

国家自然科学基金重大研究计划

**“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”**

2016年度交流会

会议手册

**国家自然科学基金委员会**

**2017年2月**

**目 录**

[**一、会议须知 1**](#_Toc475019611)

[**二、日程安排 3**](#_Toc475019612)

[**三、参会人员 6**](#_Toc475019613)

[**四、相关项目年度指南 14**](#_Toc475019614)

# 一、会议须知

欢迎您参加国家自然科学基金重大研究计划“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”2016年度交流会，为使会议顺利进行，请会议代表认真阅读本手册。

1、会议安排概览

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **日 期** | **时 间** | **会议内容** | **地 点** | **参加人员** |
| 2月20日 | 全天 | 报 到 | 融侨皇冠假日酒店 | 全体代表 |
| 2月21日 | 08:15—09:00 | 开幕式 | 酒店三层皇冠B厅 | 全体代表 |
| 09:00—18:00 | 报告及讨论 | 酒店三层皇冠B厅 | 全体代表 |
| 19:00—21:00 | 墙报交流 | 酒店三层 | 全体代表 |
| 2月22日 | 08:30—16:00 | 报告及讨论 | 酒店三层皇冠B厅 | 全体代表 |
| 2月23日 | 全 天 | 离 会 | —— | —— |

2、会议用餐

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | 用餐地点 | 用餐时间 | 备注 |
| 早餐 | 酒店一层自助餐厅 | 6:30-8:00 | 凭房卡用餐 |
| 午餐 | 酒店三层皇冠C厅 | 12:00-13:00 | 凭代表证用餐 |
| 晚餐 | 酒店三层皇冠C厅 | 18:00-19:00 | 凭代表证用餐 |

3、酒店房间中午14:00前退房不加收半天房租，参会代表比较多，离会代表请提前到前台办理退房手续。

4、酒店无线WiFi服务器名称：Crowneplaza，无密码；房间电话国内长途拨付方式：90+国内长途号码。

5、酒店提供免费健身房服务，健身房位于酒店5层，开放时间：6:00-23:00。

6、为确保会议期间各位来宾的人身与物品安全，特别提醒您：休息或离开房间时，及时锁门，并将重要物品妥善保管；外出期间，注意自身保护，一旦发生失窃、安全事故或者其他事件，请及时向会务联系人报告。

**7、联系方式：**

**会务组联系人：**

中科院福建物构所

林授群 会务协调人 13559173958

**重大研究计划管理工作组联系人：**

国家自然科学基金委

黄宝晟 13681131433，付雪峰 13811165950

# 二、日程安排

**“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”**

**重大研究计划交流会议日程安排（2016培育项目）**

**时间：2017年2月21日 地点：酒店三层皇冠B厅**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **时 间** | **序号** | **答辩人** | **依托单位** | **主持人** |
| 08:15-09:00 | **领导讲话****重大研究计划专家组介绍项目整体情况** | **杨俊林** |
| 09:00-09:13 | 1 | 徐伟宏 | 中国科学院合肥物质科学研究院 | 洪茂椿 |
| 09:13-09:26 | 2 | 于澍燕 | 北京工业大学 |
| 09:26-09:39 | 3 | 邓鹤翔 | 武汉大学 |
| 09:39-09:52 | 4 | 任申强 | 东南大学 |
| 09:52-10:05 | 5 | 钟声亮 | 江西师范大学 |
| 10:05-10:18 | 6 | 朱广山 | 东北师范大学 |
| 10:18-10:31 | 7 | 潘世烈 | 中国科学院新疆理化技术研究所 |
| 10:31-10:50 | **休 息** |
| 10:50-11:03 | 8 | 鹿 颖 | 东北师范大学 | 吴以成 |
| 11:03-11:16 | 9 | 张杰鹏 | 中山大学 |
| 11:16-11:29 | 10 | 王新益 | 南京大学 |
| 11:29-11:42 | 11 | 卜显和 | 南开大学 |
| 11:42-11:55 | 12 | 毛江高 | 中国科学院福建物质结构研究所 |
| 11:55-12:08 | 13 | 游雨蒙 | 东南大学 |
| 12:08-14:00 | **午餐及午休** |
| 14:00-14:13 | 14 | 吕 健 | 福建农林大学 | 严纯华 |
| 14:13-14:26 | 15 | 宋 友 | 南京大学 |
| 14:26-14:39 | 16 | 孙晓明 | 北京化工大学 |
| 14:39-14:52 | 17 | 翟天佑 | 华中科技大学 |
| 14:52-15:05 | 18 | 林哲帅 | 中国科学院理化技术研究所 |
| 15:05-15:18 | 19 | 井立强 | 黑龙江大学 |
| 15:18-15:31 | 20 | 钟羽武 | 中国科学院化学研究所 |
| 15:31-15:50 | 休 息 |
| 15:50-16:03 | 21 | 成昭华 | 中国科学院物理研究所 | 李玉良 |
| 16:03-16:16 | 22 | 帅志刚 | 清华大学 |
| 16:16-16:29 | 23 | 姚淑华 | 南京大学 |
| 16:29-16:42 | 24 | 姚吉勇 | 中国科学院理化技术研究所 |
| 16:42-16:55 | 25 | 陈兴国 | 武汉大学 |
| 16:55-17:08 | 26 | 夏志国 | 北京科技大学 |
| 17:08-18:00 | 专家组讨论 |

