**“团簇构造、功能及多级演化”重大研究计划2020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，具有确定的原子组成和化学结构，代表了凝聚态物质的初生态，是关联宏观性质和物质微观结构的理想模型，对深刻认识和理解物质转化的规律具有重大意义。

　　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，建立团簇高精度和高分辨表征的新技术，在原子水平上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）团簇的稳定性机制。

　　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。

　　团簇结构及稳定性随团簇尺寸的演变规律、团簇的“幻数”特性、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、簇际相互作用、团簇与环境耦合的关系。

　　三、2020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（特别是生物体系）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、稳定性规律和构效关系，构造具有独特功能的团簇材料与器件。本重大研究计划2020年度重点资助以下研究方向：

　　（一）团簇多级结构的精准构筑。

　　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。理解团簇内聚集态、簇际相互作用、团簇与环境及外场间相互作用的规律，揭示团簇基功能材料的构效关系，进而实现功能复合。重点支持新型团簇体系的合成方法和多级组装结构的研究，特别注重主族元素团簇、f区元素团簇、模拟酶团簇、中性团簇及团簇组装的功能材料体系。

　　（二）团簇的电子结构及演化规律。

　　发展团簇的电子结构和稳定性理论，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。建立团簇结构数据库，发展人工智能方法，指导团簇实验研究。发展先进的团簇束源技术，建立团簇表征新方法，揭示团簇热力学性质、成核机制和生长演化规律。重点支持高核团簇和复杂团簇的电子结构理论和高效计算方法、高时空分辨的谱学方法与成像技术、团簇结构和动力学的原位研究方法。

　　（三）团簇的功能与应用。

　　设计团簇基能源与信息材料，揭示团簇内核结构、配位结构、簇际相互作用、环境和外场等因素对材料性能的调控规律，实现团簇功能的理性设计，开展高性能原型器件的探索研究。重点支持团簇在量子计算、分子电子学、人工光合作用、温和固氮、能量转换、原子制造、量子精密测量与传感、生物医药等领域的应用，特别注重具有重大应用前景的团簇组装材料如量子材料、信息材料和催化材料等研究。

　　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、2020年度资助计划

　　2020年度拟资助培育项目25-35项，直接费用资助强度约为80万元/项，资助期限为3年，申请书中研究期限应填写“2021年1月1日-2023年12月31日”；拟资助重点支持项目5-7项，直接费用资助强度约为300-400万元/项，资助期限为4年，申请书中研究期限应填写“2021年1月1日-2024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）除特别说明外，申请当年资助期满的项目不计入申请和承担总数范围。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2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、原创探索计划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]。

**具有高级专业技术职务（职称）的人员作为主要参与者正在承担的 2019 年（含）以前批准资助的项目不计入申请和承担总数范围，2020 年（含）以后申请（包括申请人和主要参与者）和批准（包括负责人和主要参与者）项目计入申请和承担总数范围。**

　　（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。

　　（4）原创探索计划项目从预申请开始直到自然科学基金委作出资助与否决定之前，不计入申请和承担总数范围；获资助后计入申请和承担总数范围。

　　（三）申请注意事项。

　　1.本重大研究计划2020年度项目申请书报送日期为2020年10月9日 - 10月13日16时。本重大研究计划项目申请采取无纸化申请。

　　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《2020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/（以下简称信息系统；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）申请人应当在摘要第一句注明申请内容对应的本指南重点资助研究方向中确切的研究重点，同时在“立项依据与研究内容”部分论述与项目指南最接近的科学问题的关系，以及对解决核心科学问题和重大研究计划总体目标的贡献。

　　项目申请书选题应符合本重大研究计划的实施原则，具有明确的关键科学问题。申请书的目标和内容应瞄准核心科学问题，突出有限目标，强调创新点与前沿基础科学问题的研究。

　　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《2020年度国家自然科学基金项目指南》中预算编报要求的内容，严格按照《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》《关于国家自然科学基金资助项目资金管理有关问题的补充通知》《关于国家自然科学基金资助项目资金管理的补充通知》《关于进一步完善科学基金项目和资金管理的通知》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。申请材料中所需的附件材料（有关证明信、推荐信和其他特别说明要求提交的纸质材料原件），全部以电子扫描件上传。确因疫情防控需要暂时无法提供的，请申请人在申请书正文中“其他需要说明的问题”中注明，并上传依托单位出具的说明材料扫描件。自然科学基金委将根据情况通知依托单位后续提供。

　　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，对申请人编制项目预算的目标相关性、政策相符性和经济合理性进行审核，并在规定时间内提交申请材料至自然科学基金委。具体要求如下：

　　（1）应在项目集中接收工作截止时间前（2020年10月13日16时）通过信息系统逐项确认提交本单位电子申请书及附件材料，无需报送纸质申请书。项目获批准后，将申请书的纸质签字盖章页装订在《资助项目计划书》最后，一并提交。签字盖章的信息应与电子申请书严格保持一致。

　　（2）依托单位完成电子申请书及附件材料的逐项确认后，应于申请材料提交截止时间前通过信息系统上传本单位科研诚信承诺书的电子扫描件（请在信息系统中下载模板，打印填写后由法定代表人亲笔签字、依托单位加盖公章），无需提供纸质材料。

　　4.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材料化学与能源化学学科

　　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1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，并认真开展学术交流。