

# 关于发布面向未来技术的表界面科学基础 重大研究计划 2025 年度项目指南的通告

国科金发计〔2025〕8号

国家自然科学基金委员会现发布面向未来技术的表界面科学基础重大研究计划 2025 年度项目指南，请申请人及依托单位按项目指南所述要求和注意事项申请。

国家自然科学基金委员会

2025 年 1 月 24 日

## 面向未来技术的表界面科学基础重大研究计划

### 2025 年度项目指南

表界面科学涉及物质、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，为我国高新科技的发展做出贡献。

#### 一、科学目标

本重大研究计划立足于若干未来技术的共性表界面科学问题，聚焦于固体功能体系的界面构筑、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界面态这一核心科学问题，集中开展以下三方面研究：

### （一）界面态的探测与表征。

发展界面精准表征新方法，建立微弱信号增强新原理，解决界面态探测难题，实现固体界面态的精密探测。

### （二）界面态的理论与计算。

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

### （三）界面态的设计与调控。

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

## 三、2025 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. 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，实现界面的精密探测。

**2. 界面精确计算新理论。**发展用于界面体系的高效算法，实现非周期、非连续和非同质的界面体系模拟。针对界面结构演化、电荷转移和能量传递等过程，建立不同时空尺度上界面相关过程动态模拟新方法，实现复杂界面体系的精确计算。

**3. 界面精准构筑新方法。**发展界面体系的原子级构筑方法与技术，实现界面结构与成分的功能导向精准构筑。阐明界面的结构、成分与外场对界面态的调控机制，建立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。**发展跨越飞秒与亚毫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，为能源催化转化研究提供技术手段。

**2. 表界面光电转化微观过程的时空分辨测量方法。**发展表界面亚纳米空间分辨的光电流探测与亚光学周期时间分辨的光电子探测技术，分析光激发载流子、激子和极化子的实空间或动量空间分布特征及其动力学演化规律，揭示共振激发与相干耦合在光电转化中的驱动机制，为高效光能转化与光电器件提供科学基础。

**3.界面结构的精准掺杂。**构筑基于有机半导体层-掺杂剂层的界面掺杂体系，突破高效有机掺杂剂及亚微米级区域可控的界面掺杂技术，建立原子分子尺度掺杂结构与电学性质的构效关系，揭示电荷转移与库仑束缚在界面掺杂过程中的作用机制，实现有机半导体-掺杂剂界面结构的精准构筑与性能调控，为提高有机半导体的迁移率和构筑高性能功能器件奠定基础。

**4.界面电荷态的精准调控。**建立界面多电荷态和高价离子态调控方法，检测离子的迁移和扩散动力学行为，研究界面电荷态及其诱导的准粒子量子特性，发展描述电子关联和电声子耦合等多体相互作用的理论方法，为设计界面量子态和调控电子输运等性能奠定基础。

**5.界面驱动的材料精准生长。**优化设计材料外延生长中的生长源与衬底晶格，揭示界面微观结构在多元生长环境下对材料形态与性能的影响机制，实现界面驱动的材料精准调控与高品质制备，为新型高性能器件提供界面工程与技术基础。

**6.二维有机材料的拓扑超导物态。**发展基于界面调控的精准表面化学制备技术，在超导表面可控制备二维有机拓扑材料，探索超导、磁性与拓扑态之间的界面耦合机制，理解拓扑超导态中准粒子的空间分布特征及其演化规律，为高效拓扑量子计算和超导电子器件奠定基础。

**7.碳笼多态多维信息电子器件。**发展碳笼分子内表面、分子-电极界面原子水平精准构筑与电学调控方法，研究界面结构成分、耦合作用以及电荷转移对器件多态形成及其性能调控的理论机制，实现碳笼晶体管的矩阵化信息电学存取功能，建立多维智能信息理论，用于高维信息电路。

**8.有机集成电路界面工程。**发展有机晶体管表界面时-空分辨表征技术,揭示各功能层表界面化学结构、缺陷构成、应力分布、耦合作用和电子态与电荷输运/注入效率和稳定性之间的构效关系,建立原子级精准表界面调控方法,构筑高性能高稳定低功耗的有机晶体管及有机集成电路。

#### **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、2025 年度资助计划**

拟资助培育项目 20-25 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“2026 年 1 月 1 日 - 2028 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“2026 年 1 月 1 日 - 2029 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《2025 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、《2025 年度国家自然科学基金项目指南》和《关于 2025 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 2025 年 3 月 1 日 - 2025 年 3 月 20 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 2025 年 3 月 20 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 21 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 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

