

## 化学科学部

### “鼓励探索、突出原创”典型案例 1

#### 一、项目背景 ( 重要性、必要性 ) 的阐述

硅是非常重要的主族元素，其应用已深入化工、食品、医疗、能源、农业等人类生产生活的几乎每一个领域并发挥着举足轻重的作用。近年来，含“硅”功能有机分子在药物、新材料和新型配体/催化剂开发等多个领域正展现出越来越重要的应用价值。硅元素的特殊理化性质赋予了含硅有机分子诸多功能上的新颖性，但也使其化学合成相比“碳”基分子更具挑战。因此，**“物质可及性匮乏”是目前制约含硅功能有机分子研究最主要的瓶颈，而其背后代表性的关键科学问题集中体现在：如何实现手性硅杂环的高效构建。**

#### 二、项目原创性 ( 从无到有 ) 的阐述

**针对“手性硅杂环的高效构建”关键科学问题，项目将从“试剂”和“方法”两方面进行原始创新。**第一，以可规模化制备、性质稳定、结构多样为标准，设计并开发氮杂环丁硅、季碳环丁硅、硅氮偶极子等新型有机硅试剂和合成子，实现“试剂”的从无到有；第二，探索手性硅杂环缩环、外消旋硅动态动力学拆分等新反应方法学，实现手性硅杂环构环“方法”的从无到有。

#### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

1、该项目拟开发的氮杂环丁硅、季碳环丁硅、硅氮偶极子等有机硅试剂和合成子是全新的有机硅物种，具有显著的原创性。

2、该项目拟采用的手性硅杂环缩环、外消旋硅动态动力学拆分等策略和方法目前尚未见诸报道，属于创新的设计构想。

3、该项目以“硅”为创新抓手，特色鲜明，在“试剂”和“方法”两方面均具有显著的原创性，是“鼓励探索、突出原创”的典型案例。

## “鼓励探索、突出原创”典型案例 2

### 一、项目背景（重要性、必要性）的阐述

微纳米颗粒是材料发挥光电化学功能的重要形态，不同颗粒个体的化学活性和功能往往不尽相同。深入理解导致颗粒个体之间性能差异的结构和动力学原因，是诸如能源、催化、传感等前沿领域所共存的研究关键。对单颗粒进行超快动力学测量和成像，存在瞬态信号弱的问题，传统超快成像技术或通过结合锁相放大技术来提取微弱的瞬态信号，或通过长时间的信号积分来提高信号强度。这些超快成像技术都存在一定局限，未能从测量原理上突破超快光谱的探测模式。

### 二、项目原创性（从无到有）的阐述

本项目聚焦“单颗粒超快动力学”这一在共性科学问题，针对单颗粒瞬态信号弱的测量难题，提出利用干涉效应和光场调制来放大微弱瞬态信号的研究思路；研制飞秒时间分辨和纳米空间分辨的飞秒干涉

散射显微镜 ( Femto-iSCAT ) 装置 ; 实现不同单颗粒及单颗粒上不同部位载流子分布、迁移及弛豫动力学的测量和成像。继而以等离激元催化、光催化等几种典型催化体系为研究实例 , 联用超分辨荧光成像技术 , 实现单颗粒化学活性和单颗粒动力学特性的同步测量 , 从载流子弛豫和迁移的动力学角度阐释导致单颗粒化学活性异质性的内在原因 , 促进单颗粒化学研究从“单颗粒效应”到“单颗粒机理”的发展和深入。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

本项目从实现“单颗粒超快动力学测量和成像”这一研究需求出发 , 针对单颗粒瞬态动力学测量的技术挑战 , 提出了利用干涉效应和光场调制来放大瞬态信号的新思路 ; 基于此思路自主研制飞秒和纳米时空分辨的飞秒干涉散射显微镜 ( Femto-iSCAT ) , 实现单颗粒载流子分布、迁移及弛豫动力学的测量和成像。本项目的顺利实施 , 将为单颗粒研究提供原创的解决思路和研究工具 , 促进从“单颗粒效应”到“单颗粒机理”的理解深入。该项目是该领域独创性的研究工作 , 课题特色鲜明 , 是“鼓励探索、突出原创”的典型案列。

### “鼓励探索、突出原创”典型案例 3

#### 一、项目背景 ( 重要性、必要性 ) 的阐述

从分子、原子水平上精细调控和理性设计合成贵金属晶体催化材料 , 对实现原子精度的化学精准合成至关重要。

在上一个国家自然科学基金项目( 批准号 :21573029 )的支持下 ,首次成功合成高度晶化、自支撑、自稳定的金属单原子层。发现了在这种只有一个原子层的金属晶体上 ,出现由于金属键角变化而导致的晶面弯曲的新现象。这种现象的影响机制有别于以往研究中所提出的三种基本效应 :系综效应、配体效应和几何效应 ( 应力效应 ) ,给金属催化剂带来了新的催化特性和调控手段。二、项目原创性 ( 从无到有 ) 的阐述

该项目针对单原子层金属晶体晶面弯曲的新现象 ,从单原子层金属晶体晶面的弯曲特性、其对于催化的影响机制、以及催化与弯曲间动态响应和反馈机制等方面 ,开展晶面弯曲调控催化性能研究 ,实现了该新奇特性从无到有的研究探索。晶面弯曲将会从电子结构、表面几何结构中影响催化性能 ,深入理解晶面弯曲本身固有特性以及其所带来的性质变化 ,将为开发新型基于晶面弯曲的特种催化剂奠定基础。项目拟理解和利用晶面弯曲所带来的吸附、催化性质的动态变化规律 ,设计具有“自调整”特性的特殊催化剂 ,以解决在某些催化反应中反应物和生成物吸附同强或同弱的难题 ,如一氧化碳室温氧化、有机物电合成、小分子有机物氧化 ,氢氧化等。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

1. 同一晶面内由于晶格收缩而引起的键角变化 ,给金属催化剂 ,特别时单原子层金属晶体催化剂 ,引入了一类新的结构因素 ,即晶面弯曲 ,为金属催化剂的催化特性调控提供了新途径 ,具有鲜明的首创

性。

2. 单原子层金属晶体中，晶面弯曲具有动态变化特征，即会因吸附或自组装呈现不同的曲率大小，或将在催化过程中会产生以曲率变化的助力（或主导）催化过程。

3. 项目首次基于晶面曲率可逆变化调整吸脱附强弱，开发具有“自调整”特性的催化剂材料：对反应物吸附强（晶面曲率大时）而对生成物吸附弱（吸附后晶面曲率变小），以攻克某些催化反应中反应物和生成物吸附同强或同弱的难题，如一氧化碳室温氧化、有机物电合成、小分子有机物氧化，氢氧化等，课题特色鲜明，是“鼓励探索、突出原创”的典型案列。

