性设计。

(2) **聚合、解聚反应与方法**. 通过对聚合反应机理的深入理解和认识, 借鉴有机化学、无机化学、生物化学以及超分子化学等领域的知识积累与最新进展, 发展新的聚合方法; 突破传统单体和聚合物结构的局限及现有聚合方法的应用范围, 从源头上促进功能聚合物的精准合成; 师从有机合成方法学和生物化学, 探索用于可持续聚合物的构筑、传统聚合物的绿色降解与高附加值转化的新方法。

(3) **非共价合成**. 开发用于精准构筑多级、多层次、多尺度组装结构的新方法; 发展高时空分辨、原位监测自组装过程的新技术; 推动非共价合成与共价合成的协同与耦合, 构筑力学性能可调控的功能超分子体系, 开发其在生物、材料等领域的应用; 建立基于非共价作用的合成新理论; 建立非平衡态自组装

新体系与理论.

(4) **固体合成.** 通过客体引导的骨架设计等策略进行功能单元的可控构筑和高性能材料的精准合成; 发展新型晶态材料和玻璃陶瓷等固体材料的高通量合成, 以及外延薄膜宏量简便生长等新方法; 开发高稳定性材料的晶体生长、固液不同组成的大晶体生长、非常规溶剂辅助晶体生长等新策略、新方法以及新技术, 解决单晶生长过程中的实时监测、定量控制等技术问题; 探索软化学合成、无容器接触合成、表界面合成以及高压、多外场调控等极端条件下合成新方法及其装备.

(5) **表界面合成化学.** 研究在液-固、气-固、气-液、液-液等表界面成键、断键、非共价相互作用的特殊机制, 包括表界面共价合成、表界面非共价合成以及共价与非共价相结合的表界面合成等; 在表界面精准合成新分子、创制新物质、构建新器件; 探索表界面合成的宏量制备方法, 以及材料和器件一体化制备技术.

(6) **生物合成.** 开发绿色、节能、高效的新型酶促反应, 阐明重要天然活性分子的生物合成途径及相关酶学机制; 设计和构建基于微生物和细胞工厂的高效生物合成新路线; 建立和发展基于生物信息学的相关基因组信息发掘技术.

(7) **仿生合成.** 通过模仿简单到复杂生命体的结构与功能原理, 创制不同层级、尺度和功能的新物质与材料, 阐明自然、人造资源的循环路径和规律, 开发高效绿色化学转化策略, 推动资源的循环、再生与高附加值转化.

(8) **非常规条件合成.** 开发外场调控及非常规条件下的新反应, 揭示外场调控引发反应的新作用机制; 完善具有时空分辨的反应物种原位测量手段, 构建非常规条件或极端条件下的化学反应新装置、新体系; 理解极端条件下化学应对地球化学与生命化学的影响.

(9) **再生资源与循环利用方法.** 揭示自然和人造资源循环路径的化学转化机制; 开发高效绿色化学转化策略, 推动资源的循环利用, 提升再生资源在循环过程中的功能化水平; 推动学界与产业间的深度融合, 助力再生资源化学与循环化学的工业化应用.

(10) **新技术、新仪器赋能的合成.** 基于合成化学大数据的原始积累, 建设我国自主、完备、规范、开

放的合成化学数据库; 利用人工智能等先进技术, 开发可用于分子与物质精准高效合成的深度学习方法与规则算法; 研制集设计、反应、纯化、分析、反馈于一体的标准化智能反应体系, 实现合成自动化; 引领合成化学研究范式从“劳动密集型和经验试错型”到“自动化、智能化、精细化”的升级.

2.2.3 物质合成的机制、规律与理论

结合人工智能、计算模拟和高时空分辨等原位表征技术, 深入理解反应机制, 揭示化学键断裂和形成的规律以及多重分子间相互作用力协同构筑多层次结构形成的规律, 进而指导新物质的设计与制备.

基于对化学键和分子间作用力本质的深入认识, 淡化无机、有机、高分子和超分子化学的边界, 以科学问题为引导, 通过交互融合, 将合成化学的共性问题提升到规律提炼的高度. 结合计算模拟和原位表征技术, 深入理解反应机制, 建立相应的数据库, 借助大数据分析机器学习等技术, 揭示物质合成的普遍规律, 阐明物质功能的构效关系, 推动合成化学从“试错性和经验性探索”到“理性和智能创制”的发展.

