



# 化学理论与机制发展规划概述

戴亚飞<sup>1\*</sup>, 沈祥建<sup>2</sup>

1. 国家自然科学基金委员会化学科学部, 北京 100085

2. 郑州大学化工学院, 郑州 450001

\*通讯作者, E-mail: daiyf@nscf.gov.cn

收稿日期: 2021-03-06; 接受日期: 2021-03-10; 网络版发表日期: 2021-03-20

**摘要** 化学理论与机制是化学科学的理论基础, 其根本任务是研究化学科学中的基本原理, 揭示化学反应及其相关过程的机制和基本规律, 并为其他相关学科的发展提供基础理论支撑. 本文简要介绍了国家自然科学基金委员会化学科学部化学理论与机制领域(基金申请代码: B03)“十四五”及中长期发展规划、学科布局、申请代码和研究方向, 供相关人员参考. 新基金申请代码已于2021年启用.

**关键词** 国家自然科学基金, 化学理论与机制, 发展规划, 学科布局, 申请代码

## 1 引言

2017年, 为了更好适应国际化学发展的总体趋势和促进中国化学研究的转型发展, 国家自然科学基金委员会(以下简称自然科学基金委)化学科学部进行了全面的学科领域调整, 形成了化学理论与机制这一新的学科方向(基金申请代码: B03)<sup>[1]</sup>. 根据2021~2035年国家中长期科技发展规划基础科学发展战略的总体目标, 结合目前自然科学基金工作的特点, 2020年自然科学基金委化学科学部制订了化学理论与机制领域“十四五”及中长期发展规划, 明确了学科领域内涵, 分析了该学科领域发展规律与发展现状, 并提出了未来学科领域的发展目标和优先发展方向.

## 2 化学理论与机制的学科内涵

化学理论与机制是化学科学的一个重要学科领

域, 它借助物理、数学等基础科学理论及其提供的实验手段, 研究化学科学中的基本原理和化学体系中一般的宏观、微观规律, 承担着建立和发展新的化学理论和实验方法, 揭示化学反应及其相关过程的机制和基本规律的重要任务. 化学理论与机制领域包含以下方向: 理论与计算化学、化学热力学、化学动力学、结构化学、光化学与光谱学、化学反应机制、高分子物理与高分子物理化学, 以及化学信息学. 该领域是整个化学学科的理论基础.

## 3 学科的发展规律与发展现状

### 3.1 化学理论与机制领域的发展规律

(1) 基于数学、物理和计算科学, 建立各种理论与计算方法, 探讨原子、分子、分子聚集体以及凝聚相的一般规律, 阐明物质的结构、性质及其相互关系. 通过理论计算与模拟, 获得化学问题的微观至宏观诸

引用格式: Dai Y, Shen X. Overview of development plan of chemistry theory and mechanism discipline. *Sci Sin Chim*, 2021, 51: 1–11, doi: 10.1360/SSC-2021-0056



图 1 化学理论与机制的学科内涵 (网络版彩图)

Figure 1 Discipline connotation of chemical theory and mechanism (color online).

层次的静态与动态信息,使越来越多的实验现象通过计算机模拟手段重现,从而被正确地认识和理解;同时,通过提出新的概念和方法,对未知的实验现象和实验设计起到预测和指导作用。

(2) 通过实验手段,观察物质的宏观结构、表征微观结构、测定物质的性质、跟踪化学反应的动态过程,从原子分子层次上研究物质静态结构及反应变化动态过程的本质与规律,搭建从微观到宏观、从物理学基本规律到复杂化学过程之间的桥梁。

(3) 该学科总的发展趋势是从一般键合分子扩展到精准键合分子及非化学计量化合物;从单个原子、分子体系到大分子、聚集体和凝聚相体系;从稳态、基态到瞬态、激发态;从静态结构到动态行为;从对气、液、固三种聚集态扩展到各种分散态;从对化学过程的宏观控制(如温度、压强等),发展到对分子、原子、电子以及量子态的微观调控;从一般条件下的化学过程到极端条件下(超高温、超高压、超低温、无重力)的化学过程研究;从定性描述到定量分析;从抽象的原理模型建立到面向真实体系。

化学理论与机制领域的研究已经渗透到化学科学的各个分支,初步建立和发展了能够解决生命、能源、材料、环境等交叉领域中基础科学问题的理论工具。化学理论方法和实验技术的发展奠定了分子科学的坚实基础,对化学科学各个分支的发展起到了极大的推动作用。

### 3.2 化学理论与机制领域的发展现状

(1) 理论方法得到充分发展,计算精度和计算能力

不断提高。

化学理论与机制的研究很大程度上依赖于理论方法的发展。理论化学自上世纪中期以来取得了突飞猛进的进展,主要表现在分子轨道理论、电子转移反应、轨道对称守恒、非平衡统计力学、分子反应动力学等理论方法的建立。随着计算机硬件性能的提高,理论化学又得到了进一步发展。目前,理论化学可以在1 kcal/mol精度上计算体系能量,高精度的电子结构理论和动力学方法可以描述复杂的化学反应过程,提供丰富的微观信息。同时,传统的理论与计算化学方法正在逐渐与化学信息学方法相融合。例如,预测某一个体系的性质,我们可以通过基于量子力学基本原理的方法进行从头算,也可以通过大数据、机器学习来预测。目前理论与实验的结合日趋紧密,可相互印证、相互促进。理论不止停留在简单解释实验现象,而是已经逐渐深入到预测物质结构与性能,指导实验设计的阶段。

