

化学科学部重大项目指南

2026 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。

“面向高效器件的超晶格材料化学合成与功能”

重大项目指南

高性能存储是人工智能和信息技术发展的关键，非易失性存储器是实现数据持久存储、系统启动和信息安全的核心组件。插层超晶格材料由于其结构可编程性与功能可调控性，有望为大幅度提高非易失性存储器件性能提供解决方案。本项目针对当前非易失性存储器件持续小型化的需求和功耗高的难题，发展精准合成策略与多尺度调控方法，构建具有高效电荷/自旋输运能力的插层超晶格材料体系，为下一代高性能非易失性存储器件提供物质基础，提升我国在相关领域的自主可控能力与国际竞争力。

一、科学目标

建立插层超晶格材料的理性设计与精准构筑方法，实现功能位点在原子尺度的精准排布、定向集成与协同调控，提高结构稳定性和电子态可调性；阐明多级插层结构对电荷与自旋输运行为的影响规律，揭示结构-能带-输运特性间的内在构效关系及多场调控机制；发展多维度界面能级与几何构型匹配的器件构筑新策略，大幅度提升非易失性存储器件性能。

二、关键科学问题

- (一) 插层超晶格结构精准设计与创制的化学原理。
- (二) 插层超晶格材料电荷与自旋输运及存储机制。
- (三) 非易失性存储器件中的界面构筑与调控规律。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“面向高效器件的超晶格材料化学合成与功能”，申请代码 1 选择 B01 及其下属申请代码（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

(二) 咨询电话：010-62329320。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

“曲面共轭富碳分子的精准创制与功能”

重大项目指南

曲面共轭富碳分子凭借其独特的拓扑结构,表现出特殊的光、电、磁等性质,是支撑未来碳基高科技产业的重要物质基础,对培育和发展新质生产力具有重大战略意义。本项目针对高张力及复杂拓扑结构的曲面共轭富碳分子的合成难题,发展高效精准的合成方法与策略,协同提升成键效率与选择性,创制结构明确的新型曲面共轭富碳分子与材料,深入挖掘新奇物理化学性质,赋能碳基分子材料的功能开发与变革性应用,抢占相关领域国际前沿研究制高点。

一、科学目标

发展兼具高效率与高选择性的新成键反应与合成策略,突破高张力与复杂拓扑分子的合成极限,结合理论计算与人工智能手段,设计并合成结构独特、具有重大应用前景的曲面共轭富碳分子;阐明该类分子基元的可控组装规律,实现从分子到材料的跨尺度构建,建立针对复杂或亚稳态共轭富碳分子结构和物性的高分辨、高灵敏表征方法;挖掘此类分子和材料的新奇物性与功能,揭示结构与功能之间的本征构效关系,探索其在物质转化、能源存储、电子信息等领域的应用。

二、关键科学问题

(一) 高张力富碳分子理性设计与精准合成方法。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

(二) 复杂拓扑曲面的精确结构与新奇性质测量。

(三) 曲面共轭富碳材料独特功能。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“曲面共轭富碳分子的精准创制与功能”，申请代码 1 选择 B01 及其下属申请代码（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

(二) 咨询电话：010-62329320。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

“碳基量子磁体的表面精准合成及其多域物态调控”

重大项目指南

碳基量子磁体是一类新型碳纳米磁性材料。其中，主要由碳原子排列形成的平面拓扑结构材料具有独特的电子自旋离域性质，在量子信息领域意义重大。本重大项目致力于碳基量子磁体材料的表面精准制备与探测、量子态调控和器件构筑，为未来信息产业发展奠定科学和技术基础。

一、科学目标

发展碳基量子磁体的表面在位精准合成新策略，建立其多域物态的高精度探测与量子调控新方法，揭示结构与自旋特性之间的构效关系，实现碳基量子材料与性能的按需定制，构筑原理型碳基自旋器件，引领国际量子信息科技前沿研究。

二、关键科学问题

- (一) 碳基量子磁体原子精度的表面合成与结构调控规律。
- (二) 碳基量子磁体多域物态的原子尺度单自旋分辨探测原理。
- (三) 碳基量子自旋器件的量子态调控与构筑机制。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“碳基量子磁体的表面精准合成及其多域物态调控”，申请代码 1 选择 B02 及其下属申请代码（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

杨明东 浙江大学

(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。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

