



国家自然科学基金能源化学发展规划和布局概况

梁振兴^{1,2}, 姜玮^{1,3}, 张国俊^{1*}

1. 国家自然科学基金委员会化学科学部, 北京 100085;

2. 华南理工大学化学与化工学院, 广州 510641;

3. 中国科学院化学研究所, 北京 100190

*联系人, E-mail: zhanggj@nsfc.gov.cn

我国是世界上最大的能源消费国和温室气体排放国, 能源是关系我国经济社会可持续发展的重大问题。2020年9月, 习近平总书记宣布“中国二氧化碳排放力争于2030年前达到峰值, 努力争取2060年前实现碳中和”, 因此, 需要大力发展碳中和技术体系和碳中和产业, 积极推进能源革命^[1]。

绝大多数的能源利用实质上是能量和物质不同形式之间的转化过程, 而能源和化学物质之间的转化是通过化学反应直接或间接实现的。为充分发挥化学科学在能源科学中的支撑作用, 能源化学作为一门交叉学科应运而生。我国在能源化学学科建设方面已取得重要进展^[2]。2016年, 能源化学列入教育部新增审批本科专业(代码: 070305T), 为我国能源化学发展培养后备人才^[3]。2017年, 国家自然科学基金委员会(以下简称“基金委”)化学科学部对学科布局进行了优化, 考虑到能源材料化学等相关领域发展态势组建了“材料化学与能源化学”学科(学科申请代码: B05)^[4], 为推动学科发展, 2019年, 化学科学三处着手制订了能源化学“十四五”及中长期发展规划; 2020年, 按照“源于知识体系逻辑结构、促进知识与应用融通”的原则, 化学科学部继续优化学科布局, 为强化自然科学基金在面向国家能源战略需求中的作用, 化学科学部将原“材料化学与能源化学”学科一分为二, 设立了“能源化学”学科(B09), 资助能源化学领域的相关基础研究。本文将对化学科学三处开展的能源化学发展规划和学科布局工作进行简要介绍。

1 能源化学“十四五”及中长期发展规划

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, 参考国家发改委、国家能源局《能源技术革命创新行动计划(2016~2030年)》等能源框架文件^[5], 结合自然科学基金工作特点, 制订了能源化学“十四五”及中长期发展规划, 明确了学科内涵、目标和特征, 分析了学科现状, 提出了未来学科发展布局和优先发展领域。

1.1 能源化学学科内涵、目标与发展逻辑

能源化学的核心内涵是利用化学的原理和方法, 研究能



张国俊 国家自然科学基金委员会化学科学部, 研究员, 化学三处副处长兼能源化学项目主任。2002年在中国科学院生态环境研究中心获博士学位; 2002~2003年在中国环境科学研究院工作; 2003~2005年, 新加坡国立大学博士后; 2005~2012年在北京工业大学工作; 2014~2015年在美国斯坦福大学做访问学者。2012年11月调入基金委化学科学部工作, 历任工业化学项目主任、化学工程项目主任、能源化学项目主任。

量获取、储存及转换过程的基本规律, 为发展新的能源技术奠定基础。能源化学学科以“满足国家能源战略需求, 引领国际能源化学前沿”为总体发展目标。在“十四五”规划期间, 凝练并解决能源化学领域的共性科学问题, 构建完整的能源化学学科体系, 推动我国成为国际能源化学研究的学术高地, 为培育能源高新技术提供原始创新的动力和支撑。针对我国现有能源结构特点和发展趋势, 能源化学研究将围绕“化石资源清洁高效利用与耦合替代”、“清洁能源互补体系”、“能源化学前沿科学”三条主线开展科学研究布局, 推动基础研究与应用基础研究融合发展^[5,6]。

1.2 能源化学的研究内容与发展布局

能源化学研究内容包括: 载能化学物质之间的转化、电/光/热/机械能与化学能之间的转换、能源的化学转化机制与理论等。

1.2.1 载能化学物质之间的转化

研究含碳、氮、氢等元素的载能化学物质在转化和利用过程中所涉及的化学科学规律, 通过调控化学反应实现载能化学物质结构再造与能量存储, 创建安全、高效的能源与化学品合成研究体系。