物质合成的机制、规律与理论包括:

(1) **小分子活化与转化.** 重点研究氮气、氢气、氧气、二氧化碳等气体小分子活化与转化的反应机理; 阐明小分子的成键、断键过程中的关键中间体与电子转移机制, 揭示小分子定向转化的调控机制, 建立对小分子活化普适反应机制的认知; 拓展小分子转化反应的类型, 实现转化产物的多样性.

(2) **有机合成机制.** 针对重要有机转化反应, 通过对重要中间体的检测与解析, 以及反应动力学及理论计算等方面的研究, 揭示化学键的活化、断裂和重组的反应机制; 阐明活性物种的结构与反应活性及选择性之间的构效关系, 研究高活性有机物种反应的选择性调控机制, 为发展新型高效的有机转化新反应提供指导.

(3) **聚合反应机制.** 充分考虑链缠结、黏弹性、扩散性、链构象等高分子特征理化性质的影响; 对引发、链增长、链交换、解聚、后修饰、网络化等基元反应进行理论描述、理性设计和机理阐述, 为发展新聚合反应、实现聚合物精准合成与降解提供理论基础与指导.

(4) **超分子组装机.** 关注自组装过程中各种非共

价相互作用的协同规律; 发展在线测量技术与瞬时组装手段; 捕捉及检测自组装中间过程及其非线性动力学特征; 建立能量耗散体系组装过程的精确理论模型; 探索快速多尺度的动力学模拟方法。

(5) **固体中的反应与相变机制**. 阐述动力学控制固相产物的形成原理及其特征结构单元在反应过程中的分解和重组机理; 拓展固体材料在温度、压力、电场等外场作用下结构相变的追踪方法; 厘清离子嵌入脱出过程中基本结构稳定性差异的机制; 开展多尺度(离子、分子、团簇、颗粒)固体材料的合成机理研究; 实现相变界面结构特征表征和计算模拟。

2.3 合成化学的学科优先发展领域

合成化学正进入一个崭新的时代, 充满了机遇与挑战。中国合成化学应致力于提升学术品味, 打破原有的学科界限, 勇于开拓新领域, 探索“无人区”, 形成特色研究方向; 既要针对重大需求, 解决实际问题, 又要推进机制研究, 提升理论和科学高度。基于这些考虑, 建议合成化学学科优先发展领域如下:

- (1) 生物活性分子构建的策略、方法与技术;
- (2) 新型功能物质的合成;
- (3) 再生资源化学与循环化学;
- (4) 新试剂、新方法和新技术;
- (5) 原位、实时、多元的表征方法和机制研究;
- (6) 多级结构与化学键协同构筑的合成化学;
- (7) 多外场协同驱动的合成化学;
- (8) 非常规条件或远离平衡态的合成化学;
- (9) 晶态体相物质的理性设计与合成化学;
- (10) 基于大数据分析和人工智能的合成方法学及合成策略;
- (11) 化学合成与生物合成的耦合;
- (12) 面向国家重大需求的合成化学基础研究。

3 优化学科布局与申请代码调整

《中共中央关于制定国民经济和社会发展第十四个五年规划和二〇三五年远景目标的建设》中提出了通过优化学科布局等强化国家战略科技力量的措施。为构建理念先进、制度规范、公正高效的新时代科学基金体系, 自然科学基金委提出了明确的改革任务, 其中包括: 坚持把支持源头创新作为基础研究的根本出

发点, 把创新性和系统性作为项目评审的两把尺子, 从而明确资助导向; 着眼于解决与国计民生相关的重大基础科学问题, 坚持以开放和交互的视角分析和研究各个分支的特色, 从而优化学科布局; 进一步改进评审方式来提高评审质量, 完善专家遴选原则和评审标准, 从而完善评审机制^[4-7]。为此, 化学科学部设立了守正出新、面向未来、兼容并包的“合成化学”领域(申请代码: B01)^[8,9]。申请代码不仅是开展科学基金项目申请、评审、资助和管理的工具, 还对学科发展起到重要的引导作用。

3.1 原学科申请代码介绍

2018年启动的以科学问题为导向构建的合成化学领域共包括7个二级代码以及39个三级代码(表1)^[10], 基本涵盖了合成化学领域的研究内容, 在三年来的项目申请和管理中发挥了积极作用。

根据合成化学“十四五”及中长期发展规划的指导, 遵循基金管理服务与优化学科布局的原则, 2018~2020年的申请代码结构仍面临一些挑战, 存在以下问题:

