附件2

化学科学部重大项目指南

2020年化学科学部共发布8个重大项目指南，拟资助7个重大项目。项目申请人申请的直接费用预算不得超过1800万元/项。申请书的附注说明选择相关重大项目名称，例如“非常规激发染料的构效调控及产品工程科学基础”。

“非常规激发染料的构效调控及产品工程科学基础”

重大项目指南

染料对光的选择性吸收是其本征特性，因而总是与光记录、光存贮、光显示及光成像直接联系，是多个新兴产业的关键化学品。随着相关领域发展，染料分子在常规条件下的激发态行为和能量弛豫规律逐步被揭示出来。但在极端条件下，特别是在高光子能量（如极紫外）和低光子能量（如近红外、超声波、偏振光）等非常规条件下，对染料分子激发态的形成、调控和应用研究极为薄弱。极紫外可以提供高的分辨率、超声波能提供更深的穿透力，这些赋予了非常规激发染料特殊的应用功能。因此，拓展传统紫外-可见光波长范围的染料波长，开展非常规激发和吸收染料分子的研究，对于光刻、显示等新兴产业发展，具有重要意义。

一、科学目标

项目拟围绕非常规激发染料结构-性能调控的关键科学问题，特别是在高能量光子（极紫外）和低能量光子（近红外、超声、偏振光）等特种激发条件下，染料分子对激发能的吸收和响应规律，通过分子结构精准设计、调控激发态的能量释放途径（如发光、电子转移、能量转移、催化反应等），实现光刻、显示等新兴产业领域的产品分子设计创新，为支撑相关产业发展提供科学与技术基础。

二、研究内容

（一）非常规激发理论及分子体系设计。

非常规激发染料的激发效率是实现功能的基础。重点研究在高光子能量或低光子能量条件下，不同分子的激发响应性，包括形成激发态的效率、光引发的电子转移、能量转移或化学反应效率；揭示分子结构与目标性能(包括耐受性)之间的规律，形成若干性能优异的染料母体分子平台，为产品分子设计提供理论依据。

（二）极紫外光刻材料设计及制备。

聚焦极紫外光敏分子结构与极紫外光吸收截面的关系，探索极紫外光引发的新型分解或聚合反应、过程中电子或能量转移形成的催化机制，研究新型结构的极紫外光敏分子及其光刻胶的制备、生产过程对超高分辨率性能的影响因素，形成新型极紫外光刻胶的关键生产工艺，为其规模化生产提供科学技术基础。

（三）功能染料工程化及其在光电材料中的应用基础。

分子的稳定性是染料工程化应用的前提。需揭示“光-热-机械”复杂稳定性与染料分子结构的映射机制，包括不同光能量、热效应和机械效应对染料稳定性和应用性能的调控规律，研究染料分子结构对光刻胶流变学性能和对光引发剂光化学反应性能的影响机制，探索提高彩色光刻胶分辨率的有效途径，建立与终端产品服役条件相一致的工程技术体系和可靠性评价准则。

“分子光子学材料与激发态过程调控”

重大项目指南

光子学是研究以光子作为信息和能量载体的科学，涉及光的产生、传输、探测、放大和显示等应用。和无机光子学材料相比，分子光子学材料在光学性能、柔性加工和生产成本等方面展现出独特的优势。设计合成同时具备优异光学性质和电荷输运能力的分子材料，从微观角度深入认识分子材料中的激发态过程，结合器件构型设计优化制备工艺和性能指标，将推动分子光子学材料在相关产业尤其是新型显示领域的应用。“分子聚集态下特异性激发态过程对光子学性能的调控机制”与 “不同光子学功能中涉及的激子与光子的相互作用原理”是分子光子学研究中的关键科学问题。“新型光子学分子的理性设计与高效合成”与“光子学功能导向的分子材料组装与器件集成”是本领域的重大需求。本重大项目旨在联合分子材料合成、激发态理论、光谱学和光电器件等方面的科学家进行攻关，从微观角度深入认识分子材料中的激发态动力学过程，结合器件构型设计，优化制备工艺和性能指标，发挥分子光子学材料在光学性能、溶液加工、柔性集成等方面展现出独特的优势，推动分子光子学在相关产业尤其是新型显示领域的应用。