1.2.1.1 载能小分子的活化与转化

在氢能源化学方面, 探索新型可再生能源制氢过程、高

效储氢材料、氢气储运介质加/脱氢过程,通过发展新的方法、策略和过程促进氢气的高效转化与利用;在甲烷活化与转化方面,研究甲烷无氧活化及转化制高值化学品、甲烷催化氧化制低碳醇等含氧化合物、含碳重质产物与甲烷耦合反应等新化学过程,实现原子经济的甲烷转化;在二氧化碳活化与转化方面,开展二氧化碳加氢转化、多能量场促进二氧化碳还原研究,探索新的反应耦合过程,实现二氧化碳的绿色高效转化;在化学固氮与转化方面,发展多相/均相/多相-多相/酶催化、化学链等化学固氮与转化过程,探索氮气活化与转化的新途径,实现温和、高效、绿色合成氨、硝酸及其他重要含氮化合物,发展面向氨作为载能分子的活化转化、分解制氢、燃烧等新型释能转化的化学过程。

1.2.1.2 煤资源化学

在煤结构的分子层面表述方面,结合现代表征技术剖析煤主份化学结构,从化学键和自由基角度揭示煤的转化特性,为煤等含碳资源协同利用和开发提供科学基础;在煤中污染元素、燃烧产物控制和转化的化学理论基础方面,研究煤中硫/氮/重金属污染元素的多层次、多尺度化学演变进程,揭示煤转化过程污染物分子的形成机制,为煤炭资源清洁开发利用提供理论依据;在合成气转化过程耦合与产物调控作用机制方面,从原子/分子层次揭示C-O键活化、C-C键形成、碳链增长及终止机制,强化过程协同耦合,构建合成气转化过程C-H-O反应网络;在煤绿色氧化过程的化学基础方面,从自由基可控反应角度揭示光/电驱动的煤氧化行为,为高效直接煤燃料电池、煤-化学品绿色转化过程提供理论基础。

1.2.1.3 石油资源化学

实现石油资源化学与分析化学、计算化学及信息科学等学科交叉,揭示石油资源及其加工利用的化学本质。在石油分子及超分子的表征新方法及新认识方面,基于先进分析方法,揭示石油分子及超分子聚集体的多层次结构特征,分子水平上认识石油及产品的化学组成;在石油组学及分子尺度模型化的理论基础方面,在分子水平建立石油组成和理化性质的关系,针对石油复杂体系建立分子层次模拟的理论方法,为石油资源加工利用技术的发展提供理论基础;在石油分子高效绿色转化的化学基础方面,揭示石油烃分子化学转化机理,构建分子层次反应网络模型和理论模拟方法;研究烃分子转化过程相行为、吸附和扩散等特性,发展烃分子高效定向转化催化体系,研究石油资源开发、炼制及污染治理等转化过程的化学本质。

1.2.1.4 生物质资源化学

发展多途径生物质耦合转化技术,创新升级绿色生物炼制路线,发展生物质定向转化方法,探索光/电辅助生物质催化转化合成液体燃料体系,阐明生物质三大组分(木质素、纤维素和半纤维素)的原位转化与分离、生物质C-O/C-C键的选择性剪切与重构和生物质平台化合物选择性可控碳链增长机制,构建生物质自供氢多功能解聚催化体系和基于生物

质的C-N/C-S/C-O体系,探索多转化过程的耦合匹配过程。

1.2.2 电/光/热/机械能与化学能之间的转换

研究电/光/热/机械能与化学能之间相互转化规律,通过深入揭示固-固、固-液、固-液-气内部物质与载流子传递,特别是多相界面上的荷质转移机制,形成以化学储电、燃料电池、太阳燃料、化学储热、自充电系统等为代表的能量储存与转化体系。