## “聚焦前沿、独辟蹊径”典型案例 1

### 一、该项目所聚焦的前沿问题是什么？

碳氢键活化被誉为合成化学的“圣杯”，可以对复杂分子骨架进行直接修饰，具有优异的原子及步骤经济性。自由基反应在 $sp^3$ 碳氢键官能化中展现出独特优势，通过自由基促进的氢原子转移（HAT）策略为烷基 $sp^3$ 碳氢键的官能化提供了有效途径。然而，当烷基链上具有多个理化性质类似的 $sp^3$ 碳氢键时，攫氢过程难以专一进行，反应体系复杂，反应效率降低。因此，**如何高效高选择性地实现 $sp^3$ 碳氢键官能化一直是自由基化学领域的研究热点和前沿。**

## 二、该项目中独特的解决方案是什么？

项目巧妙利用自由基参与的氢原子转移 (HAT) 与官能团迁移 (FGM) 的策略组合，通过发展高效可控的自由基接力途径，解决反应中的化学和区域选择性问题，建立一系列新颖且具应用价值的高选择性  $sp^3$  碳氢键官能化反应体系。首先，规避现有的分子内 HAT 过程对特殊设计的底物需求，实现分子间 HAT 过程诱导的官能团迁移，从而扩展该合成策略的应用范围；其次，发展新反应模式，利用“自由基钟”原位形成杂原子自由基，进而引发区域选择性的 HAT 和 FGM 过程；再次，针对目前的串联反应模式都是先 HAT 再 FGM，逆向思考，利用自由基官能团迁移 (FGM) 促进 HAT 过程的发生，实现更远程的碳氢键官能化。

## 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

项目将自由基参与的氢原子转移 (HAT) 与远端官能团迁移 (FGM) 策略巧妙地应用于挑战性的惰性  $sp^3$  碳氢键官能化反应。通过变换氢迁移 (HAT) 和官能团迁移 (FGM) 的组合顺序，调节碳氢键官能化的反应位点。同时，通过更换外加自由基，可以方便地引入不同的取代基，实现产物的多样性合成。充分利用“自由基钟”开环模式生成氧/氮杂原子自由基，通过串联的氧/氮自由基参与的氢迁移和远程烯丙基迁移实现区域选择性的  $sp^3$  碳氢键烯丙基化反应，为自由基烯丙基化反应提供新合成策略。将自由基加成、官能团迁移、氢原子转移和自由基捕获等自由基基元反应有序地整合，巧妙构建了高

效的自由基接力策略，实现多官能化反应。本项目为惰性  $\text{sp}^3$  碳氢键高效高选择性官能化这一前沿科学问题提供了独特的解决方案，是“聚焦前沿，独辟蹊径”的典型案列。

## “聚焦前沿、独辟蹊径”典型案例 2

### 一、该项目所聚焦的前沿问题是什么？

金属/沸石分子筛复合催化剂的构筑属于国际前沿的研究课题。金属/沸石分子筛复合材料是一类重要的加氢/脱氢催化剂，广泛的应用于催化加氢、异构化以及催化裂解等领域。但是由于传统沸石分子筛中金属活性位的稳定性和大分子可及性难以兼顾，同时活化氢的能力难以调控，因此对于大分子的选择性催化反应，例如生物质转化过程中涉及的芳香类化合物的选择性氢解/加氢脱氧等反应仍然具有很大的挑战。发展可高效转化大分子的、具有高稳定性的金属/沸石分子筛复合催化剂是当前的科学前沿问题。

### 二、该项目中独特的解决方案是什么？

本项目针对以上问题，聚焦二维沸石分子筛上金属活性位的调控，通过铈作为桥梁，以木质素中 $\beta$ -O-4键的氢解/加氢脱氧反应作为探针反应，开发铈合金负载的二维沸石分子筛催化剂，在二维沸石分子筛空位稳定铈合金的同时，通过调节合金组成之间的电子传递来调控催化剂活化氢的能力；此外，结合并调节二维沸石分子筛的酸性构筑双

功能的催化体系，通过酸性位和铈合金的协同，实现温和条件下的氢解/加氢脱氧反应。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

聚焦金属/沸石分子筛复合催化剂构建的前沿科学问题，通过发展铈合金负载的二维沸石分子筛复合材料，为金属/沸石分子筛复合催化剂高效催化大分子选择性转化提供独特的解决方案。本项目利用二维沸石分子筛的空位稳定铈合金，通过调节铈合金组分之间的电子转移调控催化剂活化氢的能力；通过调节二维沸石分子筛本身的酸性，与铈合金活性位协同，实现温和条件下大分子的高效氢解/加氢脱氧反应。本项目的研究为金属/沸石分子筛催化大分子的加氢/氢解/加氢脱氧这一前沿科学问题提供了独特的解决方案，是“聚焦前沿，独辟蹊径”的典型案列。

### “聚焦前沿、独辟蹊径”典型案例 3

#### 一、该项目所聚焦的前沿问题是什么？

单粒子与其性能关联及其表面单分子反应的相关行为属于国际前沿研究课题。其已成为精准化学极其重要的研究方向，可为从分子层次认识粒子表面化学反应机理提供模型。目前研究主要集中在粒子的动态碰撞行为研究，但信息仍不够丰富全面，通过发展新型联用技术，实现粒子碰撞及所衍生催化反应研究是当前的科学前沿问题。



## 二、该项目中独特的解决方案是什么？

显微摄像追踪技术与表面增强拉曼光谱 ( SERS ) 成像联用平台为粒子碰撞及相关催化反应行为精确关联提供了独特的解决方案。近年来，大量工作致力于发展基于电化学与光学成像或SERS光谱联用技术，通过电流和光学成像或SERS强度解析单粒子与微电极碰撞行为，但缺少溶液体相中的同类信息，更未能从分子水平上关联化学反应活性与结构。而本项目所搭建平台可提供粒子运动和表面分子结构信息，更适用于碰撞和反应行为研究。本项目拟通过搭建一体化平台，融合粒子碰撞及限域催化反应的信息，为粒子性能结构关联及单分子反应性能这一前沿科学问题提供独特的解决方案。

