**团簇构造、功能及多级演化重大研究计划2019年度项目指南**

　　团簇是介于原子/分子与宏观物质之间的多核聚集体，具有确定的组成原子数和结构，代表了凝聚态物质的初生态，是关联物质微观结构与宏观性质的理想模型，对深刻认识和理解物质转化规律具有重大意义。

　　一、科学目标

　　通过化学、物理、生命、材料、环境、信息等多学科交叉，发展新型团簇及其多级结构构筑的新概念、新策略、新方法和新反应，建立适于团簇高精度、高分辨表征的新技术，从原子水平揭示团簇特殊性质的结构基础与演变规律，理解团簇结构与功能的关联，制备功能团簇基材料与器件，解决基于团簇的变革性技术中的关键科学问题，促进相关学科的发展。

　　二、核心科学问题

　　本重大研究计划将聚焦团簇构效关系，探索物质结构与性能随团簇尺寸变化的规律，揭示团簇稳定性机制，理解多级团簇体系中主体与环境的作用机制，实现功能导向的多级团簇结构的精准构筑和宏量制备。

　　（一）团簇的稳定机制：具有特殊结构与独特性能的新型团簇的发现、团簇形成机理和稳定化机制的理解、各种化学键及弱相互作用的认知；

　　（二）团簇电子结构的规律：团簇结构随团簇尺寸的演变规律、团簇的“幻数”性、团簇的构效关系；

　　（三）多级团簇功能的调控原理：多级团簇功能与团簇内聚集态、团簇间相互作用、团簇与环境耦合的关系。

　　三、2019年度重点资助研究方向

　　针对原子团簇、分子团簇及其多级体系中的重要科学问题，发展团簇研究的新方法和新理论，揭示团簇的形成机制和构效关系，构造具有独特功能的团簇材料与器件。

　　（一）团簇多级结构的精准构筑。

　　1.新型团簇的精准合成和宏量制备。

　　建立团簇的定向设计、高效合成策略和宏量制备方法，认识和理解团簇稳定性机制，揭示团簇制备的调控规律。重点支持新团簇体系和新合成方法的研究。

　　2.新型团簇基功能材料的精准构筑。

　　利用团簇精确构筑功能材料，理解团簇内聚集态、团簇间相互作用、团簇与环境间相互作用的规律，揭示功能材料的构效关系，进而实现功能复合。重点支持新型团簇基功能材料的制备。

　　（二）团簇的电子结构及演化规律。

　　1.团簇理论和计算方法。

　　发展团簇的电子结构和稳定性理论，揭示团簇结构与性能的系统规律，开发团簇体系的计算方法和软件，理解大尺寸团簇的化学成键和电子结构。建立团簇结构的数据库，发展人工智能方法，指导团簇实验研究。重点支持团簇（特别是高核团簇和复杂团簇）电子结构理论和高效计算方法研究，注重团簇电子结构与材料性能的关联。

　　2.团簇表征方法和技术。

　　发展团簇束源技术，建立团簇表征与性能研究的新方法，揭示团簇成核机制和生长演化规律。重点支持高时空分辨的谱学方法与成像技术，原位研究团簇的结构和反应动力学。

　　（三）团簇的功能与应用。

　　1.团簇催化。

　　揭示团簇内核结构、配位结构、环境等因素对催化性能的调控机制，实现催化剂的理性设计。重点支持团簇催化机制研究，认识和理解酶活性中心的团簇催化体系，实现仿生固氮和光合等功能。

　　2.团簇基器件。

　　基于团簇精确可控的结构特性，设计团簇基能源、信息材料，制备基于新原理的高性能原型器件，探索规模化技术。重点支持团簇在能量转换、量子计算、分子电子学、量子精密测量与传感等领域的应用。

　　四、项目遴选的基本原则

　　本重大研究计划以原始创新为首要目标，以学科交叉研究为特征，旨在将相关研究项目联系起来，成为一个协调的综合“项目群”。申请书应论述与项目指南最接近的科学问题和创新目标，同时要体现交叉研究的特征以及对解决核心科学问题和实现项目总体目标的贡献。

　　科学问题明确、原始创新性强、学科交叉特征明显的申请项目，将以重点支持项目的方式予以资助；有创新研究思路、探索性强的申请项目，将以培育项目的方式予以资助。不支持跟踪性和简单拓展性研究。

　　五、2019年度资助计划

　　2019年度拟资助培育项目20-25项，直接费用资助强度约为80-100万元/项，资助期限为3年，培育项目申请书中研究期限应填写“2020年1月1日-2022年12月31日”；拟资助重点支持项目4-6项，直接费用资助强度约为300-400万元/项，资助期限为4年，重点支持项目申请书中研究期限应填写“2020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。