- (1) 原有7个二级申请代码之间的内在逻辑关系有待进一步梳理与厘清;
- (2) 原有代码体系对学科方向的覆盖仍需扩充, 面向物质功能、理论基础等研究方向未充分体现, 如“功能分子/材料的合成”与“结构与反应机制”等尚未囊括;
- (3) 原有部分申请代码的内涵有待优化, 如“B0102无机合成”与“B0103有机合成”包含的研究方向较多, 需要进一步细分;
- (4) 原有代码的项目申请量分布有待优化, 存在个别代码申请量过多或太少, 如“B0103有机合成”的申请量尤为突出, 而“B010704原子与步骤经济性反应”申请量较低。

3.2 申请代码调整情况介绍

围绕合成化学发展的三条主线, 化学科学部进一步优化了合成化学领域的申请代码(B01)。新的申请代码下设13个二级代码, 70个研究方向(表2)。下面就申请代码的调整情况进行简要说明, 供相关人员参考。

(1) 元素化学(B0101)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0101元素化学”及相应的三级申请代码, 对应于规划中2.2.1部分

表 1 2018~2020年期间自然科学基金委化学学部所使用的合成化学申请代码

Table 1 The application code of Synthetic Chemistry in the Department of Chemical Sciences of NSFC during the period of 2018–2020

二级申请代码	三级申请代码
B0101元素化学	B010101主族元素化学 B010102过渡金属元素化学 B010103稀土与锕系元素化学
B0102无机合成	B010201无机固相合成 B010202无机溶液合成 B010203非常规条件下无机合成 B010204晶体生长化学 B010205纳米与团簇化学 B010206功能无机分子的设计与合成
B0103有机合成	B010301新试剂与新反应 B010302活性中间体化学 B010303金属催化合成反应 B010304有机小分子催化 B010305不对称合成 B010306天然产物全合成 B010307功能有机分子的设计与合成
B0104 高分子合成	B010401聚合反应与方法 B010402离子聚合与配位聚合 B010403自由基聚合 B010404逐步聚合 B010405高分子光化学与辐射化学 B010406高分子精密合成
B0105配位合成化学	B010501配位反应 B010502溶液配位化学 B010503功能配合物化学 B010504金属有机化学 B010505配位聚合物
B0106超分子化学与组装	B010601组装基元 B010602非共价相互作用与组装方法 B010603动态共价键化学 B010604组装过程的动态调控 B010605超分子复合物与聚合物 B010606生命功能体系的组装
B0107绿色合成	B010701生物催化与生物转化 B010702模拟酶与仿生合成 B010703光化学合成 B010704原子与步骤经济性反应 B010705可再生资源化学 B010706温和条件下的化学转化

中的“元素化学(或元素化合物)”。

研究方向具体包括: d、f区元素化学、主族元素化学、有机磷化学、有机硅化学、有机硼化学、有机氟化学、其他元素有机化学。

(2) 配位化学(B0102)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0105配位合成化学”及相应的三级申请代码, 将“配位聚合物”(原B010505)调整为“配位聚合物与金属有机框架”,

新增“模拟酶与仿生合成”。对应于规划中2.2.1部分中的“金属配合物”。

具体研究方向包括: 金属有机化学、配位聚合物和金属有机框架、溶液配位化学、配位反应(过程)、模拟酶与仿生合成、功能配合物化学。

(3) 团簇与纳米化学(B0103)

本申请代码继承了原三级申请代码“B010205纳米与团簇化学”, 并进一步丰富了该代码下的具体研究内容。对应于规划中2.2.1部分中的“团簇化合物”与“纳米结构”。

具体研究方向: 金属团簇、金属有机簇、多酸和金属氧簇、非金属团簇、其他团簇、纳米碳材料、纳米材料的合成及机理、纳米材料的表界面化学、纳米材料的相态和晶相、纳米材料的缺陷化学、纳米材料的组装及集成、纳米复合材料、纳米多孔材料、纳米薄膜材料、纳米及单原子催化材料、纳米生物医学材料、纳米光催化和电催化材料、纳米功能材料。

(4) 无机合成(B0104)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0102无机合成”及三级申请代码“B010201无机固相合成”、“B010203非常规条件下无机合成”和“B010204晶体生长化学”, 新增“无机合成新方法”和“表界面合成化学”。对应于规划中2.2.1部分中的“固体结构”与2.2.2部分中的“固体合成”、“表界面合成化学”以及2.2.3部分的“固体中的反应与相变机制”。