说明：① 每人汇报8分钟，提问讨论5分钟，共计13分钟；

② 答辩顺序按项目批准编号排序。

**“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”**

**重大研究计划交流会议日程安排**

**（集成项目及2012重点支持项目）**

**时间：2017年2月22日 地点：酒店三层皇冠B厅**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **时 间** | **序号** | **答辩人** | **依托单位** | **主持人** |
| 08:30-09:00 | **重大研究计划专家组介绍项目整体情况** |
| 09:00-09:45 | 1 | 熊仁根 | 东南大学 | 陈仙辉 |
| 09:45-10:30 | 2 | 陈小明 | 中山大学 |
| 10:30-10:50 | 休 息 |
| 10:50-11:35 | 3 | 陈小龙 | 中国科学院物理研究所 | 王继扬 |
| 11:35-12:00 | 专家组讨论 |
| 12:00-14:00 | 午餐及午休 |
| 14:00-14:30 | 1 | 苏成勇 | 中山大学 | 许京军 |
| 14:30-15:00 | 2 | 李 丹 | 汕头大学 |
| 15:00-15:30 | 3 | 胡文平 | 中国科学院化学研究所 |
| 15:30-16:00 | 4 | 叶 宁 | 中国科学院福建物质结构研究所 |
| 16:00-16:20 | 休 息 |
| 16:20-18:00 | 专家组讨论 |

说明：①集成项目每人汇报30分钟，提问讨论15分钟，共计45分钟；

②重点支持项目每人汇报15分钟，提问讨论15分钟，共计30分钟；

③答辩顺序按项目批准编号排序。

# 三、参会人员

**重大研究计划“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”**

**指导专家组**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **序号** | **姓名** | **职称** | **单位** |
| 1 | 洪茂椿 | 研究员、院士 | 中国科学院福建物质结构研究所 |
| 2 | 吴以成 | 研究员、院士 | 中国科学院理化研究所 |
| 3 | 严纯华 | 教授、院士 | 北京大学 |
| 4 | 李玉良 | 研究员、院士 | 中国科学院化学研究所 |
| 5 | 陈仙辉 | 教授、院士 | 中国科技大学 |
| 6 | 王继扬 | 教授 | 山东大学 |
| 7 | 许京军 | 教授 | 南开大学 |

**特邀专家**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **序号** | **姓名** | **职称** | **单位** |
| 1 | 沈保根 | 研究员、院士 | 中国科学院物理研究所 |
| 2 | 谢兆雄 | 教授 | 厦门大学 |
| 3 | 唐智勇 | 研究员 | 国家纳米科学中心 |

**国家自然科学基金委员会**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **序号** | **姓名** | **职称** | **职务** |
| 1 | 姚建年 | 研究员、院士 | 基金委副主任 |
| 2 | 陈拥军 | 研究员 | 化学科学部常务副主任 |
| 3 | 杨俊林 | 研究员 | 化学科学部副主任 |
| 4 | 黄宝晟 | 研究员级高工 | 化学科学部 |
| 5 | 付雪峰 | 教授 | 化学科学部 |
| 6 | 郑企雨 | 研究员 | 化学科学部 |
| 7 | 高飞雪 | 研究员 | 化学科学部 |
| 8 | 陈荣 | 研究员 | 化学科学部 |
| 9 | 陈克新 | 研究员 | 工程与材料科学部 |
| 10 | 何杰 | 研究员 | 信息科学部副巡视员 |