一、科学目标

以有机分子特有的“单线态和三线态激子过程调控”为主线，聚焦新材料合成制备和高性能器件集成两大方向，解析微纳体系中激发态物理化学过程，指导新型分子光子学材料骨架结构及其微纳晶体的设计合成，拓展高性能有机微纳激光和有机电致发光在显示器件方面的应用。以此为基础，形成在国际上有重要影响的研究团队，提升我国在分子光子学前沿交叉方向上的整体水平。

二、研究内容

本项目围绕“分子光子学材料的结构-性能关系”开展以下研究：

（一）高性能光子学材料的分子设计与可控合成。

以调控分子能级与激发态过程为导向，设计合成兼具高载流子迁移率和高固态发光效率的分子光子学材料；通过调控分子间弱相互作用充分运用其组装性能，制备形貌、结构和性能可控的分子聚集体，为发展分子光子学奠定材料基础。

（二）有机微纳体系的激发态调控与过程研究。

准确理解分子光子学材料体系中激发态动力学、载流子扩散动力学和能级调控等理论，揭示其中载流子传输性能和光学特性之间的平衡和制约关系；通过光、电、磁和热等多种外场手段强化激发态下的激子传输与电子转移和能量传递过程，以及激子和光子的强相互作用与耦合过程。

（三）高性能有机微纳激光材料与器件。

在新型分子光子学材料中实现覆盖可见光谱的受激辐射，设计新的微纳结构单元作为光学谐振腔，得到激光波长和模式可调可控的有机微纳激光；开发微纳晶定向图案化制备新工艺，发展微纳激光阵列大面积集成方法，探索基于分子光子学材料的激光平板显示技术。

（四）有机分子电致发光与显示器件。

以分子光子学的激发态动力学为指导，设计制备高激子利用率和窄谱带发射的发光器件；构建全新的器件模型，探索激发态传输及电荷陷阱效应等基本物理过程和规律，完善和发展电致发光和分子器件的相关理论，展示分子光子学材料在显示原型器件上的应用。

“电解水制氢与绿色化工耦合的科学基础”重大项目指南

面向可再生能源高效利用和绿色化工的重大需求，针对电解水与绿色化工耦合所涉及的关键科学问题，研究电解水过程中活性物种的生成与调控、电解水与有机物氧化还原反应的耦合过程，探究多尺度流动与传递对电化学过程的影响机制，构建若干规模化电解水与有机物合成耦合反应体系，形成能源化学与绿色化工领域新的发展方向。

一、科学目标

通过高效电解水耦合加氢/氧化的催化过程，实现碳-氢键、碳-卤键、碳-碳键以及碳-氧键等的定向转化，揭示电/光电作用下电极界面氢氧等中间物种的生成机理及其与有机物反应途径，建立选择性合成高附加值产物的实验方法和理论体系，构建电解水耦合化工产品绿色合成系统；发展新型光电化学反应器，阐明多相反应过程中的流动、混合、传递对能量与物质转化的作用规律，实现新能源利用与绿色化工耦合的应用示范。

二、研究内容

（一）电解水耦合氧化与高效制氢。

针对规模制氢与大宗化学品生产的耦合，研究多相界面活性氧生成与转化机理，以电极组成和界面性质调控活性氧在阳极表面的浓度、活性和能量，匹配有机物在电极表面的传质吸附特征和氧化反应能级；发展新型结构化电极，实现有机相、水相和气相在电极表界面的均匀分布、高效传递与反应耦合；研究有机相对隔膜性能的影响，提高隔膜稳定性；研究阳极活性氧的快速转化对水分解制氢过程的促进作用，并在工程化研究装置上实现耦合氧化高效制氢。

（二）电解水耦合加氢与氧化。

针对阴极制氢与耦合加氢之间的转换，利用活性氢和活性氧分别对有机底物进行加氢和氧化，合成高端精细化学品，提高能量和物质的利用效率；研究阴极活性氢的生成及其析氢/加氢反应的竞争机制，提高目标产物选择性；根据阴极和阳极反应的反应机制和动力学特性，设计新型电极及反应器，优化操作条件、探索成对电合成反应体系中电解反应与产物分离的协同机制。