1.2.2.1 电能源化学

针对电能高效转化与存储的科学基础,研究非均匀/非连续电极电解质体系的电荷和物质耦合输运过程及外场调控机制、复杂结构电极界面上物质和能量转化反应机制、材料的构效关系及设计基础、工况条件下电极材料和多相复杂电化学反应界面的结构及其演变规律。

1.2.2.2 光能源化学

光能的化学转化与利用将会革新现有过度依赖化石资源的能源结构。针对光能化学转化与利用的科学基础,研究光生电荷的产生分离、传输与表面催化反应的串行行为与互相制约的机制;多电子、多质子参与的复杂光电催化活性中心的结构;光生电荷到化学反应中心的传递机制;人工光合体系及自然光合体系的O-O键形成机理;人工光合成反应在原子/分子层次上化学键的断裂和重排机理;人工光合成“暗反应”活性和选择性的微观调控机制等。

1.2.2.3 热能源化学

围绕热能与化学能的相互转化,开展燃烧化学过程与机制、热化学反应、储热材料与化学等方面的研究。

1.2.2.4 机械能源化学

针对基于纳米发电机的机械能化学转化与利用,重点研究机械能驱动下固/固、固/液、固/气、液/液等界面上电荷分离与转移机制、环境因素(温度、湿度和气压等)对电荷转移过程的作用机理、材料表面/界面的化学成分和分子结构对表面电荷影响机制、局域电场与极化现象对催化反应的作用机制和“机械能-电能-化学能”之间的高效转化。

1.2.3 能源的化学转化机制与理论

微观反应机制是理解能源的化学转化本质、发展能源利用新技术的前提。需针对能源化学转化中涉及的热化学、力化学、光化学、电化学等反应过程,在量子、统计和化学动力学理论计算、仿真与多尺度模拟、原位表征技术开发及反应机制探索、表界面结构解析及性能研究、材料制备与器件开发等方面进行布局,加强量子理论和多尺度计算模拟与现代实验表征和数据解析的综合运用,在原子/分子到器件多尺度上揭示能源转化利用过程中的科学本质和规律,发展新概念,建立能源化学相关理论。

1.3 能源化学学科优先发展领域

在学部“夯基础、补短板、蕴特色、促交叉”理念指引下,围绕能源化学发展的三条主线,在分析我国基础研究现

状和广泛征集建议基础上,凝练了如下7个方向作为能源化学学科的优先发展领域,为未来制订重点类项目申请领域提供参考。(1) 载能小分子的化学键构建、定向活化与工程科学基础;(2) 化石能源与可再生能源等复杂分子体系的组成及转化基础;(3) 化石能源与可再生能源耦合体系与机制;(4) 电能源化学体系创制与机制;(5) 光能源化学材料与器件;(6) 多场耦合的固-固界面结构与电荷迁移机制;(7) 能源转化过程中固体结构理论与方法。

2 优化学科布局和申请代码

《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。基金委化学科学部设立能源化学学科将会引导化学科学在支撑国家能源科技战略中发挥更大作用。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,调整学科申请代码是基金委优化学科布局的重要内容之一。

2.1 现有能源化学学科申请代码介绍

2018年启用的“材料化学与能源化学”(B05)共包含10个二级申请代码^[7],其中能源化学领域包含4个二级申请代码、20个三级申请代码(表1)。

上述两级申请代码体系较为完整地涵盖了能源化学的研究方向,在项目申请和管理中发挥了积极作用。表2为2018~2020年能源化学领域面上项目、青年科学基金项目和地区科学基金项目的申请与资助情况,可以看出项目申请量和资助量均呈逐年增加的趋势^[7]。

2.2 学科申请代码调整情况介绍

面对日新月异的研究工作和不断细分的研究方向,目前的学科申请代码结构在基金管理中也面临着一些挑战,较为突出的问题包括:(1) 4个二级申请代码之间的内在逻辑关系仍需进一步梳理;(2) 申请代码覆盖度仍需进一步完善,如:热能/机械能与化学能之间的转化、能源材料数据设计等尚未体现;(3) 部分二级申请代码与三级申请代码的对应关系仍需加强,如:二级申请代码“B0508 电化学能源化学”下

