

材料基因组计划与先进材料

陈立泉



材料是制造业的基础，材料创新往往处在颠覆性技术革命的核心。然而，新材料从发现到市场应用的进程一般需要 15 至 20 年，甚至更长的时间。依赖科学直觉与试错的传统材料研究方法已明显跟不上当今时代快速发展的需求。革新材料研发方法，加速新材料从研究到应用的进程，这已成为各国学界的普遍共识。

2011 年，美国总统奥巴马宣布实施“材料基因组计划”(Materials Genome Initiative, MGI)，其目标是将先进材料“发现—开发—生产—应用”这一进程所需的时间减少一半，并将其成本降低数倍。这一计划的实施旨在保持并强化美国在核心科技领域的优势，保障其在 21 世纪全球竞争中的国力优势地位。

材料基因组计划的根本目的是引领并推广材料科学研究的新范式和新文化。通过前期材料模拟计算预测材料性质、性能，完成材料设计，再辅以数量有限的关键验证实验来完成材料的研发。这与当前实行的严重依赖反复实验和经验的做法形成鲜明对照。

材料基因组计划加速新材料研发的具体手段包括：

(1) 开发有效、可靠的材料模拟计

算方法和软件工具；

(2) 发展高通量实验方法学，为理论和材料计算结果提供有效的验证工具，并向材料数据库提供可靠的实验数据；

(3) 建立可靠、开放、广泛适用的数据库，发展材料信息学工具。

因此，建设以高通量材料模拟计算工具、高通量实验工具、材料数字化数据库三大平台为代表的基础设施，是材料基因组计划实施的重要任务。

我国在新材料领域的核心竞争力不足，关键材料自给率令人担忧。在此背景下，我们必须毫不犹豫地将“中国版材料基因组计划”作为一项国家战略启动实施。当前阶段的首要任务应该是建立一批具有计算工具、实验工具和数据管理能力的材料基因研究中心，形成新材料创新的基础设施；与此同时，应选择几种目前我国亟需的关键材料进行材料基因组技术攻关研究示范，包括能源材料、复合材料、低维电子材料、无机功能材料、高温合金、生物材料等。该计划的成功实施将有利于我国实现新材料领域的超常规发展，以满足国家的重大需求，支撑我国制造业的战略转型。