（三）光电协同分解水与氧化/加氢耦合。

研究光促电解水制活性氧/氢和有机物选择性氧化/加氢的新型绿色合成方法，探究光电极对光子的能量利用以及动力学，揭示光促电解水的本征活性和动力学过程对有机反应选择性调控的内在机制，进一步促进水分解和有机物氧化/还原的耦合。

（四）制氢耦合绿色化工的过程强化与系统集成。

研究多尺度流动、混合和传递特性对电化学反应的影响，获得从电极、单池到系统的反应与传递耦合规律；研究反应与分离耦合机制，揭示系统内单元结构与性能的影响，确定单元间的衔接原则，建立电化学耦合反应系统的放大模型与设计方法，实现1~2个耦合反应体系工程化示范。

“固体结构的化学调控与功能强化”重大项目指南

固体物质在信息、能源、国防、机械、电子、医学等领域具有广泛的应用。物质的性能不仅取决于化学组成、相态、晶体结构，还受限于局域结构、化学有序、电荷有序、磁有序等。针对关系国家重大需求的电输运材料、铁电/铁磁体、储能材料等，利用先进大科学装置，多层次揭示固体材料结构与功能间的关系，运用化学手段调控固体结构，实现性能显著提升或获得新功能。

一、科学目标

通过极端条件合成、化学压力（Chemical Pressure）、缺陷设计和复相匹配等手段，实现对固体结构的化学调控；充分利用现代表征技术和方法，解析固体的晶体结构、局域结构、电子结构和声子结构等；创制系列新型电输运、高性能铁电/铁磁、高效储能等新型固体功能材料。

二、研究内容

（一）极端条件下特殊功能固体材料的合成。

在高温、高压或超强外场下，合成常规条件下难以得到的特殊结构和功能的固体材料；发展基于次级结构、堆积模块等合成砌块的可控合成方法，在多元体系中筛选超导、快离子导体、高能量密度等特殊功能材料，揭示其反应历程。

（二）化学压力调控结构与强化功能。

利用相界面应变、异质化学元素引起的局域结构畸变、离子调控等化学压力方法，实现晶体结构及晶格应变的微观尺度调控，建立化学压力调控结构的精准化学合成方法，揭示固体中元素分布、化学有序、电荷有序、化学成键和晶格变化，阐明结构-相态-性能的关联。

（三）缺陷调控结构与新型电输运固体。

通过化学掺杂、拓扑反应和玻璃结晶等多种途径，系统研究固体材料中缺陷的可控引入及其对晶体结构、电子结构的影响；结合多种技术手段建立缺陷组成、浓度、分布等表征方法；研究缺陷对固体材料中电子和离子输运性质的影响；从化学成键、离子间相互作用阐述固态离子导体中缺陷稳定与离子迁移机制；基于缺陷在性能上的构效关系，设计合成新型电子/离子导体等材料。

（四）复合固体结构调控与电极材料功能强化。

发展复合固体结构精准化学调控的新方法，研究单组分及复合固体结构与电子态之间的协同效应，以及轨道耦合、电荷转移、局域结构等对复合结构的影响规律；多层面认识能源复合固体材料的构效关系，提出高效电极材料等复合固体的设计原则，合成具有协同功能增强效应的电极复合材料。

“基于纳米孔道电荷传输的单分子单细胞精准测量”

重大项目指南

细胞中分子间通过电荷传输及能量有序交换发生的各类反应都是在极小且拥挤的空域和极短的时域内进行的，并控制着单个生物分子功能的执行、反应的精准调节以及能量的高效传递和转化等。纳米孔道限域空间提供了最逼近实际生命体系中分子反应行为的场所，可实现在极短的时域内进行单个分子的动态测量。然而，电子、质子、离子及分子在纳米孔道限域界面内的传输，常常表现出与宏观界面上完全不同的限域增强特性。因此，在生命分析中利用纳米孔道的立体限域空间及瞬态电荷传输特性，可获得极高的时空分辨，实现单分子、单细胞等单个体的精准测量，为进一步探索基础生命化学领域新现象、新规律和新知识提供了新途径。

