

2025 年度国家自然科学基金专项项目

“材料科学模型驱动基础理论创新与前沿材料发现新方法” 申请指南

人工智能（AI）与材料科技和产业的深度融合，将深刻变革材料基础理论研究，新材料的探索发现、研发与应用范式。国家自然科学基金委员会工程与材料科学部围绕“材料科学模型驱动基础理论创新与前沿材料发现新方法”设立专项项目，开展面向材料科学智能的前沿研究，推动 AI 在材料基础理论研究、高端材料研发和颠覆性新材料探索发现中的应用。

一、总体科学目标

面向成分-工艺-组织-性能内禀关系构建、跨尺度建模，以及微观组织解析等材料科学核心基础问题，开展材料科学基础模型与智能体、材料数据跨模态融合与建模新方法、材料反演式人工智能方法、材料微结构智能解析与定量建模等前沿研究，在材料科学智能基础理论与算法上获得突破，构建一批材料科学模型，推动材料基础理论创新和 AI 应用创新。

二、拟资助的研究方向

围绕上述科学目标，拟资助符合以下方向的研究：

（一）材料科学基础模型

研究多尺度信息传递与融合建模、材料知识挖掘与知识迁移等新方法，发展融合材料知识的可解释算法与策略，构建材料能量、热力学、动力学、晶体学等基础科学模型；应用集成建模等方法，突破材料跨尺度、跨体系、跨性能统一建模与求解难题。

（二）材料设计智能体

面向关键新材料高效研发的重大需求，研究制备过程数字化建模、多参数实时优化、认知进化、自我评估等材料智能体的核心算法和软件；构建具备自主阅读文献、自动提取数据、自主制定研究方案、智能设计成分与工艺、自适应迭代优化等多种功能的全流程智能体系统。

（三）材料数据跨模态融合与建模新方法

针对材料内禀关系解析与构建的难题，研究材料图像、文本、数值等多模态数据治理与质量提升方法，基于物理一致性的材料数据生成等新算法；突破材料数据跨模态动态“表示-对齐-融合”技术，实现物理信息嵌入的多模态自适应、可解释建模。

（四）材料反演式人工智能方法

面向高端结构材料精准设计与极端条件服役安全高效评价的需求，研究基于扩散模型、流模型等生成式人工智能的材料反演设计方法，构建性能导向的材料全要素反演生成框架；挖掘材料成分-工艺-组织-性能内禀关系，破解极端条件下材料性能预测、组织演化和寿命评估等关键难题。

（五）人工智能赋能微结构的描述、表征与定量建模

研究基于人工智能的组织结构图像解析方法，材料多尺度结构和组织的统一表示方法，突破三维结构反演与重构技术，实现材料介观与微观组织的精准识别与智能表征，建立材料微结构特征参数与宏观性能之间的可解释映射关系；在材料组织结构优化和演化规律跨尺度建模与精准预测中实现应用。

（六）人工智能驱动高端材料和颠覆性新材料应用示范

围绕空天飞行器耐高温材料、高端装备轻质高强材料、生命健康材料等性能提升，以及超材料和量子材料等探索发现的需求，发展材料科学机理发现和规律探索、新材料发现和设计、材料性能优化等的机器学习新算法和新策略，推动高端材料高效研发、颠覆性新材料创制和材料理论创新。

三、资助强度和资助期限

拟资助青年项目 15 对（30 项）左右，资助强度约为 100 万元/对；资助重点项目 5~6 项，资助强度约为 200 万元/项。项目资助期限均为 3 年，申请书中研究期限应填写“2026 年 1 月 1 日—2028 年 12 月 31 日”。

四、申请要求及注意事项

（一）申请条件。

本专项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。

3. 鼓励 45 岁以下的青年科研人员作为申请人申请重点项目；青年项目申请人须申请当年 1 月 1 日未满 40 周岁（1985 年 1 月 1 日（含）以后出生）。

（二）青年项目联合申请要求。

青年项目要求由两位申请人联合申请，申请人分别来自材料领域和人工智能领域（依托单位可以相同或不同）。联合申请人不得互为对方项目的主要参与者，联合申请双方需围绕同一个项目、同一个研究目标，分别撰写申请书【具体要求参见（四）申请注意事项】。

