

关于发布功能基元序构的高性能材料基础研究重大研究计 划 2024 年度项目指南的通告

功能基元序构的高性能材料是指以功能基元为基本单元,通过空间序构获得具有突破性和变革性性能的新材料。“功能基元”是指在原子/分子尺度和宏观尺度之间引入具有特定功能的中间结构单元,“序构”是指“功能基元”通过人工设计制造而成的特定的空间堆垛、排列方式,如有序结构、长/短程有序结构、梯度结构等。功能基元序构的高性能材料可以突破元素种类的限制,为设计和发展具有突破性和变革性性能的关键新材料拓展了更大的空间。

一、科学目标

本重大研究计划瞄准世界材料科学前沿和国家对具有变革性性能的结构材料、信息材料和能源材料的重大需求,聚焦中国学者提出的“功能基元-序构-变革性性能”材料研究新范式,聚焦创建若干种具有世界影响力的中国品牌关键新材料,研究其中的关键科学问题与技术问题,揭示功能基元序构材料中蕴含的规律,建立相应的理论;发展材料设计的新原理和先进制备技术,逐步实现按需设计具有突破性和变革性性能的新材料。通过本重大研究计划的实施,提高我国在国际材料科学前沿的原始创新能力。

二、核心科学问题

本重大研究计划将组织材料、信息、数理、化学等学科的科学家共同开展研究,拟解决的核心科学问题如下:

(一) 功能基元的本征特性(如物理化学性质、微纳结构、形态、尺寸、分布等)对宏观性能的影响规律及其调控机理。研究功能基元的临界尺寸效应和量子限域效应;功能基元(如铁电畴、铁磁畴、孪晶、组分、结构、低维量子材料、人工谐振单元等)与材料宏观性能(如力、热、光、声、电、磁)之间的关联;发现和构筑影响材料宏观新奇物性的关键功能基元。

(二) 序构对材料宏观性能优化增强的作用规律。研究序构(如有序结构、长/短程有序结构、梯度结构、无序结构等)引发的功能基元间的耦合、增强效应;揭示序构对材料宏观性能的影响机制。

(三) 功能基元序构的协同关联效应。揭示功能基元序构的协同关联作用机制;发现超越功能基元本身的高性能甚至全新的性能;阐明“功能基元+序构”与宏观性能的关联;建立按需设计功能基元序构的高性能材料的方法。

(四) 功能基元序构高性能材料的制备科学与表征技术。发展“自上而下”与“自下而上”制备功能基元序构高性能新材料的方法与技术;发展人工序构材料的结构和性能表征技术。

三、2024 年度资助的研究方向

根据总体布局，本重大研究计划在前期研究的基础上，2024 年聚焦以下两个目标部署集成项目：一是逐步创立中国学者提出的“功能基元-序构-变革性性能”材料研究新范式，研究其中的关键科学问题并取得突破；二是通过材料研究新范式，创建结构、信息和能源领域急需且具有国际影响力的中国品牌关键新材料。鼓励前期在本重大计划研究中取得重要进展且研究方向相近、研究力量具有互补优势的项目团队联合申请集成项目，充分发挥学科交叉优势，协同攻关，取得具有国际影响力的重大标志性成果。本年度资助的研究方向如下：

（一）材料研究新范式的理论体系构建。

围绕“功能基元-序构-变革性性能”的构效关系与突现性，新范式的数理方法与变革性新材料逆向设计方法，拟资助集成项目数 3-4 项，直接费用资助强度 300-500 万元/项。

1. “功能基元-序构-变革性性能”的构效关系与突现性。

基于重大研究计划的前期研究积累，特别是梯度序构纳米金属、多级片层序构高温轻合金、序构塑性陶瓷和序构能源转换材料等重大代表性研究成果，开展“功能基元-序构-变革性性能”材料研究范式的理论体系构建。结合基元序构新材料的可控制备研究，发现定量描述序构效应的关键序构特征参量，发展序构设计准则和理论；通过优化跨尺度空间序构设计，增强基元间“1+1>2”的协同耦合效应，揭示基元序构耦合导致的突现性及其微观机理；建立功能基元特征尺寸、空间序构与强度、塑性、疲劳断裂等宏观力学使役性能、电与热输运等宏观物性及其自旋量子特性之间的构效关系，探究序构参量对变革性性能的影响机制与规律；阐明基元与序构的跨层级交互作用、演化规律和突现性特征。