本重大项目拟聚焦于具有纳米级孔道结构这一最基本的限域电荷传输界面，探索传感界面结构、电荷传输、测量精准度之间的内在关系，提出原创的纳米孔道测量新原理，将生命分析测量从宏观界面推进到纳米限域界面，从分子整体行为测量推进到单个分子、单个细胞差异性研究，有望成为现有基础分析化学研究方法和理论进一步发展的突破口，催生和引领蛋白质单分子测序、生物化学反应动态测量以及高通量疾病早期筛查等方向的研究。

一、科学目标

项目围绕“具有纳米级孔道结构”的限域电荷传输界面，突破现有对生命体系微弱瞬态过程测量的瓶颈，建立原创的纳米孔道界面分析化学理论与方法，构建具有单分子灵敏度和亚纳米空间分辨能力的原位、无损纳米孔道电荷传输测量器件，在单分子、单细胞水平上揭示电子、质子、离子、分子等相互作用及其能量转化过程，以期在单分子、单细胞水平上探索基础生命化学。

二、研究内容

（一）纳米孔道测量界面的可控构建。

以生物蛋白质、无机材料、有机大分子等为基本构筑单元，探索多元纳米孔道化学结构特征与电荷载体间的相互作用，发展空间限域电荷场扰动方法及可控单分子界面修饰方法，增强纳米孔道测量界面内多个探针基团的协同测量效应，从而构建每一个基团都精确可控的纳米孔道测量界面。

（二）纳米孔道单个体测量的机制研究。

探索传感界面结构、电荷传输、测量精准度之间的内在关系，调控限域空间内电子、质子、离子、分子的传输过程，建立基于纳米孔道界面电荷传输测量的特异性信号增强放大新机制，实现高通量、定性及定量测量生物分子的结构变化、分子间相互作用变化及其引发的纳米孔道界面内电荷分布差异和瞬态能量变化等。

（三）纳米孔道单细胞单分子原位测量研究。

发展适用于单个活细胞内单个分子可控递送和原位分析的方法，建立纳米孔道单细胞成像测量的新方法和谱学研究的新策略，深度解析由单个分子引起的单细胞表型特征；发展纳米孔道单分子计数与光学实时检测新技术，实现生理浓度范围单分子光学检测，阐释生物分子相互作用的单分子反应机制和动力学，从而在单分子、单细胞水平实现疾病早期筛查。

（四）纳米孔道界面的高时空分辨测量方法及系统。

突破现有生命分析方法的时空测量极限，发展具有高时空、高能量分辨，实时原位、无损的电子、电荷、离子测量新方法、新器件及新系统，在纳米孔道限域测量界面上实现单个生物分子反应中间体、反应路径、反应选择性等的瞬态测量，为蛋白质单分子测序以及重要生物化学反应研究提供技术支撑。

“面向重要化工分离的金属-有机框架材料设计及过程

调控机制”重大项目指南

分离是化工生产的关键技术之一。以烷烃/烯烃分离（如乙烷/乙烯等）、同分异构体分离（如正构烃/异构烃等）、二氧化碳捕获为代表的工业分离过程，其规模均在千万吨级，关系经济社会发展及国家战略需求。传统热驱动分离过程能耗高，若以非热驱动的吸附或膜分离过程替代热驱动分离过程，可望大幅度降低能耗。金属-有机框架材料拥有庞大的组分/结构单元库，其可设计性为吸附与膜分离带来机遇。然而，金属-有机框架材料目前尚未实现分离工业应用，亟待在基础科学与工程技术方面取得突破。本指南以重要的化工分离过程为导向，拟围绕金属-有机框架材料设计、吸附材料/分离膜可控制备、过程调控机制等关键科学问题，实现高效、高选择性、高稳定性分离，推动分离科学与技术的理论创新与技术进步。

一、科学目标

以金属-有机框架材料设计制备与重要工业分离过程调控为核心，揭示吸附分离与膜分离机理，建立分离材料组成-结构-性能设计方法；提出吸附材料与分离膜晶粒/晶界调控策略，突破分离通量与选择性的博弈限制；开展放大制备与组件集成研究，为金属-有机框架材料吸附与膜分离的工业应用提供科学支撑。