表1 “材料化学与能源化学”学科中能源化学领域申请代码

Table 1 Application code of energy chemistry in the area of “materials chemistry and energy chemistry”

二级申请代码	三级申请代码	
B0507 碳基能源化学	B050701 天然气活化与转化	
	B050702 煤转化化学基础	
	B050703 石油资源化学	
	B050704 二氧化碳化学转化	
	B0508 电化学能源化学	B050801 超级电容器
		B050802 燃料电池
B0509 可再生与可持续能源化学	B050803 化学电源	
	B050804 太阳能电池	
	B050805 其他新型电池	
	B050806 电池回收化学	
	B050901 氢能源化学	
	B050902 人工光合过程	
B0510 能量转换材料化学	B050903 化学固氮与转化	
	B050904 太阳能化学利用	
	B050905 生物质能源化学	
	B051001 储能相变材料化学	
	B051002 光电转换材料化学	
	B051003 热电材料化学	
	B051004 光热材料化学	
	B051005 其他能量转化材料化学	

设置了三级申请代码“B050804 太阳能电池”,但从项目受理情况看,目前太阳能电池研究主要基于光电转化过程,较少涉及电化学科学内容。

因此,有必要进一步优化能源化学学科申请代码。2020年,化学科学三处以能源化学“十四五”及中长期发展规划为指导,按照“源于知识体系逻辑结构、促进知识与应用融通”的原则,围绕能源化学发展的三条主线,在“继承-发展”原有申请代码基础上编制了新的申请代码,于2021年启用。“能源化学”(B09)下设8个二级申请代码,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。

表2 2018~2020年度能源化学领域面上项目、青年科学基金项目、地区科学基金项目申请和资助情况

Table 2 Application and funding statistics of General Program, Young Scientists Fund, and Less Developed Regions Fund in the area of energy chemistry in 2018–2020

年度	面上项目			青年科学基金			地区科学基金		
	申请项数	资助项数	资助率(%)	申请项数	资助项数	资助率(%)	申请项数	资助项数	资助率(%)
2020	737	139	18.9	1021	175	17.1	128	25	19.5
2019	613	125	20.4	796	149	18.7	100	17	17.0
2018	605	124	20.5	676	141	20.9	105	16	15.2

2.2.1 氢能源化学(B0901)

面向以氢元素为核心构建的能源化学体系. 考虑到氢能在清洁能源结构中的重要作用, 此次申请代码调整过程中将原申请代码中三级申请代码“B050901 氢能源化学”升级为二级申请代码; 本申请代码对应于规划1.2.1.1部分.

研究方向具体包括: 制氢、储氢材料与化学、化学固氮与转化、氢能转化.

2.2.2 碳基能源化学(B0902)

面向以碳元素为核心构建的能源化学体系. 本申请代码继承了原二级申请代码“B0507 碳基能源化学”及相应的三级申请代码. 另外, 将原三级申请代码“B050905 生物质能源化学”调整进入该二级申请代码, 新增前沿研究方向“合成气化学”; 本申请代码对应于规划中1.2.1.2~1.2.1.4部分.

研究方向具体包括: 煤转化化学基础、石油资源化学、天然气活化与转化、二氧化碳化学转化、生物质能源化学、合成气化学.

2.2.3 热能源化学(B0903)

面向热能与化学能相互转化的能源化学体系. 本申请代码为新增申请代码, 对应于规划中1.2.2.3部分.

研究方向具体包括: 燃烧化学、化学链燃烧、高温水热解、热化学利用.

2.2.4 机械能源化学(B0904)

面向机械能与化学能相互转化的能源化学体系. 本申请代码为新增申请代码, 对应于规划中1.2.2.4部分.

研究方向具体包括: 机械能-电能转化、机械能-化学能转化.

2.2.5 电能源化学(B0905)

面向电能与化学能相互转化的能源化学体系. 本申请代码继承了原二级申请代码“B0508 电化学能源化学”, 将原来三级申请代码中的“B050804 太阳能电池”调整到其他申请代码, 新增“液流电池”、“电能-化学能转化”; 对应于规划中1.2.2.1部分.

