

附件 2

化学科学部重大项目指南

2025 年化学科学部共发布 10 个重大项目指南，拟资助 6 个重大项目。项目申请的直接费用预算不得超过 1500 万元/项。

“面向光子操控的激子半导体纳米晶”重大项目指南

新一代太阳能电池、高效照明和信息显示等重大产业的发展瓶颈在于提高激子产生和光电转换效率。其核心科学问题是阐明激子-光子高效转换的动力学机制。本重大项目聚焦大尺寸范围半导体纳米晶的精准合成，调控半导体激子结合能，构建激子半导体纳米晶高效光电器件，为未来能源与信息产业发展奠定科学与材料基础。

一、科学目标

建立尺寸、形貌、晶面和表面配体单分散半导体纳米晶精准可控合成方法；阐明半导体纳米晶激子产生与激子-光子转换动力学，开发全原子尺度理论与计算方法；发展低成本绿色溶液加工方法与技术，研制半导体纳米晶高效光电器件，为新一代激光器和显示器的产业化提供原型样机。

二、关键科学问题

- (一) 大尺寸范围半导体纳米晶原子精度生长与调控规律。
- (二) 半导体纳米晶激子结合能调控与效率提升机制。
- (三) 高性能激子半导体纳米晶器件的实现策略。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“面向光子操控的激子半导体纳米晶”，申请代码 1 选择 B02 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理。

(二) 针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

(三) 咨询电话：010-62329320。

“生物/仿生界面的创制与功能”重大项目指南

针对生殖系统癌症诊疗难题，深入理解其生物界面动态易变机制，对于实现诊疗一体化具有重大意义。其核心科学问题是揭示多尺度生物界面的特异识别与粘附、高效传导机制及其功能调控规律。本重大项目聚焦生物/仿生界面科学基础研究，建立高特异性识别与高效传导模型，创制生物/仿生界面，实现跨越病理生理屏障的高效定向传输，为解决生殖系统癌前病变临床诊疗难题提供科学依据与技术支持。

一、科学目标

面向生殖泌尿系统重大疾病临床诊疗的应用需求，发展生物界面精准测量和调控技术，揭示生物界面识别、粘附和传导规律；创制具有识别与传导功能的生物/仿生界面，构建类器官模型；建立从单细胞到动物活体的跨尺度、深层次、高分辨光学成像新方法，显著提高药物递送效率，实现生殖泌尿系统重大疾病的临床应用。

二、关键科学问题

- （一）活体跨尺度生物界面的特异识别与高效传导机制。
- （二）功能化仿生界面的设计原理、构建方法与调控规律。
- （三）生物/仿生界面在临床诊疗中的结构演变与协同作用。

三、申请要求

- （一）申请书的附注说明选择“生物/仿生界面的创制与功能”，申请代码 1 选择 B02 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项

目申请不予受理。

(二) 针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

(三) 咨询电话：010-62329320。

“单分子物态演变的精准表征与原理”重大项目指南

单分子物态的演变是决定单分子器件性能的关键因素，由于演变过程显著依赖单分子器件所处的外场和环境，其精准表征与调控存在巨大挑战。单分子物态演变过程的全景刻画亟需融合功能分子合成、单分子器件制备、高精度表征和理论计算模拟全链条创新研究。光电耦合分子体系的理性设计、单分子器件的极限加工、多域集成单分子多模态的精准表征、非平衡动力学算法的快速发展为解决单分子物态演变过程中的关键科学问题提供了契机。

一、科学目标

发展多功能耦合的分子理性创制策略，实现单分子器件中分子-电极界面的可控制备，研发高时空分辨的单分子测量技术，建立复杂外场调控下非平衡量子态演化的精准模拟方法。

二、关键科学问题

- (一) 多功能耦合的单分子体系精准设计与构筑策略。
- (二) 单分子器件的原子级可控制造与集成思路。
- (三) 全方位解析量子态演化过程的单分子多模态测量与表征。
- (四) 单分子物态演变与化学反应的机制解析和计算模拟方法。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“单分子物态演变的精准表征与原理”，申请代码 1 选择 B03 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理。

(二) 针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

(三) 咨询电话：010-62329320。

“分子聚集体激发态结构与理论”重大项目指南

分子聚集过程中，分子间和分子内的协同相互作用，会导致激发电子态从定域到离域的演变，可根本性改变有机光功能材料的性能。由于分子聚集体结构的高度复杂性，亟需发展新的精准制备策略、实验探测技术和理论模拟方法，在光功能材料和器件的性能方面取得突破。数据驱动的材料与器件创制、高时空分辨谱学技术以及多尺度计算模拟方法的发展为分子聚集体激发态研究提供了重要契机。

