

原子级制造基础研究重大研究计划

2025 年度项目指南

原子级制造是指在原子尺度控制材料的结构与成分，其核心是通过原子的精确操控来获得特定功能，突破传统制造技术的精度极限，实现物质的原子级转化与高效利用。原子级制造的科学基础是在原子尺度下优化物质转化与能量利用，实现物质结构和材料性能的按需订制，为实现颠覆性技术、升级战略性新兴产业和提升国家安全竞争力奠定科学与技术基础。

一、科学目标

本重大研究计划围绕批量原子操控这一核心目标，聚焦原子尺度下物质与能量的相互作用原理，实现材料成分和结构的原子级构筑和测量表征，构建原子级制造核心技术体系，为亚纳米芯片制造、量子计算、新能源材料以及航空航天等领域提供原子级精度的制造解决方案，抢占尖端制造领域制高点，为国家培养和储备未来制造战略人才，为实现科教兴国战略和中华民族伟大复兴提供独特的技术支撑。

二、核心科学问题

本重大研究计划围绕以下三个核心科学问题展开研究：

（一）原子级结构基元与能场的相互作用机制。

厘清原子、分子、团簇、原子层等原子级结构基元与能场的相互作用机制，发展克服能场/能束扩展性的限域调控方法，建立能场均布性与批量原子精确操控的对应关系，实现原子级基元的批量可控迁移、一致去除和精准改性。

（二）限域空间内原子级结构基元传质与组装机理。

揭示限域空间内外场协同作用下原子级结构基元的可控扩散迁移和能量传递机制，建立表面局域性质调控的原子级结构基元精准合成和组装机理，实现三维异质异构结构的原子级精度高效构筑与缺陷最小化。

（三）原子级形性参量探测的敏感机制及其增强方法。

研究探测能场对原子级形性参量的敏感机制及其增强方法，探索跨尺度原子级高精高效测量的新原理新方法，解决原子级结构与缺陷探测中精度与效率难以同时提高的挑战。

三、2025 年度资助研究方向

（一）培育项目。

围绕上述科学问题，以总体科学目标为牵引，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，具体研究方向如下：

1. 批量原子操控新原理与新方法。

在原子/分子、原子团簇或原子层等原子级结构基元精准反应与限域能场作用体系下，提出原子级操控、去除、改性、缺陷控制等的新原理与新方法。

2. 原子级结构基元高效构筑新原理与新方法。

探索原子级结构基元高效有序构筑新原理，揭示多能场协同构筑机制，研究表面原子级改性与图案化构筑方法；研究特定功能的材料或器件原子/分子级精度控制和构建新技术。

3. 原子级制造测量、表征新原理与新方法。

探索面向原子级制造的高时空分辨的原位、动态测量新原理；探索原子级材料物化性质、器件结构与缺陷等的高精高效测量新原理与新方法。

（二）重点支持项目。

围绕前沿科学问题和产业重大需求，对总体科学目标有较大贡献的申请项目，将以重点支持项目的方式予以资助，鼓励与企业联合申报，具体研究方向如下：

1. 批量原子操控新原理与新方法。

（1）原子级精度表面制造及宏观形性调控原理。

为打破核心零部件表面精度对机械使役性能的限制，开展大面积原子级精度表面制造方法及宏观形性调控机理研究，揭示关键结构材料表面的原子/原子层限域去除原理，形成宏观表面核心接触区域低于 5 层原子起伏的精准调控方法，构建接触界面原子级匹配与关键机械使役性能的关联模型，突破宏观尺度原子级精度表面的形性调控共性技术瓶颈。

（2）超低磨损运动部件润滑材料的原子级改性与调控。

针对航空航天等领域装备中精密运动部件在苛刻复杂工况下高性能、高可靠服役需求，开展近零摩擦的关键部件润滑材料原子级改性和调控的研究，突破活性化、功能化、定向可控化等原子级表面改性技术，揭示材料构效关系和原子级改性调控机制，获得原子级结构优化、性能强化的超低磨损部件润滑材料的制备和改性工艺。

（3）基于表面原子级选择性清除及其损伤抑制研究。

面向新一代二维材料和碳基器件对加工工艺损伤抑制的极致需求，研究质量选择团簇等载能束流与器件表面相互作用的机理，聚焦研究作用损

伤与表面势垒操控的机制，建立其尺寸、结构以及加速能量对表面清除作用的理论基础和数值模型，发展其束流可控形成方法，突破晶圆级、强选择性和近零损伤的表面清除技术，基于该技术优化器件特性，获得高质量逻辑、光电等器件。

