**功能基元序构的高性能材料基础研究重大研究计划2022年度项目指南**

　　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“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、能源等应用领域对材料的需求，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。在此基础上，探索和发展“功能基元序构的高性能材料”的研究新范式，提高我国在国际材料科学前沿的整体创新能力。

**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；明晰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”“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、2022年度资助研究方向**

　　（一）功能基元序构新材料的设计理论、方法和物理基础。

　　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，探索功能基元序构导致变革性材料的新规律、新理论和计算方法。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、增强和突现性效应等。

　　2. 基于功能基元序构的突破性和变革性新材料体系，发展功能基元序构高性能材料的系统性设计理论和逆向设计方法，形成相应的设计软件和数据库等。

　　（二）下一代信息技术核心材料及器件。

　　1. 为满足下一代信息系统应用的迫切需求，探索解决光波和电磁波等信息载体在发射、探测和成像中的瓶颈问题, 发展基于“功能基元+序构”的太赫兹波段的高效辐射及探测材料和原型器件。研究如下高性能材料及器件：室温条件下，工作频率范围在0.6-1THz的高功率、连续波输出的自由电子太赫兹相干辐射器件；基于二维电子栅控小尺度可编码有源动态超构表面的高速高阶太赫兹调制器；基于人工表面等离激元超构材料的太赫兹片上高通量信道传输原型器件；工作频率范围在0.1-6THz、具有大动态范围和高辐射功率、在通讯波段下工作的光电导太赫兹源和探测器。

　　2. 发展基于紫外光学材料的超构透镜设计方法和加工技术，制备大尺寸、多阵元、高效率的紫外超构透镜光学系统原型器件。

　　3. 调控极性拓扑畴的自发序构，研究和发现拓扑畴三维空间的原子构型及其新奇特性（如负电容、太赫兹谐振等效应），制备可重构、低功耗、高集成度的新型信息功能器件。

　　（三）超高性能结构材料。

　　1. 发展针对高性能结构材料的功能基元序构的理论方法，建立相关的理论模型和设计软件。重点研究高性能结构材料中功能基元的特征尺寸、序构方式与宏观力学性能之间的定量关系，探索序构后功能基元间的耦合所呈现的强韧化新效应，发展相应的数值模拟方法，研发先进的材料制备技术；通过研究高性能材料的变形、断裂等力学行为，验证设计理论与方法的实用性，形成功能基元序构高性能结构材料的逆向设计和优化方法、软件和数据库等。

　　2. 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和无机材料及其制备技术；发现超轻、超弹、超强、高温隔热、吸/透波等新材料，满足极端服役条件对材料性能的苛刻要求，加强对结构-功能一体化塑性陶瓷的探索。

　　（四）面向未来的高性能能量转换与存储新材料及器件。

　　1. 研究功能基元序构热电材料中电子/声子相互作用动力学的新过程、新机制、新规律和新效应，为新一代热电材料的结构设计和创制、热电性能的颠覆性突破提供重要的理论指导；设计和制备多场作用的电-磁-热多功能基元序构而成的热电材料，研究序参量互作用增强的耦合效应，发展高效固态制冷材料。

　　2. 基于功能基元序构新原理，研究用于固态电池、光电转化和高效催化的关键材料及器件。

**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本指南要求，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，提炼其中的基础科学问题，开展创新性研究。

　　（一）在申请书中需要明确“功能基元”和“序构”的定义。“功能基元”的性能可以是寻常的，但“功能基元+序构”导致的宏观材料的性能应该超越功能基元本身，力争实现变革性或颠覆性性能。

　　（二）提出并研究“功能基元+序构”导致新效应和高性能的科学和技术问题。

　　（三）要明确对实现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。

　　（四）鼓励开展实质性的国际合作。

**五、2022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，将以培育项目方式予以资助。鼓励对功能基元序构材料基本原理、材料逆向设计、太赫兹材料器件和超高性能结构材料方向的探索性研究。2022年度拟资助培育项目10项，直接费用平均资助强度约60万元/项，资助期限为3年，培育项目申请书中研究期限应填写“2023年1月1日－2025年12月31日”。

　　对于有较好研究基础和积累、有明确的重要科学问题需要进一步深入系统研究、体现学科交叉特征的申请，将以重点支持项目的方式予以资助。2022年度拟资助重点支持项目8项，直接费用平均资助强度约300万元/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“2023年1月1日－2026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《2022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、《2022年度国家自然科学基金项目指南》和《关于2022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2022年11月18日－11月23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“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2022年11月23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11月24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一处

　　联系电话：010-62327144