具体研究方向包括: 无机固相合成、晶体生长化学、无机合成新方法、表界面合成化学、非常规条件下合成。

(5) 催化合成反应(B0105)

本申请代码继承了原三级申请代码“B010303金属催化合成反应”和“B010304有机小分子催化”。对应于规划中2.2.2部分中的“催化合成反应”。

具体研究方向包括: 金属催化合成反应、有机小分子催化。

(6) 不对称合成(B0106)

本申请代码继承了原三级申请代码“B010305不对称合成”, 新增了“不对称金属催化合成反应”和“不对称有机小分子催化”。对应于规划中2.2.2部分中的“催化合成反应”。

具体研究方向包括: 不对称金属催化合成反应、不对称有机小分子催化、不对称合成。

表 2 自然科学基金委化学学部于2021年启用的合成化学申请代码及研究方向

Table 2 Application code and research areas of Synthetic Chemistry in the Department of Chemical Sciences of NSFC in 2021

二级申请代码	研究方向
B0101元素化学	d、f区元素化学、主族元素化学、有机磷化学、有机硅化学、机硼化学、有机氟化学、其他元素有机化学
B0102配位化学	金属有机化学、配位聚合物和金属有机框架、溶液配位化学、配位反应(过程)、模拟酶与仿生合成、功能配合物化学
B0103团簇与纳米化学	金属团簇、金属有机簇、多酸和金属氧簇、非金属团簇、其他团簇、纳米碳材料、纳米材料的合成及机理、纳米材料的表界面化学、纳米材料的相态和晶相、纳米材料的缺陷化学、纳米材料的组装及集成、纳米复合材料、纳米多孔材料、纳米薄膜材料、纳米及单原子催化材料、纳米生物医学材料、纳米光催化和电催化材料、纳米功能材料
B0104无机合成	无机固相合成、晶体生长化学、无机合成新方法、表界面合成化学、非常规条件下合成
B0105催化合成反应	金属催化合成反应、有机小分子催化
B0106不对称合成	不对称金属催化合成反应、不对称有机小分子催化、不对称合成
B0107天然产物全合成	天然产物全合成
B0108新反应与新试剂	新型有机试剂、有机合成新反应
B0109高分子合成	高分子合成、聚合反应与方法、高分子精准合成、聚合物拓扑结构、聚合物的化学反应
B0110超分子化学	组装基元、非共价相互作用和动态共价键、组装方法与机制、超分子组装结构、功能超分子体系、生物超分子体系
B0111仿生与绿色合成	生物催化与生物转化、模拟酶与仿生合成、光化学与电化学合成、可再生资源化学、温和条件下的化学转化
B0112功能分子/材料的合成	电功能导向分子/材料合成、光功能导向分子/材料合成、磁功能导向分子/材料合成、储能导向分子/材料合成、薄膜及分离功能分子/材料合成、生物及医用分子/材料合成、智能及特种功能材料
B0113结构与反应机制	结构表征方法与理论、反应机制及表征方法、反应活性中间体的结构及反应性

(7) 天然产物全合成(B0107)

本申请代码继承了原三级申请代码“B010306天然产物全合成”。对应于规划中2.2.1部分中的“生物活性分子与天然产物”。

具体研究方向包括: 天然产物全合成。

(8) 新反应与新试剂(B0108)

本申请代码为新增申请代码, 新增研究方向包括“新型有机试剂”和“有机合成新反应”。

具体研究方向包括: 新型有机试剂、有机合成新反应。

(9) 高分子合成(B0109)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0104高分子合成”及三级申请代码“聚合反应与方法”与“高分子精准合成”, 新增“高分子合成”、“聚合物拓扑结构”与“聚合物的化学反应”。对应于规划中2.2.1部分的“高分子”、2.2.2部分的“聚合、解聚反应与方法”与2.2.3部分的“聚合物反应机制”。

具体研究方向包括: 高分子合成、聚合反应与方

法、高分子精准合成、聚合物拓扑结构、聚合物的化学反应。

(10) 超分子化学(B0110)