**项目参会人员**

| **序号** | **项目依托单位** | **姓名** |
| --- | --- | --- |
| 1 | 广西师范大学 | 曾明华 |
| 2 | 中山大学 | 匡代彬 |
| 3 | 中山大学 | 苏成勇 |
| 4 | 中山大学 | 张杰鹏 |
| 5 | 中山大学 | 陈小明 |
| 6 | 中山大学 | 巢晖 |
| 7 | 中山大学 | 童明良 |
| 8 | 中山大学 | 潘梅 |
| 9 | 中国科学技术大学 | 钱逸泰 |
| 10 | 中科院上海有机化学研究所 | 李维实 |
| 11 | 中科院长春应用化学研究所 | 孙忠明 |
| 12 | 中科院长春应用化学研究所 | 宋术岩 |
| 13 | 中科院化学研究所 | 付红兵 |
| 14 | 中科院化学研究所 | 刘彩明 |
| 15 | 中科院化学研究所 | 刘辉彪 |
| 16 | 中科院化学研究所 | 胡文平 |
| 17 | 中科院化学研究所 | 钟羽武 |
| 18 | 中科院合肥物质科学研究院 | 孙贵花 |
| 19 | 中科院合肥物质科学研究院 | 杨骋 |
| 20 | 中科院合肥物质科学研究院 | 张庆礼 |
| 21 | 中科院合肥物质科学研究院 | 徐伟宏 |
| 22 | 中科院合肥物质科学研究院 | 童鹏 |
| 23 | 中科院合肥物质科学研究院 | 蔺帅 |
| 24 | 中科院物理研究所 | 成昭华 |
| 25 | 中科院物理研究所 | 金士锋 |
| 26 | 中科院物理研究所 | 郭建刚 |
| 27 | 中科院理化技术研究所 | 林哲帅 |
| 28 | 中科院理化技术研究所 | 姜兴兴 |
| 29 | 中科院理化技术研究所 | 姚吉勇 |
| 30 | 中科院新疆理化技术研究所 | 潘世烈 |
| 31 | 中科院福建物质结构研究所 | 曹荣 |
| 32 | 中科院福建物质结构研究所 | 黄艺东 |
| 33 | 中科院福建物质结构研究所 | 卢灿忠 |
| 34 | 中科院福建物质结构研究所 | 郭国聪 |
| 35 | 中科院福建物质结构研究所 | 叶宁 |
| 36 | 中科院福建物质结构研究所 | 龙西法 |
| 37 | 中科院福建物质结构研究所 | 陈忠宁 |
| 38 | 中科院福建物质结构研究所 | 毛江高 |
| 39 | 中科院福建物质结构研究所 | 张健 |
| 40 | 中科院福建物质结构研究所 | 王明盛 |
| 41 | 中科院福建物质结构研究所 | 孔芳 |
| 42 | 中科院福建物质结构研究所 | 李莉萍 |
| 43 | 中科院福建物质结构研究所 | 吴克琛 |
| 44 | 中科院福建物质结构研究所 | 陈玲 |
| 45 | 东北师范大学 | 朱广山 |
| 46 | 东北师范大学 | 鹿颖 |
| 47 | 东南大学 | 游雨蒙 |
| 48 | 东南大学 | 熊仁根 |
| 49 | 北京工业大学 | 于澍燕 |
| 50 | 北京大学 | 王炳武 |
| 51 | 北京大学 | 刘志伟 |
| 52 | 北京化工大学 | 孙晓明 |
| 53 | 北京科技大学 | 边永忠 |
| 54 | 北京科技大学 | 夏志国 |
| 55 | 北京理工大学 | 杨国昱 |
| 56 | 兰州大学 | 刘伟生 |
| 57 | 兰州大学 | 唐瑜 |
| 58 | 宁波大学 | 韩磊 |
| 59 | 吉林大学 | 贲腾 |
| 60 | 吉林大学 | 黄科科 |
| 61 | 同济大学 | 闫冰 |
| 62 | 华中科技大学 | 翟天佑 |
| 63 | 华东师范大学 | 高恩庆 |
| 64 | 华东理工大学 | 王雨蕾 |
| 65 | 华侨大学 | 吴季怀 |
| 66 | 江西师范大学 | 钟声亮 |
| 67 | 汕头大学 | 李丹 |
| 68 | 安徽工业大学 | 张千峰 |
| 69 | 苏州大学 | 郎建平 |
| 70 | 武汉工程大学 | 赵洪阳 |
| 71 | 武汉大学 | 邓鹤翔 |
| 72 | 武汉大学 | 陈兴国 |
| 73 | 郑州大学 | 侯红卫 |
| 74 | 南开大学 | 卜显和 |
| 75 | 南开大学 | 对师唯 |
| 76 | 南开大学 | 李立存 |
| 77 | 南开大学 | 郑大怀 |
| 78 | 南开大学 | 赵斌 |
| 79 | 南开大学 | 程鹏 |
| 80 | 南京大学 | 王新益 |
| 81 | 南京大学 | 孙为银 |
| 82 | 南京大学 | 宋友 |
| 83 | 南京大学 | 郑丽敏 |
| 84 | 南京大学 | 郑和根 |
| 85 | 南京大学 | 姚淑华 |
| 86 | 哈尔滨工业大学 | 徐平 |
| 87 | 哈尔滨工业大学 | 韩喜江 |
| 88 | 重庆大学 | 杨韬 |
| 89 | 复旦大学 | 易涛 |
| 90 | 浙江理工大学 | 李超荣 |
| 91 | 浙江理工大学 | 潘佳奇 |
| 92 | 清华大学 | 帅志刚 |
| 93 | 清华大学 | 佘珊 |
| 94 | 清华大学 | 陈坤 |
| 95 | 清华大学 | 寇会忠 |
| 96 | 清华大学 | 魏永革 |
| 97 | 黑龙江大学 | 井立强 |
| 98 | 福州大学 | 庄乃锋 |
| 99 | 福州大学 | 陈 新 |
| 100 | 福州大学 | 陈建中 |
| 101 | 福州大学 | 郭飞云 |
| 102 | 福州大学 | 章永凡 |
| 103 | 福建农林大学 | 吕健 |
| 104 | 福建农林大学 | 曹海雷 |