(2) 实验方法的发展、仪器设备的更新,极大地提升了科研水平。

化学理论与机制领域的特点是在原子分子微观层次上研究物质的结构、动态过程,在此基础上分析、预测并调控物质的宏观性质和功能,因此非常依赖于“动态原位”的实验方法、技术和仪器。目前我国越来越多的实验室拥有了先进的商用测量设备,极大地提升了科研水平;国内外大型科学设备,如同步辐射光源、自由电子激光、极端条件物理化学实验等的发展和建设以及在化学及其相关学科中的不断应用,为化学理论与机制领域的基础实验研究提供了良好平台,已经初步培养了一批训练有素、能够娴熟综合利用这些平台的科学家;理论计算方法的快速发展和普及也有利于进一步理解和阐释实验结果,促进了实验科学的进一步发展。

(3) 理论方法和实验技术的发展,使得物质结构的图像越来越清晰。

物质结构是化学理论与机制研究的基础。原子结构理论近年来取得了飞速发展,我们已经从猜测结构时代逐步进入了自动搜索结构时代。早期在理论上研究分子或者材料体系的结构,需给出初始结构猜测,然后分别计算出能量或者某些特定的性质,最后通过比较能量高低或与实验结果的对比来给出可能的结构。随着计算机技术的发展,目前的算法已经可以进行

结构的自动搜索, 例如粒子群算法、势能面随机行走算法等. 通过全局搜索, 计算机有很大的几率能够自动找到体系的原子结构.

仪器分析手段以及实验技术的发展也为结构的确定提供了有力的支持和保障, 从小分子到纳米、团簇、生命物质; 从晶体到单分子、准晶、微晶粉末甚至非晶态物质; 从基态结构到表面、缺陷、激发态、过渡态结构, 针对复杂化合物、复杂化学反应体系、超分子自组装体系, 结构化学领域在不断创新着“看清”物质结构的思路和技术. 目前, 结构化学与合成化学之间呈现出良好的互动与促进作用, 直接指导特定结构的定向合成及性能调控. 同时与生物化学、环境化学、催化化学、材料化学、原子物理与化学等学科也有实质性的交叉融合, 展现出共同发展的良好态势.

(4) 理论与实验研究相结合, 架起了认识物质微观结构到宏观性质的桥梁.

化学热力学是物理化学的重要分支学科之一, 它架起了从微观理论到宏观性质的桥梁. 依据体系的宏观可测性质和热力学函数关系可判断体系的稳定性、变化趋势以及变化程度. 随着实验仪器与技术的发展, 热力学性质的测量越来越精确. 理论上, 对于简单体系, 谐振子近似模型未失效的情况下, 热力学性质可以被精确计算; 对于复杂体系, 则需采用分子模拟进行相空间采样, 这亟需发展高效的增强采样技术才能得到收敛的热力学性质. 由于热力学性质的重要性, 基于理论计算和实验测量所得到的热力学数据, 目前国内外已经建立起一批针对分子、材料以及生物体系的热力学数据库. 这些数据库在化学信息学以及基于人工智能和大数据的化学研究中将起到越来越重要的作用.

除了热力学性质, 近年来包括光、电、力、磁在内的其他性质与化学结构之间的关系也越来越清晰. 在对这些性质的研究中, 新的理论与机制不断被发掘. 在研究物质性质的过程中, 提出了新概念、新机制, 为化学乃至材料等其他科学领域的发展提供了新动力.

(5) 激发态的研究使得化学反应的内涵更为丰富.

相对于热化学反应, 光化学反应具有可控性强、选择性高、反应条件温和等特点. 目前, 光化学与光谱学、物理学、化学、材料科学和生命科学等学科交叉融合, 产生了许多新兴前沿研究领域. 基于超快光谱技术可以研究实时化学反应过程; 空间分辨与时间分

辨相结合的光谱技术可实现从单分子到超分子体系、生命大分子体系、微纳米结构等不同层次的光化学及其过程研究. 各类新型有机、无机和有机/无机复合体系以及纳米结构材料的发展也为光化学和光谱学研究提供了新的研究对象, 形成了新的学科生长点. 光化学和光谱学的研究成果不断应用于现代高技术领域, 促进了社会经济的快速发展.

(6) 各类化学反应的动力学过程及反应机制逐步被揭示.

化学科学研究的核心是化学反应. 化学动力学聚焦于化学反应的理论与机制. 目前, 化学动力学研究的对象已经从简单的气相体系扩展到更复杂的体系, 如与大气、燃烧、表面、生物等学科紧密相关的复杂体系, 为与能源、环境等科学技术相关的化学反应过程的研究提供了重要的实验和理论基础. 同时, 化学动力学研究已经逐渐深入到了原子、分子以及精细量子态的层次; 分子动态过程的研究已由基态的动态学扩展到了激发态的动态学; 化学动力学理论研究也由单势能面的绝热动态学深入到了多势能面的非绝热动态学; 反应过程时间尺度的研究也开始从微秒、纳秒走向飞秒、阿秒; 以新一代波长可调谐极紫外自由电子激光为基础的新动态学实验方法的大力发展也极大地推动了化学动力学实验研究的发展. 化学动力学在过去的几十年中取得一系列重大成就, 不断揭示各类化学反应的本质. 我国各个领域的发展对于复杂体系中化学动力学基础研究也有了越来越大的需求. 例如, 燃烧化学动力学研究涉及到高激发态反应过渡态的动态学, 该研究已经成为我国发动机高技术发展的一个重要基础; 化学激光研究也需要化学动力学基础研究作为支撑; 大气雾霾化学的研究同样离不开复杂分子化学动力学研究. 总之, 化学动力学正在逐渐成为化学学科中一个非常重要且高度活跃的研究领域.