“面向高端化学品创制的多相表界面化学”

重大项目指南

高端化学品已成为制约我国新材料、新能源、集成电路、生物医药等重大领域快速发展的瓶颈之一。其核心科学问题是通过调控反应选择性获得高纯度的高端化学品。本重大项目聚焦含氧、含氮等高端化学品高效合成，设计具有选择性氧化功能的多相表界面体系，创制高效选择氧化催化剂，发展绿色低碳催化新工艺。

一、科学目标

构建氧化物、金属多相催化体系，发展界面及缺陷结构的精准表征方法，揭示表面活性物种的动力学形成机制；阐明多相界面反应物间协同活化转化机理，建立催化剂定量构效关系；创制以分子氧等为氧化剂的环氧化、氨氧化、酰氧化等高效催化剂，形成具有我国自主知识产权、国际领先的环氧丁烷、甲基丙烯腈、醋酸丙烯酸酯等高端化学品高纯、绿色合成新工艺。

二、关键科学问题

- (一) 活性氧物种识别、转移路径及选择性氧化机制。
- (二) 选择氧化催化剂多相界面的构筑与调控原理。
- (三) 高端化学品合成动力学网络模型和选择性控制规律。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“面向高端化学品创制的多相表界面化学”，申请代码 1 选择 B02 及其下属申请代码（以上选

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

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。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

“基于先进光源的靶蛋白-药物分子动态互作测量方法”

重大项目指南

先进光源作为推动我国科学发展的国之利器，有望为生物分子动态互作研究提供变革性方法。靶蛋白中广泛存在着与重大疾病密切相关的致病性突变以及翻译后修饰等变体，其独特构象和互作网络为药物研发拓展了新的靶向空间。精确测量靶蛋白的变体构象及其与药物分子的动态互作是药物研发领域的瓶颈问题，亟需发展基于先进光源的动态构象分辨、高时空精度的多尺度测量原理与技术。

一、科学目标

建立基于先进光源大科学装置的靶蛋白-药物分子动态互作多尺度测量方法，揭示肿瘤、神经退行性疾病等重大疾病中靶蛋白致病性构象，解析靶蛋白-药物分子复合物高精度结构，生理环境下表征靶蛋白-药物分子互作的生物效应，为新药创制提供引领性测量工具和方法。

二、研究内容

（一）靶蛋白变体多构象动态解析。

基于先进光源，发展自由电子激光解离质谱仪器和方法，解析靶蛋白致病性构象及其与药物分子动态互作的关键位点。

（二）靶蛋白-药物分子复合物结构高精度解析。

结合高能同步辐射与硬 X 射线自由电子激光，在原子尺度解

析靶蛋白致病性变体与药物分子复合物的精细结构。

(三) 生理环境下靶蛋白-药物分子互作的生物效应研究。

发展单细胞软 X 射线自由电子激光相干衍射成像方法，整合高能同步辐射成像与近红外-超声活体原位成像等技术，在细胞/组织/动物水平多尺度原位测量靶蛋白-药物分子动态互作的生物效应。

(四) 靶向蛋白致病性构象的药物分子发现与干预。

基于动态互作分子机制，开展靶向蛋白致病性构象的药物分子发现、结构设计和优化，获得有效干预先导分子。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“基于先进光源的靶蛋白-药物分子动态互作测量方法”，申请代码 1 选择 B04 及其下属申请代码（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

(二) 咨询电话：010-62329320。

“突破有机半导体关键极限性能的材料化学”

重大项目指南

有机半导体材料的载流子迁移率、能量转换效率等关键性能亟需大幅提升，以满足柔性电子、绿色能源等新兴产业的快速发展需求。突破有机半导体性能极限的核心科学问题是阐明激子/电子-声子耦合、载流子输运动力学与激发态演化规律。本重大项目聚焦有机半导体的材料化学基础研究，发展新一代有机半导体的分子设计原理，揭示载流子输运与能量转换新机制，创制突破性能极限的材料体系，为我国有机半导体产业自主可控、跨越式发展奠定材料化学基础。

一、科学目标

从分子设计原则、激子产生和湮灭动力学、激子/电子-声子耦合以及载流子输运等角度推进对有机半导体的新认知；创立新一代有机半导体材料的分子设计、聚集态调控方法及其相关理论体系；建立跨尺度界面构筑方法，发展系列具有自主知识产权的高载流子迁移率、高能量转换效率有机半导体材料及器件技术，推动有机半导体材料在新型显示、薄膜光伏、热电转换等关键领域的应用。

