



Views & Comments

中国材料基因工程研究特色和愿景

谢建新, 宿彦京, 张达威, 冯强

Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering & Institute for Advanced Materials and Technology & State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

在新一轮全球科技革命和产业变革中, 我们所面临的 最大瓶颈之一就是材料技术的缺乏, 迫切希望在材料科技 领域也能发生重大变革, 而不是渐进式的缓慢发展[1]。 材料基因工程(MGE)在此背景下迅速发展, 其关键 技术开发和工程应用已成为材料研究前沿[2]。在材料研发- 生产-应用全链条, 构筑“理性设计-高效实验-大数据技术” 深度融合、协同创新的新型研发模式和技术创新体 系, 显著提升新材料的研发效率, 促进工程化应用, 满足 经济社会发展对新材料日益增长的迫切需求, 是材料基因 工程的目标和使命, 也是当前材料科技领域的重要挑战。

材料基因工程是一个引领材料科技革命的系统工程, 包括材料传统发展理念的变革、颠覆性技术和装备的研发 与应用、具有新思想掌握新技术的综合型创新人才培养 等。为了推动新材料科技和产业发展, 中国全方位地布局 开展材料基因工程的研究, 以期通过“关键技术与装备研 发-创新平台建设-工程化推广应用”的一体化实施, 变 革传统的研发理念和模式, 发展新方法和高效技术, 培养 高质量的创新人才队伍, 提升材料创新能力和国际竞 争力。

国家重点专项全方位布局研究

2015年科技部投入8.4亿元人民币, 设立“材料基因 工程关键技术与支撑平台”重点专项, 构建支撑材料基因

工程研究和协同创新发展的高效计算、高通量实验和数据 库等三类示范平台, 研发材料高效计算方法与软件、高通 量制备与表征技术、材料服役行为高效评价技术、材料数 据库和大数据技术等四大关键技术, 在能源材料、生物医 用材料、稀土功能材料、催化材料、特种合金材料等五类 材料上开展验证性应用示范, 推动材料基因工程新方法和 新技术的研发和应用。其中, 关注材料制造工艺优化、材 料服役行为高效评价技术等研究, 是国家重点专项的重要 特色之一。国家重点专项的主要研究任务为:

(1) 通过研发高通量和自动流程算法, 实现新材料成 分-结构-性能的快速筛选; 发展集成计算材料工程(IC- ME), 解决材料多层次、跨尺度计算设计瓶颈, 建立材料 成分-组织结构-性能-工艺的关联关系, 实现材料设计和工 艺优化。以中国强大的超级计算机资源为硬件条件, 融合 材料高通量计算和集成计算材料工程, 建立材料理性设计 的技术基础和支撑条件。

(2) 应用薄膜材料制备、3D打印、扩散多元节、连 续定向凝固、梯度热处理等技术, 发展适合不同形态(薄 膜、粉体、块体)材料的高通量制备技术和装置。依托同 步辐射光源和散列中子源等科学研究装置, 开发适合于海 量实验数据快速处理的解析算法, 发展适合材料成分和结 构表征的高通量实验技术。通过高通量实验技术与装备 的研发与应用, 实现材料理性设计方案的快速验证, 以及材 料成分、组织结构和工艺的高通量筛选和优化。

(3) 研发材料服役与失效的跨尺度模拟计算方法、高效评价方法及等效加速模拟实验、材料服役大数据等新材料工程应用关键技术,突破服役与失效行为研究周期长、成本高的瓶颈,加速新材料应用进程,形成中国材料基因工程面向工程应用的重要研究特色。

(4) 研发集数据自动采集、归档、挖掘、应用为一体的智能化数据库技术,支撑/服务于高效计算、高通量实验,实现海量数据自动处理和积累,构建集数据收集、数据服务、数据分析、新材料发现、新产品开发等功能为一体的材料数据库平台,促进大数据和人工智能技术在新材料研发中的应用。

