# 基础科学板块“冷分子制备、物性与化学动力学”专项项目指南

　　冷分子和超冷分子的碰撞和化学反应是原子分子物理和物理化学领域研究的前沿课题，对其研究能从量子力学层面来深入认识和理解分子碰撞和化学反应机理，并有助于促进对常温下化学反应的研究。我国科学家在冷分子和超冷分子的碰撞和化学反应方面取得了一些具有原创意义的研究成果，受到了国际学术界的广泛关注。然而，冷分子和超冷分子的碰撞和化学反应研究在国际上仍处在起步阶段，一系列重要的科学难题没有得到解决，其难点主要表现在实验上制备和操控冷分子和超冷分子以及利用外场来操控化学反应极其困难，理论上对低温下分子碰撞和化学反应的精确计算也极具挑战。

　　国家自然科学基金委员会基础科学板块现启动“冷分子制备、物性与化学动力学”专项项目，旨在从最根本的层面来认识和理解化学反应过程，为设计和调控化学反应提供依据。专项倡导原始创新，鼓励物理和化学研究人员深度合作，共同推动这一前沿交叉领域的发展。

**一、科学目标**

　　发展新的方法和实验技术手段，结合理论获得对低温和超低温下分子的碰撞和化学反应的认识和理解。通过新的实验方法和制备新的超冷分子体系，探索超冷碰撞和反应中新奇的量子现象，从而获得在量子力学层面对超冷化学新的认识和理解。利用激光、电磁场等调控手段，对冷分子和超冷分子的碰撞和化学反应进行控制，实现冷分子化学反应动力学的精密测量与调控。通过对冷原子、离子和冷分子反应动力学的研究，结合高精度的分子势能面，发展高效冷分子传能和反应动力学理论，揭示微观动力学新的机制，并开拓冷分子化学在星际化学与天文观测等领域的应用。

**二、研究方向和研究内容**

**（一）超冷三原子分子系综的制备与操控（申请代码1选择数理科学部A21或A24下属代码）**

　　研究原子-分子Feshbach共振机制并发展理论模型。合成三原子分子并制备高相空间密度的超冷三原子分子系综，探测三原子分子的能级、寿命和磁矩等，研究光激发对三原子分子的影响。理论结合实验给出三体相互作用势能面的高精度描述。探索三原子分子内部结构和能级的操控方法。

**（二）外场调控下超冷分子的碰撞和反应（申请代码1选择数理科学部A21或A24下属代码）**

　　实现超冷分子多自由度单量子态精确操控，利用电场、微波以及囚禁势等外场调控分子间长程相互作用、少体碰撞和化学反应，对碰撞和反应过程进行精确表征，实现分子间散射共振、稳定的弹性碰撞和可控化学反应，发展分子间碰撞与反应的理论模型与计算方法。

**（三）冷分子化学反应超快动力学（申请代码1选择数理科学部A21或A24下属代码）**

　　制备不同种类百mK量级冷分子与团簇体系，在时间域直接观测激光诱导冷分子及分子间化学反应超快动力学，实现冷分子化学反应中间态与产物的时频域联合调控，揭示冷分子与液态超流环境相互作用的新效应。

**（四）里德堡超冷分子长程相互作用反应动力学（申请代码1选择数理科学部A21或A24下属代码）**

　　发展超冷里德堡分子超长化学键的直接成像技术，研究里德堡分子的束缚机制、非绝热跃迁效应、分子波矢演化动力学和分子动力学的时空效应等，实现超冷里德堡分子长程相互作用反应过程的高时空分辨率灵敏探测，实现分子动力学外场对分子量子态的精确调控，深入理解超冷里德堡分子内部量子动力学行为和分子间量子化学反应过程。

**（五）冷分子碰撞传能动力学（申请代码1选择化学科学部B03下属代码）**

　　在典型的冷分子体系，选择并调控分子特定的量子态、空间和自旋取向等性质，观测冷分子间非弹性碰撞过程；结合机器学习和量子化学计算构建高精度的多原子分子体系势能面，发展高效的多原子分子间非弹性碰撞的量子动力学方法及立体动力学理论，定量计算冷分子碰撞的态-态量子传能动力学性质，揭示其中的微观动力学新机制，进而实现对冷分子间碰撞传能过程的精准量子调控。