二、关键科学问题

- (一) 新一代有机半导体分子构筑原理及聚集态调控策略。
- (二) 激子/电子-声子耦合、载流子输运动力学与激发态演

杨明东 浙江大学

化规律。

杨明东 浙江大学

(三) 跨尺度界面构筑原理与关键性能协同提升机制。

杨明东 浙江大学

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“突破有机半导体关键极限性能的材料化学”，申请代码 1 选择 B05 及其下属申请代码（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。

“大气污染物与温室气体协同减排的化学机制”

重大项目指南

深入打好污染防治攻坚战是我国的重大战略需求，减污降碳协同增效已成为我国环境治理的核心方向。现有大气污染治理模式难以兼顾多污染物深度净化与温室气体协同减排。本项目围绕重点行业产生的大气污染物与温室气体多组分共存、难以协同深度治理的难题，旨在揭示多污染物与温室气体协同控制化学机制与规律，为构建复杂大气污染深度治理与资源化提供理论基础和关键技术支撑，推动重点行业绿色低碳可持续发展。

一、科学目标

面向我国冶金、建材、石化等重点行业大气污染物与温室气体协同减排的重大需求，聚焦减污降碳深度耦合过程中的关键化学基础问题，揭示大气污染物与温室气体在生成转化、净化及资源化过程中的协同/拮抗等互作机制，开发多污染物协同净化耦合温室气体深度减排技术，发展工业源复杂烟气污碳协同控制与资源化利用新技术原理和控制途径，为我国重点行业绿色低碳高质量发展提供环境化学理论基础和关键技术。

二、研究内容

(一) 烟气多污染物耦合深度减排化学机制及协同降碳策略。

围绕冶金、建材及石化行业烟气多污染物排放特点，研究多污染物一体化净化过程中的竞争吸附、协同转化与抑制效应，揭

示复杂烟气多组分耦合条件下反应路径、关键中间体与速率控制步骤，明确协同/拮抗产生的化学本质、温室气体氧化亚氮抑制产生及净化机制，提出适用于工业复杂条件的反应调控路径和协同降碳策略。

（二）氮氧化物与温室气体协同控制及资源化原理。

针对氮氧化物（NO、NO₂）与温室气体（CO₂、N₂O 等）同根同源排放特征，揭示反应活性位点构型、反应条件、复杂烟气毒副产物与传质过程对协同控制效率、选择性与稳定性的影响规律，阐明污碳协同控制中的反应路径耦合机制与毒副产物抑制机制。面向资源化利用，研究温和条件 NO_x 与 CO₂ 协同高值转化技术原理及其费效分析。

（三）挥发性有机物与温室气体协同控制及资源化原理。

针对石化和焦化等重点行业废气中挥发性有机物（VOCs）与温室气体（CO₂、CH₄ 等）共存情景，研究 VOCs 转化过程中的活化反应机理与选择性规律，阐明 VOCs 与温室气体协同净化技术原理，研发复杂废气协同治理过程中毒副产物的抑制方法，探索热/光/电等多场耦合的污染物与温室气体深度治理及资源化技术原理。

三、申请要求

（一）申请书的附注说明选择“大气污染物与温室气体协同减排的化学机制”，申请代码 1 选择 B06 及其下属申请代码（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

(二) 咨询电话: 010-62329320。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

“天然免疫调控的分子基础与化学干预”

重大项目指南

天然免疫系统是机体抵御外源病原体侵袭、维持生理稳态的第一道核心防线，其调控网络失衡与感染、慢性炎症、自身免疫病、肿瘤等多种重大疾病密切相关。目前，天然免疫调控网络的动态互作机制、时空调控规律尚未系统阐明，关键靶点挖掘与精准干预手段仍存在明显短板。本重大项目聚焦天然免疫信号转导、通路互作与修饰网络的动态化等重要特征，揭示天然免疫失衡与疾病发生发展的内在关联，研发化学生物学工具与精准干预体系，为重大疾病的防治提供新策略、新靶标与新途径。