一、科学目标

发展分子聚集体激发态电子结构理论和高效准确模拟方法，开发高时空分辨谱学技术，探究分子聚集体激发态性质与演变过程，揭示聚集体结构与功能的内在关联，发现新规律，提出新概念，实现高性能光功能分子聚集体和原型器件创制，引领分子聚集体科学的发展，推动我国相关产业应用。

二、关键科学问题

- (一) 功能导向的分子聚集体结构智能设计与制备策略。
- (二) 分子聚集体及原型器件激发态的精准测量与调控。
- (三) 分子聚集体激发态理论及多尺度模拟新方法。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“分子聚集体激发态结构与理论”，申请代码 1 选择 B03 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项

目申请不予受理。

(二) 针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

(三) 咨询电话：010-62329320。

“高灵敏活体拉曼成像方法”重大项目指南

拉曼成像作为一种高特异性、高空间分辨率的分子指纹识别技术，在生物医学成像领域展现出巨大潜力。小分子的自发拉曼信号极其微弱，在实际成像应用中，需要利用表面增强拉曼、共振增强拉曼或者非线性拉曼等效应实现待测物信号的增强，但均受限于灵敏度或生物相容性等问题，难以用于活体成像。亟需探索拉曼增强新机制，创制高生物兼容性的信号增强材料，发展复杂生理环境下的高灵敏拉曼活体成像方法，为活体化学成像提供科学基础。

一、科学目标

本重大项目面向生命健康的国家重大战略需求，以“安全有效，灵敏可视”为牵引，针对高灵敏活体拉曼成像必须依赖于外源金属纳米结构或者强激光的局限，提出小分子拉曼自增强新机制，智能设计具有高拉曼增强性能的小分子化合物，发展拉曼探针精准递送特异识别靶标的新方法，研发能够实现快速拉曼成像的装置，实现高灵敏活体动态拉曼成像，为活体分子科学提供新的技术支撑，提升我国在活体拉曼成像领域的国际竞争力。

二、关键科学问题

（一）小分子拉曼信号的自增强及调控机制。

（二）具有拉曼自增强性能的小分子智能设计。

（三）基于拉曼自增强的活体分子动态成像方法及装置。

三、申请要求

（一）申请书的附注说明选择“高灵敏活体拉曼成像方法”，申请代码 1 选择 B04 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理。

（二）针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

（三）咨询电话：010-62329320。

“面向软体机器的智能形变高分子材料化学基础”

重大项目指南

智能形变高分子是实现软体机器驱动-感知-结构-功能一体化设计的核心，对于提高软体机器在生命健康、极端环境、多栖跨域等领域的自主性、适应性和作业能力至关重要。然而，目前智能形变高分子的驱动、感知、自主行为控制性能难以满足下一代智能软体机器的应用需求。为此，发展高分子材料智能形变的分子机制与设计策略，揭示多尺度结构调控与驱动强化机制，赋予智能形变高分子材料的“类生命体”特点，推动其在软体机器领域的应用和跨越式发展，显得尤为重要。

一、科学目标

针对软体机器构筑材料的共性问题，发展智能形变高分子材料的理性设计和分子创制策略；揭示多尺度/多维度结构精准调控与协同作用规律；阐述微观基元与环境能量交互的作用机制；探索通过内部结构自主调整实现能量交换和信息处理的策略；创制具有“类生命体”特征的智能形变高分子材料，结合多功能集成与制造技术，展示其在软体机器领域的应用潜力。

二、关键科学问题

(一) 高灵敏外场刺激响应的分子机制与结构设计策略。

(二) 高分子多尺度结构调控规律与能量转换的强化机制。

(三) 高分子材料学习、记忆、反馈等特性的调控机制。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“面向软体机器的智能形变高分子材料化学基础”，申请代码 1 选择 B05 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理。

(二) 针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

(三) 咨询电话：010-62329320。

“新污染物的生殖发育毒性及机制研究”重大项目指南

不孕不育和不良妊娠结局持续高发，环境污染物在人群中的暴露可能在其发生发展中起重要作用。本项目旨在对新污染物影响人类生殖发育的全过程及其机制进行系统、深入研究，从环境污染视角阐述不孕不育、不良妊娠等生殖发育问题的成因，为新污染物精细化管理提供科学基础，服务于我国新污染物治理和国家大健康战略。

一、科学目标

建立高通量新污染物毒性评估方法，构建人类生殖发育毒性评估体系；甄别具有生殖发育毒性的高风险新污染物，阐明共性致毒过程及其机制；揭示新污染物暴露与不良生殖结局因果关系，为生殖发育毒性风险防控提供理论基础。