(7) 对高分子等复杂体系的结构和动力学行为的研究得到了深入开展.

高分子体系是一类比较复杂的体系. 由于高分子链单元之间较强的共价键作用, 高分子表现出较大的空间尺度关联性和较宽的时间松弛谱, 导致其化学结构演化的动力学行为极其复杂. 若要从分子层面理解高分子体系的结构和动力学行为, 尚需结合凝聚态物理理论和应用数学理论, 这极具挑战. 目前, 我国在高

分子物理与高分子物理化学领域中的优势方向是高分子结晶和高分子自组装研究, 已形成了一支较强的研究队伍, 而高分子流变和聚电解质研究方向则较为薄弱。

### 3.3 学科发展存在的问题

#### (1) 理论与算法的发展略显薄弱。

理论化学可以对化学直觉概念进行严格微观证明, 针对不同的体系通过建立模型进行近似的模拟, 因此理论与算法的发展对整个学科的发展起着关键作用。但是, 目前理论和算法并不完善, 仍有一些复杂体系的分子结构、动力学行为、反应过程、物质性质的计算模拟达不到理想效果, 主要包括: 强关联电子体系、电子激发态理论、多原子反应体系高精度势能面构造方法和精确量子动态学理论方法、针对大分子和凝聚相体系的低标度有效算法、描述小体系和受限体系涨落效应的新方法、复杂体系热力学和动力学计算的高效采样方法、生命过程和化学反应的非平衡统计力学理论等等。针对以上问题的理论和方法有待进一步改进和发展。

近些年我国在理论和算法方面已取得相当的进展, 国内理论科学家也发展了自己的算法, 解决了一些关键问题并得到认可和广泛使用, 在国际上已占有一席之地。但即便如此, 算法与程序开发仍然是我国理论化学与计算化学的一大短板, 需要继续加强这方面的积累。

#### (2) 人工智能技术在理论化学中的应用还不成熟。

大数据时代人工智能的发展已势不可挡。正确地将人工智能技术引入到理论与计算化学领域不仅可以显著提高计算效率, 而且有可能突破理论化学的瓶颈, 解决目前理论所解决不了的难题。当然, 目前人工智能在化学中的研究尚处于起步阶段, 存在诸多问题, 主要包括: 作为人工智能的基础, 已有的数据库体系还缺乏统一标准, 很多急需的数据库完全空白; 针对化学研究的机器学习算法还没有系统化发展; 人工智能时代的理论化学语言没有形成; 已有的人工智能在化学研究中的广泛应用还需进一步测试和完善; 同时, 在基于人工智能技术实现分子合成路径的高效自动设计、高效药物研发、功能材料设计、谱图解析等应用方面, 也还需要加强并取得更多的突破。

#### (3) 具有自主知识产权的大型通用计算化学软件仍

然空白。

计算软件是理论化学家眼中的重大仪器, 是理论化学发展必不可少的工具。目前在国际上被广泛应用的理论化学软件几乎全部由国外开发, 而我国自主知识产权的大型通用计算软件几乎空白<sup>[2]</sup>。目前, 我国的硬件技术已飞速发展, 自主研发的超算功能处于世界领先地位。可是国外的软件却与我国的超算集群硬件无法兼容, 导致我国的硬件资源极度浪费。同时, 由于没有自主研发的软件, 我国科学家自己的理论方法也无法得到快速推广。此外, 在目前严峻的中美贸易战形势下, 国外随时可能会对中国形成技术封锁和软件出口管控。一旦离开现有计算化学软件, 我国理论化学家将举步维艰。因此, 在理论方法发展的同时, 迫切需要不计代价进行软件开发, 争取有一套我国自主知识产权、具备通用计算化学功能、可替代现有国外商业计算软件的大型通用计算化学软件。该软件的开发将直接面向我国自主研发的新超算框架, 并吸纳我国科学家自己发展的理论方法。

#### (4) 理论研究没有充分发挥预测实验现象、指导实验设计的作用。

理论研究通常基于一定的假设和近似, 理论模型是对实际体系的抽象与简化。因此, 理论和实验之间往往存在着一条鸿沟。一方面, 由于理论发展的不完善和计算能力的限制, 目前的理论研究经常会存在模型过度简化、对实际条件考虑不周全等问题, 导致理论计算的结果与实验结果有较大偏差, 无法对实验进行有效预测与指导。另一方面, 在复杂、极端的条件下, 实验上要对复杂体系进行实时、动态、原位表征也十分困难, 导致实验数据也存在不完整、不准确的情况, 从而使得理论与实验的相互验证变得更加困难。目前, 理论分析对实验数据的解释已经达到相当好的水平, 很大程度上帮助了实验科研人员对实验数据有了更深层次的认识, 形成了更好的物理图像。但是, 理论分析要想走到实验研究的前端, 去预测实验结果, 还有相当大的困难。这需要计算能力的进一步提升以及理论方法的进一步发展。当然, 也离不开实验方法和技术的提高。理论科学家要充分利用实验数据, 从实验结果中分析、凝练, 形成新的概念和理论, 从而达到进一步预测、指导实验的能力。只有理论、实验协同发展, 才能相互融合, 相互促进, 并取得突破性的进展。