# 四、相关项目年度指南

**“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”重大研究计划**

**2016年度项目指南**

晶态材料是长程有序固态材料的总称，具有结构有序稳定、构效关系清楚、本征特性多样、物理内涵丰富、易于复合调控等特征。晶态材料研究正在向以功能为导向，通过结构设计和可控制备获得所需应用特性材料的方向发展。

**一、科学目标**

本重大研究计划以晶态材料为研究对象，以宏观性质（光、电、磁及其复合性能）与微观（电子、分子、聚集态）结构之间内在关系为主线，旨在揭示决定晶态材料宏观性质的功能基元及其在空间的集成方式，发展功能基元理论，深化对晶态材料功能特性和功能基元本质的认识；开展具有重大科学意义和应用前景的功能晶态材料的设计、合成、制备、表征和应用探索研究，为实现晶态材料功能导向的结构设计和可控制备提供新理论、新方法与新材料体系，推动相关学科的发展。

本重大研究计划以晶态材料的关键基础科学问题为核心，充分发挥化学、物理、材料和信息等多学科交叉合作的优势，注重创新性和前沿性，着力提升我国材料研究的综合实力和自主创新能力，凝聚和培养具有国际影响的人才队伍，为国民经济和社会可持续发展作出重大贡献。

**二、核心科学问题**

本重大研究计划围绕决定晶态材料特性的关键功能基元、晶态材料宏观功能与微观结构的关系和基于功能基元晶态材料的设计原理和可控制备三个关键科学问题开展研究工作。

**三、2016年度拟重点资助研究方向**

2016年度的项目申请必须强调功能导向和结构设计的要求，进一步加强化学、材料、物理、信息等学科间的交叉和融合，鼓励理论与实验的紧密结合，深化对晶态材料功能基元的结构特征的探索研究。申请人应注意项目申请与“可控自组装体系及其功能化”等相关重大研究计划的区别。本重大研究计划不受理已得到该重大研究计划集成项目资助者（主持人及项目组主要成员）的申请。

本重大研究计划主要针对原创性强、挑战性大，但相关工作基础相对薄弱的申请，以“培育项目”的形式予以资助，其中对有学科交叉特色的申请将予以优先支持。所有项目申请必须体现功能导向与结构设计的基本要求。

2016年度重点资助以下方面的研究工作：

（一）新型晶态功能材料的可控制备与表征。

发展晶态功能材料的合成、制备和表征新方法，重点开展以下工作：

1．系统发展功能基元的组装方法和技术，通过功能基元的结构优化和裁剪，制备新型功能晶态材料。通过结构调控实现特定结构晶态材料的可控生长，实现功能的增强与复合。

2．建立功能基元及材料的探测与表征新方法，重点发展原位、实时、微区结构的测量技术，表征晶态材料的相关性能。鼓励利用国家大科学装置进行晶态材料的物性和机理研究。

（二）功能导向新型晶态材料。

基于我国在相关研究领域的优势，结合前述研究内容，着重开展以下应用体系的研究：

1. 光学晶体材料：重点研究深紫外、中远红外波段和新结构类型的非线性光学晶体材料。

2. 非常规超导晶态材料：研究具有电荷、自旋、轨道和晶格间相互作用的复杂体系功能材料和功能复合材料。重点发展铁基超导体等非常规超导材料。

3. 光、电、磁功能材料：研究新结构类型的具有光、电、磁功能的晶态材料。

4. 复杂体系及功能复合材料：研究具有电荷输运、轨道耦合和晶格间相互作用的复杂体系功能材料和功能复合材料。

**四、2016年度资助计划**

2016年度拟资助培育项目约20项，直接费用的平均资助强度约100万元/项，资助期限为2年，申请书中研究期限应填写“2017年1月1日-2018年12月31日”。