本申请代码继承并调整了原二级申请代码“B0106超分子化学与组装”, 保留了“B010601组装基元”, 将原三级申请代码“B010602非共价相互作用于组装方法”与“B010603动态共价键化学”合并为研究方向“非共价相互作用和动态共价键”, 将原三级申请代码“B010604组装过程的动态调整”调整为“组装方法与机制”, 将原三级申请代码“B010605超分子复合物与聚合物”调整为“超分子组装结构”, 将原三级申请代码“B010606生命功能体系的组装”调整为研究方向“生物超分子体系”, 新增“功能超分子体系”。对应于规划中2.2.1部分的“超分子组装结构”、2.2.2部分的“表界面合成化学”与2.2.3部分的“超分子组装机理”。

具体研究方向包括: 组装基元、非共价相互作用和动态共价键、组装方法与机制、超分子组装结构、功能超分子体系、生物超分子体系。

(11) 仿生与绿色合成(B0111)

将原二级申请代码“B0107绿色合成”调整为新的申请代码“仿生与绿色合成”, 继承了原三级申请代码“B010701生物催化与生物转化”、“B010702模拟酶与仿生合成”、“B010705可再生资源化学”、“B010706温和条件下的化学转化”, 将原三级申请代码“B010703光化学合成”调整为“光化学与电化学合成”, 将原三级申请代码“B010704原子与步骤经济性反应”作为关键字并入“温和条件下的化学转化”. 对应于规划中2.2.2部分的“生物合成”、“仿生合成”与“再生资源化学与循环化学”.

具体研究方向包括: 生物催化与生物转化、模拟酶与仿生合成、光化学与电化学合成、可再生资源化学、温和条件下的化学转化.

(12) 功能分子/材料的合成(B0112)

本申请代码为新增代码, 并继承了原三级申请代码“B010206功能无机分子的设计与合成”、“B010307功能有机分子的设计与合成”. 合成化学的重要价值之一在于创制具有特殊物理化学性质与材料功能的分子和物质, 该新增代码的主旨在于发展先进、高效、精确的合成方法与策略, 在分子、超分子水平上构筑具有光、电、磁、热、声、力、超导、分离、催化、生物医用等特殊功能的分子基材料, 认识与理解功能分子从分子尺度到宏观尺度的性能演变和关联, 因此该新增代码对应于规划中2.2部分中的所有相关研究内容.

具体研究方向包括: 电功能导向分子/材料合成、光功能导向分子/材料合成、磁功能导向分子/材料合成、储能导向分子/材料合成、薄膜及分离功能分子/材料合成、生物及医用分子/材料合成、智能及特种功能材料.

(13) 结构与反应机制(B0113)

本申请代码为新增代码, 将原三级申请代码“B010302活性中间体”调整为“反应活性中间体的结构及反应性”, 新增“结构表征方法与理论”、“反应机制及表征方法”. 由于合成化学的结构表征与机制的目的是揭示合成化学反应基元反应步骤的机制——包括反

应过程中的电子转移和化学键断裂与形成机制, 总结规律并建立合成化学的科学理论, 为化学合成反应的精准调控、新化学反应的理性设计提供实验依据和理论基础, 因此该新增代码对应于规划中2.2.3部分中所有相关研究内容.

具体研究方向包括: 结构表征方法与理论、反应机制及表征方法、反应活性中间体的结构及反应性.

4 总结与展望

合成化学的成就是衡量各国化学科学研究水平的重要标尺. “十三五”期间, 根据合成化学的跨学科“大交叉”特点, 自然科学基金委化学科学部取消了原有二级学科设置, 设立合成化学这一领域, 将分散在各二级学科中的合成化学相关问题整合在一起, 促进各分支的交汇融通, 推进对合成化学中共性问题的研究.

然而, 我国合成化学还存在以下不足: (1) 合成方法的原创研究尚不多见, “中国牌”的合成方法较少; (2) 合成方法未能上升到理论高度, 各分支之间的交叉融合仍显不足, 距离理性设计和可控合成还有较大的提升空间; (3) 反应机制研究还未被广泛开展, 大多数反应机制工作仍然停留在自圆其说和逻辑自恰的层面, 未能揭示其本征规律; (4) 对先进科学方法的响应不够机敏和迅捷, 例如, 尚缺乏合成化学领域的大数据分析与人工智能方法研究, 缺乏相关技术对合成反应发现与方法开发的指导, 人工智能对合成设计的赋能不足; (5) 基础研究与产业化结合不够紧密, “卡脖子”的合成技术少有进展, 尤其缺少面向国家重大战略需求的精细化学品合成方法, 在品质提升等工艺细节方面离精益求精还有很大的发展空间.