研究方向具体包括: 超级电容器、燃料电池、液流电池、锂(钠)离子电池、锂(钠)硫电池、金属-空气电池、其他电池、电池回收化学、电能-化学能转化. 其中, “其他电池”包括多价态离子电池、锌电池、镁电池、钙电池、铝电池、浓差电池、纤维状电池、水性可充电池、柔性电池、微型电池、镍氢电池、铅酸电池、热化学电池、全固态电池等.

2.2.6 光能源化学(B0906)

面向光能与化学能相互转化的能源化学体系. 本申请代码继承了原三级申请代码“B050902 人工光合过程”、“B050904

太阳能化学利用”, 另外, 将原三级申请代码“B050804 太阳能电池”调整进入该二级申请代码; 对应于规划中1.2.2.2部分.

研究方向具体包括: 人工光合过程、太阳能化学利用、有机聚合物光伏电池、钙钛矿类光伏电池、其他光伏电池. 其中, “其他光伏电池”包括染料敏化光伏电池、聚合物-量子点杂化光伏电池、量子点光伏电池、薄膜光伏电池等.

2.2.7 极端环境能源化学(B0907)

面向特殊应用场景的能源化学体系. 本申请代码为新增申请代码.

研究方向具体包括: 深空能源化学、深海能源化学、深地能源化学、其他极端环境能源化学. 其中, “其他极端环境能源化学”包括高盐、高湿、高压、高腐蚀、真空、强磁场、强辐射等特殊条件.

2.2.8 能源材料化学(B0908)

面向材料化学与能源化学的交叉研究领域. 本申请代码继承了原二级申请代码“B0510 能量转换材料化学”及相应的三级申请代码, 新增“机械能转换材料化学”、“核能材料化学”、“能源材料数据与设计”.

研究方向具体包括: 储能相变材料化学、光电转换材料化学、热电转换材料化学、光热转换材料化学、机械能转换材料化学、其他能量转换材料化学、核能材料化学、能源材料数据与设计. 其中, “其他能量转换材料化学”包括磁光转化、磁热转化、光化学能量转换材料等; “核能材料化学”包括锕系材料化学、氟氟化学、稀土催化材料化学、稀土材料化学、反应堆材料化学、辐射材料化学等.

3 结语与展望

(1) 能源化学“十四五”及中长期发展规划系统梳理了学科内涵、目标、特征及发展态势, 提出了若干优先发展领域, 为未来凝练重点类项目领域作储备.

(2) 在“继承-发展”原有申请代码基础上进一步优化能源化学学科申请代码, 新的申请代码体系充分体现了学科面向需求的内在特征, 涵盖了与化学相关的能源研究方向, 不仅服务于学科的科学基金管理工作, 也可为相关部门进行学科建设提供参考. 同时需要指出的是, 申请代码需要与基础研究发展态势相适应, 因此, 有必要建立学科申请代码动态调整机制, 建议适时调整.

(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, 从而有利于更加精准地指派评审专家.

致谢 感谢常春然、陈军、陈立桅、陈萍、程方益、范峰滔、巩金龙、黄富强、黄佳琦、黄延强、贾春江、李福军、李泓、李隽、李永峰、廖洪钢、刘国柱、刘海超、刘建国、刘中民、刘忠文、邱介山、石建英、司锐、苏东、孙世刚、王宝俊、王阳刚、王中林、魏子栋、吴凯、吴骊珠、肖宇、徐超、徐春明、杨全红、余家国、赵天寿、张霖

