**“碳基能源转化利用的催化科学”重大研究计划2016年度项目指南**

　　“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**

　　（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、2016年度拟重点资助研究方向**

　　本重大研究计划前期主要以“培育项目”和“重点支持项目”的形式予以资助，在要求和资助强度上有所不同。对探索性强、选题新颖的申请将以“培育项目”方式予以资助；对具有原创性、有一定工作积累、有望取得重要突破的申请将以“重点支持项目”的方式予以资助。鼓励材料、物理、工程热物理等来自不同学科的研究队伍共同参与申请。拟重点资助以下方向：

　　（一）涉碳化学键（如C-C、C-H和C-O等）催化活化的新机制。

　　发展通过催化剂表界面结构调控以提高催化特性的新方法；研究甲烷等低碳烷烃活化以及煤、重油、生物质等稠环大分子的精准活化直接获取液体燃料和化学品的新途径；探索外场对涉碳化学键催化活化过程强化新机制。

　　（二）C-C键偶联的精准控制及合成气转化的新概念。

　　研究催化剂表界面原子结构及缺陷态的调控规律和反应分子（如CO和H2等）在催化剂表面的吸附和反应机理，探索在催化剂表面和分子筛孔道中C-C键形成和偶联增长的精准控制策略及机制。

　　（三）碳基小分子电催化转化的新探索。

　　调控电催化剂结构和性能，构筑电催化表界面新体系；研究电催化碳基小分子活化转化新机制，重点支持高温和非贵金属体系相关研究，着力提高过程效率，实现电能向化学能高效转换和可再生能源的高效储存。

　　（四）催化表界面表征与理论模拟的新方法。

　　发展适合于催化反应原位-动态环境和涉及外场作用条件下对催化表界面进行高灵敏和高分辨表征的新技术和新理论；建立催化过程多尺度理论研究的新方法，注重催化过程的动态模拟。

　　**四、遴选项目的基本原则**

　　为确保实现总体目标，本重大研究计划要求：

　　1.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、新方法的研究。

　　2.鼓励多学科实质性交叉合作研究，特别是数理、材料、化学、化工等学科间的相互交叉。注重理论与实验的有机结合。

　　3.鼓励开展国际合作研究。

　　**五、2016年度资助计划**

　　2016年度拟资助培育项目20-25项，直接费用的平均资助强度约80万元／项，资助期限为3年，申请书中研究期限应填写“2017年1月1日-2019年12月31日”；拟资助重点支持项目4项，直接费用的资助强度300-400万元／项，资助期限为4年，申请书中研究期限应填写“2017年1月1日-2020年12月31日”。

　　**六、申报要求及注意事项**

　　（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以及正在攻读研究生学位的人员不得申请。

　　（二）限项规定。

　　1. 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，作为参与者不限）、国家重大科研仪器研制项目（含承担科学仪器基础研究专款项目和国家重大科研仪器设备研制专项项目）、优秀国家重点实验室研究项目，以及资助期限超过1年的应急管理项目。

　　2.申请人（不含参与者）同年只能申请1项重大研究计划项目。上一年度获得重大研究计划项目资助的项目负责人（不包括集成项目和战略研究项目），本年度不得再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2016年9月19日至23日16时。

　　2.本重大研究计划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《2016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“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。以上选择不准确或未选择的项目申请将不予受理。

　　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，应突出有限目标和重点突破，明确对实现本重大研究计划总体目标和解决核心科学问题的贡献。

　　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，应当在报告正文的“研究基础”部分论述申请项目与其他相关项目的区别与联系。

　　（6）申请人应根据《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》的有关规定，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资金预算表》。项目资金分为直接费用和间接费用，申请人仅需填写直接费用部分，间接费用由系统自动生成。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资金预算，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，下载并打印最终PDF版本申请书，向依托单位提交签字后的纸质申请书原件。

　　（8）申请人应保证纸质申请书与电子版内容一致。

　　3. 依托单位应对本单位申请人所提交申请材料的真实性和完整性进行审核，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（2016年9月23日16时）前提交本单位电子版申请书及附件材料，并统一报送经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，还应包括本单位公函和申请项目清单，材料不完整不予接收。

　　（4）可将纸质申请书直接送达或者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，请在项目申请截止日期前（以发信邮戳日期为准）以快递方式邮寄，并在信封左下角注明“重大研究计划项目申请材料”， 请勿使用邮政包裹，以免延误申请。

　　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计划局交叉学科处

　　联系电话：010-62328484

　　国家自然科学基金委员会化学科学部三处

　　联系电话：010-62327172

　　（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。