多层次手性物质的精准构筑重大研究计划2022年度项目指南

　　手性与生命现象密切相关，也显著影响物质的性能，手性科学的发展对人类社会的进步做出了巨大贡献。然而，当前手性物质的研究面临着新的挑战，如：能够实际应用于手性医药和农药生产的合成技术依旧屈指可数；在超分子和材料层次上缺少获得单一镜像异构体高效和普适的方法；表征技术和理论的缺乏严重制约了手性材料的发展和应用。因此，开展多层次手性物质精准构筑的研究具有重要意义，并有望为医药、农药、信息和材料领域提供核心技术支持。本重大研究计划将集化学、物理、材料、生物等学科的优势力量，提升我国在手性科学领域的创新能力。

　　一、科学目标

　　以多层次手性物质的精准构筑为核心，通过多学科交叉和新技术运用，实现手性分子、手性大分子、手性超分子和手性材料单一镜像异构体的高效制备，揭示手性产生、传递、放大和调控的机制和规律，阐明手性物质的结构-功能关系，发展精准和规模创造手性功能分子和材料的关键技术，形成新的学科生长点，显著提升我国在手性物质研究领域的原始创新能力和国际竞争力。

　　二、核心科学问题

　　（一）单一镜像异构体的精准构筑。

　　（二）手性传递放大的机制与规律。

　　（三）不同镜像异构体的手性效应与功能。

　　三、2022年度资助的研究方向

　　围绕上述核心科学问题，本年度以“重点支持项目”和“集成项目”的形式开展资助工作，鼓励开展多层次、跨尺度的手性物质构筑、表征或功能的融合与交叉研究。

　　（一）重点支持项目。

　　1. 设计新型手性大分子、手性超分子和手性材料，发展获得其单一镜像异构体的有效方法，研究分子以上层次手性物质的组装与结构，探索手性产生、传递、放大和调控的机制与规律。

　　2. 研究手性物质在物理和生物等方面的性能，探索手性物质表征的新原理、新技术、新方法，阐释手性物质结构与其特性之间的关系，发展新的手性功能分子和材料。

　　（二）集成项目。

　　在本重大研究计划前期执行的基础上，进一步聚焦手性物质精准构筑的关键科学问题，对以下研究方向进行项目集成：

　　1. 对映选择性自由基和卡宾反应。聚焦有机化学反应中重要的中间体，拓展基于自由基和卡宾中间体的对映选择性合成化学，揭示对映选择性调控规律。包括以下方向：烃类化合物经自由基和卡宾过程的高效不对称转化新反应；自由基和卡宾反应的动态变化机制及对映选择性调控。

　　2. 不对称碳氢键活化。发展应用于天然产物、药物和材料等功能分子合成的高效、高选择性不对称碳氢键活化新反应，揭示催化过程中的活性和选择性控制规律。包括以下方向：烃类分子高效、高位点选择性和高对映选择性的碳氢键活化新反应；催化剂电性、立体位阻以及手性环境对反应活性和选择性的影响规律。

　　3. 新型手性配体和催化剂。聚焦新型高效手性配体及金属催化剂，揭示手性配体骨架、配位原子、非共价相互作用、金属价态和自旋态以及受限环境等因素对催化剂性能的影响规律，创制具有自主知识产权的高效手性金属催化剂。包括以下方向：基于优势骨架的手性配体及其丰产金属催化剂；多功能手性催化剂和协同催化新体系。

　　4. 手性光电功能材料和器件。聚焦高不对称因子(g)和高效率的手性光电功能材料及器件，研究多层次手性结构对手性光电性能的传递、放大和调控机制，实现手性光电材料的应用。包括以下方向：高g因子（g > 1）和高光电转化效率的手性小分子、聚合物、半导体发光材料、液晶材料及圆偏振发光器件的构筑；手性材料和器件与g因子、光电转换效率等的构效关系及规律。

　　5. 功能导向手性超分子组装体。聚焦功能导向手性组装体，发展多组分、多层次超分子组装体，揭示跨层次、跨尺度手性传递与放大规律，实现功能导向手性物质的精准合成，为新型手性材料的构筑提供理论和物质基础。包括以下方向：功能导向手性大分子、超分子和组装体及其材料的构筑新方法；多级次手性分子选择性识别、传递和组装规律。

　　6. 生物和仿生催化。融合化学与生物学，发展生物催化和仿生催化新策略、新方法和新反应，探索生物体系中手性物质的合成机制及其生物学效应。包括以下方向：手性物质创制相关的酶学机制；仿生催化新体系、新反应和新催化模式以及基于人工智能和定向进化等技术的新酶体系；基于生物和仿生催化的手性药物及其中间体的规模化绿色制造。

　　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项目总体目标的贡献。

　　鼓励多学科实质性交叉合作研究，优先考虑数理、信息、生命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。重点支持项目资助科学问题明确、原始创新性强、学科交叉特征明显的项目申请。集成项目要在前期已经取得的重要进展基础上，进一步聚焦核心科学问题，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。

　　五、2022年度资助计划

　　拟资助重点支持项目1-3项，直接费用资助强度为200-300万元/项，资助期限为4年，申请书中研究期限应填写“2023年1月1日-2026年12月31日”；拟资助集成项目3-4项，直接费用资助强度为800-1000万元/项，资助期限为3年，申请书中研究期限应填写“2023年1月1日-2025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《2022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、《2022年度国家自然科学基金项目指南》和《关于2022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2022年3月16日－3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”或“重点支持项目”，附注说明选择“多层次手性物质的精准构筑”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。

　　重点支持项目的合作研究单位不得超过2个，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、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2022年3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3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

 　化学科学部一处

　　联系电话：010-62327170