

面向未来技术的表界面科学基础重大研究计划

2026 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、2026 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. 催化表界面原子结构的精准模拟与智能预测。

发展融合全局结构搜索、第一性原理计算与机器学习势函数的高精度多尺度模拟方法，实现不同氛围、温度、压力等反应工况下丙烷脱氢等重要工业催化剂表界面结构的精准预测，并结合催化实验进行验证。阐明表界面原子结构与催化活性及选择性等宏观性能之间的内关联，为高性能催化剂的设计提供理论依据和结构数据库。

2. 惰性小分子转化的表界面动态催化机制与新过程。

针对 CO_2 、 N_2 等惰性小分子的催化转化，通过对催化表界面动态结构与关键反应中间体的原位原子尺度观测，以及在纳秒至毫秒跨时间尺度的动态探测，建立高压加氢反应下活性位动态结构与加氢活性、选择性之间的构效关系，实现温和条件下甲醇、氨等化学品的高效合成，完成相关的过程放大和技术验证。

3. 工作条件下半导体表界面结构设计及智能模拟。

发展人工智能加速的表界面结构预测与模拟方法，建立表界面微观结构与器件性能关联的物理模型与调控机制；开发多目标筛选与逆向设计方法，获得几种高性能材料及界面结构；发展机器学习力场方法，实现成核生长的长时动力学模拟，提出制备工艺的优化策略，为开发高性能电子器件提供理论支撑。

4. 基于量子传感的超灵敏表界面探测技术。

融合量子传感与扫描探针技术，发展纳米尺度的极微弱电场和磁场测量方法，精准表征材料表界面的量子态和量子序/相，揭示复杂量子体系的电子配对、对称性破缺、量子临界现象等微观机制，为新型量子器件的探索提供技术基础。

5. 界面电子结构的原位探测与调控。

基于先进光源，发展具有表界面纵向高空间分辨能力、元素分辨能力的光电子谱学成像新技术。结合原位栅极电场调控手段，针对拓扑、超导等材料堆叠的异质界面形成的新奇量子态，实现外场下界面电子结构的原位测量与精准调控，为开发基于界面量子态调控的低功耗新原理器件奠定基础。

6. 柔性热电器件的界面电声耦合调控。

针对柔性热电材料在应变场中的电声耦合调控问题，设计与制备共晶薄膜、有机多周期结构等分子界面层，实现电子-声子-力场的界面协同调控，创制贴附式柔性薄膜器件，推动其在室温区高性能热电发电、传感与制冷等领域的应用突破。

7. 离子型光电半导体界面多场耦合调控。

发展软离子晶格半导体光电材料的原子级界面构筑与调控技术，优化能级匹配，增强力热稳定性，建立界面结构、电子能带、应力与载流子传输效率的构效关系，揭示界面电荷分离与传输机理，阐明其在高温、高湿、强光照、冷热循环与粒子辐照等多场耦合下的衰退机制，构建长寿命高效光电器件。

8. 半导体磁性异质结自旋信息器件。

发展高质量二维范德华半导体/磁性异质结界面的构筑和调控方法,揭示界面能带杂化、电荷转移等对异质结磁电/磁光特性的调控机制,突破半导体高效自旋注入与光-自旋耦合增强关键难题,研制高性能半导体自旋电子器件和超快自旋光子器件,为下一代低功耗半导体自旋信息器件发展奠定基础。

(三) 集成项目。

围绕重大前沿科学问题和产业急迫需求,以总体科学目标为牵引,对于前期研究成果积累丰富、对重大研究计划总体目标有重大贡献、且具有重大应用价值的申请项目,将以集成项目的方式予以资助,研究方向如下:

1. 面向大规模集成电路的低维半导体表界面研究。

针对低维半导体电子器件及其大规模集成中的关键问题,表征并调控低维半导体与接触金属、衬底、栅介质等界面,推动基于低维半导体器件的大规模集成电路的快速发展。

金属-低维半导体欧姆接触界面的原子级构筑。针对制约低维半导体性能的界面接触电阻瓶颈问题,发展分子、碳纳米管、二维材料与金属界面的原子级构筑方法,解析接触界面的原子级结构特征及其输运机制,研究界面成键过程、界面电子态形成及能带调控规律,揭示界面微观结构对量子输运行为的影响机理,获得单量子通道条件下的界面输运性能极限。构建低温、低损伤、兼容 CMOS 工艺的金属接触集成技术体系,制备高性能二维半导体晶体管,性能指标达到开态电流密度 $\geq 1 \text{ mA}/\mu\text{m}$ 、开关比 $\geq 10^7$,接触栅间距 $\leq 38 \text{ nm}$ 。

栅介质—低维半导体的界面精准调控。发展基于二维范德华半导体的无损界面冷集成技术，实现精准掺杂及极性调控，研制二维高性能电子器件。制备二维半导体 CMOS 晶体管，实现界面态密度小于 $10^{-10} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ 、晶圆尺寸 ≥ 4 英寸。

大规模碳基集成电路的研制。表征和优化碳基半导体表面、碳基半导体/金属接触界面、碳基 MOS 栅界面，建立高性能高可靠性碳基 CMOS 晶体管的集成方案，推动碳基半导体器件的大规模集成，实现等效 45 纳米节点的碳基 CMOS 晶体管、演示碳基集成电路，晶体管数量 ≥ 100 万、主频 $\geq 100 \text{ MHz}$ 、晶圆尺寸 ≥ 8 英寸。

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）重点支持项目和集成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、2026 年度资助计划

拟资助培育项目约 12 项，直接费用资助强度约为 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“2027 年 1 月 1 日 - 2029 年 12 月 31 日”；拟资助重点支持项目约 6 项，直接费用资助强度约为 280 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“2027 年 1 月 1 日 - 2030 年 12 月 31 日”；拟资助集成项目 1 项，

直接费用资助强度约为 1500 万元/项，资助期限为 4 年，集成项目申请书中研究期限应填写“2027 年 1 月 1 日 - 2030 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科学技术人员不得作为申请人进行申请。

（二）限项申请规定。

执行《2026 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、《2026 年度国家自然科学基金项目指南》和《关于 2026 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 2026 年 3 月 1 日 - 2026 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(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) 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”、“重点支持项目”或“集成项目”，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，集成项目合作研究单位不得超过 4 个。集成项目主要参与者必须是项目的实际贡献者，合计人数不超过 9 人。

(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 2026 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。**未按时提交项目清单的申请将不予接收。**

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, 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一处

联系电话: 010-62328382