2. 功能基元序构新材料的逆向设计新范式。

建立材料作为复杂体系的数理描述基础，阐明基元序构与相互耦合的微观层次多参量之间的关联。建立基元序构和功能特性的数理表述，实现整体结构、能量及功能特性的跨尺度结构特征的定量表述；在实现功能基元物理性质量化的基础上，结合人工智能算法，解决序构的描述符及其与材料功能性质关系的定量表述；发展和建立基于功能基元与序构的多尺度材料设计理论和方法。结合材料科学与复杂体系研究，探究材料性能突现性的微观机制，实现新材料的结构生成和构筑方法(包含基元和序构的构建)的突破。逐步建立“功能基元-序构-变革性性能”范式的逆向设计方法。

（二）基于功能基元序构的重大前沿结构材料。

聚焦具有重大应用前景的两种前沿结构材料，创制中国品牌的序构塑性陶瓷和序构高温轻合金，拟资助集成项目数不超过 2 项，直接费用平均资助强度不超过 1200 万元/项。

1. 序构塑性陶瓷。

针对陶瓷没有室温塑性限制其重大工程应用的历史性难题，发展具有室温塑性的序构陶瓷。研究陶瓷中功能基元与序构的形成规律；研究序构陶瓷中决定塑性和强度的物理机制、规律和调控参数；研究共格序构、转角序构和能量耦合关系；阐明基元、序构方式与强塑性的构效关系。获得室温下具有良好塑性变形能力的大尺寸陶瓷块材，实现室温压缩总应变 $>10\%$ ，塑性应变 $\geq 5\%$ ，抗弯强度 $>200\text{MPa}$ 。

本方向的重大应用场景是面向序构塑性陶瓷在航空航天关键构件、高端自润滑轴承等重大工程的应用。

2. 序构高温轻合金。

通过功能基元多级序构，攻克钛铝合金室温脆性大、高温长时承载能力低等技术难题，揭示多级序构高温轻合金大尺寸生长原理和规律，获得高强高韧多级序构轻合金材料。大尺寸序构高温轻合金性能达到：材料密度约为 $4.0\sim 4.2\text{g/cm}^3$ ，材料直径 $>30\text{mm}$ ，室温屈服强度 $>800\text{MPa}$ ，室温伸长率 $>10\%$ ， 1000°C 屈服强度 $>400\text{MPa}$ 。

本方向的重大应用场景是面向空天动力装备等重大工程应用。

（三）序构关键战略功能晶体和太赫兹材料。

本方向聚焦具有重大应用前景的两种前沿信息材料，创制中国品牌的序构关键战略功能晶体和序构太赫兹高性能材料及器件。拟资助集成项目数不超过2项，直接费用平均资助强度不超过1200万元/项。

1. 序构关键战略功能晶体。

研究和发展更短波长、更高功率的序构非线性光学晶体和序构红外激光晶体。研究超快激光与非线性晶体的相互作用机制、设计制备序构晶体，研究非线性功能基元的尺寸效应、周期和准周期序构及其中光子-光子耦合规律、有序/无序功能基元界面的频率转换规律，发展精准可控的功能基元制备与加工技术，研制周期序构、准周期序构、二维周期序构的功能晶体，进一步缩短激光波长，提升激光输出功率，实现激光波长 $\leq 150\text{nm}$ ，输出功率 $\geq 1\text{mW}$ 。研究序构激光晶体中功能基元的电子-声子耦合强度、多声子耦合调控机制、多级序构激光谐振腔的设计原理，发展 $3\sim 5\mu\text{m}$ 波段介质多级序构的加工与制备技术，研制功能基元序构的中红外激光晶体，实现荧光光谱之外的可调谐激光输出，减小激光器体积，提高中红外激光输出功率和效率，达到激光波长 $3\sim 5\mu\text{m}$ ，输出功率 $\geq 1\text{W}$ 。

本方向的重大应用场景是面向国家重大需求的光源，如ARPES光电子能谱仪光源、 ^{229}Th 核钟激光光源等。

2. 序构太赫兹高性能材料及器件。

面向高速度、长距离太赫兹通信系统的关键战略需求，突破功率限制，研究自由电子功能基元的太赫兹辐射效应、非线性功能基元的太赫兹波调控机制、太赫兹辐射源的多级序构耦合规律以及提高太赫兹探测器件的灵敏度的机制，实现输出功率 ≥ 50 mW @0.66-1 THz；太赫兹调制速度 ≥ 100 Gbps；太赫兹峰值探测率 $\sim 10^9$ Jones；响应速度从 ms 量级提升至小于 10ns@ ≥ 0.3 THz。