二、研究内容

（一）金属-有机框架材料精准设计与制备。

基于计算化学、“网格化学”及构筑模块策略，开展材料分子基元组成、拓扑结构、微观孔结构设计；基于先进晶体工程手段，实现材料高通量制备与结构表征；基于探针分子吸附，揭示材料与被分离分子相互作用机制及动态响应规律，建立理论与实验相结合的晶体材料构筑方法，创制具有工业应用前景的吸附与膜分离材料。

（二）金属-有机框架吸附材料结构调控与分离应用。

基于分子构筑单元设计，实现材料孔道结构、表面基团定向调控；基于单组分静态吸附与多组分动态分离的系统评价体系，开展吸附材料分离性能和构效关系研究，获得吸附分离热力学、动力学规律，反馈指导材料精准设计与吸附性能调控，实现烷烃/烯烃分离等体系的工业性试验；完成吸附材料的规模化制备及吸附分离过程的设计，为突破其在吸附分离工业中的应用提供科学基础。

（三）金属-有机框架分离膜可控制备与分离应用。

基于微区反应设计与分子组装技术，实现分离膜孔结构、择优取向、堆砌单元、晶界结构的精准调控，创新膜的工程化制备方法；在工业性实验装置上开展操作条件（温度、压力等）可控的多组分膜渗透分离在线评价，深入揭示膜分离机制，突破分离通量与选择性的博弈限制，获得工程放大规律；完成分离膜放大制备与组件集成设计，实现二氧化碳捕获等工业应用示范。

“面向学科前沿交叉的金属卡宾化学”重大项目指南

金属卡宾结构独特，其反应具有高效、多样以及可控等特点，受到人们的极大关注，相关研究对于合成化学、化学生物学以及有机材料等领域产生重要影响。对于金属卡宾的结构及其性质的理解不仅是金属有机化学基础理论研究的核心内容，也是发展具有高效性和多样性的合成反应的关键。金属卡宾丰富的反应性也为其在前沿交叉领域的应用带来新的机遇和挑战。

一、科学目标

针对金属卡宾的特性以及目前该领域发展的现状，本项目以探讨新型金属卡宾的发现及产生、结构以及反应性为出发点，发展基于金属卡宾的新反应、新方法，拓展其在功能有机分子合成、高分子聚合、药物合成以及化学生物学等交叉领域中的应用。通过项目的实施，推动合成化学以及结构理论的发展，并通过金属卡宾化学与生命科学的衔接为生物大分子化学修饰，化学蛋白质组学以及新药研发等提供新工具和新技术。形成一支在国际上具有重要影响的研究队伍，进一步巩固我国在金属卡宾领域的国际影响力。

二、研究内容

（一）新型金属卡宾的合成及其结构、反应性研究。

围绕过渡金属催化的卡宾转移机理研究，设计、合成、表征一系列活泼的金属卡宾中间体，包括铁卡宾、钴卡宾、镍卡宾、铜卡宾、钌卡宾、锇卡宾、钯卡宾、金属烷基卡宾以及金属双卡宾等；进一步通过实验和理论计算等手段，获取金属卡宾的结构信息和提出新的反应模式。研究含氟卡宾与含氟金属卡宾的合成、结构表征及其在含氟有机分子合成中的应用。

（二）基于金属卡宾的碳-碳键以及碳-杂原子键构建。

发展基于金属卡宾的碳-碳键以及碳-杂原子键构建新方法，包括金属卡宾参与的碳-碳键选择性切断与重组、碳-氢键的官能化、金属卡宾的不对称催化反应等。研究金属卡宾反应在高分子聚合中的应用，包括卡宾经典反应以及卡宾偶联反应为基础的高分子聚合，过渡金属催化的卡宾聚合、卡宾－烯烃共聚等。研究金属卡宾反应在高分子后官能化中的应用。

（三）金属卡宾反应在新药研发以及化学生物学中的应用。

发挥金属卡宾反应类型多样性的特点，开发具有生物兼容性的高效金属卡宾反应，为生物大分子化学修饰提供具有化学特征的新工具和新技术，为新药研发提供基础性和前瞻性的科学技术储备。包括应用金属卡宾参与的多组分反应实现生物活性小分子的多样性合成、应用金属卡宾反应对药物及生物活性分子进行后期修饰以及开发针对动态修饰的新药物靶标和相应的干预小分子、基于金属卡宾开发新一代化学蛋白质组学工具探针等。

