

功能基元序构的高性能材料基础研究重大研究计划2021年度项目指南

发布时间：2021年01月25日 来源：国家自然科学基金委员会

功能基元序构的高性能材料是指以功能基元为基本单元，通过空间序构构成具有突破性、颠覆性宏观性能的高性能材料。“功能基元”是在原子/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，序构指人工设计制造的特定结构单元堆垛、排列方式，如有序结构、长/短程有序结构、梯度结构等。功能基元序构的材料可以突破元素种类的限制，为探索具有变革性和颠覆性的高性能材料提供了更大的空间。

一、科学目标

本重大研究计划瞄准材料科学前沿，通过功能基元序构构建高性能新材料，满足信息、结构、能源和极端服役条件对材料的需求，解决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，逐步实现按需设计变革性和颠覆性新材料的目标，提高我国在材料科学领域的整体创新能力。

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,关注功能基元的临界尺寸效应和量子限域效应,明确功能基元(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)与材料的宏观性能(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。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;明晰序构影响材料宏观性能的物理机制。

(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”、“自下而上”制备功能基元序构高性能材料的新方法与新技术,发展人工序构材料的结构和性能表征技术,探索其中独特的科学问题。

三、2021年度重点资助研究方向

通过“功能基元+序构”的研究思路发展以下材料设计理论、方法和高性能材料:

(一) 功能基元序构新材料的设计理论、方法和物理基础。

聚焦功能基元序构高性能材料的物理机制与变革性新材料设计的理论和方法:1)研究“功能基元—人工序构—超越性能”三者之间关系的物理基础,包括功能基元结构和性能(力、热、光、声、电、磁等)的特征尺寸效应、量子限域效应等,基元之间的关联和耦合效应,序构导致的合作、性能增强和突现性效应等。探索

功能基元序构导致变革性材料的新规律和新方法。2) 发展功能基元序构变革性新材料的设计理论和方法，研究功能基元序构高性能材料的系统性设计理论和方法，探索基于功能基元序构的突破性和变革性新材料体系，发展功能基元序构新材料逆向设计、优化设计的方法、软件和数据库等。

（二）下一代信息技术核心材料。

为满足下一代5G-6G通讯系统等器件应用的迫切需求，重点解决传统太赫兹发射源器件中高频率和高功率的矛盾，发展出基于“功能基元+序构”的太赫兹波段的高效辐射及探测材料。针对信息领域应用的重大需求，通过“功能基元+序构”的物理效应研究，探索解决光波和电磁波等信息载体的发射、探测和成像中的瓶颈问题。特别鼓励设计和制备如下高性能材料：工作频率在0.6-1THz、功率大于10mW、室温工作、连续波输出的自由电子太赫兹相干辐射器件；量子级联太赫兹辐射源，最高激射温度 $>200\text{K}$ 、频率范围在1 THz—5 THz、连续输出功率大于200 mW；实现单模输出功率 $>1\text{W}$ （峰值，占空比大于1%）且单模连续可调谐范围 $>1\text{THz}$ ；基于非线性光子晶体的，片上可集成高速电光调制的太赫兹辐射源，调制频率 $>100\text{G}$ ；在通讯波段下工作的光电导太赫兹探测器，探测范围0.5-5THz、动态范围大于50dB@1THz、探测器件噪声等效功率低于 $100\text{pW}/\sqrt{\text{Hz}}$ 。发展低维体系功能基元构建有序结构的高性能信息处理、探测、成像的新材料。

（三）超高性能结构材料。

为满足航空航天和国家重大工程等应用的迫切需求，基于“功能基元+序构”的途径，重点解决传统材料强度与塑性和韧性的矛盾，发展出综合性能优异的金属、无机和有机材料及其制备技术；发现超轻、超强、耐腐蚀等新材料，满足极端服役条件对材料性能的苛刻要求。特别鼓励对如下变革性材料的探索：塑性陶瓷（压缩强度 $>500\text{MPa}$ 、断裂应变 $>10\%$ ）；综合性能优异的TiAl合金（室温拉伸塑性 $>6\%$ ，屈服强度 $>700\text{MPa}$ ， 1000°C 拉伸屈服强度 $>400\text{MPa}$ ）；多维复杂序构的防护新材料。

（四）面向未来的能量转换与存储新材料。

重点支持基于功能基元序构的高性能能量转换与存储新材料及器件。特别鼓励对基元序构物理和以下变革性材料的设计、制备研究：功能基元序构的高性能室温热电材料（ZT值 >2.0 ）；多场多功能基元序构耦合卡和高效能量转换新材料；功能基元序构的固态电池及关键材料（如固态电解质离子室温电导率 $>0.001\text{ S/cm}$ ）；功能基元序构新材料用于氢能制备和存储及高性能燃料电池；基于功能基元序构的高选择性和高转化率的新型光催化材料；基于单纳米功能基元序构的储能器件及性能倍增机制探索；新型光电功能基元与高效能量转换的研究，以满足未来能源技术的重大需求。

（五）高性能的生物医用材料。

重点支持基于功能基元序构的变革性新材料的仿生学研究及其按需逆向设计的理论、制备技术探索；发展功能基元序构高性能生物医用材料，为临床重大疾病探测、诊断、治疗的变革性方案提供必要的高端材料与技术支持。

四、项目遴选的基本原则

为确保实现总体目标，本重大研究计划要求申报项目的研究内容必须符合指南要求，围绕“功能基元+序构”的研究思路，以“突破性”、“颠覆性”性能为研究导向，结合实际研究，提炼其中的基础科学问题，开展创新性研究。

（一）要求研究“功能基元+序构”相关的基础科学问题，即：在申请书中需要明确“功能基元”、“序构”、“功能基元+序构”的设计，研究其中蕴含的机理与机制。其中，序构可以是有序、长/短程有序、甚至无序等形式。

(二) “功能基元”性能可以是寻常的，但“功能基元+序构”获得的宏观材料的性能必须是变革性或颠覆性的，比“功能基元”自身所用材料有大幅度提高，或者发现“功能基元”所用材料本身所不具备的新性能。

(三) 要围绕“功能基元+序构®高性能”归纳提炼明确的核心关键科学问题。

(四) 要明确对实现重大研究计划总体目标和解决核心科学问题的贡献。

(五) 鼓励开展实质性的国际合作。

五、2021年度资助计划

对于有比较好的创新性研究思路或比较好的苗头但尚需一段时间探索研究的申请项目，将以培育项目方式予以资助。2021年度拟资助培育项目35项，直接费用平均资助强度约为65万元/项，资助期限为3年，培育项目申请书中研究期限应填写“2022年1月1日—2024年12月31日”；对于有较好研究基础和积累，且有明确的重要科学问题需要进一步深入系统研究同时体现学科交叉特征的申请项目，将以重点支持项目的方式予以资助。2021年度拟资助重点支持项目15项，直接费用平均资助强度约为350万元/项，资助期限为4年，重点支持项目申请书中研究期限应填写“2022年1月1日—2025年12月31日”。

六、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《2021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、《2021年度国家自然科学基金项目指南》和《关于2021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2021年2月28日—3月4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）本重大研究计划旨在紧密围绕核心科学问题，将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、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“培育项目”或“重点支持项目”，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。

培育项目和重点支持项目的合作研究单位不得超过2个。

(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重点资助研究方向，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。

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。

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2021年3月4日16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3月5日16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 材料科学二处

联系电话：010-62327144