**五、申报要求及注意事项**

（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以及正在攻读研究生学位的人员不得申请。

（二）限项规定。

1. 具有高级专业技术职务（职称）的人员，申请（包括申请人和主要参与者）和正在承担（包括负责人和主要参与者）以下类型项目总数合计限为3项：面上项目、重点项目、重大项目、重大研究计划项目（不包括集成项目和战略研究项目）、联合基金项目、青年科学基金项目、地区科学基金项目、优秀青年科学基金项目、国家杰出青年科学基金项目、重点国际（地区）合作研究项目、直接费用大于200万元/项的组织间国际（地区）合作研究项目（仅限作为申请人申请和作为负责人承担，作为参与者不限）、国家重大科研仪器研制项目（含承担科学仪器基础研究专款项目和国家重大科研仪器设备研制专项项目）、优秀国家重点实验室研究项目，以及资助期限超过1年的应急管理项目。

2. 申请人（不含参与者）同年只能申请1项重大研究计划项目。上一年度获得重大研究计划项目资助的项目负责人（不包括集成项目和战略研究项目），本年度不得再申请重大研究计划项目。

（三）申请注意事项。

1. 申请书报送日期为2016年9月26日至30日16时。

2. 本重大研究计划项目申请书采用在线方式撰写。对申请人具体要求如下：

（1）申请人在填报申请书前，应当认真阅读本项目指南和《2016年度国家自然科学基金项目指南》中申请须知和限项申请规定的相关内容，不符合项目指南和相关要求的申请项目不予受理。

（2）本重大研究计划旨在紧密围绕核心科学问题，将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具体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）申请人登录科学基金网络信息系统https://isisn.nsfc.gov.cn/（以下简称信息系统，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），按照撰写提纲要求撰写申请书。

（4）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”，附注说明选择“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请将不予受理。

培育项目的合作研究单位不得超过2个。

（5）申请人应当按照重大研究计划申请书的撰写提纲撰写申请书，应突出有限目标和重点突破，明确对实现本重大研究计划总体目标和解决核心科学问题的贡献。

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，应当在报告正文的“研究基础”部分论述申请项目与其他相关项目的区别与联系。

（6）申请人应根据《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》的有关规定，以及《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的具体要求，按照“目标相关性、政策相符性、经济合理性”的基本原则，认真编制《国家自然科学基金项目资金预算表》。项目资金分为直接费用和间接费用，申请人仅需填写直接费用部分，间接费用由系统自动生成。多个单位共同承担一个项目的，项目申请人和合作研究单位的参与者应当分别编制项目资金预算，经所在单位审核后，由申请人汇总编制。

（7）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，下载并打印最终PDF版本申请书，向依托单位提交签字后的纸质申请书原件。

（8）申请人应保证纸质申请书与电子版内容一致。

3. 依托单位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审核，并在规定时间内将申请材料报送国家自然科学基金委员会。具体要求如下：

（1）应在规定的项目申请截止日期（2016年9月30日16时）前提交本单位电子版申请书及附件材料，并统一报送经单位签字盖章后的纸质申请书原件（一式一份）及要求报送的纸质附件材料。

（2）提交电子版申请书时，应通过信息系统逐项确认。

（3）报送纸质申请材料时，还应包括本单位公函和申请项目清单，材料不完整不予接收。

（4）可将纸质申请书直接送达或者邮寄至国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组。采用邮寄方式的，请在项目申请截止日期前（以发信邮戳日期为准）以快递方式邮寄，并在信封左下角注明“重大研究计划项目申请材料”， 请勿使用邮政包裹，以免延误申请。

4. 申请书由国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组负责接收，材料接收工作组联系方式如下：

通讯地址：北京市海淀区双清路83号国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组（行政楼101房间）

邮 编：100085

联系电话：010-62328591

5. 本重大研究计划咨询方式：

国家自然科学基金委员会计划局交叉学科处

联系电话：010-62328484

国家自然科学基金委员会化学科学部一处

联系电话：010-62327170

（四）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一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。

**“功能导向晶态材料的结构设计与可控制备”**

**重大研究计划2014年度项目指南**

晶态材料是长程有序固态材料的总称，具有结构有序稳定、构效关系清楚、本征特性多样、物理内涵丰富、易于复合调控等特征。晶态材料研究正在向以功能为导向，通过结构设计和可控制备获得所需应用特性材料的方向发展。本重大研究计划围绕决定晶态材料特性的关键功能基元、晶态材料宏观功能与微观结构的关系和基于功能基元晶态材料的设计原理和可控制备三个关键科学问题开展研究工作。