地方政府和企业积极投入研发经费

在国家重点专项牵引下,地方政府和部门也积极支持材料基因工程研究。代表性的投入项目有:2017年北京市政府和中国科学院联合投入5.7亿元人民币,建设国内规模最大的材料基因工程研究设施;北京市政府投入5亿元人民币,建立“北京材料基因工程高精尖创新中心”,凝聚材料基因工程领域的顶级科学家开展合作研究和高层次人才培养;2017年深圳市政府投入7.1亿元人民币,建设材料基因组工程大科学平台。2018年以来,云南省人民政府针对地方新材料产业的特色,持续投入超过4亿元人民币,建设稀贵金属材料基因工程创新平台,承接国家重点专项的研发成果,开展稀贵金属新产品的研发。此外,上海市、广东省等省市和一些材料相关大型企业也设立了相关研究项目。

国家引导和支持构建协同创新体系

国家重点专项重点支持材料基因工程关键共性技术、软件和装备的研发,构建材料设计-研发-生产-应用全链条技术体系和创新平台,开展协同创新研究。引导地方政府和企业投入,开展材料基因工程技术的工程化应用和新材料、新产品开发,促进研发部门和企业的实质性合作,提升企业的积极性和参与度,促进材料基因工程关键技术和装备的工程化应用。为了支撑材料基因工程关键技术和应用的可持续发展,国家支持和引导开展材料基因工程的标准体系建设,协调构建材料基因工程的技术体系和标准体系。中国材料与试验标准委员会(CSTM)建立了材料基因工程标准委员会,2019年发布了全球首个材料基因工程通则标准[3],为全面推广材料大数据模式奠定了基础。

材料基因工程研究新文化与新环境正在快速形成

例如,2017年开始,中国工程院举办每年一届的“材料基因工程高层论坛”,宣传推广材料基因工程的理念和思想,加强国际学术交流,促进材料基因工程基础理论、前沿技术和关键装备的发展及应用。中国材料大会每年均设立材料基因工程分会。中国金属学会举办了系列讲座。一些高校的材料学科开设了计算材料学或材料信息学、材料高通量实验技术、材料大数据技术等课程,培养材料基因工程的专业人才。

材料基因工程关键技术快速发展,工程应用效果凸显

经过近5年的发展,中国已经基本形成了材料基因工程产学研用协同发展的态势,取得了一批创新性的研究成果,工程化应用的成效正在彰显,呈现出了良好的发展势头和巨大的工程化应用前景。2019年美国发布的材料基因组计划人才培养报告认为,中国材料基因工程的发展理念和实施成效体现出了更广泛的产学研一体化的特点[4]。

共性关键技术、软件和装备研发主要进展

开发出了多套材料高通量并发式自动流程计算和多尺度计算软件,实现了万量级(10^4 级)高通量并发式计算,部署在超算平台上,实现了初步开放共享;研发出了薄膜、粉体、块体等多种形态材料高通量制备技术和装置,以及材料热处理、凝固和加工工艺优化的高通量实验技术;发展了材料失效的多层次、跨尺度算法及复杂环境材料服役行为高效评价技术,实现了材料腐蚀和断裂的高效表征及快速评价;构建了集数据采集-数据库-数据挖掘为一体、可扩展的材料基因工程理念数据库系统框架,实现了复杂异构材料数据的个性化描述、便捷汇交和挖掘分析[5]。

新材料研发和工程化应用主要进展

应用材料组合制备技术,结合X射线衍射高通量结构表征和电阻测量技术,研发出国际上玻璃转变温度最高、强度最高、具有良好热塑性性能的新型高温块体金属玻璃Ir-Ni-Ta-(B)[6]。发现TiZrHfNb高熵合金中间隙元素存在化学短程有序,有序间隙化合物改变位错剪切模式,可