二、关键科学问题

- （一）人类早期胚胎发育过程的综合毒性评估体系构建。
- （二）生殖发育毒性新污染物的高通量甄别。
- （三）新污染物生殖发育毒性效应及共性致毒机制。
- （四）新污染物暴露与人类不良生殖结局因果关系及风险阻控。

三、申请要求

（一）申请书的附注说明选择“新污染物的生殖发育毒性及机制研究”，申请代码 1 选择 B06 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理。

(二) 针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

(三) 咨询电话：010-62329320。

“功能分子的化学—生物融合合成”重大项目指南

生物合成是功能分子创制的重要手段。生物合成与化学合成的协同发展可突破传统研究范式，推动二者在理论、方法和技术层面的深度融合。化学—生物融合合成能够超越单一合成手段的分子创制能力，形成更为高效精准的催化体系，为重要功能分子的创制开辟新路径。

一、科学目标

以创制药物、疫苗、生物基材料、能源与化工等领域的重要功能分子为目标，结合人工智能，在催化体系的挖掘和构建、新反应的发现和发展、功能分子的合成和应用等层面进行化学与生物学的交叉融合，形成单一生物或化学合成手段难以完成的高效催化体系和精准合成能力，重塑功能分子的创制路径；从反应元件、催化体系到合成策略等方面实现功能分子合成理论与技术的重大突破及应用。

二、关键科学问题

- （一）功能分子的化学—生物融合催化体系的构建与优化。
- （二）化学—生物融合催化体系的兼容性与精准协同机制。
- （三）化学—生物融合合成理论及技术体系的集成与应用。

三、申请要求

（一）申请书的附注说明选择“功能分子的化学—生物融合合成”，申请代码 1 选择 B07 的下属申请代码。以上选择不准确或未选

择的项目申请不予受理。

(二) 针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

(三) 咨询电话：010-62329320。

“绿色农药靶标发现的科学基础”重大项目指南

绿色农药通过精准靶向作用机制，实现病、虫、草害的高效防治，确保非靶标生物的生态安全，减轻农业生产中的环境负担。病、虫、草害抗药性日益加剧，亟需开发基于全新靶标的绿色农药创制策略，突破传统防治手段的技术瓶颈。绿色农药靶标发现作为基础研究与产业应用的关键环节，能够促进农药研发由“经验筛选”向“理性设计”转型，助力实现粮食安全与农业可持续发展的双重目标。

一、科学目标

围绕原创性靶标稀缺、发现效率低等核心问题，通过化学、生命、结构和计算生物学等多学科交叉融合，构建绿色农药靶标发现的创新研究体系，发掘并验证在病虫害防治中具有高选择性和安全性的关键新靶标，系统阐明其与农药分子之间的作用机制，指导高效低毒农药分子的设计与结构优化；建立从靶标挖掘、功能验证到应用转化的完整技术链条，推动绿色农药先导化合物与候选新品种的创制，加速我国绿色农药科技的跨越式发展。

二、关键科学问题

（一）绿色农药新靶标与先导分子的系统发现与确证。

（二）农药靶标的选择性与特异性机制。

（三）农药分子与靶标的作用机制与结构基础。

（四）病、虫、草害抗性演化规律与分子调控机制。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“绿色农药靶标发现的科学基础”，申请代码 1 选择 B07 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理。

(二) 针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

(三) 咨询电话：010-62329320。

“面向‘未病’调控的生理活性物质的生物制造和作用机制研究”重大项目指南

随着老龄化趋势加速和亚健康人群比例逐年升高，“未病”防治已成为国家重大需求，同时也是世界科学难题。中医药在“未病”调控中具有长期的应用历史和独特优势，但其生理活性物质来源有限、丰度低，原材料一致性差，且作用机制复杂。生物制造可实现稀有生理活性物质的多品种、规模化高效制造，为解决上述问题提供物质基础，同时发现和制备新的生理活性物质，揭示其新机制，可为“未病”防治提供科学基础与技术支撑。

一、科学目标

面向睡眠障碍、免疫下降等典型“未病”指征，建立多品种生理活性物质的高效生物制造方法，构建生理活性物质库，挖掘有效物质，揭示其新机制；实现 3-5 个稀有有效物质的大规模、低成本生物制造，开展其体内传递规律与临床作用强化机制研究，为“未病”调控提供新方法、新途径和新产品。

二、关键科学问题

（一）生理活性物质的规模化高效生物制造原理与方法。

（二）调控“未病”指征的物质基础及其作用机制。

（三）有效物质的体内传递规律和临床作用强化机制。

三、申请要求

（一）申请书的附注说明选择“面向‘未病’调控的生理活性物

质的生物制造和作用机制研究”，申请代码 1 选择 B08 的下属申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理。

（二）针对项目指南目标和科学问题，申请题目可自拟。

（三）咨询电话：010-62329320。