# **2022年度国家自然科学基金专项项目“基于先进红外光源的原位研究方法及其在小分子碳循环和芯片制造领域的应用”指南**

自由电子激光具有高亮度、短脉冲、强相干、窄带宽、波长连续可调且范围广等突出优点，是目前性能最为优异的先进光源之一。与同步辐射相比，自由电子激光在峰值亮度、相干性、时间结构上优势明显，非常适合于从分子水平上研究材料结构演变和化学反应动态过程。碳基能源转换、芯片制造等领域涉及物理学、化学、材料学等学科的前沿交叉。尽管国内外开展了有成效的相关研究，但仍有很多基础科学问题需要探索和澄清。复杂体系材料结构和反应研究涉及原子分子、微纳等多尺度结构表征以及能量、时间、空间等多维度方法学研究。发展基于宽波段、高强度、超短脉冲先进红外光源的振动光谱技术，从能量、空间、时间等维度上对小分子催化转化和芯片制造过程中所涉及的高效CO/CO2加氢、CO2电化学还原、铜互连电化学、热诱导铜-树脂键合等关键基础/应用科学问题，开展原位动态表征，探索材料结构特性和反应过程，将为能源材料化学和芯片制造化学化工等领域的应用提供理论指导。

国家自然科学基金委员会基础科学板块现启动“基于先进红外光源的原位研究方法及其在小分子碳循环和芯片制造领域的应用”专项项目，将利用位于中国科学技术大学的红外自由电子激光平台，开展先进实验方法和应用研究，推动自由电子激光相关技术发展和应用机制创新。

## 一、科学目标

本专项项目针对小分子碳循环和芯片制造等领域前沿科学问题，基于先进红外光源发展原位实验技术和装置，提升光源性能，实现在中、远红外波段对固气、固液等复杂体系结构和反应动力学过程的高灵敏、高时空分辨原位探测与解析，重点开展小分子碳循环转化和芯片制造化学与材料相关研究，揭示活性位结构和复杂反应动力学机理，建立材料微结构特性对分子反应性的调控方法，为催化剂和芯片制造中关键化学材料的设计、合成与应用提供基础支撑。

## 二、拟资助研究方向和研究内容

## （一）超短脉冲振荡器自由电子激光的物理与实验研究（申请代码 1 选择 A30 下属代码）

基于中国科学技术大学的红外自由电子激光装置，建立和发展振荡器型超短脉冲自由电子激光物理演化模型。基于电子束操控技术、谐振腔调谐以及波荡器参数优化，在抑制边带和获得足够高输出功率的前提下，提出若干个可行性好的振荡器型超短脉冲实现方案，在装置上开展超短脉冲自由电子激光的实验研究，将现有自由电子激光皮秒级脉冲宽度压缩一个数量级，实现中、远红外波段（10-50 μm）百飞秒量级的超短脉冲自由电子激光，同时提升装置运行稳定性，实现宏脉冲能量波动均方根值小于5%，为超快化学、催化科学、芯片制造等领域提供高亮度、可调谐、单色性优异的中、远红外超短脉冲激光光源。

## （二）基于先进红外光源的复杂体系原位谱学方法研究（申请代码 1选择 A30 下属代码）

针对小分子碳循环和芯片制造相关化学与材料体系，发展基于先进红外光源的固气、固液等体系宽波段原位谱学实验方法，特别是针对10-50 m中远红外区的金属-氧键合动态机制、分子弱吸附作用和材料微区结构特性的谱学表征技术，包括亚单分子层灵敏度探测、百飞秒量级时间分辨、十纳米量级空间分辨实验技术和装置，实现多维度下对复杂体系微区结构和反应过程的高灵敏度、高时空分辨探测，揭示复杂反应动力学机理，建立材料微尺度结构对分子反应性的调控方法。

## （三）小分子碳循环界面过程谱学研究（申请代码 1 选择 B02 下属代码）

高效CO/CO2加氢、CO2电化学还原等是实现闭环碳循环的关键，其中催化剂起着决定性作用。构建不同结构金属和金属－氧化物催化剂界面，依托先进红外光源发展的高灵敏和高时间分辨谱学方法，通过检测反映表面物种与活性位点相互作用的中、远红外谱学信息，原位表征催化剂结构的动态演变和跟踪催化反应动态过程，揭示界面上M-O/M-C和C-O/C-H键活化以及关键中间物种的形成和演变，探索催化剂表面的限域和协同效应，在分子水平上认识催化化学本质。利用先进红外光源的宽波段、高亮度的优势，探索振动光谱在工况条件下电化学反应器中的应用。

