**碳基能源转化利用的催化科学重大研究计划2021年度项目申请指南**

　　碳基能源转化利用的催化科学重大研究计划面向碳基能源高效利用的国家重大战略需求，针对催化表界面化学所涉及的关键科学问题开展系统深入的研究。本重大研究计划注重催化剂结构、表界面特性以及外场环境对催化剂表界面电子态的影响和调控，重点关注能源小分子高效转化相关的C-H键和C-O键的催化活化及C-C偶联等反应；创新碳基能源利用的化工过程，优化反应历程，以达到高效、环保和CO2低排放的目标；建立和发展高分辨表征手段，实现在实际催化反应条件下对反应过程进行精准表征；发展新的理论方法，实现在接近真实催化反应条件下的理论模拟和预见，为未来在分子、原子水平上对催化剂活性中心进行理性设计提供指导。

　　一、科学目标

　　本重大研究计划拟通过化学、化工、数理、材料等多学科交叉融合，针对碳基能源分子的高效转化，在催化相关的理论和实验的创新上取得突破，充分发挥和放大我国在微纳米和表界面研究领域的优势，力争在催化表界面理论研究方面形成特色；着重解决涉碳化学键催化活化、合成气高效转化和碳基小分子电催化转化等过程的关键科学问题，推动碳基能源的产业革命；造就高水平、结构合理的研究队伍，培养精于理论和实验科学研究的优秀青年学者，大力提升我国在这一领域的竞争力和国际地位。

　　二、核心科学问题

　　本计划针对碳基能源转化利用的催化科学，围绕以下三个核心科学问题展开研究：

　　（一）催化剂固体表界面局域原子和电子结构的精准设计与构建。

　　（二）碳基载能分子在表界面的选择活化和定向转化。

　　（三）催化剂固体表界面特性与环境和外场的相互作用机制及调控规律。

　　三、2021年度重点资助研究方向

　　进一步聚焦碳基能源转化利用的关键催化科学问题，针对合成气直接转化、CO2和甲烷催化转化等过程，加强理论研究并与实验相结合，注重发展和利用原位表征新技术和新方法。2021年拟在前6年资助项目的基础上，对以下方向进行集成：

　　（一）研究电催化剂和电解质的构效关系，认识相关表界面电催化反应机理，揭示电催化过程中多相多尺度作用机制和调控规律，实现CO2和CH4活化和定向转化为烯烃或其它高值化学品的高效电催化过程，并达到工业级电流密度（不小于0.5 A/cm2）。

　　（二）针对甲烷活化反应，发展催化剂表界面结构调控催化特性的新方法，认识C-H高效活化、C-C可控偶联的新机制，创制新催化剂和新反应过程，实现甲烷直接转化，高效制取高值化学品和液体燃料。

　　（三）发展理论和实验研究方法，在原子尺度上研究氧化物催化剂表界面缺陷结构的调控规律和碳基小分子的活化机理，揭示C-O和C-H等化学键活化、以及中间体形成和转化的热力学和动力学规律，系统探索和深入认识纳米限域催化和单原子催化的本质，形成化学键精准构建的催化新概念和新理论。

　　四、项目遴选的基本原则

　　为确保实现总体目标，本重大研究计划项目遴选的基本原则如下：

　　（一）鼓励开展前沿领域探索性研究，优先支持具有原创性的催化表界面新概念、新理论、新体系、新方法、新技术的研究。

　　（二）鼓励多学科实质性交叉合作研究，特别鼓励和优先考虑来自于数理和材料等学科的申请,以及其他学科与化学学科的交叉合作；注重理论与实验的有机结合。

　　（三）鼓励开展国际合作研究。

　　五、2021年度资助计划

　　2021年度拟资助集成项目1—2项，直接费用的资助强度约为600—1200万元/项（由指导专家和评审专家组根据评议情况确定资助额度），资助期限为2年，申请书中研究期限应填写“2022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。

　　执行《2021年度国家自然科学基金项目指南》“申请规定”中限项申请规定的相关要求。

　　（三）申请注意事项。

　　申请人和依托单位应当认真阅读并执行本项目指南、《2021年度国家自然科学基金项目指南》和《关于2021年度国家自然科学基金项目申请与结题等有关事项的通告》中相关要求。

　　1. 本重大研究计划项目实行无纸化申请。申请书提交日期为2021年9月16日－9月20日16时。

　　（1）申请人应当按照科学基金网络信息系统中重大研究计划项目的填报说明与撰写提纲要求在线填写和提交电子申请书及附件材料。

　　（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）申请书中的资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“集成项目”，附注说明选择“碳基能源转化利用的催化科学”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。

　　集成项目的合作研究单位不得超过4个，主要参与者必须是集成项目的实际贡献者。

　　（4）申请人在申请书“立项依据与研究内容”部分，应当首先说明申请符合本项目指南中的重点资助研究方向，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。

　　2. 依托单位应当按照要求完成依托单位承诺、组织申请以及审核申请材料等工作。在2021年9月20日16时前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，并于9月21日16时前在线提交本单位项目申请清单。

　　3. 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。

　　（四）咨询方式。

　　国家自然科学基金委员会化学科学部二处

　　联系电话：010-62327035