## 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

聚焦上述前沿问题，通过发展基于显微追踪和SERS技术研究溶液相中微纳粒子动态行为的“可视化”新方法、新技术，结合两者在光学成像和检测灵敏度方面优势，开展溶液中粒子碰撞及相关化学反应过程的“可视化”研究。发挥粒子碰撞产生的巨大表面等离子共振技术 ( SPR ) 效应的双重功能，同时增强碰撞限域内的SERS信号和SPR催化性能，以SERS监测催化反应，获得单个或少数粒子碰撞及限域内极少量或单分子的反应动力学，实现从分子水平上关联粒子结构组成与性能。本项目的研究对体相溶液中单个或极少数粒子碰撞、限域内少数分子或单分子SPR催化反应过程以及精确关联粒子结构与性能一前沿科学问题提供了独特的解决方案，是“聚焦前沿、独辟蹊径”

的典型案例。

## “聚焦前沿、独辟蹊径”典型案例 4

### 一、该项目所聚焦的前沿问题是什么？

**精准操控辐射与物质间的相互作用并从微观层面理解由此相互作用引起的独特物理化学现象属于国际前沿研究课题。**等离子体金属纳米结构(PMNS)因具有独特的光学特性，已被科学家广泛地在纳米尺度上用于辐射与物质间相互作用的控制与操纵，如采用它与发光体相互作用来调控物质的光电性质等。但目前这一前沿领域的研究尚由实验主导，亟需从理论角度理解和阐释光-PMNS-分子系统的微观作用机理。为此，建立基于量子力学原理的理论框架和开发成熟的软件是当前的科学前沿问题。

### 二、该项目中独特的解决方案是什么？

**发展组合的量子-经典或量子-量子理论计算方法及软件为微观理解等离子体与分子相互作用提供了独特的解决方案。**结合量子力学原理与电动力学或分子力学方法、以及结合电子结构理论与动力学方法，可微观理解PMNS和分子间大的尺度差异、各自不同的光学特性、等离子体与分子电子态和振动态之间的复杂相互作用、以及分子的电子-振动耦合效应。在前期研究基础上，项目拟发展解析的能量求导方法和包含环境效应的电子耦合元等的计算方法和软件，解决在理论

描述这些体系时所需的激发能、能量梯度、Hessian矩阵、非绝热耦合元等结构参量和模型哈密顿的构建等 ,为深入理解光与物质间的相互作用提供了独特的解决方案。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

**聚焦辐射与物质相互作用的微观机理的前沿问题 ,通过发展新颖的计算方法和程序去实现目标体系的理论模拟 ,为微观理解辐射与物质相互作用提供了独特的解决方案。**本项目的实施可为纳米器件制造、分析检测工具研发、太阳能利用等应用研究领域起到理论指导作用,有利于实现精准操控辐射-物质间的相互作用、理解由此相互作用引起的独特现象 , 阐明不同实验过程引起争端的原由。本项目是“**聚焦前沿、独辟蹊径**”的典型案列。

## “聚焦前沿、独辟蹊径”典型案例 5

### 一、该项目所聚焦的前沿问题是什么？

可穿戴设备用于人体健康的监控是近年来的前沿热点领域 ,微型柔性化生物传感器是其中的技术核心。深入解析外周监测系统中的大分子生物标志物的变化过程 ,发展相关可穿戴生物传感设备 ,对于精准诊断与疾病治疗具有重要意义。

### 二、该项目中独特的解决方案是什么？

目前可穿戴生物传感器件对大分子生物标志物的识别与检测目

前仍然停留在初期 ,尤其是针对有重要临床意义的蛋白质或核酸分子的检测。本项目提出利用Cas9蛋白酶与纳米石墨烯结合 ,发展非扩增前提下的DNA高灵敏原位特异性检测新策略 ,直接对人体外周循环系统中的游离目标DNA进行生物传感识别与检测 ,在酶和石墨烯的双重作用下促进方法的灵敏度与选择性提升。发展基于柔性可穿戴器件上适用的大分子生物标志物捕获与传感新策略 ,为可穿戴生物传感器件和设备的研制提供新的方法学和技术基础。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

本项目将Cas蛋白酶作为一种特异性核酸酶应用于生物传感技术的应用 ,为可穿戴生物传感器件对大分子生物标志物的检测提供一种新的解决方案。重点解决柔性可穿戴器件中生物传感体系构建中设计的目标大分子原位富集、捕获与信号放大检测等科学问题 ,推动生物传感设备在医学诊断领域的发展 ,从而为人体外周循环系统的生物标志物无创或微创诊断方式拓展新思路 ,是“**聚焦前沿、独辟蹊径**”的典型**案例**。

### “聚焦前沿、独辟蹊径”典型案例 6

#### 一、该项目所聚焦的前沿问题是什么？

**新型分子铁电体的创制属于国际前沿研究课题。**分子铁电体兼具铁电材料优良的铁电性、介电性、压电性、热释电性等性质和分子基

材料的柔性好、轻量、易加工、声阻抗低等特点，具有重要的学术价值和巨大的应用潜力；如何开发分子铁电体的功能特性，设计出有别于传统铁电体的新型分子铁电体是当前的科学前沿问题。

## 二、该项目中独特的解决方案是什么？

**光致结构相变分子铁电体的设计合成为拓展分子铁电体的功能特性提供了独特的解决方案。**目前，铁电材料的结构相变一般需要借助温度触发，而其相变温度大多是远高于室温的高温或远低于室温的低温，不利于铁电相关性质的调控。

相比于温度，光具有可远程操控、响应快等特点，构筑光致结构相变分子铁电体将有望通过光调控铁电相关性质，然而有机胺盐类、冠醚包合物类、金属-甲酸框架类、分子钙钛矿类等常见的分子铁电体体系都不具有光致结构相变。该项目拟通过组装基于水杨醛席夫碱类、偶氮苯类衍生物的光致异构化合物，设计合成出光致结构相变分子铁电体，为分子铁电体的功能特性开发应用这一前沿科学问题提供独特的解决方案。

## 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

**聚焦新型分子铁电体创制的前沿问题，通过构筑光致结构相变分子铁电体，为分子铁电体的功能特性拓展提供独特的解决方案。**该项目利用具有光致异构特性的水杨醛席夫碱类、偶氮苯类衍生物，结合引入极性基团、单一手性等分子修饰策略，定向设计合成光致结构相变分子铁电体，系统研究其铁电相关性质、光致结构相变及光对铁电

相关性质的调控作用，阐明结构-功能关系及光调控铁电相关性质的作用机制。光致结构相变分子铁电体有别于传统的温致结构相变铁电体，其结构相变由光触发，能通过光调控铁电相关性质。该项目是“**聚焦前沿、独辟蹊径**”的典型示例。

