

## 预算说明书（定额补助）

（请按照《国家自然科学基金项目预算表编制说明》等的有关要求，对各项支出的主要用途和测算理由，以及合作研究外拨资金、单价 $\geq 10$ 万元的设备费等内容进行必要说明。）

### 一、项目资金

#### （一）直接费用（共63万元）

##### 1、设备费：10万元

本项目计算量较大，基于原有计算平台，还需要添加高性能计算工作站的硬件支持。预计需新增2个多核心计算服务器（单价 $< 5$ 万元）。总计约10万元。

##### 2、材料费：6万元

实验材料费：购买实验所需要的化学试剂和一般性耗材，总计约6万元。

##### 3、测试化验加工费：12万元

实验材料分析表征测试费：XPS，热重分析、拉曼光谱、红外光谱分析、元素分析、高分辨透射电镜分析等，四年合计4万元。超算中心机时费用：超算帐号约为2万元/年（国家超级计算天津中心），合计8万元。

##### 4、燃料动力费：0万元

##### 5、差旅费/会议/国际合作与交流费：14万元

差旅费/会议费：约6万元。参加国际会议”12th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, VANCOUVER, BC, AUGUST 16-21, 2020”以及“17th international congress of quantum chemistry, june 21-26, 2021, Bratislava, slovakia,”和“全国环境化学大会”等相关领域的国内学术会议。包括往返交通费、住宿费、差旅补助以及会议注册费。除此以外，项目交流合作以及赴外地进行分析测试活动费用。

国际合作与交流费：8万元。项目执行期间，拟邀请1-2人次境外专家学者来华交流访问。2万元/人次 $\times 2$ 人次=4万元。并且，项目组成员1-2人次到国际著名高校进行交流合作。2.00万元/人次 $\times 2$ 人次=4.00万元。

##### 6、出版/文献/信息传播/知识产权事务费：6万元

论文著作出版费，书籍购买、文献检索、报告排版印刷费、邮寄费、计算商业软件升级费用、君富集群管理更新费用。

##### 9、劳务费：15万元

支付直接参加项目研究的研究生（硕士4名，博士2名）的劳务费用。

##### 10、专家咨询费：0万元

##### 11、其他支出：0万元

### 二、自筹资金：0元