**一、科学目标**

本重大研究计划以晶态材料为研究对象，以宏观性质(光、电、磁及其复合性能)与微观(电子、分子、聚集态)结构之间内在关系为主线，旨在揭示决定晶态材料宏观性质的功能基元及其在空间的集成方式，发展功能基元理论，深化对晶态材料功能特性和功能基元本质的认识；开展具有重大科学意义和应用前景的功能晶态材料的设计、合成、制备、表征和应用探索研究，为实现晶态材料功能导向的结构设计和可控制备提供新理论、新方法与新材料体系，推动相关学科的发展。

**二、核心科学问题**

（一）晶态材料功能基元、构效关系及其规律的研究。

（二）功能导向新型晶态材料的设计。

（三）功能导向新型晶态功能材料的可控制备与表征。

**三、2014年度重点资助领域和研究方向**

为进一步凝练重大科学问题，在原2009年、2010年、2011年度支持项目基础上，本重大研究计划2014年度拟进行三个领域的集成，以组建优势互补的科研攻关团队，实现在若干重要方向上的突破发展。

（一）磁电功能分子晶态材料。

以低维分子基磁体和磁电功能复合分子晶态化合物为研究目标，提出合理设计与合成方法, 发现功能基元及其构效关系与规律。围绕磁、电晶态分子材料功能基元的几何与电子结构特征，发展具有磁、电功能的配位分子基材料的设计与合成方法，着重研究高磁阻塞温度高各向异性能垒单分子磁体（特别是单离子磁体）、低场大磁熵变分子基低温磁制冷材料和电、磁功能复合（特别是电磁耦合）分子材料。探索关键功能基元设计规律，提出功能调控的新思路和新认知，揭示晶态材料功能基元本质特征和基元间相互作与性能的关系。

（二）分子铁电体材料。

研究铁电性的产生和起源、自旋交叉-晶格耦合和分子型类钙钛矿铁电化合物的量子顺电效应。研究磁、电、光多重调控机制，探索可能的自旋与极化(或晶格)的耦合效应。以含过渡金属离子配合物为合成靶向，设计、合成具有磁性（如自旋交叉）性质的铁电化合物和具有类钙钛矿型结构（通式ABX3）的分子铁电化合物, 研究磁、电、光多重调控机制，探索自旋与极化(或晶格)的耦合效应及其规律。根据分子铁电化合物的合成策略，引入能够产生结构相变的基元，制备出具有丰富磁性质的分子铁电化合物。寻找高居里温度的钙钛矿型分子铁电体，研究磁-介电行为和可能的量子顺电性质，探索磁-电耦合效应实际应用的可能。

（三）层状超导和热电材料。

掌握层状化合物中结构、功能基元和超导/热电性能之间的关联规律，发展优化超导/热电材料物性的新途径和新方法。系统开展晶态过渡族金属V族和VI族层状化合物中功能基元间的相互作用规律及其与超导和热电性能关系研究。深入认识功能基元中的自旋态等特征参量对物性的影响；通过优化剪裁功能基元结构、引入载流子或外场等途径调控自旋态等特征参量，实现晶态材料的结构设计并诱导或强化材料的超导和热电性能；探索功能基元的组装方法，发展新的材料可控制备方法，探索出具有重要研究价值或潜在应用价值的新型超导和热电材料。

**四、2014年度资助计划**

2014年度拟安排项目经费约2500万元，经费全部用于项目集成，拟资助集成项目3项左右，资助期限为3年，平均资助强度为800万元/项（由指导专家和评审专家组根据目标凝练和评议情况确定资助额度）。

**五、申报要求及注意事项**

（一）申请条件。

本重大研究计划集成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）；

3. 主要为获得过本重大研究计划资助的项目负责人，未获得本重大研究计划项目资助的科技人员可联合已获得本重大研究计划资助的项目负责人进行申请。

正在博士后流动站或者工作站内从事研究、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均不得申请。

（二）限项规定。

具有高级专业技术职务（职称）的人员，申请或参与申请本次发布的重大研究计划集成项目不限项。

（三）申请注意事项。

1. 项目申请接收与受理。

（1）本重大研究计划申请书报送日期为2014年10月28-31日16时。申请书由国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组负责接收。