## “聚焦前沿、独辟蹊径” 典型案例 7

### 一、该项目所聚焦的前沿问题是什么？

**蛋白质翻译后修饰的研究对于揭示蛋白质的结构-功能关系至关重要，属于国际前沿课题。**蛋白质组中的已知化学修饰数量庞大、且存在高度的时空动态变化特征，是精准调控细胞信号转导通路、重大疾病发生、发展表型的关键分子机器。蛋白质翻译后修饰作用极大的增加了蛋白质结构和功能的多样性和复杂性。翻译后修饰与一系列重要过程，如蛋白质折叠调控、蛋白质降解、细胞内信号转导、细胞间识别等紧密相关。翻译后修饰过程中的异常状态的检测与干预，对于发展疾病的新型诊断方法和治疗手段具有基础性意义。但是，由于翻译后修饰的复杂性和动态特征，通过生物表达方法和酶促反应获得所需样品极为困难，导致确定翻译后修饰的结构功能关系较为困难。正因如此，对于重要目标蛋白，运用化学合成蛋白质的策略，获得结构均一的、在指定位点具有特定类型翻译后修饰的蛋白质，进而研究其生物学功能，成为重要的前沿研究方向。

### 二、该项目中独特的解决方案是什么？

小窝蛋白-1 是一个重要的膜蛋白，参与调节众多的生理过程，包括小窝形成，囊泡运输和信号传导等。该研究以小窝蛋白-1 为目标蛋白，运用其课题组发展的 STL 等新颖的蛋白质化学合成的手段来进行片段拼接，引入 Ser 磷酸化、Tyr 磷酸化和 Lys 泛素化等多种翻译后修饰基团，实现对带有不同翻译后修饰的小窝蛋白-1 的化学合成，并探索翻译后修饰对小窝蛋白-1 的寡聚，结构及功能的影响，进而结合噬菌体展示技术筛选出一系列新颖的、高亲和力的小窝蛋白-1 的 D 型多肽抑制剂。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

**聚焦蛋白质翻译后修饰研究这一前沿方向，从精确样品制备入手，开发一系列蛋白质合成方法和手段，为获得结构均一的、带有翻译后修饰基团的蛋白质提供独特的解决方案。**本项目聚焦于研究小窝蛋白-1 的翻译后修饰构效关系。计划利用蛋白质化学合成，得到无法用生物表达等方法得到的带有翻译后修饰基团的小窝蛋白-1，进而深入研究翻译后修饰对该蛋白质功能的调控，筛选得一系列新颖的、高亲和力的到小窝蛋白-1 的 D 型多肽抑制剂，将为阐述小窝蛋白-1 与肿瘤的关系有着重要的科学意义。是“聚焦前沿、独辟蹊径”的典型案列。

## “聚焦前沿、独辟蹊径”典型案例 8

### 一、该项目所聚焦的前沿问题是什么？

**电解水制氢作为可再生能源发电的重要支撑技术 ,属于国际前沿研究课题。**当下水电解成本主要来自电费 ,所以研发重点在于提升电解效率。但现有效率较高的水电解技术 ,既需要高分子膜或固态电解质 ,又常需要贵金属催化剂 ,致使初始成本高昂。当可再生能源大规模普及时 ,电价下降、装置使用率低等新特点 ,将对大幅降低电解装置的成本提出苛刻要求。在此背景下 ,低材料成本的无膜水电解逐步成为新兴研究领域。然而宏观尺度的无膜水电解由于双极距离较远 ,存在电压效率低的问题。因此 ,在电解水制氢中如何兼顾高电解效率与低材料成本是科学前沿问题。

## 二、该项目中独特的解决方案是什么？

**阴阳极双电层交叠纯水电解为高电解效率与低材料成本难以兼顾的问题提供了独特的解决方案。**2017年一篇论文发现 ,在阴阳极双电层交叠区强电场作用下 ,纯水电解的电流密度显著高于相同条件下的强碱电解 ,初步展现了双电层交叠对纯水电解的促进作用。然而 ,申请人发现该论文对双电层交叠效应的理解存在局限 ,经过深入分析 ,获得以下新知 :第一 ,交叠效应除了包含离子迁移增强作用 ,还存在与宏观纯水电解迥异的pH梯度及双性反应环境 ,可以加以利用。第二 ,亚德拜长度的阴阳极间距易伴随生成物串流 ,引发副反应 ,使电流效率较低 ,而原文并未认识到该点。第三 ,充分理解和调控阴阳极双电层交叠效应 ,有望实现兼顾高效率与低成本的纯水电解。

申请人进一步理出交叠双电层的结构、特性与演化机制 ,微尺度、



微产量下电流效率的测算方法,电解池构型和材料对交叠效应的影响机制三个关键科学问题,并提出可行的研究方案。特别是针对串流效应这一难点,设计出带有检测电极的流动式圆环-圆环纳米单池以实现电压效率与电流效率的解耦,并进一步联用时域与频域方法以测算电流效率。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

**聚焦电解水制氢的前沿问题,通过研究阴阳极双电层交叠的纯水电解,为实现兼顾高电解效率与低材料成本的纯水电解提供独特的解决方案。**本项目建立适用于阴阳极双电层交叠、考虑水的取向极化和解离反应的双电层模型,理清纯水电解阴阳极交叠双电层的结构、特性与演化机制;设计带有检测电极的流动式圆环-圆环纳米单池,进一步联用时域与频域方法研究生成物传输机制,建立纯水电解电流效率测算方法;研究电解池的构型和材料对纯水电解的阴阳极双电层交叠效应的影响机制,构建兼顾电压效率与电流效率的电解池基本单元与调控方法。本项目的研究为兼顾高电解效率与低材料成本的纯水电解这一前沿问题提供了独特的解决方案,是“**聚焦前沿、独辟蹊径**”的典型案列。

### “需求牵引、突破瓶颈”典型案例 1

#### 一、该项目契合国家哪方面需求?

我国二氧化碳排放量巨大，实现“碳达峰碳中和”目标艰巨。与此同时，我国可再生能源丰富，但目前利用形式主要是发电，如何利用可再生能源合成液体燃料，成为关系我国能源和工业低碳发展的重要课题。太阳燃料合成提供了从可再生能源到绿色液体燃料生产的全新途径，它是指利用太阳能等可再生能源发电，进而电解水制备绿氢、将二氧化碳加氢转化制甲醇等液体燃料，把可再生能源存储在液体燃料中，被形象地称为“液态阳光”。本项目一方面可实现二氧化碳减排，另一方面可将再生能源存储在液体燃料中，解决可再生能源波动性间歇性的问题，因此本项目高度契合我国碳中和需求及可再生能源利用需求。