　　1.申请人同年只能申请1项重大研究计划项目（其中：重大研究计划项目中的集成项目和战略研究项目除外）；上一年度获得重大研究计划项目（不包括集成项目和战略研究项目）资助的项目负责人，本年度不得作为申请人申请重大研究计划项目。

　　2.申请和承担项目总数的限制规定。

　　（1）高级专业技术职务（职称）人员申请和承担项目总数：具有高级专业技术职务（职称）的人员，申请（包括申请人和主要参与者）和正在承担（包括负责人和主要参与者）以下类型项目总数合计限为 3 项：面上项目、重点项目、重大项目、重大研究计划项目（不包括集成项目和战略研究项目）、联合基金项目、青年科学基金项目、地区科学基金项目、优秀青年科学基金项目、国家杰出青年科学基金项目、重点国际（地区）合作研究项目、直接费用大于 200 万元/项的组织间国际（地区）合作研究项目（仅限作为申请人申请和作为负责人承担，作为主要参与者不限）、国家重大科研仪器研制项目（含承担国家重大科研仪器设备研制专项项目）、基础科学中心项目、资助期限超过 1 年的应急管理项目以及资助期限超过 1 年的专项项目[特殊说明的除外；应急管理项目中的局（室）委托任务及软课题研究项目、专项项目中的科技活动项目除外]。

　　（2）不具有高级专业技术职务（职称）人员申请和承担项目总数：作为申请人申请和作为项目负责人正在承担的项目数合计限为 1 项； 在保证有足够的时间和精力参与项目研究工作的前提下，作为主要参与者申请或者承担各类型项目数量不限。晋升为高级专业技术职务（职称）后，原来作为负责人正在承担的项目计入申请和承担项目总数范围，原来作为主要参与者正在承担的项目不计入。

　　3.计入申请和承担项目总数的部分项目类型的特殊要求。

　　（1）优秀青年科学基金项目和国家杰出青年科学基金项目申请时不计入申请和承担总数范围；正式接收申请到自然科学基金委作出资助与否决定之前，以及获得资助后，计入申请和承担总数范围。

　　（2）基础科学中心项目申请时不计入申请和承担总数范围；正式接收申请到自然科学基金委作出资助与否决定之前，以及获得资助后，计入申请和承担总数范围。基础科学中心项目负责人及主要参与者（骨干成员）在结题前不得作为申请人申请重大研究计划项目。

　　（3）国家重大科研仪器研制项目（部门推荐）获得资助后，项目负责人在准予结题前不得作为申请人申请重大研究计划项目。

　　（三）申请注意事项。

　　1.申请书报送日期为2019年9月16日-9月20日16时。

　　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《2019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“重点支持项目”或“培育项目”，附注说明选择“团簇构造、功能及多级演化”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。

　　培育项目和重点支持项目的合作研究单位不得超过2个。

　　（5）申请人应当按照重大研究计划申请书的撰写提纲撰写申请书，在“立项依据与研究内容”部分，需要首先说明本次申请符合指南中哪一个重点资助的研究方向。在论述部分，应明确提出假说，论述其科学意义和依据，以及对解决本重大研究计划核心科学问题、实现本重大研究计划科学目标的贡献。

　　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《2019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》《项目资金管理有关问题的补充通知》以及《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的具体要求，按照“目标相关性、政策相符性、经济合理性”的基本原则，认真编制《国家自然科学基金项目预算表》。多个单位共同承担一个项目的，项目申请人和合作研究单位的参与者应当分别编制项目预算，经所在单位审核后，由申请人汇总编制。

　　（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，下载打印最终PDF版本申请书，并保证纸质申请书与电子版内容一致。

　　（8）申请人应及时向依托单位提交签字后的纸质申请书原件以及其他特别说明要求提交的纸质材料原件等附件。

　　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；对申请人申报预算的目标相关性、政策相符性和经济合理性进行审核，并在规定时间内将申请材料报送国家自然科学基金委员会。具体要求如下：

　　（1）应在规定的项目申请截止日期（2019年9月20日16时）前提交本单位电子申请书及附件材料，并统一报送经依托单位签字盖章后的纸质申请书原件（一式一份）及要求报送的纸质附件材料。

　　（2）提交电子版申请书时，应通过信息系统逐项确认。

　　（3）报送纸质申请材料时，还应提供由法定代表人签字、依托单位加盖公章的依托单位科研诚信承诺书，并附申请项目清单，材料不完整不予接收。

　　（4）可将纸质申请材料直接送达或邮寄至国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组。采用邮寄方式的，请在项目申请截止时间前（以发信邮戳日期为准）以快递方式邮寄，以免延误申请，并在信封左下角注明“重大研究计划项目申请材料”。

　　4.申请书由国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组负责接收，材料接收工作组联系方式如下：

　　通讯地址：北京市海淀区双清路83号，国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组（行政楼101房间）

　　邮编：100085

　　联系电话：010-62328591

　　5.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三处

　　联系电话：010-62327111

　　（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一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。