**（六）冷原子分子反应动力学（申请代码1选择化学科学部B03下属代码）**

　　发展冷原子、冷分子反应动力学实验方法，实现冷碰撞条件下的态-态反应动力学研究。选择具有关键性意义的冷分子反应体系，准确测量其反应速率以及分支比；结合高精度的分子势能面发展冷分子反应动力学理论，研究小质量数的分子反应中长程相互作用、非绝热过程、立体效应、以及量子干涉与共振等现象。研究星际等环境中可能实际存在的冷分子反应过程。

**（七）冷离子分子反应动力学（申请代码1选择化学科学部B03下属代码）**

　　研究超冷离子与量子态和速度选择的冷原子冷分子间的反应。对具有代表性的冷离子分子反应，精确测量其化学反应速率以及反应分支比，观测冷离子分子反应所特有的量子效应；结合高精度势能面以及量子动力学的理论计算模拟，研究离子分子反应中的长程相互作用、电荷转移过程和激发态动力学，分析低温下离子-分子化学反应的基本规律。

**三、资助计划**

　　本专项项目资助期限为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”。计划资助7-8项，平均资助强度为300-350万元/项，总资助直接经费为2400万元。

**四、申请要求及注意事项**

**（一）申请资格**

　　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**

　　1.本专项项目申请时不计入申请和承担总数范围，正式接收申请到自然科学基金委做出资助与否决定之前，以及获资助后，计入申请和承担总数范围。

　　2.申请人同年只能申请1项专项项目中的研究项目。

　　3.其他限项申请要求按照《2022年度国家自然科学基金项目指南》“限项申请规定”执行。

**（三）申请注意事项**

　　1.申请书报送日期为2022年11月21日—11月26日16时。

　　2.本专项项目申请书采用在线方式撰写。对申请人具体要求如下：

　　（1）申请人在填报申请书前，应当认真阅读本申请须知、本项目指南和《2022年度国家自然科学基金项目指南》的相关内容，不符合项目指南和相关要求的申请项目不予受理。

　　（2）本专项项目旨在紧密围绕“冷分子的制备、物性与化学动力学”，集中国内优势研究团队进行研究，成为一个专项项目群。申请人应根据本专项项目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、关键科学问题、技术路线和相应的研究经费等。

　　（3）申请人登录科学基金网络信息系统http://grants.nsfc.gov.cn/（没有系统账号的申请人请向依托单位基金管理联系人申请开户），按照撰写提纲及相关要求撰写申请书。

　　（4）申请书中的资助类别选择“专项项目”，亚类说明选择“研究项目”，附注说明选择“科学部综合研究项目”，**申请代码1应当根据“二、研究方向和研究内容”选择数理科学部或化学科学部相应的申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请将不予受理。**

　　（5）请按照“专项项目-研究项目申请书撰写提纲”撰写申请书时，**请在申请书正文开头注明“冷分子的制备、物性与化学动力学：XXX（填写拟资助的7个研究方向之一）”**。

　　申请书应突出有限目标和重点突破，明确对实现本专项项目总体科学目标和解决核心科学问题的贡献。

　　如果申请人已经承担与本专项项目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。

　　3.申请人应当严格按照《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》等相关规定和《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的具体要求，按照“目标相关性、政策相符性、经济合理性”的基本原则，认真编制《国家自然科学基金项目预算表》。

　　4.本专项项目采用无纸化申请，申请人完成申请书撰写后，在线提交电子申请书及附件材料。依托单位只需在线确认电子申请书及附件材料，无须报送纸质申请书，但应对本单位申请人所提交申请材料的真实性和完整性进行认真审核，在项目申请接收截止时间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；在申请截止时间后24小时内在线提交项目申请清单。项目获批准后，依托单位将申请书的纸质签字盖章页装订在《资助项目计划书》最后，在规定的时间内按要求一并提交。

　　5.本专项项目咨询方式：

　　国家自然科学基金委员会数理科学部

　　联系人：倪培根

　　联系电话：010-62326911

　　国家自然科学基金委员会化学科学部

　　联系人：黄艳

　　联系电话：010-62329320

**（四）其他注意事项**

　　1.为实现专项项目总体科学目标，获得资助的项目负责人应当在项目执行过程中关注与本专项其他项目之间的相互支撑关系。

　　2.为加强项目之间的学术交流，本专项项目群将设专项项目总体指导组和管理协调组，并将不定期地组织相关领域的学术研讨会。获资助项目负责人必须参加上述学术交流活动，并认真开展学术交流。