## 二、该项目可能解决哪方面科学问题、突破哪方面技术瓶颈？

太阳燃料合成主要包括水分解制氢、二氧化碳捕集、二氧化碳加氢制甲醇等关键技术，其中二氧化碳加氢制甲醇是一个制约步骤，具体来讲是缺乏高活性、高选择性、高稳定性催化剂及其匹配工艺。传统CuZnO基催化剂由合成气制甲醇催化剂演变而来，存在两个突出问题，一是副反应逆水煤气变换反应难以抑制；二是反应生成的水加速了催化剂失活。双组元固溶体氧化物催化剂可从根本避免上述问题，但其催化活性位认识并不清楚，这限制了更优氧化物催化剂的开发。本项目拟研究固溶体氧化物的活性位与反应性能的关系，解决CO<sub>2</sub>和H<sub>2</sub>的活化、可控C=O键断裂等关键科学问题，突破二氧化碳加氢制甲醇高选择性的技术瓶颈。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

本研究从应用需求出发，在原子、分子层次上认识ZnO-ZrO<sub>2</sub>氧化物固溶体催化剂的活性位结构及其与二氧化碳、氢气分子的微观作用机制，从Zn与O-Zr的配位情况、形成固溶体时ZnO-ZrO<sub>2</sub>的相变等对催化性能的影响入手研究构效关系，弄清双活性位点协同催化二氧化碳加氢制甲醇的本质，为开发可应用的新型高效二氧化碳加氢制甲醇催化技术奠定科学基础。

### “需求牵引、突破瓶颈”典型案例 2

#### 一、该项目契合国家哪方面需求？

**含能材料的设计契合国家重大战略需求。**由于高性能含能材料在军民领域的重要作用，世界各国对其需求一直极为迫切。感度是标度含能材料安全性的工程量，它和能量是含能材料设计中需首先考虑的最重要性能。由于感度实验测试结果的严重不确定性，使得感度的可预测性较差。感度预测的不确定性这一短板也成为含能材料设计的瓶颈，严重迟缓了基于大数据的含能材料智能设计时代的到来。因此，基于人工智能和大数据挖掘技术辅以分子设计，可使创制含能材料效率大幅度提高，契合国家重大战略需求。

#### 二、该项目可能解决哪方面科学问题、突破哪方面技术瓶颈？

**项目拟借助人工智能算法和大数据挖掘技术突破现有分子材料**

**辅助设计这一技术瓶颈。**由于感度影响因素众多，涉及到含能材料的多层级结构、具体刺激方式和测试条件，必须借助理想模型解决感度不确定性问题。通过提出并研究对应于本征结构（分子和晶体堆积）的本征感度，以含能材料本征结构为基本模型，不断挖掘有效数据，提炼关键描述符，进行人工智能训练和预测，并与相关实验测试结果进行比较、分析与验证，获得本征感度，进而实现高效且智能化的分子材料设计。因此，借助人工智能算法和大数据挖掘技术辅助材料设计可突破现有分子材料辅助设计的关键技术瓶颈。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

**含能材料的开发与利用是国家重大战略需求，如何实现借助人工智能和大数据技术辅助材料设计是关键技术瓶颈。**项目将实现感度问题由复杂现实向简单理想的转变。借助人工智能算法和大数据挖掘技术的优势，实现高效且智能的计算机辅助设计。通过制定感度的模拟计算标准，规定具体的建模、模拟与分析方法，“标准化”本征感度数据，以纳入含能材料大数据库中，助力智能设计新型含能材料。该项目通过新方法，为含能材料的开发与利用提供了技术和理论储备，是“需求牵引、突破瓶颈”的典型案列。

### “需求牵引、突破瓶颈”典型案例 3

#### 一、该项目契合国家哪方面需求？

**关系到亿万人的身体健康和生命质量的生物医用材料 ,契合《“健康中国2030”规划纲要》这一国家重大战略需求。**生物医用材料是被列入《国家中长期科学与技术发展规划纲要》中的重点领域及优先主题 ,其中硬组织类金属植入材料是典型代表。医用镁金属及合金具有独特的体内可降解性能 ,作为骨替代硬组织植入体、可降解心血管支架等的基体材料 ,能够避免现有医用金属材料体内不能降解、需进行二次手术给患者带来的身体损害和经济压力 ,是金属植入材料未来发展方向。但目前技术瓶颈在于镁腐蚀太快、不可控 ,造成植入体过早失去力学完整性 ,植入部位氢气聚集、体液碱化 ,阻碍细胞功能表达等生物相容性 ,限制了其大规模临床应用。因此 ,控制镁金属腐蚀速率、提高表面生物活性 ,同时满足诊断、治疗、抗菌、抗炎等多种复杂临床需求 ,是镁金属实现生物医用的必由之路。

## **二、该项目可能解决哪方面科学问题、突破哪方面技术瓶颈？**

**该项目拟突破镁金属植入材料腐蚀太快不可控导致植入失败这一技术瓶颈。**镁基表面涂层技术是突破该瓶颈的一个重要策略。金属有机框架材料 ( MOFs ) 是近年来被广泛关注、研究和应用的新型功能材料 ,作为保护层的研究已经凸显出其对金属防腐的开发潜力。MOFs 中金属离子和有机配体易于调控 ,一些人体中内源性金属元素及有机化合物都可以用来构建 MOFs ,为制备生物相容 MOFs 提供了基础。MOFs 多孔、官能团丰富、结构易调控 ,为装载或修饰客体功能分子提供了基础。基于此 ,开发基于 MOFs 的涂层应用于医用镁金

属，有望实现镁基植入体可控腐蚀、表面生物相容的基础功能与多种应用功能（客体分子负载与释放、功能分子表面修饰）的多功能平台构建，具有很好的应用前景和实际意义。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

**镁金属植入材料契合“健康中国”国家需求，腐蚀不可控是镁基植入体的关键技术瓶颈。**该项目构筑 Zr-MOFs 晶粒紧密交联的膜层完整覆盖镁基表面，实现镁基体的可控腐蚀、表面生物相容的基础功能；弄清 Zr-MOFs 膜的组分、晶粒结构与尺寸、稳定性等理化性质与镁基体的可控腐蚀、生物相容性提高的构效关系；利用 Zr-MOFs 的多孔性和官能团丰富易调控，实现 Zr-MOFs 膜层的客体分子负载与释放、功能分子表面修饰的应用功能，完成多功能平台的验证和构建。该项目源于医用镁金属的应用需求，具有鲜明的问题、目标导向，旨在通过解决镁金属腐蚀太快、不可控的瓶颈，为医用可降解金属功能涂层设计与制备提供新思路，同时推动 MOFs 材料的生物医用拓展，是“需求牵引、突破瓶颈”的典型案例。