(4) 单原子/分子精度的规模化自主操纵技术及器件研制。

针对未来信息技术对人工原子材料及器件的需求，在扫描探针技术的基础上发展大规模自主原子操纵技术，大幅提高原子/分子的操纵效率和数量，在测试精度上实现原子级空间分辨率、meV 级电子能量分辨率和 neV 级自旋能量分辨率。精准构筑新型人工量子晶格，研发低功耗自旋电子学器件、类脑融合计算及固态量子芯片等原理性新器件。

2. 原子级结构基元高效构筑新原理与新方法。

(1) 原子层生长的构筑理论与工艺仿真。

针对具有深孔限域结构的原子层沉积（ALD）等关键工艺难题，突破微观生长机理与宏观腔体仿真的跨尺度耦合技术，揭示等离子体-表面反应-热流体-应力多场协同作用下原子的高效有序构筑规律，阐明多元材料生长过程中前驱体与表面的相互作用原理、缺陷产生及抑制机制，针对三维高深宽比结构表面沉积均匀性的仿真预测精度>95%。

(2) 叠层结构原子层有序生长原理与关键技术。

针对器件尺寸微缩、结构三维化导致多层堆叠结构制造中套刻误差大、对准位置偏差的问题，建立原子尺度薄膜生长模型，研究原子层选区沉积与刻蚀技术，探索非生长区原子层生长缺陷的产生机制与消除方法；揭示叠层结构的边缘横向扩展规律，研究表面限域与外场调控技术，实现薄膜

生长位置的结构有序性和原子层生长取向有序性可控的原子级精准控制，原子层薄膜生长边缘横向扩展控制达到原子级（ $<1\text{nm}$ ），建立芯片互连结构的原子层有序生长与性能优化方法。

（3）基于定向组装的图案化结构原子级构筑原理与方法。

开展以二维材料、水合离子等原子级结构基元的定向组装图案化结构的原子级构筑新原理与新方法研究，建立基底表面图案化的原子级改性方法，揭示改性表面对原子级结构基元的限域定量吸附的影响机理，构建多维参数与吸附溶液体积的映射关系，实现图案化结构厚度的原子级可控；建立液滴干燥过程的动力学模型，揭示原子级结构基元可控迁移及重排机制；建立异质异构表面图案化原子级改性方法，实现柔性器件基元图案化结构叠层构筑。

（4）异质接触特性的原子级调控与制造方法。

针对器件内部异质异构接触特性影响电子或离子传输的问题，揭示接触特性与器件性能的构效关系；研究二维材料层间原子级接触间隙的外场原位调控方法，实现 2nm 以下层间间隙的可控构筑和离子高通量传输；研究二维材料与金属集流体的原子级紧密接触制造方法，实现近零接触电阻；开展典型器件内部接触特性的原子级构筑与调控验证研究，实现器件的高性能制造。

3. 原子级制造测量、表征新原理与新方法。

（1）原子级结构高精高效无损测量。

针对高端芯片原子级制造过程中复杂高深宽比结构等的关键尺寸在线无损测量需求，发展原子级结构高精高效无损测量新原理与新方法，构

建探测能束与原子级结构的相互作用模型，阐明原子级结构测量的敏感机制，探索测量灵敏度的增强方法，实现复杂高深宽比结构等关键尺寸的快速精确测量，深宽比大于 40:1，关键尺寸测量精度优于 0.1nm，推动其在高端芯片制造过程中在线测量的应用。

(2) 原子级制造基础材料的力学特性原位测量。

针对原子级制造中关键材料基础理论的发展需求，建立具有皮牛级力灵敏度的原位力学特性测量技术，实现外场（力、电、磁）作用下的原子分辨结构成像，探测静态与动态加载条件下表面/界面的原子级接触、能量耗散、结构应变和弛豫，探索基于量子效应的传感、高效驱动及能量采集新机制，为纳米机械系统的精准制造与性能预测提供基础数据。

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）优先资助能够解决原子级制造中的基础科学难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。

五、2025 年度资助计划

拟资助培育项目约 40 项，直接费用资助强度不超过 50 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约 10 项，直接费用资助强

度约为 230 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 9 月 15 日 - 2025 年 9 月 22 日 16 时。

2. 项目申请书采用在线方式撰写。对申请人具体要求如下：

（1）申请人应当按照科学基金网络信息系统（以下简称“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) 项目申请人在信息系统中选择“在线申请”——“新增项目申请”——“申请交叉科学部项目”进行项目申报。

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“原子级制造基础研究”，受理代码选择 T02，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阐明所申请的研究内容与原子级制造内涵和核心科学问题的契合度，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（上述描述不少于 800 字）。

(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。

3. 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，于 2025 年 9 月 22 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。

4. 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, 并认真开展学术交流。

(四) 咨询方式。

国家自然科学基金委员会交叉科学部交叉科学二处

联系电话: 010-62329548