(5) 兼具高空间、高时间以及高能量分辨的谱学与成像技术有待提高。

高分辨的谱学与成像技术是化学反应研究的保证。目前在超高真空理想条件下,对化学反应的动态过程进行高空间、高时间、高能量分辨的全方位的谱学和成像测量已经成为可能。这使得我们能够更加全面深入地理解化学反应。但是,对一些复杂化学反应体系的机理和动态过程的研究,依然有点力不从心。需要发展具备高时间、高空间、高能量分辨的谱学和成像技术,才能全面研究燃烧、大气、化学激光、表面催化等过程中重要化学反应过程中的动态学难题。

(6) 已有大科学装置的有效利用仍需进一步加强。

由国家自然科学基金委资助搭建的“大连极紫外相干光源”已于2018年通过验收并投入运行,这是基于高增益谐波产生模式的、具有超高亮度和超快时间特性的可调极紫外相干光源的综合实验装置。已建成的大科学装置应该得到充分利用,要想让极紫外相干光源充分发挥作用,助力我国科技的发展,增强我国在国际上的科学和技术竞争力,就应该立足于把它应用于更多相关科学研究领域,如原子和分子的量子调控、生物分子等体系的高灵敏探测以及其他复杂体系过程的研究。因此探索、发展和研制能够充分利用可调极紫外相干光源的化学反应动态学实验研究的技术和设备,显得尤为重要。

(7) 对化学反应体系的干预和主动控制能力还不够。

控制化学反应的过程一直是化学家们梦寐以求的理想。控制化学反应的方法可以分作被动控制和主动控制。被动控制是尽可能地制备处于适当量子态上的反应物,再让反应体系按着自身的反应特性自行反应;主动控制则不仅制备处于合适量子态上的反应物分子,而且在反应过程中对反应体系进行干预,“引导”反应体系沿着人们希望的路径和方向所进行演化而生成特定的产物。通过调控反应物的量子态和在反应过渡态区域的量子态等手段来探索主动和被动控制化学反应的原理和方法,将使得人们对化学反应动态学过程有更深入的认识。同时,也会发现更多的化学动态学的规律和动态学新现象。目前对化学反应的控制仍处于初级的阶段,亟需进一步加大反应机理的研究,并发展相关实验手段,以达到控制化学反应的能力,促进化学科学的发展。

(8) 自行研制仪器设备的能力亟待加强。

先进科学仪器设备对化学科学的发展起着举足轻重的作用。目前我国诸多实验室都已配备了进口的先进实验仪器,但是我国科学家自行研制的原创性精准化、微型化、智能化的科学仪器设备少之又少。尽管我国科研人员在分子设计、药物合成、材料制备等方面具有较大的优势,但是仪器设备的研制方面仍然是短板。与计算化学软件类似,目前我国的科研设备多为商业产品或部件集成,面临进口管控、技术封锁等方面的极大风险。因此,在仪器设备的研制方面亟待加强。

(9) 原创性、引领性的工作仍然偏少。

化学理论与机制研究关注实验现象背后深层次的机理,尤其要注重工作的原创性、引领性。目前,我国在这方面的研究中也提出了一些原创性的概念和机理,例如双极磁性半导体、聚集诱导发光等。但是,仍然还有很多研究属于热点追踪,太多重复性工作,缺乏原创性和引领性。今后需要加强对机理的深入研究,在深刻理解机理的基础上,进行原始创新,提出新概念、新机理,创制新仪器。

(10) 既懂理论研究又懂实验研究的高水平复合型创新人才队伍建设亟需加强。

想要从原子尺度理解实验现象背后的科学本质问题,需要将理论与实验研究结合起来。理论科学家与实验科学家之间需要有共同的语言,形成良好的沟通,才能针对某个共同的科学问题,协同攻关。然而,理论科学家和实验科学家在很多情况下并不能形成良好的沟通,相互之间不能理解对方的专业语言。实验研究人员不懂理论框架,而理论研究人员又不熟悉实验仪器与实验条件,形成了理论与实验的严重脱节,最终可能直接导致对实验机理的错误理解,更谈不上利用理论预测实验和指导实验。目前,大部分研究人员是仅懂理论或仅懂实验的单一型人才。为此,我们今后需要更加注重培养既懂理论又懂实验的高水平复合型创新人才,真正地促进理论与实验相互配合,相互促进。

## 4 学科的发展目标

### 4.1 发展理论模型与高效算法,实现理论预测实验结果、指导实验设计

发展高效的高精度电子结构算法和动力学模型,

提高计算精度和效率, 为实验研究提供更丰富的微观信息, 使得理论结果具有较强的预测性, 实现对大分子、聚集体等复杂体系的结构、动力学行为、反应过程等的理论预测, 以及分子水平上的功能材料设计、药物设计、材料合成等实验的理论指导.

具体的理论方法包括:

(1) 发展新的电子结构理论及交换关联泛函, 精确描述电子激发态、强关联电子体系;

(2) 针对大分子和凝聚相体系发展低标度的高效电子结构算法;

(3) 针对高维和凝聚相体系发展量子动力学方法以及多尺度动力学理论;

(4) 针对高分子链状结构特点, 发展系统的理论方法, 解决自组装、链折叠、链缠结、玻璃化转变和非线性流变等问题.