## “需求牵引、突破瓶颈”典型案例 4

### 一、该项目契合国家哪方面需求？

**大气复合污染的重要前体物氮氧化物（NO<sub>x</sub>）和挥发性有机物（VOCs）的协同控制契合打赢“蓝天保卫战”这一国家重大战略需求。**我国大气环境保护虽取得积极进展，但新型复合污染物的大量生成给

目前本就严峻的治理形势提出了新的挑战，多种大气污染物相互耦合，区域环境质量恶化，已成为我国经济可持续发展的制约因素。因此，要加快改善我国目前复杂的大气污染现状，需同时推进VOCs 和NO<sub>x</sub>减排，从源头切断臭氧、PM<sub>2.5</sub> 等复杂二次污染物的形成路径。

## **二、该项目可能解决哪方面科学问题、突破哪方面技术瓶颈？**

该项目拟突破新型环境功能吸附/催化耦合材料的低温活性和复杂环境下的适应性这一技术瓶颈，以期对大气复合污染主要前体物进行高效净化。一方面，开发宽温度脱硝催化剂、改进配方以适应我国复杂多变的煤质是当前亟待解决的难题。另一方面，目前广泛应用的贵金属催化剂成本高、热稳定性差，难以满足高效、低成本催化氧化VOCs 的治理需求。因此，针对 NO<sub>x</sub> 和 VOCs 协同控制面临的挑战，通过调控催化剂表面氧化还原-酸性位的比例、多孔环境功能材料孔道结构，在优化污染物分子在材料表面的传质扩散性能的同时，研究环境功能材料的吸附性能或催化化学反应性能，可以突破新型环境功能吸附/催化耦合材料的低温活性和复杂环境下的适应性这一技术瓶颈。

## **三、具体阐述该项目符合此属性的理由**

NO<sub>x</sub> 和 VOCs 协同控制是“十四五”大气污染防治的重要任务，新型环境功能吸附/催化耦合材料的低温活性和复杂环境下的适应性是大气复合污染控制的关键技术瓶颈。本项目围绕当前大气复合污染主要前体物 NO<sub>x</sub> 和 VOCs 控制化学中的基础科学问题，设计开发特



定结构金属氧化物、多级孔分子筛等环境功能材料，实现形貌、构型等可控设计与合成。建立环境吸附/催化实验条件下实时表面微化学环境，揭示环境功能材料与催化/吸附行为的内在理化关系。在此基础上分析复杂气氛条件下竞争吸附和选择性催化的微观机制，指导制备针对特征污染物吸附/催化的新型环境功能材料，研究对特征污染物的净化性能，突破新型环境功能材料的低温活性和复杂环境下的适应性，为大气复合污染治理提供关键科学理论支撑，是“需求牵引、突破瓶颈”的典型案例。

## “需求牵引、突破瓶颈” 典型案例 5

### 一、该项目契合国家哪方面需求？

铀是核电行业和国防核事业的关键基础原料，铀资源的可持续获取关系到我国的能源安全和国防安全。核电产业的可持续发展也是“碳达峰”和“碳中和”国家战略目标实现的重要支撑。然而，全世界范围内可开采的陆地铀矿资源总量非常有限，仅能满足全球60到80年的核电发展需求。我国的铀资源更为短缺，现阶段核电产业的铀资源需求90%以上依赖进口。海水中蕴藏着全球99.9%以上的铀资源，开展海水提铀技术的研究可满足我国乃至全世界长期的铀资源需求。由于海洋环境极为复杂，海洋中存在的干扰离子、海洋生物污损等因素严重制约了现有海水提铀吸附剂的实际应用。因此，针对实际海洋环境，开发具有真实海洋环境应用潜力的海水提铀特种材料对海洋中铀



资源的可持续获取、保证核电产业发展的铀资源需求具有重要的战略意义。

## **二、该项目可能解决哪方面科学问题、突破哪方面技术瓶颈？**

该项目拟开发适应南海海洋环境的海水提铀特种材料，突破海洋环境影响海水提铀性能的技术瓶颈。海水提铀技术的实际应用需要在真实海域中实施，相比于我国其他海域，南海海域面积广阔、水质纯净、水温较高，为海水提铀技术的实际应用提供了极为有利的条件。然而，和其他海域一样，南海海域也存在着海水铀浓度低、海洋生物污损严重、海洋干扰离子丰富等制约着海水提铀技术实际应用的关键瓶颈问题，导致了已有吸附剂在海洋环境中存在铀吸附容量偏低、提铀速度慢等问题。因此，基于对海水中铀酰配位环境的精准识别及动力学提升策略进行深入研究的基础上，开发适应南海海洋环境的高性能海水提铀吸附剂可突破海洋环境对提铀性能影响的关键瓶颈问题。

## **三、具体阐述该项目符合此属性的理由**

海水中铀资源的可持续获取对解决我国铀资源短缺的“卡脖子”问题具有重大意义，海水提铀吸附剂的海洋环境适应性是海水提铀技术实际应用的关键技术瓶颈。本项目针对现有海水提铀吸附剂海洋适应性低的问题，拟在系统研究南海海洋环境中与海水提铀有关的海洋因素基础上，设计合成高选择性、高亲和力新型铀酰离子结合功能分子，制备新型海水提铀特种材料，解析海水提铀配位环境精准识别机制，深入研究海水提铀功能材料的铀吸附性能及受海洋因素干扰的机

制，结合南海海洋环境优化海水提铀性能，开发出适合南海海洋环境的高性能海水提铀吸附剂。高选择性、高亲和力海水提铀吸附剂的制备可提升海水提铀的铀吸附性能；海水提铀生物污损防控技术的开发，在提升海水提铀性能的基础上，还可增加海水提铀吸附剂的重复使用性能；对海洋环境中有利于海水提铀的海洋因素的利用也可增加海水提铀性能。该项目通过海水提铀海洋影响因素的分析和海水提铀新材料的开发，为我国海水提铀技术的实际应用提供了积极的科学依据和技术基础，相关研究成果有望推动我国海水提铀技术的工程化应用，是“需求牵引、突破瓶颈”的典型案列。

## **“需求牵引、突破瓶颈”典型案例 6**

### **一、该项目契合国家哪方面需求？**

我国的化工产能位居全球首位，GDP已占16-20%，但大宗化工生产多采用传统的过程和工艺，面临由大变强的重大需求。特别在面临美丽中国建设以及碳中和等挑战背景下，开展能够显著提高化工过程效率相关技术的基础研究具有十分重大需求。化工生产过程效率的显著提高是决定我国化学工业发展质量的关键，而旨在显著提高效率的过程强化技术的大规模工业应用则是瓶颈之一。

