

团簇构造、功能及多级演化重大研究计划

2024 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、2024 年度资助的研究方向

进一步聚焦团簇构造、功能及多级演化的关键科学问题，在本重大研究计划前期执行的基础上，2024 年度以集成项目的形式对以下研究内容进行资助：

（一）团簇新体系与合成新方法。

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，开发具有特殊结构与独特性能的新型团簇，揭示型团簇体系中的化学成键和电子结构特征；关注包括主族元素团簇、过渡金属团簇、f 区元素团簇、（多）金属氧簇等体系的形成规律与稳定化机制，探索簇结构对光电磁等物理化学性能的影响，发挥其与物理、材料、信息、能源等学科交叉的优势，拓展应用潜能。

（二）功能导向的团簇精准构筑。

建立具有精准结构和确定原子数的团簇的定向设计、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。理解团簇内多核聚集态与电子转移、簇际相互

唐家林 华南农业大学

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。重点支持功能导向的原子团簇和分子团簇的设计及合成，通过其光、电、磁等物理特性的性能复合，构建相关团簇材料和器件，为集成电路、大气环境、原子制造和量子信息等领域中重要难题提供解决方案。

（三）复杂团簇体系的表征与理论。

唐家林 华南农业大学

发展超高时空分辨的团簇研究技术与团簇的电子结构理论。建立团簇结构数据库，发展人工智能（AI）辅助的合成方法。发展先进的团簇束源技术，建立团簇物性表征新方法，揭示团簇成核机制、生长演化规律及其动力学性质。重点支持建设高时空分辨的团簇科学装置，发展创新的团簇形成与表征方法，实验与理论研究相结合，理解团簇结构与性能的关系，认识和研究各类团簇的结构、性质及演化规律。

（四）团簇和模拟金属酶的催化基础。

唐家林 华南农业大学

研究具有确定原子数和精确结构的负载型团簇和仿生团簇的催化性能，理解催化过程中团簇结构、电子转移和能量传递对分子转化的影响。开展以特定原子数的团簇为催化剂、催化机制可明确表征的研究，针对烃类、 N_2 、 CO_2 、 H_2O 等重要分子的催化转化和生物酶活性中心的全合成与催化机制研究等方面内容。重点支持团簇模拟金属酶的合成，开展固氮、光合、产氢等功能研究；发展团簇复合体系，开拓团簇在氮循环、碳循环、硫循环等方向的催化应用。

（五）团簇组装及功能演化。

发展原子团簇和分子团簇的合成方法学，认识团簇结构随团簇尺寸的演变规律，研究团簇发生作用的尺寸效应，理解多级结构与功能演化的关系；发展团簇组装体的精准制备策略，揭示团簇间相互作用耦合规律，探索团簇组装体功能演化机制，阐明团簇组装多级材料中的电子效应和构效关系。

（六）生物学中的功能团簇。

通过团簇的表面结构修饰与性能优化，构建具有生物靶向功能的团簇及其组装体，研发生物医用荧光团簇显像剂，发展靶向识别和肿瘤细胞可视化技术，实现对肿瘤的精确成像和治疗。重点支持硼团簇等体系的功能衍生与生物学应用，获得可用于癌症诊断、靶向、中子捕获放疗等诊疗一体化的团簇候选药物。

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。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本重大研究计划总体目标的贡献。鼓励多学科实质性交叉合作研究，优先考虑生命、医学、数理及材料等学科与化学学科的交叉合作，优先支持跨领域交叉的研究项目，优先对关系到国家重大需求和解决“卡脖子”难题的研究内容进行资助。

集成项目要聚焦核心科学问题，明确申请项目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。

五、2024 年度资助计划

拟资助集成项目 10-15 项，直接费用资助强度为 200-400 万元/项，资助期限为 3 年，申请书中研究期限应填写“2025 年 1 月 1 日-2027 年 12 月 31 日”。国家自然科学基金委员会将根据申请情况和申请项目研究工作的实际需要确定资助项目数和直接费用资助金额。

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《2024 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、《2024 年度国家自然科学基金项目指南》和《关于 2024 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 2024 年 8 月 30 日 - 2024 年 9 月 9 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“团簇构造、功能及多级演化”，根据拟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。

(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资助研究方向，以及对解决本重大研究计划核心科学问题和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2024年9月9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10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 and 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。

(四) 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：010-62328253