“锂同位素萃取分离的科学、技术与应用”重大项目指南

锂同位素是十分重要的能源材料和国防战略物资。在清洁新能源领域，锂同位素是新一代钍基熔盐裂变堆、可控热核聚变堆和压水反应堆中的核心原料及调节剂。随着我国先进核能的快速发展，寻找更安全、更高效、易于工业化放大生产的锂同位素分离方法迫在眉睫。本项目采用“基础研究—应用研究—产业化”贯通式研究模式，开展有机萃取法分离锂同位素的科学、技术与应用研究。通过有机化学、物理化学、分离工程、人工智能、自动化控制等多学科交叉融合，解决萃取分离过程中的萃取剂分离效率低、稳定性不足、合成制备难、萃取分离机制不明确、萃取串级工艺难等重要科学与技术难题。促进有机萃取法分离锂同位素的新方法在基础理论和工程化应用方面上升到新的高度，促使原始创新技术在满足国家重大需求的任务中发挥重要科技支撑作用。

一、科学目标

本项目围绕锂同位素萃取分离过程中的科学、技术与应用关键问题，从发展新型、高效的萃取剂和可实用化萃取工艺为核心，解决从基础研究到产业化应用过程中的关键科学和技术问题。阐明锂离子在不同介质间转移的能量变化与动力学规律；揭示有机萃取剂分子结构与同位素分离性能的重要构效关系；阐明萃取剂分子在长期酸、碱、氧气以及辐照等条件下的降解规律；设计并优化萃取剂分子结构，发展若干具有自主知识产权的高性能新型萃取剂材料，锂同位素分离系数α大于1.030，在连续萃取分离条件下能稳定运行8000小时；发展串级萃取分离锂同位素的化工工艺，实现连续多级锂同位素的萃取富集浓缩，建设锂同位素萃取分离的工业化示范线。

二、研究内容

（一）萃取剂分子结构设计、合成与性能评价。

通过分子模拟软件设计并优化新型萃取剂分子结构；发展萃取剂分子的多样性、高效性合成方法，批量制备专用萃取剂；利用氟原子和含氟基团的独特效应，开展有机萃取剂、协萃剂、稀释剂等分子的高选择性氟化方法研究，建立含氟萃取剂、协萃剂、稀释剂等组成的独特萃取体系；建立萃取剂分离锂同位素的综合性能评价方法，考察萃取剂的分离系数、分配系数、萃取负载量等指标；调节并优化萃取体系的组分配方，揭示其对锂同位素分离效率的影响规律（包括协萃剂、改质剂、溶剂、盐效应等影响因素）；根据工业化应用的要求，结合萃取剂分子的多方面性能，综合评价并筛选得到综合性能优秀、适合于工业应用的萃取剂分子。

（二）萃取分离机制及萃取剂结构与性能关系研究。

研究液-液两相界面锂离子迁移动力学；阐明两种锂同位素之间极化率、迁移率和溶剂化作用的差别；锂离子在萃取介质中的迁移、扩散及溶剂化过程中的复杂结构和能量变化；锂离子在不同萃取介质间转移的动力学规律；采用计算机模拟两相锂离子传输过程中的动力学和热力学问题等。采用人工智能技术，研究萃取剂结构与溶解性、同位素分离系数、萃取能力、转相能力等之间的关系，并得出构效关系规律；利用人工智能技术，对萃取剂的结构与化学稳定性、辐照稳定性之间关系进行模拟，并得出构效关系规律。

（三）有机萃取法分离锂同位素的工业应用。

研究不同类型萃取剂在长期化工应用中的化学和辐照稳定性，阐述萃取剂分子的在酸、碱、氧化以及辐照等条件下的降解规律及降解产物；研究萃取法分离锂同位素的全流程串级萃取化工工艺；设计并优化同位素分离专用离心萃取机的机械结构及串级连接方式；研究串级萃取试验过程中的自动化控制技术、工艺稳定控制技术及产品的后处理纯化技术；在多级串级萃取试验装置系统上，进行锂同位素萃取分离的连续分离富集试验，连续稳定获得富集产品；建设锂同位素萃取分离的工业化示范线，开展工业应用示范的技术研究。