### **二、该项目可能解决哪方面科学问题、突破哪方面技术瓶颈？**

该项目提出的关于受限空间尺度效应及其优化的研究，旨在通过

尺度的优化在保证过程强化技术显著提高生产效率的同时增强其工业应用可行性，进而有利于突破化工生产过程效率的瓶颈，但涉及受限空间传质机理、尺度对过程效率影响及其背后的控制机制，以及如何建立对传质效率和工业可行性进行权衡的尺度最优化方法等若干基础性问题，需要首先从基础理论上实现突破。该项目将研究受限空间气液传质过程受限尺度对传质过程强化的影响，以期揭示临界尺度现象，进而实现可兼顾过程强化和应用可行性的受限空间传质过程最佳尺度的优化，以解决上述核心基础性问题。

### **三、具体阐述该项目符合此属性的理由**

工程科学源头是工程实际问题，而小尺度化工过程强化技术的出现则为化学工程科学提出了新的问题。该项目受限空间尺度效应及其优化的研究旨在解决过程强化技术的工业应用可行性与效率之间的权衡问题，是化工强化技术及其应用发展中需要解决的新问题，需要根据新的问题开拓新的方法和理论。该项目研究受限空间气液传质过程受限尺度对传质过程强化的影响，以期揭示临界尺度现象，进而实现可兼顾过程强化和应用可行性的受限空间传质过程最佳尺度的优化方法。是“需求牵引、突破瓶颈”的典型案列。

## **“需求牵引、突破瓶颈”典型案例 7**

### **一、该项目契合国家哪方面需求？**

大力推广风能、太阳能等绿色能源是实现我国双碳目标的重要途径。而绿色能源的有效利用，依赖于高性能安全绿色的能量储存与转换装置。因此，对能量储存与转换装置的研发和制造，已经成为我国能源发展的重大需求和经济主战场，符合国家中长期能源战略规划。由于我国锂资源缺乏，导致目前广泛应用的锂离子电池价格昂贵。因此亟待开发锂离子电池的替代产品，如碱金属、碱土金属以及锌和铝等非锂离子电池。

## 二、该项目可能解决哪方面科学问题、突破哪方面技术瓶颈？

各种金属离子电池普遍存在电池循环性能衰减快和运行安全差的技术瓶颈。在电池反复充放电过程中，金属离子扩散、嵌入/脱嵌会对电极-电解质界面结构造成破坏导致循环性能衰减。因此过渡金属氧化物正极-电解质界面的结构与稳定性是制约该技术瓶颈的关键科学问题。本项目提出在密度泛函理论的基础上，建立含磁矩贡献的过渡金属氧化物 Gibbs 自由能计算方程，并采用配位键能校正法，使其计算准确度达到化学级。基于此方法结合 Marcus 理论，探索电解液组分在各种过渡金属氧化物表面的吸附与降解、工作金属离子与过渡金属氧化物的置换反应及其在电解液中的溶解平衡，研究过渡金属氧化物-电解质界面处的电子转移动力学及其温度效应，尝试电解液添加剂对于各种电化学性能的影响，获得影响过渡金属氧化物-电解质界面结构与稳定性的关键因素，获得优化金属离子电池正极材料和电解液组成，使基础研究成果走向应用。

### 三、具体阐述该项目符合此属性的理由

二次电池出现的性能迅速衰减以及鼓气膨胀和发热等带来的运行安全问题，已经成为其商业化的技术瓶颈，亟待需要建立基础理论来理解和攻克这些问题。采用密度泛函理论和统计电化学理论，从热力学角度研究解决影响金属氧化物-电解质界面的结构和稳定性的因素及其内在关系这一关键科学问题，可使基础研究成果走向应用，加速二次电池商业化。是“需求牵引、突破瓶颈”的典型案例。

### “共性导向、交叉融通”典型案例 1

#### 一、 该项目的共性科学问题是什么？

随着化学和生命科学学科的迅速发展，化学反应和化学分子需要有更广阔的应用平台，而生命科学领域需要更多样化的研究手段，化学生物学基于化学探针的高活性和可控性等优点，对于多学科的一些共性难题发挥了自身的独特优势。

RNA-RNA 相互作用在生命活动中发挥着重要的作用已成为学术界共识，然而由于平台技术缺乏、干预手段薄弱等因素，目前对 RNA 相互作用的规律揭示和功能研究始终处于起步阶段。RNA-RNA 相互作用本质为分子间的相互作用，如何将细胞内的 RNA-RNA 相互作用尽可能多的捕获下来，是决定技术是否有更广泛应用前景的前提之一。

## 二、该项目所具有的交叉融通特征是什么？

RNA-RNA 相互作用在生命活动中扮演着重要的角色，如非编码 RNA 通过与靶 RNA 之间的识别在基因表达等方面发挥调控作用。然而由于现有研究技术的不足，人们对 RNA 的相互作用规律和功能知之甚少。本项目拟针对目前 RNA-RNA 相互作用研究的困难，基于特异性的 RNA 标记探针，将化学共价交联与 RNA 生物学、深度测序相结合，开发活细胞的 RNA-RNA 相互作用组学研究技术。通过化学与生物学的深度交叉，基于化学探针的优势，助力活细胞内 RNA-RNA 相互作用模式和规律的解析，为揭示 RNA 相互作用调控网络和重要功能提供关键的技术支撑。

## 三、具体阐述所选项目符合此属性的理由

RNA-RNA 的相互识别和作用是基于两者之间序列互补或者蛋白质介导发生的，而且这一过程往往是短暂存在而且动态变化的。现有方法所检测的 RNA 相互作用组学结果均面临着检测不饱和，即捕获效率低下的缺点。而基于化学共价交联的策略，将空间上相互邻近的 RNA 进行快速和高效的固定，是增加检测覆盖面的有效方案。通过化学合成、化学交联反应与 RNA 生物学、测序技术深度交叉，有望在 RNA 相互作用组学检测领域实现突破，揭示 RNA 相互作用的新规律。本项目的实施，不仅可以推动生命科学领域中非编码 RNA 功能解析的发展，也能够指导更多适用于活细胞的 RNA 标记化学探针的设计开发，因此，该项目是“共性导向、交叉融通”的典型案列。