建议合成化学领域学者能够更加系统地掌握相关研究分支(包括无机合成、有机合成、高分子合成、超分子合成等)的发展过程与演化逻辑, 进一步夯实理论基础, 引导变革性突破, 建立原创性和标志性的新型物质建构体系, 推动合成化学领域形成系统性、通用性理论认知.

致谢 在自然科学基金委和化学科学部的领导下, 化学一处坚持发扬民主、开门问策, 广泛听取相关领域专家学者的意见建议, 认真组织了合成化学“十四五”及中长期发展规划起草工作和申请代码调整工作. 我们谨向参与讨论和起草工作的所有人员表示诚挚的谢意! 向提出意见建议、亲自撰写、审读规划草案的所有专家学者表示诚挚的感谢! 向所有关心、指导这项工作的领导和同事表示诚挚的感谢!

参考文献

- 1 Brown TE, Lemay HE, Bursten RBE, Murphy C, Woodward P, Stoltzfus ME. Chemistry: the Central Science, 14th Ed. Harlow: Person Education Limited, 2018
- 2 Lu Y. *Huaxue Tongbao*, 2011, 74: 1076–1073 (in Chinese) [路甬详. 化学通报, 2011, 74: 1076–1073]
- 3 习近平. 在全国科技创新大会、两院院士大会、中国科协第九次全国代表大会上的讲话. 2016
- 4 Dai Y, Gao F, Wang C, Chen Y. *Acta Phys Chim Sin*, 2020, 36: 2003034 [戴亚飞, 高飞雪, 王翠霞, 陈拥军. 物理化学学报, 2020, 36: 2003034]
- 5 Zhang G, Fu X, Dai Y, Chen Y. *Acta Phys Chim Sin*, 2020, 36: 2003051 [张国俊, 付雪峰, 戴亚飞, 陈拥军. 物理化学学报, 2020, 36: 2003051]
- 6 Fu X, Huang Y, Cui L, Chen Y. *Acta Phys Chim Sin*, 2020, 36: 2004002 [付雪峰, 黄艳, 崔琳, 陈拥军. 物理化学学报, 2020, 36: 2004002]
- 7 Fu X, Dai Y, Huang Y, Cui L, Chen Y. *Acta Phys Chim Sin*, 2020, 36: 2004048 [付雪峰, 戴亚飞, 黄艳, 崔琳, 陈拥军. 物理化学学报, 2020, 36: 2004048]
- 8 Zhang G, Fu X, Zheng Q, Chen Y. *Sci Sin Chim*, 2020, 50: 681–686 (in Chinese) [张国俊, 付雪峰, 郑企雨, 陈拥军. 中国科学: 化学, 2020, 50: 681–686]
- 9 Kang Q, Cao X, Liu L, Li P, Wu C, Yang P, Cui L, Chen Y. *Sci Found China*, 2020, 34: 358–366 (in Chinese) [康强, 曹晓宇, 刘磊, 李鹏飞, 吴长征, 杨鹏, 崔琳, 陈拥军. 中国科学基金, 2020, 34: 358–366]
- 10 Gao R. *Guidelines for National Natural Science Foundation of China in 2020*. Beijing: Science Press, 2020 (in Chinese) [高瑞平等. 2020年度国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2020]

Layout of development and discipline of Synthetic Chemistry of National Natural Science Foundation of China

Shaodong Zhang^{1,2}, Hongcheng Lu^{1,3}, Qiang Kang¹, Yan Huang¹, Xuefeng Fu^{1*}

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

²School of Chemistry and Chemical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China

³School of Chemistry and Chemical Engineering, Huazhong University of Science & Technology, Wuhan 430074, China

Abstract: In order to optimize the layout of disciplines, the Department of Chemical Sciences of National Natural Science Foundation of China (NSFC) has initiated a reform of grant application code of B01 Synthetic Chemistry, which will be launched in 2021. Synthetic Chemistry is to create new molecules and substances, which provides the objects and research models for physical sciences; it also contributes in life sciences and applied sciences with fundamental knowledge and synthetic tools. The 14th Five-Year Plan & Mid-long Term objectives and development strategies of synthetic chemistry are thus briefly described herein, with the purpose of providing guidelines to the applicants.

Keywords: National Natural Science Foundation of China, synthetic chemistry, strategic development, discipline layout, application code

doi: 10.1360/SSC-2021-0047