（三）限项申请规定。

1. 本专项项目不计入高级专业技术职务（职称）人员申请和承担项目总数 2 项的范围。

2. 申请人和主要参与者只能申请或参与申请 1 项本专项项目。

3. 申请人同年只能申请 1 项专项项目中的研究项目。

（四）申请注意事项。

1. 每个拟资助的研究方向均可申报重点项目和青年项目。

2. 申请人在提交正式申请书之前应在 2025 年 10 月 8 日 16:00 之前通过邮件方式提交一份“申请情况概述”（包括 word 版和带本人电子签名的 pdf 版）至 gongcai2025-2@nsfc.gov.cn，内容应包括拟申请的指南编号，阐述针对的材料对象、拟解决的关键科学问题、主要创新点和预期成果等，总字数控制在 2000 字以内。青年项目还需在“申请情况概述”中包括申请人简历和可以反映各自研究领域（材料或人工智能）的基础说明。学部将组织专家进行初步遴选，并通过邮件通知是否进入正式申请。通过的申请人请于 2025 年 11 月 2 日 16:00 前提交正式申请书，未通过的申请人不进入正式申请。正式申请环节采用函评与会评相结合的方式评审。

3. 本专项项目正式申请书采用在线方式撰写。对申请人具体要求如下：

(1) 申请人在填报申请书前，应当认真阅读本指南和《2025 年度国家自然科学基金项目指南》的相关内容，不符合项目指南和相关要求的申请项目不予资助。

(2) 申请人登录科学基金网络信息系统 <http://grants.nsfc.gov.cn/>（没有系统账号的申请人请向依托单位基金管理联系人申请开户），按照相关要求及提纲撰写正式申请书。请注意：申请人应围绕本专项项目的总体科学目标撰写申请书，针对本指南中拟资助的研究方向具体阐述拟开展的研究内容、方案及资金预算。

(3) 申请书中的资助类别选择“专项项目”，亚类说明选择“研究项目”，附注说明选择“科学部综合研究项目”，申请代码选择“E01、E02、E03 或 E13”。以上选择不准确或未选择的项目申请不予资助。

(4) 青年项目联合申请时，每对项目的联合申请人应分别独立提交申请，但须填写相同的项目名称，项目名称后分别标注“（联合申请 A）”或“（联合申请 B）”。每个项目按照实际需求和双方商定的比例分别进行经费预算（两方总数不超过 100 万）。申请书附件材料中须提供联合申请协议书，联合申请双方必须共同签字并由所在依托单位盖章，除此之外的其他文件形式均不予认可。

(5) 青年项目联合申请时，申请书正文开始部分应首先说明联合申请的两个项目共同的研究题目、研究背景、共同的研究目标和研究路线图，阐述开展合作研究的必要性及可行性，说明联合申请人之间的具体工作分工；随后应按照申请书的撰写要求填写各自负责的研究内容，以及其他各部分内容。申请应体现强强联合，开展互补的实质性研究工作，自然科学基金委将组织专家对联合申请进行整体评审。

(6) 每个专项项目的依托单位和合作研究单位数合计不得超过 3 个；主要参与者必须是项目的实际贡献者。

(7) 如果申请人已经承担与本专项项目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。

(8) 申请人应当认真阅读《2025 年度国家自然科学基金项目指南》申请规

定中预算编报要求的内容，如实编报项目预算。联合申请时，每位申请人均需独立编报预算。

(9) 本专项项目实行无纸化申请，申请人完成申请书撰写后，在线提交电子申请书及附件材料。依托单位只需在线确认电子申请书及附件材料，无须报送纸质申请书，但应对本单位申请人所提交申请材料的真实性和完整性进行认真审核，在项目接收工作截止时间（2025 年 11 月 2 日 16:00）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。依托单位未在截止时间前完成审核的申请将不予受理。项目获批准后，依托单位将申请书的纸质签字盖章页装订在《资助项目计划书》最后，在规定的时间内按要求一并提交。

(五) 其他注意事项。

1. 为实现专项项目的总体科学目标，获得资助的项目负责人在项目执行过程中应注重与本专项其他项目之间的协同支撑，加强研究内容的有机衔接与互补。
2. 为促进学术交流与多学科交叉，推动专项项目集群的形成，将设立专项项目指导专家组，每年举办一次年度学术交流会，并不定期组织相关领域的学术研讨会。获资助项目负责人应积极参加上述学术活动，深入开展学术交流。
3. 项目将实行年度考核机制，并在项目执行中期设立退出机制，以保障专项实施质量与进度。
4. 结题时，项目形成的科学数据和模型，应按照国家科学数据管理的有关规定，统一汇交至“国家新材料大数据中心”，依据知识产权所有者的意愿开放共享。

(六) 本专项项目咨询方式：

国家自然科学基金委员会工程与材料科学部，联系电话：010-62326884。