(5) 发展用于描述小体系和受限体系涨落效应以及环境耗散效应的动力学新方法;

(6) 发展针对多势能面的非绝热过程、激发态反应、表面化学反应等的动态学方法;

(7) 针对复杂体系发展高效率的采样方法、非平衡统计力学理论;

(8) 针对复杂体系、极端条件体系以及具有特殊相互作用体系, 发展化学热力学研究方法和理论, 揭示体系热力学性质与分子间相互作用以及微观结构间的内在联系.

## 4.2 实现人工智能时代大数据驱动的研究新范式

人工智能时代大数据驱动的研究新范式在化学研究中将扮演重要的角色. 为此, 需要将人工智能真正融入到理论计算的新模型中, 以大数据为前提, 结合机器学习和数据挖掘等技术, 发展新方法、新理论, 指导化学合成、材料优化与设计、新药物开发等研究. 力图基于人工智能技术, 提高电子结构计算和分子模拟的效率; 产生高精度的势函数库; 辅助材料设计; 促进新反应的发现; 大幅提高化学合成效率; 实现基于人工智能技术的新药前期开发等等. 预期实现的目标包括:

(1) 人工智能技术在合成反应研究模式中的有效应用;

(2) 人工智能在生物活性小分子和靶标确证中的应用;

(3) 基于人工智能的复杂化学体系中的机理发现;

(4) 构建与发展人工智能时代化学语言;

(5) 人工智能驱动的化学领域高效计算方法的发展;

(6) 人工智能时代数据体系标准的建立;

(7) 基于人工智能的谱图解析.

## 4.3 开发具有国际领先水平的我国自主知识产权的理论化学程序包

计算软件是理论化学的重大仪器, 是理论化学发展的基础. 需要针对我国超算体系的硬件架构, 开发由我国主导的具有国际领先水平且能被国内外同行广泛应用的理论化学程序包. 该程序包将包含电子结构计算和动力学计算两部分. 软件开发过程中使用已有理论的同时, 也将纳入我国学者提出的新理论新方法.

主要目标: 构建具有中国自主知识产权的、适应新一代硬件发展的、可扩展的通用计算科学软件包, 软件性能至少与同类型的商业软件功能相当, 且具有如下特色:

(1) 结合大数据和人工智能算法, 实现计算效率的大幅度提升;

(2) 针对我国自主研发的超算硬件设备进行优化, 充分释放国产超算的计算潜力;

(3) 基于分布式计算的核心代码实现, 充分发挥CPU和GPU的并行潜力;

(4) 模块化设计, 具有高度可扩展性;

(5) 通用的用户接口, 便于进行前处理、后处理及二次开发;

(6) 针对我国用户的需求进行开发, 为我国化学家的理论方法提供实现平台;

(7) 在软件开发的同时培养造就一批具有软件开发能力的理论化学家.

## 4.4 发展实验新方法、新技术, 研制新仪器

化学理论与机制领域一方面要巩固已有的优势领域, 另一方面还要通过新方法、新技术的发展和新仪器的研制, 不断开拓新的研究领域, 推动该学科向更深入的方向发展. 新方法、新技术的发展和新仪器的研制包括:

(1) 发展基于先进光源等大科学装置的高灵敏度和高时间分辨的实验探测技术, 进一步提高我国的化学动态学研究水平.

(2) 发展高空间、高时间以及高能量分辨的谱学与成像技术、交叉分子束-里德堡态氢原子飞行时间谱和超高分辨交叉分子束-离子速度成像等高分辨实验技术, 以及从超快时间尺度上跟踪观测激发态反应过程的飞秒时间分辨的先进激光光谱技术, 进一步推动新的谱学与成像先进技术在化学反应过程与机理研究中的应用。

(3) 发展化学热力学研究的先进科学仪器, 推动原创性精准化、微型化、智能化的专门热力学与热分析科学仪器、热力学与波谱等其它技术联用仪器的研制。

(4) 开发针对实时/原位反应、表界面过程、动态/瞬态/过渡态结构、分子间弱作用力、单分子/单颗粒/团簇与复杂体系的结构表征、高分辨识别等新型物化性质研究、测试的方法, 研发各种新型的多功能组合型仪器。

#### 4.5 面向材料、能源、环境、生命等领域中的关键应用, 发展新理论, 提出新机制

针对材料、能源、环境、生命等领域中的特殊关键问题, 建立新模型, 提出新概念和新思想, 解决材料、能源、环境等关键应用领域中的实际问题, 取得突破性进展。具体包括:

(1) 理论计算为催化、合成、材料、生命、能源、环境等相关领域的发展提供理论指导。

(2) 化学动态学研究对象从简单的气相体系扩展到与大气、燃烧、表面、生物等学科紧密相关的重要体系, 为与能源和环境等重要科学技术相关的化学反应过程的研究提供重要的实验和理论基础。

(3) 利用光物理和光化学原理, 设计新型激发态光氧化还原体系, 促进特殊化学键的生成或断裂, 高效制备新功能分子。

(4) 基于有机、无机、有机/无机杂化材料及生物体系, 研究太阳能光电转化和光化学转化的光物理和光化学机制, 及光催化分解水制氢、光催化二氧化碳还原、固氮等方面的反应原理、物理化学过程, 并系统研究激发态的产生与衰减、激发态能量转换与传输、电荷的分离、迁移及复合等基本过程。