宙、张强、张涛、郑俊荣、仲崇立等专家学者对学科在制订能源化学“十四五”及中长期发展规划和优化学科布局工作中给予的帮助和支持。

推荐阅读文献

- 1 Mallapaty S. How China could be carbon neutral by mid-century. *Nature*, 2020, 586: 482–483
- 2 Liu B, Fu Q, Bao X H, et al. An analysis of the discipline development of energy chemistry in China (in Chinese). *Sci Sin Chim*, 2018, 48: 1–8 [刘波, 傅强, 包信和, 等. 我国能源化学学科发展的初步探析. *中国科学: 化学*, 2018, 48: 1–8]
- 3 Fu G, Zheng N F, Ren B, et al. Construction and practice for energy chemistry majors in Xiamen University (in Chinese). *Univ Chem*, 2020, 35: 59–64 [傅钢, 郑南峰, 任斌, 等. 厦门大学能源化学专业的创建与实践. *大学化学*, 2020, 35: 59–64]
- 4 Zhang G J, Fu X F, Zheng Q Y, et al. Chemical sciences transformation in China—Review of the 13th Five-Year Plan of Department of Chemical Sciences, NSFC (in Chinese). *Sci Sin Chim*, 2020, 50: 681–686 [张国俊, 付雪峰, 郑企雨, 等. 转型中的中国化学——基金委化学部十三五规划实施纪行. *中国科学: 化学*, 2020, 50: 681–686]
- 5 Xiao Y, Peng Z L, He J D, et al. Science and technology innovation promotes construction of new national energy system (in Chinese). *Bull Chin Acad Sci*, 2019, 34: 385–391 [肖宇, 彭子龙, 何京东, 等. 科技创新助力构建国家能源新体系. *中国科学院院刊*, 2019, 34: 385–391]
- 6 Tian Z Q, Bao X H. *Energy Chemistry* (in Chinese). Beijing: Science China Press, 2018 [田中群, 包信和. *能源化学*. 北京: 科学出版社, 2018]
- 7 Liang Z X, Jiang W, Zhang G J. Review on application and funding of national natural science foundation projects in the area of “materials chemistry and energy chemistry” in 2018–2020 (in Chinese). *Sci Sin Chim*, 2021, 51: 55–61 [梁振兴, 姜玮, 张国俊. 2018~2020年国家自然科学基金委员会“材料化学与能源化学”领域项目申请和评审情况概述. *中国科学: 化学*, 2021, 51: 55–61]

Summary for “国家自然科学基金能源化学发展规划和布局概况”

Strategic development and discipline layout of energy chemistry of National Natural Science Foundation of China

Zhenxing Liang^{1,2}, Wei Jiang^{1,3} & Guojun Zhang^{1*}

¹ Department of Chemical Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085, China;

² School of Chemistry and Chemical Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China;

³ Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

* Corresponding author, E-mail: zhanggj@nsfc.gov.cn

In 2020, the research area of energy chemistry with the application code of B09 was founded in the Department of Chemical Sciences, the National Natural Science Foundation of China. The aim is to lay a solid scientific foundation for fostering transformative energy technologies. In this paper, we will give an introduction to the strategic development and discipline layout of energy chemistry. The intension, objective and development trend of energy chemistry are defined in the 14th Five Year Plan & Mid-long Term Strategic Development. As an important step to push her development, the application code of energy chemistry needs to be optimized in accordance with the inherent logic and landscape of the knowledge system. The new application coding system is, thus, established on the basis of the strategic plan and the issues of current system. Eight secondary application codes under energy chemistry are listed as follows. B0901 chemistry of hydrogen energy: The chemical production, storage and conversion of hydrogen; B0902 chemistry of carbon energy: The chemical conversion of coal, oil, natural gas, syngas, carbon dioxide, biomass; B0903 chemistry of thermal energy: The conversion between thermal energy and chemical energy; B0904 chemistry of mechanical energy: The conversion between mechanical energy and chemical energy; B0905 chemistry of electrical energy: The conversion between electrical energy and chemical energy; B0906 chemistry of photo energy: The conversion between photo energy and chemical energy; B0907 energy chemistry in extreme environment: Chemical energy system under extreme conditions like high temperature, high pressure, strong radiation, highly corrosive condition, deep Earth, deep sea, deep space, etc.; B0908 chemistry of energy material: Materials chemistry for efficient energy conversion.

National Natural Science Foundation of China, energy chemistry, strategic development, discipline layout, application code

doi: [10.1360/TB-2021-0090](https://doi.org/10.1360/TB-2021-0090)