通讯地址：北京市海淀区双清路83号国家自然科学基金委员会项目材料接收工作组（行政楼101房间）

邮 编：100085

联系电话：010-62328591

（2）本重大研究计划2014年度只接收集成项目申请，申请书中研究期限应填写“2015年1月-2017年12月”。

每个集成项目合作单位数不超过4个；主要参与者必须是集成项目的实际贡献者，不超过8人。

（3）申请书由化学科学部负责受理。

2. 申请人注意事项。

本重大研究计划采用在线撰写申请书方式，对申请人具体要求如下：

（1）申请人在填报申请书前，应当认真阅读本项目指南，不符合项目指南的申请项目不予受理。

（2）申请人应根据本重大研究计划拟解决的具体科学问题和项目指南公布的拟资助研究方向，在认真总结和系统梳理本重大研究计划已有相关成果和进展、明确新的提升突破点的基础上，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）申请人向依托单位索取用户名和密码，登录ISIS系统填写申请书。资助类别选择“重大研究计划”，亚类说明选择“集成项目”，附注说明选择“功能导向晶态材料的结构设计与可控制备”，根据申请的具体研究内容选择相应的申请代码。以上选择不准确或未选择的项目申请将不予受理。

（4）申请书的报告正文应当按照重大研究计划正文提纲撰写，应突出有限目标和重点突破，明确对实现研究计划总体目标和解决核心科学问题的贡献。

申请书内容应体现如下几个方面：①在集成方向相关领域近期取得的主要进展；②通过集成拟重点突破的研究内容、拟达到的研究目标或技术指标；③为实现总体科学目标和多学科集成的需要，申请人应承诺在研究材料、基础数据和实验平台上的共享。

如果申请人已经承担与本重大研究计划相关的国家其他科技计划项目，应当在报告正文的“研究基础”部分论述申请项目与其他相关项目的区别与联系。

（5） 申请人完成申请书撰写后，在线提交电子申请书，下载并打印最终PDF版本申请书，向依托单位提交签字后的纸质申请书原件。

（6）申请人应当保证纸质申请书与电子版内容一致。

3. 依托单位注意事项。

依托单位应当对本单位申请人所提交申请材料的真实性和完整性进行审核，并在规定时间内将申请材料报送国家自然科学基金委员会。具体要求如下：

（1）依托单位应当在国家自然科学基金委员会规定的项目申请截止日前提交本单位电子申请书及附件材料，并统一报送经单位签字盖章后的纸质申请书原件（一式一份）以及要求报送的纸质附件材料。

（2）依托单位报送纸质申请材料时，还应当包括本单位公函和申请项目清单,材料不完整不予接收。

（3）依托单位提交电子申请书时，应当通过ISIS系统逐项确认。

（4）依托单位可将纸质申请书直接送达或者邮寄至项目材料接收工作组。采用邮寄方式的，请在项目申请截止日期前（以发信邮戳日期为准）以快递方式邮寄，并在信封左下角注明“重大研究计划项目申请材料”。请勿使用邮政包裹，以免延误申请。

（四）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。

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，本重大研究计划每年将举办一次资助项目的年度学术交流会，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。

**“功能导向晶态材料的结构设计和可控制备”**

**重大研究计划2012年度项目指南**

晶态材料是长程有序固态材料的总称，具有结构有序稳定、构效关系清楚、本征特性多样、物理内涵丰富、易于复合调控等特征。晶态材料研究正在向以功能为导向，通过结构设计和可控制备获得所需应用特性材料的方向发展。

**一、科学目标**

本重大研究计划以晶态材料为研究对象, 以宏观性质(光、电、磁及其复合性能)与微观(电子、分子、聚集态)结构之间内在关系为主线,旨在揭示决定晶态材料宏观性质的功能基元及其在空间的集成方式,发展功能基元理论,深化对晶态材料功能特性和功能基元本质的认识;开展具有重大科学意义和应用前景的功能晶态材料的设计、合成、制备、表征和应用探索研究,为实现晶态材料功能导向的结构设计和可控制备提供新理论、新方法与新材料体系,推动相关学科的发展。

本重大研究计划以晶态材料的关键基础科学问题为核心，充分发挥化学、物理、材料和信息等多学科交叉合作的优势，注重创新性和前沿性，着力提升我国材料研究的综合实力和自主创新能力，凝聚和培养具有国际影响的人才队伍，为国民经济和社会可持续发展作出重大贡献。

**二、核心科学问题与2012年度重点资助的研究方向**

本重大研究计划围绕决定晶态材料特性的关键功能基元、晶态材料宏观功能与微观结构的关系和基于功能基元晶态材料的设计原理和可控制备三个关键科学问题开展研究工作。2012年度重点资助以下方面的研究工作：