(5) 针对生命科学、环境科学和国家安全需求, 发展新型发光探针和示踪成像材料, 包括长波长发光探针, 多光子、光声、光热成像等, 并对其原理和检测

技术开展研究。

(6) 通过对软物质非线性响应的动力学行为的基础研究, 深入理解生命体的复杂现象, 为疾病防控等的研究提供分子层面的理论指导。

#### 4.6 提前布局面向量子计算的理论化学新方向

量子计算是一种遵循量子力学规律调控量子信息单元进行计算的新型计算模式, 将有可能使未来的计算能力远远超过今天的计算能力。但是目前仍然有很多障碍, 例如, 如何实现保持足够多量子比特的长时间相干, 同时在这段时间内实现足够多的具有高精度的量子逻辑操作。

另外, 面向量子计算机的发展需要开发针对电子结构理论等的量子算法。量子计算机具有与经典计算机完全不同的结构, 其基本信息单元为量子比特。所有现在面向经典计算机的理论化学算法都需要重新设计成量子计算机算法, 利用量子纠缠特性, 实现计算性能的巨大提升。

### 5 学科的优先发展领域

#### 5.1 大数据时代理论化学方法的发展与应用

(1) 基于人工智能技术的理论化学方法的发展;

(2) 面向量子计算的理论化学方法的发展;

(3) 面向真实环境和复杂体系模拟的理论化学方法的发展;

(4) 理论化学新方法在催化、能源、材料、生物、环境等多种复杂体系中的实际应用。

#### 5.2 新超算构架下的计算化学软件的开发与应用

(1) 基于我国新超算构架下的电子结构和分子动力学计算化学软件的开发, 实现我国计算化学软件的从无到有, 再到优;

(2) 针对真实环境和复杂系统模拟的计算化学应用软件的开发;

(3) 新超算构架下的计算化学软件的测试及应用。

#### 5.3 化学反应的动态机理及调控

(1) 基于极紫外相干光源的基元化学反应动力学实验技术的发展;

(2) 兼具高空间、高时间以及高能量分辨的谱学与

成像技术的发展;

(3) 多原子反应体系高精度势能面构造方法和精确量子动力学理论方法的发展;

(4) 新技术、新方法在气相分子、团簇、凝聚相及表界面等反应动态机理研究中的应用;

(5) 激发态动力学及化学反应动态调控;

(6) 能源、材料、生命、环境、天文、国防等领域的化学动力学研究。

#### 5.4 光化学反应过程、机理及应用

(1) 复杂体系中的光物理及光化学理论方法与实验技术;

(2) 光功能材料的光物理过程与光化学机制;

(3) 发光及光子学材料器件的光物理过程与谱学研究;

(4) 面向生物分子影像(2D, 3D)的光化学与光物理过程研究;

(5) 光化学反应制备精细化学品与生物材料的新原理与新应用。

#### 5.5 高分子的行为机制

(1) 高分子理论模拟和表征的新方法与新技术;

(2) 从高分子单链到聚集态结构与动力学的研究;

(3) 高分子聚集态结构的形成机制与调控;

(4) 先进高分子材料的构效机制;

(5) 高分子与信息、能源、环境、生命等交叉领域的基础研究。

#### 5.6 化学热力学理论、实验及应用的新发展

(1) 化学平衡、相平衡及非平衡态的理论及实验研究;

(2) 化学热力学参数测量的新方法与新技术;

(3) 复杂体系的化学热力学与微观结构;

(4) 生命、能源、材料、食品等复杂体系中的化学热力学。

#### 5.7 结构化学

(1) 结构化学实验与理论研究新方法与新技术;

(2) 纳微尺度与限域空间中结构的精准化研究和物理化学行为调控;

(3) 动态结构表征的新方法与新技术;

(4) 动态、智能响应与能量转换;

## 6 优化学科布局与申请代码调整

《中共中央关于制定国民经济和社会发展第十四个五年规划和二〇三五年远景目标的建议》中提出通过优化学科布局等措施强化国家战略科技力量。自然科学基金委员会提出了包括明确资助导向、完善评审机制及优化学科布局的改革任务<sup>[3-6]</sup>。学科申请代码是开展科学基金项目申请、评审、资助和管理的工具,对引领学科发展有重要影响。因此,调整申请代码是基金委优化学科布局的首要步骤。

### 6.1 原学科申请代码介绍

自2018年启用的化学理论与机制领域(申请代码:B03)共包括8个二级代码以及42个三级代码(详见表1)<sup>[7]</sup>。此两级申请代码基本涵盖了化学理论与机制的研究内容,在近三年的项目申请和管理中发挥了积极作用。

### 6.2 申请代码调整情况介绍

在化学理论与机制“十四五”及中长期发展规划的指导下,遵循基金管理服务与优化学科布局的原则,目前化学理论与机制领域申请代码结构在基金管理中仍面临一些挑战,存在以下问题:

(1) 原有8个二级申请代码之间的内在逻辑关系仍需进一步梳理与厘清;

(2) 原有部分申请代码的内涵有待优化。如“B0301理论与计算化学”包含理论与方法的发展和运用,这两部分研究的侧重点和研究手段有较大区别,因此把这两部分进行了划分;“B030105化学程序与软件”是化学理论与计算研究的重要工具,一直以来都得不到重视,为鼓励冷门领域和“坐冷板凳”的研究,将原有三级代码调整为二级代码;“B0306化学反应机制”下设置了三级申请代码“B030605单分子电子学”和“B030606分子磁学”,但从项目受理情况看,二者与反应机制内容并不相符,因此进行了适当调整。

(3) 原有代码体系对学科方向的覆盖仍需扩充,如面向前沿的人工智能等研究方向未充分体现。

基于上述考虑,化学科学部进一步优化了化学理论与机制领域的申请代码(B03)。新的申请代码下设11



**表 1** 2018~2020年期间自然科学基金委化学学部所使用的原化学理论与机制申请代码

**Table 1** Application codes of chemical theory and mechanism area in the department of chemical sciences of NSFC in 2018–2020