以同时提升材料强度和延展性，在高熵合金中掺杂2%（原子分数）的O，合金强度增加48.5%，延性增加95.2%，为金属材料的增强增韧设计提供了全新的思路[7]。证明了锥面位错是Mg中有效的塑性载体，通过提高应力和减小晶粒尺寸，促进锥面位错形核和滑移，提高Mg的塑性，为高塑性Mg合金的开发提供了新的技术途径[8]。通过Na与Ag的合金化和Bi的痕量掺杂，实现了高效稳定非铅双钙钛矿Cs₂Ag-InCl₆单基质白光发光，突破了白光荧光粉近半个世纪的效率瓶颈，为非铅钙钛矿发光材料的研究提供了新思路[9]。提出面向性能要求的合金设计新方法，构建了合金成分机器学习设计模型，解决了高强高导铜合金根据使用性能要求设计成分的难题，开发出了下一代极大规模集成电路引线框架高强高导铜合金[强度达到800 MPa级，导电率达到50%国际退火铜标准(IACS)] [10]。通过高通量实验筛选，开发了高性能苯与乙烯液相烷基化催化剂和新一代新型MFI结构形貌择向的纳米片分子筛，实现大规模工程应用，创造了巨大的经济效益。

中国材料基因工程未来发展

未来5~10年，面向高端新材料研发、产业升级换代、提升自主保障能力和原始创新能力等重大需求，中国将实施国家材料基因工程计划。该计划聚焦四个方面的重点任务。第一是共性关键技术，包括材料先进计算方法与软件、材料自动化智能化实验技术及装备、材料大数据技

术、材料研发智能化技术等；第二是材料基因工程基础设施和创新平台建设，包括ICME平台、数据库和大数据技术平台，以及材料设计、制备与表征评价技术创新平台；第三是材料基因工程关键技术的前沿新材料、高端关键材料领域的规模应用，推动传统试错法材料研究模式的变革；第四是将MGE模块嵌入大学的材料科学与工程课程之中，培养大量综合型和创新型人才。

References

- [1] Shechtman D. Current challenges in materials science and engineering [presentation]. In: 2018 World Forum on Scientific and Technological Innovation; 2018 Aug 10–12; Beijing, China; 2018.
- [2] Group on Advanced Materials. Materials Genome Initiative for global competitiveness. Washington, DC: White House Office of Science and Technology Policy; 2011.
- [3] Wang H, Zhang LT, Yang ML, Su YJ, Liu Q, Xiang XD, et al. T/CSTM 00120–2019: General rule for materials genome engineering data. Chinese standard. Beijing: Chinese Society for Testing and Materials; 2019. Chinese.
- [4] MineralsThe, Metals, and Materials Society (TMS). Creating the next generation Materials Genome Initiative workforce. Pittsburgh: TMS; 2019.
- [5] Su YJ, Fu HD, Bai Y, Jiang X, Xie JX. Progress in materials genome engineering in China. *Acta Metall Sin* 2020;56(10):1313–23. Chinese.
- [6] Li MX, Zhao SF, Lu Z, Hirata A, Wen P, Bai HY, et al. High-temperature bulk metallic glasses developed by combinatorial methods. *Nature* 2019;569 (7754): 99–103.
- [7] Lei Z, Liu X, Wu Y, Wang H, Jiang S, Wang S, et al. Enhanced strength and ductility in a high-entropy alloy via ordered oxygen complexes. *Nature* 2018; 563(7732):546–50.
- [8] Liu BY, Liu F, Yang N, Zhai XB, Zhang L, Yang Y, et al. Large plasticity in magnesium mediated by pyramidal dislocations. *Science* 2019;365 (6448):73–5.
- [9] Luo J, Wang X, Li S, Liu J, Guo Y, Niu G, et al. Efficient and stable emission of warm-white light from lead-free halide double perovskites. *Nature* 2018;563 (7732):541–5.
- [10] Wang C, Fu H, Jiang L, Xue D, Xie J. A property-oriented design strategy for high performance copper alloys via machine learning. *npj Comput Mater* 2019; 5(1):1–8.