## “共性导向、交叉融通”典型案例 2

### 二、 该项目的共性科学问题是什么？

从材料化学角度分析热电分子设计 ,从物理化学角度理解分子掺杂 ,以及从光电子学角度实现功能调控 ,可以共同导向一个基本问题 :如何融合分子间多重弱相互作用精细调控电荷密度 ,推进机制与效用的并行研究。当前的有机半导体热电材料研究中 ,分子组装体与掺杂剂或掺杂助剂的相互作用并不明晰 ;主体分子如何有序组装、如何实现分子电荷得失的精准操控、如何高效调控热电转换效率研究尚浅。光掺杂在调控分子氧化还原程度和电荷密度方面具有独特优势 ,为解决精准可控的分子掺杂难题提供了新思路 ,也为有机半导体热电材料的开发提供新路径。

### 二、 该项目所具有的交叉融通特征是什么？

本项目利用光调控开展有机半导体的分子掺杂及热电性能研究 ,是合成材料化学、材料物理化学和光电子学的自然交叉。光致分子激发使得共轭分子骨架发生动态电荷密度变化 ,进而产生可逆氧化还原 ,为共轭分子的电物性研究提供了重要的新方式。分子的电荷密度及氧化还原程度与其热电性能密切相关 ,利用光掺杂的精细调控属性揭示热电参数之间的制约关系是有机热电材料领域的前沿研究方向。本项目以高效热电转换为基本目标 ,融合光掺杂在动态精细调控分子电荷密度方面的优势 ,设计光-电耦合增强调控新策略 ,在分子层次揭示

电子得失的作用机制，明晰对热电转换过程的影响规律，可以为新型高性能有机热电材料的分子设计提供指导。

### 三、具体阐述所选项目符合此属性的理由

本项目针对有机半导体的热电转换分子机制研究难题，以光掺杂的电荷密度调控为主线，发展光诱导-电调控耦合的分子掺杂新策略。利用电化学晶体管结构引入离子-电子耦合，研究有机半导体激子产生、分离、电荷传输等过程，揭示分子得失电子和熵变的作用机制，展示共轭分子体系在高性能光热电转换方面的应用潜力。总体而言，本项目具有鲜明的材料化学导向特征，涉及材料物理化学、分子设计方法学和有机光电器件，符合“共性导向、交叉融通”的科学问题属性。

## “共性导向、交叉融通”典型案例 3

### 一、 该项目的共性科学问题是什么？

从纳米材料的角度思考石墨烯的性质和应用，从弱相互作用角度理解 $\pi$ 堆积作用力，从微机电角度指导悬臂梁传感器设计加工，从气体检测角度实现传感器设计以及从影像技术角度认识微纳米级别位移识别等，可以共同导向一个基本问题：如何充分利用CVD生长的高品质铜基石墨烯膜的性质，设计研发出低成本、小型化的悬臂梁式苯系物传感器，并推进响应机理和性能研究。目前CVD生长的石墨烯膜结构最完整、性能最好，但其大多需要金属基底，因此必须首先将



其剥离转移才能使用，这是其应用上的一个巨大障碍。发展无需转移的石墨烯应用，将极大的推进石墨烯本征性质的研究以及产业化。 $\pi$ 堆积作用力在化学和生物学中都很重要，但有限的研究方法使其研究尚不够深入，而石墨烯蜂窝状的大 $\pi$ 键和可修饰性使其成为研究 $\pi$ 堆积作用力的极佳材料。苯作为一级致癌物，严重威胁人们的健康，但是目前的检测装置大都昂贵和笨重，必须发展小型化低成本的气体传感器才能满足人们的要求，而悬臂梁传感器和应用广泛的低成本摄像头以及发展迅速的影像技术是其很好的选择。影像技术在纳米领域应用广泛，但大多用于亮度和形态识别，位移识别能力应用较少。而悬臂梁传感器的弯曲位移可以充分利用影像技术的位移识别能力进行检测，从而替代原本昂贵的位移灵敏传感器。因此研发基于CVD铜基石墨烯的悬臂梁式苯系物传感器，将为石墨烯的应用提供新的方向，为 $\pi$ 堆积作用力提供了新的研究方法，为小型化、低成本化气体传感器的设计提供指导，同时也可以拓展影像技术在纳米领域的应用。

## 二、该项目所具有的交叉融通特征是什么？

该项目通过设计基于CVD铜基石墨烯的悬臂梁式传感器，利用影像技术来检测其对苯系物的响应，响应机理是石墨烯和苯系物之间因 $\pi$ 堆积作用力而吸附，进而在上下表面产生表面应力差导致悬臂梁弯曲。该弯曲由激光偏转法和影像技术的位移识别算法来检测。是石墨烯纳米材料、基础化学、微机电器件设计加工、影像技术、传感器技术研究领域的自然交叉。石墨烯纳米材料具有良好的光学、力学、

化学特性，在传感器领域很有应用潜力。其共轭大 $\pi$ 键结构使其可以通过 $\pi$ 堆积作用力选择性、高效的吸附苯系物，同时也是研究 $\pi$ 堆积作用力的极佳材料。铜基石墨烯在结构上很符合悬臂梁传感器的特性——薄基底、性质不同的上下表面、反光良好的铜表面等。悬臂梁传感器的设计、弯曲位移的偏转检测，非常适合使用位移识别影像技术、以及发展小型的低成本传感器。影像技术随着各类摄像头的普及发展非常迅速，非接触、成熟的图像处理技术等优势使其在纳米材料领域一直有着广泛的应用。除了亮度、形态识别外，位移识别也是其非常重要的发展方向，而且精度可以达到纳米级别。直接使用CVD生长的铜基石墨烯构建悬臂梁式传感器，可利用 $\pi$ 堆积作用力选择性吸附苯系物，从而实现对苯系物的检测。使用基于摄像头的影像技术来检测石墨烯悬臂梁的偏转位移，可以实现高精度的位移识别，从而提高传感器的灵敏度。同时该传感器还为研究 $\pi$ 堆积作用力提供了新的检测方法和平台，为CVD生长的石墨烯提供了新的应用方向。

### 三、具体阐述所选项目符合此属性的理由

该项目拟直接使用 CVD 铜基石墨烯，无需转移，利用其结构特点-超薄、反光的铜基底、性质不同的上下表面，来构建悬臂梁式传感器。利用石墨烯本征的化学结构-共轭大  $\pi$  键，实现对苯系物的选择性高效吸附从而实现对苯系物的高灵敏检测。使用激光偏转法、利用低成本摄像头、发展高灵敏度的位移识别图像算法来检测悬臂梁的弯曲位移。通过研究石墨烯各种修饰基团与各种  $\pi$  键化合物之间的响

应来深入研究  $\pi$  堆积作用力的性质。并利用上述研究结果，优化传感器设计和性能，最终研发出小型化、低成本的苯系物气体传感器。因此，该项目是“共性导向、交叉融通”的典型案例。