二级申请代码	三级申请代码
B0301 理论与计算化学	B030101 量子化学
	B030102 化学统计力学
	B030103 化学动力学理论
	B030104 计算模拟方法与应用
	B030105 化学程序与软件
B0302 化学热力学	B030201 化学平衡与热力学参数
	B030202 溶液化学
	B030203 量热学
	B030204 复杂流体
	B030205 非平衡态热力学
	B030206 统计热力学
B0303 化学动力学	B030301 宏观动力学
	B030302 分子反应动力学
	B030303 超快与激发态动力学
	B030304 燃烧化学动力学
	B030305 非绝热动力学
B0304 结构化学	B030401 溶液结构
	B030402 表面结构
	B030403 体相结构
	B030404 纳米及介观结构
	B030405 动态结构
	B030406 结构表征方法与技术
B0305 光化学与光谱学	B030501 激光光谱学
	B030502 分子光谱学
	B030503 激发态化学
	B030504 光化学与光物理过程
B0306 化学反应机制	B030601 理论无机化学
	B030602 无机反应热力学与动力学
	B030603 有机化学反应机制
	B030604 理论与计算有机化学
	B030605 单分子电子学
	B030606 分子磁学
B0307 高分子物理与高分子物理化学	B030701 高分子表征方法
	B030702 大分子理论、计算与模拟
	B030703 高分子结晶与相变机制
	B030704 高分子结构、性能与动态过程
	B030705 高分子流变学
	B030706 大分子链行为与相互作用

个二级代码, 下面就申请代码内涵及其调整情况进行简要介绍, 供项目申请人参考。

#### (1) 化学理论与方法(B0301)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0301理论与计算化学”中的3个三级申请代码及其研究方向: 量子化学(B030101), 化学统计力学(B030102)和化学动力学理论(B030103)。

#### (2) 化学模拟与应用(B0302)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0301理论

与计算化学”中的1个三级申请代码及其研究方向: 计算模拟方法与应用(B030104)。

#### (3) 化学热力学(B0303)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0303化学热力学”中的三级申请代码及其研究方向。

#### (4) 化学动力学(B0304)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0303化学动力学”中的三级申请代码及其研究方向。

#### (5) 结构化学(B0305)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0304结构化学”中的三级申请代码及其研究方向。

#### (6) 光化学与光谱学(B0306)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0305光化学与光谱学”中的三级申请代码及其研究方向。

#### (7) 化学反应机制(B0307)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0306化学反应机制”中的4个三级申请代码及其研究方向: 理论无机化学(B030601), 无机反应热力学与动力学(B030602), 有机化学反应机制(B030603)和理论与计算有机化学(B030604)。

#### (8) 分子电子学与分子磁学(B0308)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0306化学反应机制”中的2个三级申请代码及其研究方向: 单分子电子学(B030605)和分子磁学(B030606)。

#### (9) 高分子物理与高分子物理化学(B0309)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0307高分子物理与高分子物理化学”中的三级申请代码及其研究方向。

#### (10) 化学信息学与人工智能(B0310)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0308化学信息学”中的三级申请代码及其研究方向, 并新增了人工智能的研究方向。

#### (11) 化学程序与软件(B0311)

本申请代码继承了原二级申请代码“B0301理论与计算化学”中的1个三级申请代码及其研究方向: 化学程序与软件(B030105)。

## 7 实现途径

为确保落实十四五规划的战略部署, 实现战略目标, 必须充分发挥基金管理水平, 实施卓越的管理战

略, 做好基础研究自由探索和目标导向两方面的健康协调发展. 在总结“十三五”工作的经验基础上, 针对当前主要矛盾和突出问题, 提出以下保障措施:

(1) 改善评价、评审机制, 鼓励源头创新

发展新方法、开发新技术、研制新仪器、提出新机制是化学理论与机制领域发展的明确目标. 鉴于学科的性质和特色, 必须把支持源头创新作为该学科基础研究的根本出发点. 发展新理论、新方法、新技术需要开展长期艰辛的工作, 不能盲目跟热点、追求短平快. 因此, 必须改变对科研工作的评价标准, 不同的研究属性采用不同的评价标准, 坚决不以SCI及其引用数作为唯一的评价尺度. 把原创性和系统性作为项目评审的两把尺子, 进一步改进评审方式, 完善专家遴选原则, 建立专家负责任、讲信誉、计贡献制度, 提高评审质量. 全力为学科营造踏踏实实搞科研的环境, 引导我国学者潜心专研, 激发他们勇于挑战科学难题、敢于开辟全新领域的勇气, 切实加强对原创性项目的支持.

(2) 加强项目管理, 完善成果验收和共享机制

完善适合基础研究特点的科学基金绩效评估体系. 对重点、重大等项目以及人才类项目进行行之有效的持续跟踪, 完善项目中期检查、结题验收的评审程序. 针对不同类型的项目定位建立不同的成果验收方式.

完善科学基金资助项目研究成果报送与登记制度, 注重科学基金资助成果的知识产权保护; 加强科学基金项目研究成果的集成和宣传, 建立成果管理信息发布系统和成果展示与利用平台, 促进基础研究学术信息资源的共享和利用.