## （四）芯片制造相关的界面（电）化学及材料微区结构研究（申请代码 1 选择 B02 下属代码）

芯片制造包括集成电路制造和先进封装，涉及若干重要的界面（电）化学和材料微区结构及其演变问题。构建芯片制造相关的模型体系，利用原位振动谱学方法研究大马士革电镀铜的界面电化学、铜/树脂界面化学及微区结构演变。依托先进红外光源发展的中、远红外高灵敏、高空间分辨谱学技术，揭示集成电路铜互连电化学相关添加剂的界面吸附结构、竞合作用，及其对微纳量级孔槽铜填充效果的影响；探索先进封装相关的有机粘结剂分子在铜表面自组装过程与膜结构、热封过程粘结剂膜层与树脂化学键合的界面结构演变，及其与树脂-铜粘合性能的构效关系。

## 三、资助计划

本专项项目资助期限为4年，申请书中研究期限应填写“2023年1月1日－2026年12月31日”。计划资助4项左右，平均资助强度为350万元/项，资助经费总强度约为1400万元。

## 四、申请要求及注意事项

## （一）申请条件

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

1.本专项项目申请时不计入申请和承担总数范围，正式接收申请到自然科学基金委做出资助与否决定之前，以及获资助后，计入申请和承担总数范围。

2.申请人同年只能申请1项专项项目中的研究项目。

3.其他限项申请要求按照《2022年度国家自然科学基金项目指南》“限项申请规定”执行。

## （三）申请注意事项

1.专项项目实行无纸化申请。申请书提交时间为**2021年11月21日~11月27日16时**。

2.申请人注意事项

（1）申请人在填报申请书前，应当认真阅读本申请须知、本项目指南和《2022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受理。

（2）本专项项目旨在紧密围绕核心科学问题，集中国内优势研究团队进行研究，成为一个专项项目群。申请人应根据本专项项目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、关键科学问题、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://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），按照撰写提纲及相关要求撰写申请书。

（4）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1应当按照拟资助研究方向后标明的代码要求选择数学物理科学部和化学科学部相应的申请代码。**以上选择不准确或未选择的项目申请将不予受理。**

（5）请按照“专项项目-研究项目申请书撰写提纲”撰写申请书时，**请在申请书正文开头注明“基于先进红外光源的原位研究方法及其在小分子碳循环和芯片制造领域的应用”之研究方向：XXX（按照上述4个研究方向之一填写）**。

申请书应突出有限目标和重点突破，明确对实现本专项项目总体科学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。

（6）申请人应当严格按照《国家自然科学基金资助项目资金管理办法》等相关规定和《国家自然科学基金项目资金预算表编制说明》的具体要求，认真如实编报项目预算。

3.依托单位注意事项

（1）依托单位应对本单位申请人所提交申请材料的真实性、完整性和合规性进行审核；对申请人编制预算的目标相关性、政策相符性和经济合理性进行审核。

（2）应在规定的项目申请截止日期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，无需报送纸质申请书。项目获批准后，将申请书的纸质签字盖章页装订在《资助项目计划书》最后，一并提交。签字盖章的信息应与电子申请书严格保持一致。

（3）如依托单位在2022年度未上传过《2022年度国家自然科学基金项目申请承诺书》（以下简称《承诺书》），应从信息系统中下载《承诺书》，由法定代表人亲笔签名并加盖依托单位公章后，将电子扫描件上传至信息系统（本年度只需上传一次）。依托单位完成上述承诺程序后方可提交申请。

（4）依托单位在**项目申请截止时间后24小时内**，通过信息系统在线提交本单位项目申请清单。清单提交后，自然科学基金委方可接收项目申请材料。

4.本专项项目咨询方式

**国家自然科学基金委员会数学物理科学部**

联系人：李会红 联系电话：010-62325087

**国家自然科学基金委员会化学科学部**

联系人：高飞雪 联系电话：010-62327035

## （四）其他注意事项

1.为实现专项项目总体科学目标，获得资助的项目负责人应当在项目执行过程中关注与本专项其他项目之间的相互支撑关系。

2.为加强项目之间的学术交流，本专项项目群将设专项项目总体指导组和管理协调组，并将不定期地组织相关领域的学术研讨会。获资助项目负责人必须参加上述学术交流活动，并认真开展学术交流。