

面向未来技术的表界面科学基础重大研究计划

2024 年度项目指南

表界面科学跨越物质、能源和信息等众多基础学科，是催化、超导和芯片等国家重大战略需求的共性科学基础。本重大研究计划针对表界面相关的共性核心科学问题，开展表界面结构、电子态和物性的精密探测、精确计算和精准调控等研究，发展研究表界面的新方法、新工具和新理论，为若干未来关键技术的突破夯实科学基础，为我国新质生产力的发展做出贡献。

一、科学目标

本重大研究计划立足于若干未来技术中涉及到的共性表界面科学问题，聚焦于固体功能体系的表界面构筑、探测与模拟，实现表界面结构与功能的精准调控，助力能源催化、界面超导和芯片器件等重大领域的发展，提升我国在关键技术领域的原始创新能力。

二、核心科学问题

本重大研究计划围绕功能体系中的表界面态这一核心科学问题，集中开展以下三方面研究：

（一）表界面态的探测与表征。

发展表界面精准表征新方法，建立微弱信号增强新原理，解决表界面态探测难题，实现固体表界面态的精密检测。

（二）表界面态的理论与计算。

探究表界面不同物相间的相互作用，在微观层次阐明表界面耦合机制，在时间、空间和能量等多维度对表界面态进行理论描述与计算模拟。

（三）表界面态的设计与调控。

揭示表界面结构可控构筑的基本原理，在原子水平精准构筑表界面结构，实现表界面态与表界面物性的定量描述和精确调控。

三、2024 年度资助研究方向

（一）培育项目。

围绕能源催化、界面超导和芯片器件等重大领域中与表界面相关的上述共性科学问题，对于探索性强、选题新颖、前期研究基础较好的申请项目，将以培育项目的方式予以资助，优先支持以下研究方向：

1. 表界面精密探测新技术。

针对掩埋于固体深处的界面难以探测这一难题，发展界面探测的新原理和新技术，实现固体界面的直接表征。针对表界面探测信号微弱且难以与体相探测信号区分的难题，开发微弱信号的抽取和放大方法，实现表界面的精密探测。

2. 表界面精确计算新理论。

发展用于表界面体系的高效算法，实现非周期、非连续和非同质的表界面体系模拟。针对表界面结构演化、电荷转移和能量传递等过程，建立不同时空尺度上表界面相关过程动态模拟新方法，实现复杂表界面体系的精确计算。

3. 表界面精准构筑新方法。

发展表界面体系的原子级构筑方法与技术，实现表界面结构与成分的功能导向精准构筑。阐明表界面的结构、成分与外场对表界面态的调控机制，建立表界面物性精细调控的系统方法。

(二) 重点支持项目。

依据核心科学问题和目标，对于前期研究积累较好、对总体目标有较大推动作用的申请项目，将以重点支持项目的方式予以资助，优先支持以下研究方向：

1. 表界面探测方法。

(1) 表界面催化活性的超高空间分辨可视化技术。发展催化体系表界面态的原子级分辨检测技术，探索并建立其与催化活性的定量关系，实现表界面催化活性的可视化展示。通过高精度的表界面态调控与分析，探究催化位点的活性本源，为提高非贵金属的催化效率提供表界面科学基础。

(2) 表界面电荷运输的宽时域四维成像扫描电子显微镜技术。发展跨越飞秒与亚秒时间尺度和微纳空间分辨的四维成像技术，探索表界面电荷在时间与空间维度上的能量转移及定向传输机制，为能源催化和半导体器件的发展提供技术手段。

(3) 表界面自旋性质的单自旋尺度精密探测。有机磁性材料关乎未来信息技术，其分子间自旋相互作用以及分子-电极间多体相互作用是分子自旋器件的基础。利用表面配位与在位反应等方法精确构筑分子自旋体系，在单自旋尺度定量研究不同壳层

电子间的多重自旋相互作用，为构筑高性能分子自旋器件奠定基础。

2. 表界面新奇物态。

(1) 表界面新奇物态的理论预测。针对低维范德华材料表界面新奇物态，构建范德华材料表界面结构数据库，通过理论计算阐释新物态和新物性的产生机制。利用高通量计算和机器学习等方法，构建可用于预测复杂表界面体系物态的计算模型，为具有新奇物态的表界面体系制备提供理论指导。

(2) 表界面新奇物态的技术实现。针对铜基与铁基超导体、过渡金属硫族化合物、笼目晶格材料以及多铁性材料等体系，发展分子束外延、脉冲激光沉积和化学气相沉积等技术，实现原子尺度表界面结构的精准构筑。通过精细调控表界面晶格、对称性、原子掺杂与应力等，实现高温超导、拓扑超导、室温磁性和磁电耦合等新奇物态。

3. 特定功能界面应用。

(1) 多相催化中的金属-分子筛界面。针对金属-分子筛界面探测及其催化机制，利用成像技术建立反应条件下金属-分子筛界面的三维原子模型，开发金属-分子筛界面新的催化功能，研究其催化活性衰减原理，为诸如长链烃的高值芳构化等应用提供技术方案，并初步实现工业放大生产。

(2) 二维器件中的沟道-氧化物栅介质界面。针对二维晶体管沟道与栅介质界面性能衰退等问题，探索高迁移率二维半导体

和高介电常数栅介质的异质界面集成新方法，设计并构筑高品质异质界面，探究其性能调控机制与增强策略，提高器件稳定性，研制出超越硅基器件速度与功耗极限的二维原型晶体管和逻辑单元。

(3) 碳基芯片中的高性能低功耗碳基晶体管栅界面。针对晶体管栅界面态和界面缺陷密度，发展基于碳纳米管场效应晶体管的栅堆垛界面态表征技术，阐明界面态的调控机制，建立精确的界面态模型，发展相应的栅堆垛界面优化技术，实现高性能低功耗的碳纳米管晶体管构筑，探索其在高性能大规模集成电路中的应用潜力。

四、项目遴选的基本原则

(一) 紧密围绕核心科学问题，注重需求及应用背景约束，鼓励原创性、基础性和交叉性的前沿探索。

(二) 优先资助能够解决面向未来技术的表界面科学问题并具有应用前景的研究项目。

(三) 重点支持项目应具有良好的研究基础和前期积累，对总体科学目标有直接贡献与支撑作用。

五、2024 年度资助计划

拟资助培育项目 30-35 项，直接费用资助强度约为 70 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“2025 年 1 月 1 日 - 2027 年 12 月 31 日”；拟资助重点支持项目 6-8 项，直接费用资助强度约为 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“2025年1月1日-2028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《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8月30日-2024年9月9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，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“面向未来技术的表界面科学基础”，受理代码选择 T01，根据申请的具体研究内容选择不超过 5 个申请代码。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) 申请人在申请书起始部分应明确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 2024 年 9 月 9 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 9 月 10 日 16 时前在线提交本单位项目申请清单。未按时提交项目清单的申请将不予受理。

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 1 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。

交叉科学部交叉科学一处

联系电话：010-62328382