本方向的重大应用场景是面向长距离太赫兹通信系统和高分辨成像。

(四) 序构高效能量转换材料及器件。

本方向拟资助集成项目数 1 项，直接费用资助强度不超过 1200 万元/项。

本方向针对下一代集成电路芯片的高效散热、可穿戴设备无源供电、低品位分布式工业废热回收利用等对高性能热电材料的重大需求，以及目前热电材料性能难以满足高效制冷与发电需求、无机热电材料室温没有塑性及其可加工性差等突出问题，研究热-电-力耦合功能基元和热-电-磁耦合功能基元的本征特性、精细构筑方法、基元-序构-性能耦合关联与变革性性能实现原理，获得高热电性能、高塑性、高柔性的新型能源转换材料与器件。实现功能基元序构的热电材料近室温 zT 值达到 2.0；功能基元序构的无机塑性热电材料和有机柔性热电材料的 $zT \geq 1.0$ 、压缩应变 $\geq 50\%$ 、弯曲应变 $\geq 20\%$ ，相应的薄膜热电器件归一化功率密度 ≥ 50 $\mu\text{W cm}^{-2} \text{K}^{-2}$ 。

本方向的重大应用场景是面向下一代集成电路芯片高效散热和工业废热高效回收利用技术。

四、项目遴选的基本原则

为确保实现总体科学目标，本重大研究计划要求申请项目的研究内容必须符合指南要求，围绕“功能基元+序构”的材料研究新范式，以获得变革性性能新材料为研究导向，凝练其中的关键基础科学问题，开展原创性研究。

(一) 集成项目要突出“创立中国学者提出的材料研究新范式、创建具有国际影响力的中国品牌关键新材料”的目标导向，提出引领性的研究目标和核心指标。

(二) 项目申请书中需要明确“功能基元”和“序构”的科学内涵，凝练“功能基元+序构”产生新效应和变革性性能的关键科学技术问题，阐明通过“功能基元+序构”的材料性能超越功能基元本身，实现变革性或颠覆性。

(三) 前期已取得重要进展，具有扎实工作基础，进一步聚焦解决核心科学问题并取得突破，体现对本重大研究计划总体科学目标和解决核心科学问题的贡献。

五、申请要求及注意事项

(一) 申请条件。

本重大研究计划项目申请人应当具备以下条件：

- 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。

执行《2024 年度国家自然科学基金项目指南》“申请规定”中限项申请规定的相关要求。

(三) 申请注意事项。

申请人和依托单位应当认真阅读并执行本项目指南、《2024 年度国家自然科学基金项目指南》和《关于 2024 年度国家自然科学基金项目申请与结题等有关事项的通告》中相关要求。

1. 本重大研究计划项目实行无纸化申请。申请书提交日期为 2024 年 10 月 8 日—10 月 17 日 16 时。

(1) 申请人应当按照科学基金网络信息系统中重大研究计划项目的填报说明与撰写提纲要求在线填写和提交电子申请书及附件材料。

(2) 本重大研究计划将紧密围绕核心科学问题，对多学科相关研究进行战略性的方向引导和优势整合，成为一个项目集群。申请人应根据本重大研究计划拟解决的核心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、技术路线和相应的研究经费等。

(3) 申请书中的资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“集成项目”，附注说明选择“功能基元序构的高性能材料基础研究”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。

项目申请书中研究期限应填写“2025 年 1 月 1 日—2027 年 12 月 31 日”。

(4) 申请人在申请书“立项依据与研究内容”部分，应当首先说明申请符合本项目指南中的资助研究方向，以及对解决本重大研究计划核心科学问题、实现本重大研究计划科学目标的贡献。

(5) 如果申请人已经承担与本重大研究计划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。

(6) 每个集成项目的合作研究单位不得超过 4 家。

2. 依托单位应当按照要求完成依托单位承诺、组织申请以及审核申请材料等工作。在 2024 年 10 月 17 日 16:00 时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，并于 2024 年 10 月 18 日 16:00 时前在线提交本单位项目申请清单。

3. 其他注意事项。

(1) 为实现重大研究计划总体科学目标和多学科集成，获得资助的项目负责人应当承诺遵守相关数据和资料管理与共享的规定，项目执行过程中应关注与本重大研究计划其他项目之间的相互支撑关系。

(2) 为加强项目的学术交流，促进项目群的形成和多学科交叉与集成，本重大研究计划将每年举办一次资助项目的年度学术交流会，并将不定期地组织相关领域的学术研讨会。获资助项目负责人有义务参加本重大研究计划指导专家组和管理工作组所组织的上述学术交流活动。

(四) 咨询方式。

国家自然科学基金委员会工程与材料科学部材料科学一处

联系电话：010-62327144