(3) 加大人才队伍建设, 确保研究队伍健康快速发展

进一步加大青年基金项目的支持, 鼓励青年学者进行源头创新, 挑战高复杂度、高难度的课题, 进而做出有一定影响的系统性、原创性的工作, 避免在低层次、跟风式课题上的简单重复. 进一步完善“优秀青年基金”和“杰出青年基金”的评审机制, 做到更加公开、公正、透明、合理, 真正遴选出具有独立能力、

独特思想, 且真正具有科研兴趣和科研潜力的青年才俊.

进一步加大创新研究团队建设, 鼓励真正需要交叉且能交叉的团队深入合作, 解决一些单兵作战不能完成的重大科学问题.

(4) 优化资源配置, 坚持有所为有所不为

结合本学科的特点和现状, 面向未来时代特征和学科发展趋势, 加强优势方向、扶持薄弱方向、促进前沿方向、鼓励交叉合作, 统筹规划、重点布局, 实现面向未来的资源优化配置, 坚持有所为有所不为, 争取做出引领性的创新成果.

(5) 强化学术道德建设, 加强监督管理

加强对科学基金申请、受理、评审、实施等环节的监督, 维护科学基金制度的公正性. 加强管理队伍廉政勤政建设, 倡导密切联系科学家, 真心依靠科学家, 热情服务科学家, 形成科学家和科研管理人员互相监督的管理模式, 共同营造风清气正的学术环境.

明确项目负责人的责任和义务, 反对和杜绝一切学术不端行为, 建立不端行为预防和惩戒体系. 加强科学基金各项工作中的学术道德建设, 阻止在项目申请过程中打招呼、找关系的不良做法, 强化项目依托单位的监管责任, 保证科学基金项目的合理、合规的实施.

## 8 结论与展望

(1) 化学理论与机制十四五及中长期发展规划系统梳理了学科内涵、发展规律及现状, 提出了未来学科的发展目标和若干优先发展领域, 并对发展目标的实现途径进行了探讨.

(2) 新的申请代码在“继承-发展”原有申请代码基础上作了进一步优化, 涵盖了与化学理论与机制相关的研究方向.

(3) 为进一步提高项目评审指派工作的精准度, 建议申请人在充分理解申请代码内涵基础上准确选择二级申请代码, 并尽量选择最合适的研究方向和系统关键词.

**致谢** 谨向参与讨论和起草工作的所有人员表示诚挚的谢意! 向提出意见与建议、亲自撰写、审读规划草案的所有专家学者表示诚挚的感谢! 向所有关心、指导这项工作的领导和同事表示诚挚的感谢!

---

## 参考文献

---

- 1 Zhang G, Fu X, Zheng Q, Chen Y. *Sci Sin Chim*, 2020, 50: 681–686 (in Chinese) [张国俊, 付雪峰, 郑企雨, 陈拥军. 中国科学: 化学, 2020, 50: 681–686]
- 2 Xu X, Wu Y, Fang W, Shuai Z, Gao F, Zhang S, Meng Q, Lei J. *Bulletin of National Natural Science Foundation of China*, 2018, 32: 53–62 (in Chinese) [徐昕, 吴云东, 方维海, 帅志刚, 高飞雪, 张守著, 孟庆峰, 雷惊雷. 中国科学基金, 2018, 32: 53–62]
- 3 Dai Y, Gao F, Wang C, Chen Y. *Acta Phys-Chim Sin*, 2020, 36: 2003034 (in Chinese) [戴亚飞, 高飞雪, 王翠霞, 陈拥军. 物理化学学报, 2020, 36: 2003034]
- 4 Zhang G, Fu X, Dai Y, Chen Y. *Acta Phys-Chim Sin*, 2020, 36: 2003051 (in Chinese) [张国俊, 付雪峰, 戴亚飞, 陈拥军. 物理化学学报, 2020, 36: 2003051]
- 5 Fu X, Huang Y, Cui L, Chen Y. *Acta Phys-Chim Sin*, 2020, 36: 2004002 (in Chinese) [付雪峰, 黄艳, 崔琳, 陈拥军. 物理化学学报, 2020, 36: 2004002]
- 6 Fu X, Dai Y, Huang Y, Cui L, Chen Y. *Acta Phys-Chim Sin*, 2020, 36: 2004048 (in Chinese) [付雪峰, 戴亚飞, 黄艳, 崔琳, 陈拥军. 物理化学学报, 2020, 36: 2004048]
- 7 国家自然科学基金委员会. 2020 年度国家自然科学基金项目指南. 北京: 科学出版社, 2020

## Overview of development plan of chemistry theory and mechanism discipline

Yafei Dai<sup>1\*</sup>, Xiangjian Shen<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085, China

<sup>2</sup> School of Chemical Engineering, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China

Corresponding author (email: [daiyf@nsfc.gov.cn](mailto:daiyf@nsfc.gov.cn))

**Abstract:** As an important basis of chemical sciences, the fundamental task of chemical theory and mechanism is to study the basic principles in chemistry, reveal the reaction mechanisms and basic laws of chemical reactions and related processes, which strongly supports for the developments of other related disciplines. As one reference, this article briefly introduces some plans about Chemical Theory and Mechanism (Application codes: B03, Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China (NSFC)) including the “14<sup>th</sup> Five-Year Plan” and medium- and long-term development plans, discipline layout, application codes and research directions. New application codes in NSFC have begun in 2021.

**Keywords:** National Natural Science Foundation of China, chemical theory and mechanism, development plan, discipline layout, application codes

doi: [10.1360/SSC-2021-0056](https://doi.org/10.1360/SSC-2021-0056)