一、科学目标

研发新型化学生物学研究工具，阐明天然免疫应答与调控的分子基础；系统解析天然免疫关键通路互作、修饰网络及时空动态特征，揭示其与疾病发生发展的内在关联；阐释关键调控节点介导的通路重塑机制，明确其在感染与慢性炎症疾病中的驱动作用；挖掘新型可干预靶点，构建高选择性化学干预策略与精准递送体系，为重大疾病的精准防控提供科学依据与技术支撑。

二、关键科学问题

(一) 天然免疫分子网络时空动态互作与修饰的化学新技术新方法。

(二) 重要天然免疫通路的稳态调控与重塑机制解析。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

(三) 天然免疫关键调控节点的挖掘与功能验证。

(四) 基于天然免疫重要通路的精准化学干预与智能递送体系。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“天然免疫调控的分子基础与化学干预”，申请代码 1 选择 B07 及其下属申请代码（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

(二) 咨询电话：010-62329320。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

“二氧化碳化学-生物耦合制备重要化学品的分子机制和过程强化基础”重大项目指南

发展可再生能源驱动的 CO₂ 高效转化，是缓解全球能源、资源危机和实现温室气体资源化利用的重要途径。然而，高效碳氧键断裂、碳碳键形成和碳链延长极具挑战。针对 CO₂ 化学-生物耦合转化过程中的分子机制、能质传递、工艺适配等关键科学问题，智能设计 CO₂ 高效转化过程，在碳氧键活化、碳链增长、化学-生物过程强化等方面形成新理论、新方法、新技术，为促进化工和生物制造等产业的技术创新和产业升级、实现我国“双碳”目标提供强有力的理论和技术支撑。

一、科学目标

研究利用 CO₂ 制备重要化学品的化学-生物耦合转化新过程。创建将 CO₂ 高效转化为生物可利用 C1/C2 化合物的电催化体系；构建高效细胞工厂，实现碳链延长；阐明化学-生物定向转化 CO₂ 制备重要化学品的分子机制，发展能质传递效率高、反应速率快的耦合新工艺，实现 CO₂ 高效制备 1,3-丙二醇、己二酸、燃料油脂等 3-5 种重要化学品的绿色新过程，并完成 1-2 个中试验证。

二、关键科学问题

- (一) CO₂ 碳氧键高效活化断裂及能质传递转化机制。
- (二) C1/C2 化合物代谢机制及碳链延长调控规律。
- (三) CO₂ 电催化-生物协同转化和过程强化机制。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“二氧化碳化学-生物耦合制备重要化学品的分子机制和过程强化基础”，申请代码 1 选择 B08 及其下属申请代码（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

(二) 咨询电话：010-62329320。

“亚纳米膜孔结构与传递机理”

重大项目指南

亚纳米孔膜分离技术对面向国家战略需求的极相似分子、离子分离具有独特优势。亚纳米膜孔结构的精密构筑、传递行为的准确描述，及其高时空分辨率的原位动态表征极具挑战，制约了相关新技术的发展。本项目基于智能驱动，旨在发展亚纳米孔结构的原位观测新手段，建立亚纳米孔内传递新理论，开发亚纳米孔膜精准构筑新方法，实现分子、离子分离过程，取得若干从基础研究到工业应用的研究成果，催生面向战略资源、清洁能源、生物医药等化学工业颠覆性技术。

一、科学目标

在亚纳米尺度下，理解、预测并调控物质与限域空间相互作用规律，建立具有超越传统性能的新型分离体系：发展亚纳米膜孔结构精密构筑与调控方法；建立数据智能驱动表征平台并解析亚纳米膜孔结构；阐明分子、离子在亚纳米膜孔中的传递新机理、构建新模型；设计高通量高选择性膜新材料体系；揭示亚纳米孔膜放大规律并实现规模化制备，完成 1-2 个相似分子、离子体系的分离过程中试验证。

二、关键科学问题

- (一) 分子、离子与亚纳米膜孔相互作用规律。
- (二) 亚纳米膜孔内分子、离子传递行为与机制。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

(三) 数据智能驱动的亚纳米孔膜设计、制备与放大规律。

三、申请要求

(一) 申请书的附注说明选择“亚纳米膜孔结构与传递机理”，申请代码 1 选择 B08 及其下属申请代码（以上选择不准确或未选择的项目申请不予受理）。

(二) 咨询电话：010-62329320。

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学

杨明东 浙江大学