1．晶态材料功能基元、构效关系及其规律的研究。

围绕晶态材料功能基元的结构特征，重点开展以下工作：

（1）建立与发展新的理论方法，在多层次多尺度上计算、模拟和预测材料的结构与性质（如磁性、电性和光学性质），探索和揭示晶态材料功能特性的起源及其关键功能基元。

（2）揭示晶态材料功能基元（电子、原子、离子、分子、基团和畴结构与相结构等）间的相互作用方式（如共价键、离子键、配位键、氢键及弱相互作用等）与其性能（包括光、电、磁及其复合功能）的关系，阐明晶态功能材料宏观对称性与性质之间的关系。

（3）系统开展晶态材料的功能基元组装、修饰和光/电/磁性质调控等研究,观测相关体系在外界扰动(磁场、电场、光场、温场、力场等)下的物性响应，探讨晶态材料中电子输运、磁有序和能量转换等基本问题,寻找具有实用价值的功能调控方法。

2．功能导向新型晶态材料的设计。

根据结构与功能之间的关系及其规律，设计和合成新型晶态材料，重点开展以下工作：

（1）基于功能基元及材料体系理论，发展“分子工程学”、“晶体工程学”等方法，开展计算材料学研究，指导材料设计工作。

（2）设计和合成具有关键功能基元和特殊结构的材料体系，研究其在非线性、激光、发光、电、磁及复合性能等方面的特性，揭示结构与性能间的关系，发现新型晶态功能材料。

3．新型晶态功能材料的可控制备与表征。

发展晶态功能材料的合成、制备和表征新方法，重点开展以下工作：

（1）系统发展功能基元的组装方法和技术，通过功能基元的结构优化和裁剪，制备新型功能晶态材料。通过结构调控实现特定结构晶态材料的可控生长,实现功能的增强与复合。

（2）发展极端条件下的合成新方法，重点研究亚稳相晶态材料及薄膜、界面结构材料的制备技术。

（3）建立功能基元及材料的探测与表征新方法，重点发展原位、实时、微区结构的测量技术，表征晶态材料的相关性能。鼓励利用国家大科学装置进行晶态材料的物性和机理研究。

4．功能导向新型晶态材料。

基于我国在相关研究领域的优势，结合上述研究内容，着重开展以下体系的研究：

（1）光学和发光材料：重点研究新波段和新结构类型的激光和非线性光学晶体材料，白光和上转换发光材料，基于配位化合物和人工微结构的光学和发光材料等。

（2）电、磁功能材料：研究新结构类型的具有电、磁功能的非金属晶态材料。重点研究电光、压电和磁性材料等。

（3）复杂体系及功能复合材料：研究具有电荷、自旋、轨道和晶格间相互作用的复杂体系功能材料和功能复合材料。重点研究非常规超导材料、新型磁电阻材料、巨热电材料、光电转换材料和光功能复合晶体材料等。

**三、2012年度申请要求与资助规模**

2011年度资助项目在研究方向、研究内容和研究思路等方面总体上体现了本重大研究计划的宗旨和指导思想，但是也有一些申请项目缺乏理论与实验的结合，缺乏不同相关学科的交叉融合以及缺乏对晶态材料功能基元、构效关系及其规律的探索等，未能体现本重大研究计划“功能导向与结构设计”的基本要求。

2012年度的项目申请必须强调功能导向和结构设计的要求，进一步加强化学、材料、物理、信息等学科间的交叉和融合，鼓励理论与实验的紧密结合，深化对晶态材料功能基元的结构特征的探索研究。申请人应注意项目申请与“可控自组装体系及其功能化”等相关重大研究计划的区别。本重大研究计划不受理有关纳米材料研究的项目申请。

本重大研究计划主要以“培育项目”和“重点支持项目”的形式予以资助，两类项目在要求和资助强度上有所不同。对原创性强、挑战性大，但相关工作基础相对薄弱的申请将以“培育项目”形式予以资助，其中对有学科交叉特色的申请将予以优先支持；对有很好研究基础和积累，有明确的重要科学问题，同时具有实质性学科交叉特点的申请将以“重点支持项目”形式予以资助，同时要求有不同学科研究队伍的共同参与项目研究。所有项目申请必须体现功能导向与结构设计的基本要求。

2012年度拟资助“培育项目”约20项，资助强度约70万元/项，资助期限为3年；拟资助“重点支持项目”约5项，资助强度约300万元/项，资助期限为4年。2012年度资助总经费约3 000万元。

**四、遴选项目的基本原则**

为确保实现总体目标，本重大研究计划鼓励：

（1）具有原始创新思路和独具特色的探索性研究；

（2）与总体目标紧密相关的关键科学技术问题研究；

（3）化学、数理、材料和信息等学科的交叉合作研究；

（4）吸收海外优秀科学家参与的国际合作研究。